

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

O Limite Semiclássico do Propagador em Estados Coerentes: o Papel das Trajetórias Complexas

Tese de Doutorado

Alexandre Dias Ribeiro

orientado por Marcus A. M. de Aguiar

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar – IFGW/UNICAMP

Profa. Dra. Maria Carolina Nemes – DF/UFGM

Prof. Dr. Antônio F. R. de Toledo Piza – IF/USP

Prof. Dr. Peter A. B. Schulz – IFGW/UNICAMP

Profa. Dra. Kyoko Furuya – IFGW/UNICAMP

14 de Maio de 2004

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

R354L Ribeiro, Alexandre Dias
 O limite semiclássico do propagador em estados
 coerentes: o papel das trajetórias complexas /
 Alexandre Dias Ribeiro. -- Campinas, SP : [s.n.], 2004.

 Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar.
 Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

 1. Comportamentos caóticos nos sistemas.
 2. Funções de variáveis complexas. I. Aguiar, Marcus
 Aloizio Martinez. II. Universidade Estadual de
 Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin".
 III. Título.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

R354L

Ribeiro, Alexandre Dias

O limite semiclássico do propagador em estados coerentes: o papel das trajetórias complexas / Alexandre Dias Ribeiro. -- Campinas, SP : [s.n.], 2004.

Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Comportamentos caóticos nos sistemas.
2. Funções de variáveis complexas. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

Resumo

A aproximação semiclássica do propagador quântico em estados coerentes tem como ponto de partida sua representação em termos das integrais de caminho de Feynman. Ao tomar o limite $\hbar \rightarrow 0$, mostra-se que os caminhos mais relevantes para o cálculo da integral são trajetórias clássicas complexas regidas por uma função hamiltoniana, que é a média em estados coerentes do operador hamiltoniano. Essas trajetórias devem satisfazer condições de contorno que dependem dos parâmetros $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$, $\mathbf{p}''$ e $\mathbf{q}''$, que são as médias quânticas da posição e do momento, para os estados coerentes iniciais e finais, respectivamente. No entanto, como é natural de acontecer em expansões assintóticas, a fórmula obtida pode levar a resultados inaceitáveis, como probabilidades maiores que um e descontinuidades. Esses resultados errôneos são consequências da incompletude da aproximação realizada sob dois aspectos. O primeiro é que existem trajetórias complexas satisfazendo as condições de contorno adequadas, que não devem ser consideradas. Elas estão associadas ao fato do contorno original da integral de Feynman não poder ser deformado, durante o processo de aproximação, de modo que passe a incluí-las. O segundo aspecto está relacionado às cáusticas. Quando as trajetórias exibem tais pontos críticos, sua contribuição para o cálculo do propagador não pode ser obtida a partir de uma expansão até segunda ordem em sua vizinhança, como é feito usualmente, sendo necessária uma expansão até ordens mais altas. Nesse trabalho, desenvolvemos a fórmula semiclássica do propagador e estudamos esses aspectos em grande detalhe. Além disso, fazemos uma aplicação desta teoria a um potencial bidimensional e não integrável, em regiões caóticas, próximas de órbitas periódicas. Esses resultados numéricos ilustram inteiramente o estudo teórico realizado, expondo as sutilezas existentes na fórmula semiclássica do propagador. Quando tomadas as devidas precauções e incluídas as correções na vizinhança das cáusticas, os resultados semiclássicos demonstram uma ótima concordância com os exatos.

Abstract

The semiclassical approximation of the coherent states quantum propagator is based on its Feynman path integral representation. In the limit $\hbar \rightarrow 0$, it can be shown that the most relevant paths in the Feynman integral are complex classical trajectories governed by a hamiltonian function that is the average, in coherent states, of the hamiltonian operator. These trajectories must satisfy boundary conditions that involve the parameters $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$, $\mathbf{p}''$ and $\mathbf{q}''$, the quantum averages of the position and momentum for the initial and final coherent states, respectively. However, as it is common in asymptotic expansions, the semiclassical propagator formula may lead to non-acceptable results, as probabilities greater than one and discontinuities. These erroneous results are related to the incompleteness of the approximation concerning two aspects. The first is related to trajectories satisfying the correct boundary conditions that must not be considered. They are paths onto which the original contour of integration can not be deformed, during the approximation process. The second aspect is related to caustics. When trajectories exhibit caustics, their contribution to the propagator can not be obtained by an expansion up to second order, as usually made, being necessary to make an expansion up to higher orders. In this work, we develop this semiclassical formula and study these aspects in great detail. Moreover, we make an application of this theory to a bidimensional and non-integrable potential, in chaotic regions close to periodic orbits. These numerical results entirely illustrate the theory studied, exposing the subtleties of the semiclassical approximation. When the right precautions are taken, the semiclassical results show very good agreement with the exact quantum calculations.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que contribuíram para esse trabalho:

Ao Marcus Aguiar e à Kyoko;

Aos membros da Comissão Julgadora;

Aos colegas, professores e funcionários do IFGW;

À Iara e à Fernanda;

À minha família;

Aos amigos;

E à Fapesp, Faep e CNPq, pelo suporte financeiro.

Conteúdo

Resumo	IV
Abstract	V
Agradecimentos	VII
Introdução	XII
1 Aproximação Semiclássica	1
1.1 Estados Coerentes	1
1.2 Propagador de Feynman	3
1.3 Método do Ponto de Sela	5
1.4 Trajetórias Clássicas Complexas	8
1.5 Vizinhança da Trajetória Clássica Complexa	13
1.6 Ação Complexa	15
1.7 Formulário para o Propagador Semiclássico	15
1.8 Oscilador Harmônico Simples	18
1.9 Redução do Problema: O Propagador Diagonal	19
1.10 Problemas na Fórmula Semiclássica do Propagador	20
2 Busca das Trajetórias Complexas	23
2.1 Espaço de Fase Estendido	23
2.2 Método Numérico da Matriz de Monodromia	25
2.3 Busca no Plano Complexo	30
3 Divergência do Pré-fator	33
3.1 Bifurcação de Trajetórias	34
3.2 Colapso de Pontos Críticos	38

3.3	Representação Dual para o Propagador	40
4	Trajeto�rias n�o-Contribuintes	45
4.1	Fun��o de Airy	47
4.2	M�todo WKB	52
4.3	Trajeto�rias n�o-Contribuintes (Propagador – 1D)	59
5	Resultados Num�ricos	65
5.1	Potencial Nelson e suas �rbitas Peri�dicas	66
5.2	C�lculo Exato e Constru��o dos Gr�ficos Polares	69
5.3	Vizinhan�a da Trajet�ria Vertical	71
5.4	Vizinhan�a das Trajet�rias <i>Boomerang</i> , a_1 e a_2	73
5.5	Regi�o Distante das �rbitas Peri�dicas	84
5.6	Propagador para Per�odos mais Altos	90
5.7	Resultados Filtrados	92
6	Considera��es Finais	125
A	C�lculo do Determinante da Matriz Q (equa��o (1.27))	129
B	O M�todo do Ponto de Sela Revisado	135
C	Segundas e Terceiras Derivadas da A��o Complexa	143
	Bibliografia	150

Introdução

Quando a Mecânica Quântica começou a surgir, no início do século XX, a Mecânica Clássica estava muito bem estabelecida. Portanto, foi natural tentar descrever quantidades quânticas, como por exemplo, níveis de energia e funções de onda, em termos de quantidades clássicas. Teve-se início, então, a “velha Mecânica Quântica”, que culminou com a formulação moderna da teoria quântica em termos da Equação de Schrödinger. As fórmulas de quantização baseadas na Mecânica Clássica mostraram-se como aproximações da teoria quântica, válidas quando ações típicas eram bem maiores que a constante de Planck $\hbar$. Essas aproximações são agora conhecidas como métodos semiclássicos. Um dos trabalhos mais conhecidos nessa área é o método WKB [1], cuja autoria se deve a Wentzel, Kramers e Brillouin, para o cálculo de funções de onda. Para sistemas unidimensionais, esse método produz bons resultados, quando comparados aos exatos, exceto na vizinhança dos pontos clássicos de retorno. Além disso, através desse trabalho, é possível deduzir a fórmula da quantização para os níveis de energia de Bohr-Sommerfeld, que tem ótima concordância com a quantização exata, no limite de altos números quânticos. O resultado que se tira do método WKB é que os níveis de energia estão relacionados às ações do sistema clássico equivalente, calculadas em trajetórias fechadas. A aplicação do método WKB para sistemas com mais de um grau de liberdade, no entanto, tem dificuldades, uma vez que, nesse caso, não é sempre que podemos encontrar caminhos fechados. Para resolver essa questão, foi desenvolvido por Einstein, Brillouin e Keller, o método EBK [2, 3], que é uma generalização do método WKB para mais de uma dimensão. No entanto, o método EBK é aplicável somente aos sistemas com análogo clássico integrável, pois é baseado no cálculo de ações em circuitos irredutíveis sobre toros. Para sistemas não-integráveis, onde o movimento clássico não pode ser descrito em termos de toros invariantes, não há como reconhecer os circuitos irredutíveis, o que representa uma limitação a esse tipo de método semiclássico. Somente no final dos anos 60 é que surgiu uma fórmula de quantização semiclássica para sistemas quânticos, cujo análogo clássico é não-integrável. Trata-se da fórmula do traço de Gutzwiller [4, 5, 6, 7] (veja também [8] e [9]).

Antes de discorrer a respeito da fórmula do traço, esclareceremos sobre a motivação de se estudar métodos semiclássicos. O fato é que a perseguição por tais métodos possui raízes práticas

e filosóficas. A primeira, bastante representativa no início do século passado, se justificou pelo fato da formalização da Mecânica Quântica, ainda jovem, ser deficiente. Atualmente, sob esse ponto de vista prático, ainda existe interesse em métodos semiclássicos, quando se estuda, por exemplo, sistemas grandes e com muitos graus de liberdade. Nesse caso, a precisão da solução exata não se destaca tanto em relação à semiclássica, que, por sua vez, pode ser mais fácil de ser calculada, principalmente se o análogo clássico é bem conhecido. Por isso, métodos semiclássicos são amplamente utilizados, por exemplo, entre os químicos teóricos, no cálculo de níveis de energia e funções de onda de moléculas grandes. A segunda motivação, citada no início do parágrafo, está relacionada ao Princípio da Correspondência, que prescreve que quantidades quânticas de um dado sistema podem ser obtidas via informação de seu análogo clássico, dentro de um limite apropriado. É exatamente o que acontece com os métodos WKB e EBK: níveis de energia quânticos são calculados via ações clássicas. Sob esse ponto de vista, haveria de existir também uma maneira para utilizar informação clássica de sistemas não-integráveis no cálculo de grandezas quânticas. A fórmula do traço de Gutzwiller resgata exatamente essa idéia: função de onda e níveis de energia semiclássicos são escritos em termos das órbitas periódicas do análogo clássico, que existem tanto em sistemas integráveis quanto não-integráveis.

O ponto de partida para a fórmula do traço está no propagador de Feynman na representação de coordenadas [10], $K(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', T) = \langle \mathbf{x}'' | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$, que é escrito como uma soma infinita de integrais de caminho. A aproximação semiclássica do propagador de Feynman, baseada na idéia de fase estacionária, indica que os caminhos relevantes para o cálculo do propagador são equivalentes às trajetórias do sistema análogo clássico, que partem de $\mathbf{x}'$ e chegam em $\mathbf{x}''$, no tempo T . No entanto, como os níveis de energia e as densidades de probabilidade estão associados à transformada de Fourier do propagador *diagonal*, em relação ao tempo T , devemos considerar $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}'$. De fato, escrevendo $K(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', T) = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}'') \psi_n^*(\mathbf{x}') e^{-iE_n T/\hbar}$, obtemos $\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT K(\mathbf{x}, \mathbf{x}, T) e^{-i(E+i\epsilon)T/\hbar} = \sum_n \frac{|\psi_n(\mathbf{x})|^2}{E - E_n + i\epsilon}$. Assim, a informação clássica para o cálculo dessas grandezas quânticas se encontra nas órbitas clássicas equivalentes, que saem e voltam para a mesma posição $\mathbf{x}$. No limite semiclássico, pode-se mostrar que apenas as órbitas que saem e chegam ao mesmo ponto no espaço de fase devem ser consideradas, ou seja, somente as órbitas periódicas contribuem.

Essa visão geral dos métodos semiclássicos permite entender em que contexto se insere o estudo do propagador. Porém, é importante discutir um pouco sobre a representação quântica escolhida, nesta tese, para estudá-lo. Utilizamos a representação de estados coerentes, $|\mathbf{z}\rangle \equiv |\mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle$, por considerá-la bastante adequada para estudar o limite semiclássico. De fato, um estado coerente é representado por um ponto $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ no espaço de fase, mais a sua incerteza, que é a menor possível segundo o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Tais características tornam essa representação

quântica bastante familiar à Mecânica Clássica. Afinal, um estado clássico também é representado por um ponto no espaço de fase, com a diferença que sua incerteza é nula. Apresentamos, portanto, o propagador na representação de estados coerentes, $K(\mathbf{z}'', \mathbf{z}', T) = \langle \mathbf{z}'' | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | \mathbf{z}' \rangle$, que representa a amplitude de probabilidade de transição entre dois “pontos quânticos” $|\mathbf{z}'\rangle$ e $|\mathbf{z}''\rangle$.

Klauder [11], Weissman [12, 13], e, posteriormente, Huber e colaboradores [14, 15] foram os primeiros a deduzir uma aproximação semiclássica do propagador nessa representação. Assim como no caso do propagador na representação de coordenadas, a aproximação de $K(\mathbf{z}'', \mathbf{z}', T)$ também pode ser obtida de sua fórmula em termos de integrais de caminho. E, também, ao fazer a aproximação, conclui-se que os caminhos relevantes para o cálculo do propagador são as trajetórias de um sistema clássico equivalente. No entanto, essa representação possui uma característica peculiar, que é a necessidade imediata da consideração de órbitas complexas. Ou seja, as trajetórias clássicas envolvidas no cálculo do propagador semiclássico em estados coerentes são referentes ao sistema análogo clássico *complexificado*. A justificativa para isso é bastante simples e tem relação com o fato das condições de contorno para as trajetórias clássicas serem muito restritivas. Elas devem partir de um ponto inicial, $\mathbf{z}' \equiv (\mathbf{q}', \mathbf{p}')$, e num chegar num ponto final, $\mathbf{z}'' \equiv (\mathbf{q}'', \mathbf{p}'')$, após o tempo T . Em geral, é impossível encontrar uma trajetória clássica que satisfaça a tantos vínculos. Com tantas restrições, só resta dobrar o número de graus de liberdade, para tornar o problema solúvel. Tal procedimento é obtido naturalmente ao notar que é permitido assumir um espaço de fase complexo.

A primeira aplicação numérica da fórmula semiclássica do propagador em estados coerentes foi feita por Adachi [16], para o oscilador pulsado unidimensional, sistema dependente do tempo, que pode ser mapeado em um outro, parcialmente caótico e com uma dimensão espacial. Nesse trabalho, algumas dificuldades inerentes a fórmula semiclássica foram encontradas, como por exemplo, trajetórias não-contribuintes e cáusticas. As primeiras estão relacionadas com trajetórias que não devem ser consideradas na fórmula do propagador, sob a pena de gerar resultados não-físicos, como descontinuidades e divergências. Exceto por estas implicações físicas, não existe nenhuma maneira prática que possa identificá-las como não-contribuintes. A exclusão de trajetórias, baseada em argumentos físicos, tem relação com o Fenômeno de Stokes. Esse fenômeno aparece com frequência em aproximações assintóticas [17, 18, 19], e se manifesta através da exclusão arbitrária de determinada solução, em uma dada região, para que se preserve a fidelidade entre a solução geral assintótica e a exata. Uma discussão detalhada deste assunto será apresentada no capítulo 4 desta tese. Os pontos de cáusticas correspondem ao conjunto de parâmetros, $\mathbf{z}'$, $\mathbf{z}''$ e T , para os quais a aproximação semiclássica não pode ser aplicada. A utilização da fórmula semiclássica, para esses parâmetros, leva a divergência do propagador. No capítulo 3, faremos uma análise desse assunto. Além de mostrar exemplos desses problemas, no trabalho de Adachi, foi notificada a existência de

mais de uma trajetória complexa contribuinte para a fórmula do propagador, o que não havia sido previsto inicialmente por Klauder [20], embora ele logo tenha revisto essa posição [21]. Ressaltamos que tais temas, trajetórias complexas, Fenômeno de Stokes e cáusticas, também foram estudados para o propagador na representação de momento e posição, como por exemplo, no tratamento de tunelamento dinâmico [22, 23] e bilhares [24]. Com relação a outras aplicações do propagador em estados coerentes para sistemas unidimensionais, destacamos a partícula livre [25], o oscilador quártico [26], o tunelamento através de uma barreira de potencial [27], problemas de espalhamento [28] e acoplamento clássico-quântico [29].

Recentemente, Baranger e colaboradores [30] publicaram uma dedução bastante detalhada da fórmula semiclássica do propagador em estados coerentes, em uma dimensão. Este trabalho trouxe à tona novos ingredientes para a discussão sobre métodos semiclássicos e propagadores. Embora não desejamos nos aprofundar nessas questões, consideramos importante fazer um breve comentário. Em primeiro lugar, a referência [30] chama a atenção para o fato de não existir uma única maneira de tomar, formalmente, o limite semiclássico do propagador em estados coerentes. Como essa representação é super completa, o operador identidade pode ser definido de maneira não-única, gerando diversas fórmulas semiclássicas distintas, embora sejam equivalentes quanticamente. O outro ponto discutido foi acerca das representações de valor inicial, conhecidas como representações IVR (*Initial Value Representation*). Como é muito difícil encontrar as trajetórias complexas envolvidas no cálculo do propagador, dadas as condições de contorno mistas, que envolvem tanto o ponto final quanto o inicial, existiram tentativas de expressar propagadores em função de trajetórias que partem de um determinado ponto no espaço de fase. Assim, nas representações IVR, o trabalho de busca de trajetórias é eliminado. Um exemplo desse tipo de fórmula é quando se expande o propagador semiclássico em torno de uma trajetória conhecida. Esse tipo de expansão é válido quando queremos calcular, por exemplo, o propagador diagonal, e conhecemos uma órbita periódica próxima. Porém, o principal exemplo de propagadores IVR é o propagador de Herman-Kluk [31], muito utilizado pelos químicos teóricos no cálculo de grandezas referentes a moléculas com muitos graus de liberdade. O problema é que esse propagador não possui uma derivação semiclássica correta, sendo que, inclusive, sua dedução original contém um erro. O paradoxo aparente, existente entre ser amplamente utilizado e ser formalmente errado, foi resolvido quando, recentemente, uma dedução consistente, mas não semiclássica, desse objeto foi realizada por Miller [32]. Paralela a essa discussão, segue ainda uma outra que estuda o significado e o limite de validade para cada tipo de propagador [33, 34, 35, 36, 37].

Apesar de todo este histórico, com raras exceções [38, 39], não existem aplicações numéricas da fórmula semiclássica do propagador a sistemas bidimensionais e caóticos. Nosso trabalho de Doutorado possui tais características, sendo que os resultados numéricos principais foram apresen-

tados em [40]. O trabalho consiste em um extenso estudo onde discutimos os problemas existentes na fórmula semiclássica do propagador, reproduzimos fielmente resultados exatos em determinada superfície de energia e propomos maneiras práticas de contornar as dificuldades encontradas.

No capítulo 1 desta tese, apresentaremos a aproximação semiclássica do propagador, utilizada no Doutorado e obtida da referência [41]. Através dela, obtemos uma fórmula pela qual o propagador é escrito como uma soma sobre contribuições de trajetórias clássicas complexas de um sistema equivalente $\tilde{H} = \langle \mathbf{z} | \hat{H} | \mathbf{z} \rangle$, com condições de contorno incomuns. Essa fórmula apresenta diversas dificuldades, que foram analisadas. Além disso, propostas para contorná-las foram criadas. A primeira delas está relacionada com a obtenção das trajetórias complexas, que será tratada no capítulo 2. Uma outra dificuldade é o tratamento das cáusticas, pontos para os quais o propagador diverge. Pode-se provar que, do ponto de vista da dinâmica clássica, uma cáustica representa a situação onde existem duas trajetórias arbitrariamente próximas, com condições de contorno adequadas para serem incluídas na fórmula do propagador. Aí, aparece uma especificidade de sistemas bidimensionais não-integráveis. Para esses, como uma família de trajetórias pode se ramificar em novas famílias, a cáustica pode representar esse ponto de ramificação (bifurcação, para o caso mais simples). Para casos unidimensionais, não aparecem pontos de bifurcação, pois o sistema é integrável. Assim, em uma dimensão, uma cáustica representa o colapso de duas trajetórias contribuintes. Vale comentar que, para o propagador na representação de coordenadas, problemas decorrentes de bifurcação de trajetórias foram encontrados [42, 43, 44]. Além de entendermos o aparecimento de cáusticas, propomos uma maneira de tratá-la, motivados pelos trabalhos [45, 46, 47, 48], que trazem a idéia de trabalhar simultaneamente com duas representações semiclássicas. Assim, quando uma delas não pode ser utilizada, tira-se informação da outra, e vice-versa. No capítulo 3, apresentaremos toda essa discussão. O capítulo 4 será dedicado às trajetórias não-contribuintes e por isso será focalizado no Fenômeno de Stokes. No capítulo 5, faremos a aplicação numérica da fórmula semiclássica do propagador em estados coerentes ao potencial Nelson, que é bidimensional, num regime de energia caótico. Nesse capítulo, ilustraremos toda a teoria apresentada nos quatro primeiros. Finalmente, no capítulo 6, faremos os comentários finais.

Capítulo 1

Aproximação Semiclássica

Neste capítulo deduziremos uma fórmula semiclássica para o propagador de um sistema quântico de duas dimensões espaciais, na representação de estados coerentes. Para isso, partiremos do propagador escrito na forma das integrais de caminho de Feynman. No limite semiclássico, os caminhos pelos quais a integral não é desprezível são aqueles coincidentes com as trajetórias de um sistema clássico equivalente, satisfazendo a determinadas condições de contorno. A aproximação apresentada neste capítulo consiste em identificar tais trajetórias e fornecer uma maneira de calcular a contribuição de cada uma delas ao propagador, incluindo a sua vizinhança. As primeiras aproximações semiclássicas para o propagador em estados coerentes foram realizadas em [11, 12, 15]. No entanto, recentemente, uma derivação bastante detalhada desta dedução, para sistemas unidimensionais, foi feita em [30].

1.1 Estados Coerentes

Antes de iniciarmos a aproximação que propusemos, faremos uma breve revisão sobre a representação de estados coerentes. Uma introdução muito interessante e detalhada deste assunto, feita através do tratamento quântico do oscilador harmônico simples, pode ser encontrada em [49].

A idéia que está por trás de uma aproximação semiclássica é descrever objetos quânticos em função de grandezas clássicas. Portanto, sendo este o nosso propósito, é natural utilizarmos uma representação quântica que seja familiar à mecânica clássica. Já que descrevemos um estado clássico como um ponto no espaço de fase, seria interessante adotar uma representação que também se utilizasse deste espaço. Nesse sentido, podemos dizer que a representação de estados coerentes é bem indicada para se fazer uma aproximação semiclássica. Afinal, por meio dela podemos representar o estado quântico de uma partícula, fornecendo somente a sua posição esperada no

espaço de fase $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, a incerteza na posição, ou momento, ou ainda uma relação entre elas. Além disso, para os estados coerentes, a imprecisão da medida de sua posição no espaço de fase é mínima, segundo o Princípio da Incerteza de Heisenberg ($\Delta\hat{q} \Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}$). Este fato reforça sua proximidade com a representação clássica: Assim como os estados clássicos são representados por pontos no espaço de fase, os estados coerentes também são representados pelas menores estruturas no espaço de fase quântico, que são regiões de área $\hbar/2$. Por este motivo os estados coerentes também são chamados de pontos quânticos. Com relação à função de onda na representação de coordenada e momento, lembramos que ela é descrita por uma gaussiana centrada em $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$, respectivamente. Em síntese, a partir da posição esperada $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ e das informações sobre a incerteza desta medida, é possível construir, via representação de estados coerentes, o estado quântico $|\mathbf{z}\rangle$ da partícula com as características citadas acima.

O estado coerente em duas dimensões espaciais, $|\mathbf{z}\rangle \equiv |z_x\rangle \otimes |z_y\rangle$, com médias na coordenada $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ e no momento $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$, com incerteza na coordenada $\mathbf{b} = (b_x/\sqrt{2}, b_y/\sqrt{2})$ e no momento $\mathbf{c} = (c_x/\sqrt{2}, c_y/\sqrt{2})$, satisfazendo $b_r c_r = \hbar$, para $r = x$ ou y , é rotulado por um número complexo $\mathbf{z} = (z_x, z_y)$, que é autovalor do operador vetorial de aniquilação $\hat{\mathbf{a}} \equiv \hat{a}_x \otimes \hat{a}_y$, aplicado em $|\mathbf{z}\rangle$:

$$\hat{a}_r |\mathbf{z}\rangle = z_r |\mathbf{z}\rangle, \text{ onde } \hat{a}_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}_r}{b_r} + i \frac{\hat{p}_r}{c_r} \right) \text{ e } z_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right). \quad (1.1)$$

Os objetos $\hat{q}_r$ e $\hat{p}_r$ são os operadores de posição e momento, na direção r . Também podemos obter o estado coerente $|\mathbf{z}\rangle$ através da aplicação do operador de Weyl, $\exp \left\{ \mathbf{z} \cdot \hat{\mathbf{a}}^\dagger - \frac{1}{2} |\mathbf{z}|^2 \right\}$, sobre o estado fundamental do oscilador harmônico $|\mathbf{0}\rangle$:

$$|\mathbf{z}\rangle = \exp \left\{ \mathbf{z} \cdot \hat{\mathbf{a}}^\dagger - \frac{1}{2} |\mathbf{z}|^2 \right\} |\mathbf{0}\rangle. \quad (1.2)$$

Por completeza, escrevemos a função de onda na representação de posição, na coordenada r :

$$\langle r | \mathbf{z} \rangle = \pi^{-1/4} b_r^{-1/2} \exp \left[-\frac{(r - q_r)^2}{2b_r^2} + \frac{i}{\hbar} p_r \left(r - \frac{q_r}{2} \right) \right]. \quad (1.3)$$

Introduzidos desta maneira, os estados coerentes aparentam não ter relação com o oscilador harmônico simples. Entretanto, os estados $|\mathbf{z}\rangle$, construídos segundo a especificação acima descrita, apresentam propriedades especiais quando submetidos ao hamiltoniano do oscilador harmônico simples *com* frequências $\omega_r = (\gamma_r m)^{-1}$, onde $\gamma_r = b_r/c_r$ e m é a massa da partícula a qual se descreve. Para este sistema, em particular, o pacote de onda representado por $|\mathbf{z}\rangle$ não se deforma durante a evolução temporal, o que não acontece para um sistema arbitrário. Além disso, a média $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ dos operadores de posição e momento, em função do tempo, coincide com a trajetória

descrita pela partícula, quando submetida a uma hamiltoniana clássica $H_c \equiv H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, onde a função H pode ser obtida da relação $\hat{H} \equiv H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}})$.

Para encerrar esta seção, apresentaremos a relação de não-ortogonalidade e a relação de completeza para os estados coerentes. Quanto à primeira, esclarecemos que dois estados coerentes $|\mathbf{z}_1\rangle$ e $|\mathbf{z}_2\rangle$, com $|\mathbf{z}_1\rangle \neq |\mathbf{z}_2\rangle$, não são ortogonais. A projeção de um no outro é estabelecida pela relação:

$$\langle \mathbf{z}_1 | \mathbf{z}_2 \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} |\mathbf{z}_1|^2 + \mathbf{z}_1^* \mathbf{z}_2 - \frac{1}{2} |\mathbf{z}_2|^2 \right\}. \quad (1.4)$$

Quanto à relação de completeza para estados coerentes, é importante dizer que ela não pode ser determinada de maneira única. Por isso, esta representação é chamada de super completa, que diz respeito à existência de uma série de arbitrariedades que podem ser tomadas para se definir o operador unidade. Uma discussão sobre esse assunto pode ser encontrada na referência [50]. Nesse trabalho, utilizaremos a relação de unidade mais comum:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 \mathbf{z}}{\pi^2} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}| &\equiv \int \frac{d^2(\text{Re}[\mathbf{z}]) d^2(\text{Im}[\mathbf{z}])}{\pi^2} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}| \\ &\equiv \int \frac{d^2 \mathbf{z} d^2 \mathbf{z}^*}{(2\pi i)^2} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}| \equiv \int \frac{dq_x dp_x dq_y dp_y}{4\hbar^2 \pi^2} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}| = 1. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Vale comentar ainda que, conforme discutido em [30], o operador unidade pode ser utilizado de diferentes maneiras na construção de integrais de trajetórias. Devido à supercompleteza desta base isso pode levar a diferentes fórmulas semiclássicas do propagador, embora produzam resultados equivalentes para o propagador exato. A comparação entre estas fórmulas semiclássicas demonstra que cada uma possui o seu intervalo de validade onde reproduz melhor o resultado exato.

1.2 Propagador de Feynman

O propagador para um operador hamiltoniano independente do tempo, na representação de estados coerentes, é escrito como:

$$K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T) = \langle \mathbf{z}'' | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | \mathbf{z}' \rangle. \quad (1.6)$$

Fica fácil de entender a interpretação física para este objeto, ao identificarmos o operador de evolução temporal, $\exp \left\{ -i\hat{H}T/\hbar \right\}$. Podemos então concluir que $K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T)$ é a projeção do estado $|\mathbf{z}'\rangle$, evoluído, segundo $\hat{H}$, até o tempo T , sobre o estado $|\mathbf{z}''\rangle$. E, portanto, o módulo ao quadrado desta expressão representa a probabilidade do estado $|\mathbf{z}'\rangle$, após um tempo T , ser medido como $|\mathbf{z}''\rangle$.

Como dissemos no início deste capítulo, o ponto de partida para a nossa aproximação semi-clássica é o propagador em estados coerentes na forma das integrais de caminho de Feynman [10]. Portanto, nesta seção, partiremos da equação (1.6) e chegaremos a esse formato desejado. Para isso, o primeiro passo é discretizar esta equação com relação ao tempo. Assim, dividimos o tempo T em N intervalos de duração ϵ , e introduzimos, entre cada $e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar}$, $(N-1)$ identidades como aquelas definidas pela equação (1.6). O propagador tomará a forma:

$$K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T) = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^4 \mathbf{z}_j}{\pi^2} \right) \times \prod_{k=0}^{N-1} \langle \mathbf{z}_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | \mathbf{z}_k \rangle, \quad (1.7)$$

onde $\mathbf{z}' \equiv \mathbf{z}_0$ e $\mathbf{z}'' \equiv \mathbf{z}_N$. Cada propagador infinitesimal, $K_\epsilon(\mathbf{z}_{k+1}^*, \mathbf{z}_k, \epsilon) \equiv \langle \mathbf{z}_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | \mathbf{z}_k \rangle$, pode ser calculado ao se expandir a exponencial $e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar}$ até primeira ordem em ϵ :

$$\langle \mathbf{z}_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | \mathbf{z}_k \rangle \approx \langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \right], \text{ onde } \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \equiv \frac{\langle \mathbf{z}_{k+1} | \hat{H} | \mathbf{z}_k \rangle}{\langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle}. \quad (1.8)$$

Nesse ponto, a relação (1.4) pode ser usada para resolver o termo $\langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle$. Fazendo isso e lembrando que o termo entre colchetes na equação (1.8) pode ser reapproximado pela exponencial $\exp \left\{ -i\frac{\epsilon}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \right\}$, obtemos:

$$\langle \mathbf{z}_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | \mathbf{z}_k \rangle = \exp \left\{ -i\frac{\epsilon}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} (|\mathbf{z}_{k+1}|^2 + |\mathbf{z}_k|^2) + \mathbf{z}_{k+1}^* \mathbf{z}_k \right\}. \quad (1.9)$$

Com esta última expressão podemos escrever o propagador mais simplificadamente:

$$K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T) = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^4 \mathbf{z}_j}{\pi^2} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}}, \quad (1.10)$$

onde $e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}} \equiv \prod_{k=0}^{N-1} K_\epsilon(\mathbf{z}_{k+1}^*, \mathbf{z}_k, \epsilon)$, arranjado de forma conveniente, vale:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}} = \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left[-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1}^* - \mathbf{z}_k^*}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_k - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_{k+1}^* \right] \right\}. \quad (1.11)$$

A equação (1.10) representa o propagador de Feynman, em estados coerentes, discretizado. Será a partir desta equação que iniciaremos a aproximação semiclássica de $K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T)$. Para que a equação (1.10) se torne a forma bem conhecida das integrais de caminho [10], basta supor que os caminhos sejam contínuos, tomar o limite $N \rightarrow \infty$ e $\epsilon \rightarrow 0$, com $N\epsilon = T$, e escrever $\mathbf{z}'$ e $\mathbf{z}''^*$ em função de $\mathbf{q}'$, $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}''$ e $\mathbf{p}''$:

$$K(\mathbf{q}', \mathbf{p}', \mathbf{q}'', \mathbf{p}'', T) = \int \frac{\mathcal{D}^2[\mathbf{q}(t)] \mathcal{D}^2[\mathbf{p}(t)]}{4\hbar^2 \pi^2} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\int_0^T (\dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - \tilde{H}) dt - \frac{1}{2} (\mathbf{p}'' \mathbf{q}'' - \mathbf{p}' \mathbf{q}') \right]}. \quad (1.12)$$

A equação (1.12), que não envolve nenhuma aproximação – a não ser a suposição de que os caminhos são contínuos – indica que todos os caminhos que saem de $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ e chegam a $(\mathbf{q}'', \mathbf{p}'')$ contribuem para o propagador quântico. A amplitude de probabilidade do estado $|\mathbf{z}'\rangle$ ser medido como $|\mathbf{z}''\rangle$, após o tempo T , leva em consideração todos esses caminhos possíveis. Note que eles não obedecem necessariamente a uma equação, como acontece com as trajetórias clássicas, que são regidas pelas equações de Hamilton. O peso da contribuição de cada caminho é medido por $\mathcal{F}$, que, a menos da fase $-\frac{1}{2}(\mathbf{p}''\mathbf{q}'' - \mathbf{p}'\mathbf{q}')$, pode ser identificada como sendo a ação correspondente ao caminho. No entanto, para a nossa aproximação semiclássica, uma outra quantidade vai ser identificada como ação clássica, que discutiremos na seção 1.6.

1.3 Método do Ponto de Sela

Para resolver a integral (1.10), no limite semiclássico ($\hbar \rightarrow 0$), utilizaremos o Método do Ponto de Sela, que pode ser entendido como uma extensão do bem conhecido Método da Fase Estacionária. Uma descrição mais rigorosa de tais métodos pode ser encontrada em [51, 52].

O Método da Fase Estacionária é utilizado para o cálculo da integral:

$$\mathcal{I}^{(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) e^{-\frac{i}{\hbar} f(x)} dx, \text{ no limite } \hbar \text{ (real)} \rightarrow 0_+. \quad (1.13)$$

Consideramos que $f(x)$ e $g(x)$ são funções reais bem comportadas da variável real x . Esclarecemos que esse método também pode ser aplicado aos casos em que os limites de integração são arbitrários. No entanto, como pretendemos fazer uma aplicação direta do método ao nosso estudo, achamos conveniente restringir a discussão a este caso particular, cujo intervalo de integração vai de $-\infty$ até $+\infty$.

A idéia básica para se resolver a integral (1.13) está relacionada ao fato do integrando ser uma função oscilatória da variável x . No limite assintótico estudado, a frequência dessa oscilação é muito alta, pois ela depende diretamente de $\hbar^{-1}$. Sabemos que, em geral, a integral de funções com esta característica é nula num intervalo de integração muito maior que o período das oscilações, já que contribuições positivas e negativas tendem a se cancelar. A exceção para esta afirmação ocorre quando o intervalo de integração incluir a região onde o argumento da função oscilatória se mantém estacionário, pois nela as oscilações cessam. Também devemos tomar cuidado com a vizinhança dos extremos de integração, cuja contribuição para integral nem sempre pode ser desprezada. No entanto, não nos preocuparemos com esses limites, pois restringiremos o nosso estudo aos casos em que o integrando se anula quando $x \rightarrow \pm\infty$. Os pontos ao redor dos quais a integral não se anula, pontos extremos e estacionários, são chamados de *pontos críticos*.

Segundo os argumentos expostos, para se resolver a integral (1.13), precisamos identificar, em primeiro lugar, os pontos estacionários da fase $f(x)$, que são os pontos que resolvem a equação

$f'(x) \equiv df/dx = 0$. Depois disso, basta estimar a contribuição de cada ponto estacionário, bem como a sua respectiva vizinhança. Caso exista mais de um ponto crítico, devemos somar a contribuição de todos eles. O cálculo da contribuição de cada ponto, incluindo a sua vizinhança, pode ser feito através de uma simples expansão de $f(x)$ e $g(x)$ em torno do ponto estacionário. Em geral, para um bom resultado, é suficiente fazer esta expansão até segunda ordem.

O Método do Ponto de Sela se utiliza da mesma idéia de *fase estacionária* e *pontos críticos* para resolver as seguintes integrais de linha no plano complexo:

$$\mathcal{I}_C^{(z)} = \int_C g(z) e^{-\frac{i}{\hbar} f(z)} dz, \text{ no limite } \hbar \text{ (real)} \rightarrow 0_+. \quad (1.14)$$

Neste caso, $f(z)$ e $g(z)$ são funções complexas e analíticas, numa região que contém C , do argumento complexo z . Partindo do mesmo raciocínio utilizado no Método de Fase Estacionária, o integrando da equação (1.14) oscila muito rapidamente ao longo de um caminho arbitrário C , o que anularia a integral. No entanto, se o caminho C for coincidente com qualquer curva de nível da parte real de $f(z)$, que denotaremos por C' , eliminaremos estas oscilações de alta frequência. Dessa forma, a integral (1.14) se reduziria a:

$$\mathcal{I}_{C'}^{(z)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \text{Re}[f(z)]|_{C'}} \int_{C'} g(z) e^{\frac{\text{Im}[f(z)]}{\hbar}} dz, \quad (1.15)$$

onde $\text{Re}[f(z)]|_{C'}$ é a parte real de $f(z)$ para qualquer z pertencente à curva C' .

Dentre todas as infinitas curvas C' , existe aquela com características especiais capaz de deixar o cálculo da integral (1.15) mais simples. Uma atribuição para esse bom caminho é que ele comece e termine em regiões onde $\text{Im}[f(z)] = -\infty$, o que leva a contribuição dos extremos de integração ser nula. Além disso, ele deve passar por um extremo de $\text{Im}[f(z)]$, que é o ponto crítico (ponto de sela) de $f(z)$, que resolve a equação $f'(z) \equiv df/dz = 0$. Conforme apresentado em [51] e [52], pode-se provar que as curvas de nível de $\text{Re}[f(z)]$ que passam por um ponto de sela de $f(z)$ são os caminhos onde $|\text{Im}[f'(z)]|$ é máximo. Ou seja, com relação à topologia de $\text{Im}[f(z)]$, as curvas de nível de $\text{Re}[f(z)]$, que passam pelo ponto de sela, são coincidentes com os declives e aclives mais íngremes. No entanto, como gostaríamos de satisfazer a condição $\text{Im}[f(z)] = -\infty$ nos limites de C' , devemos considerar somente os declives mais íngremes que emanam do ponto de sela.

Portanto, o bom caminho para se resolver a integral (1.14) é aquele que passa pelo ponto de sela e tem, com relação à topologia de $\text{Im}[f(z)]$, a descida mais íngreme. Por isso, no *limite assintótico estudado*, a contribuição do ponto de sela é dominante sobre a dos demais pontos ao longo desse caminho: ao se afastar do ponto crítico, o integrando se torna desprezível, pois $\text{Im}[f(z_0)]$, onde z_0 é o ponto de sela, é maior que $\text{Im}[f(z)]$ para qualquer z pertencente ao novo caminho e, portanto, $e^{\frac{\text{Im}[f(z_0)]}{\hbar}} \gg e^{\frac{\text{Im}[f(z)]}{\hbar}}$. Dessa forma, para se calcular o valor da contribuição de um ponto de sela, basta expandir $f(z)$ na sua vizinhança e fazer a estimativa. Em geral, uma expansão de $f(z)$ até

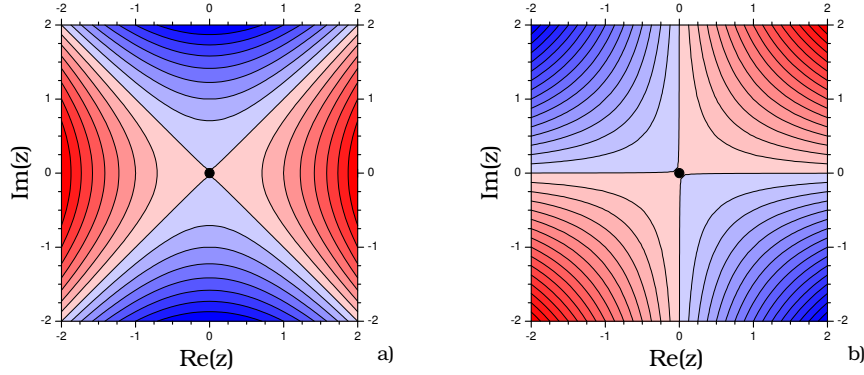


Figura 1.1: Curvas de nível para $\text{Re}[f(z)]$ (a) e $\text{Im}[f(z)]$ (b), sendo $f(z) = z^2$. O ponto $(0, 0)$ é o ponto de sela de $f(z)$. Com relação a esse ponto, existem dois vales (azul) e duas montanhas (vermelho), tanto para a parte real de $f(z)$ quanto para a parte imaginária. Note que os caminhos mais íngremes de $\text{Im}[f(z)]$, com relação ao ponto de sela, são equivalentes às curvas de nível de $\text{Re}[f(z)]$ que passam por esse ponto. Os caminhos de descida mais íngreme de $\text{Im}[f(z)]$, que é aquele onde $\text{Re}[z] = -\text{Im}[z]$, é o caminho que reduz a integral (1.14) a uma integral gaussiana.

segunda ordem é suficiente para uma boa aproximação, o que seria equivalente a transformar a integral (1.15) numa integral do tipo gaussiana, que é fácil de resolver.

A figura 1.1 ilustra estas idéias do Método do Ponto de Sela, para o cálculo da integral (1.14), com $f(z) = z^2$. Na figura 1.1a toda curva de nível de $\text{Re}[f(z)]$ representa uma possível curva C' , o que significa dizer que, tomando uma delas como caminho de integração, a equação (1.14) se reduz à (1.15). O ponto no centro do gráfico, $z = 0$, representa o ponto de sela de $f(z)$. Ao observar também a figura 1.1b, podemos notar que, se os extremos de C' estiverem localizados no primeiro ou terceiro quadrante do plano complexo z , a integral divergirá, devido à contribuição dos limites da integral. Esta discussão sugere que o caminho simples para resolver a integral (1.15) é aquele que começa no segundo quadrante e termina no quarto quadrante, ou vice-versa. O único caminho que passa pelo ponto crítico e que se encontra dentro dessas características é a curva $\text{Re}[z] = -\text{Im}[z]$, que inclui os dois declives mais íngremes de $\text{Im}[f(z)]$ com relação ao ponto de sela, e reduz a integral (1.14) a uma integral gaussiana. O fato desse método se utilizar dos caminhos mais íngremes que emanam do ponto de sela o faz ser bastante conhecido como Método dos Declives mais Íngremes (*Steepest Descents Method*).

Como vimos até o momento, o método abordado indica qual é a melhor curva C para lidar com a integral (1.14), e, para este caminho de integração, nos mostra como resolvê-la. No entanto, nada

nos garante que o caminho original da integral seja coincidente com esse caminho. Felizmente, o Teorema da Integral de Cauchy permite deformar consideravelmente o contorno de integrais, sem a alteração do seu valor numérico, sob determinadas condições. Assim, o método também consiste em alterar o contorno de integração original para aquele que deixa a integral mais simples. Portanto, podemos dizer que o Método do Ponto de Sela combina os argumentos topológicos de $f(z)$, discutidos nos parágrafos anteriores, com o enunciado do Teorema de Cauchy. O resultado final desta combinação, utilizado para resolver uma integral geral no formato (1.14), pode ser resumido em cinco passos [51]:

1. Identificar os pontos críticos do integrando: pontos de sela de $f(z)$, extremos de integração e singularidades de $f(z)$ ou $g(z)$;
2. Determinar os caminhos de declive mais íngremes partindo de cada ponto de sela;
3. Justificar, via Teorema da Integral de Cauchy, a deformação do contorno original naqueles encontrados no segundo passo;
4. Calcular a expansão assintótica da integral, ao longo do novo caminho, em torno de cada ponto crítico encontrado;
5. Somar as contribuições de cada expansão realizada.

Dentre estes cinco passos, o segundo e o terceiro, que devem ser aplicados simultaneamente, são mais delicados. Não porque sejam mais difíceis do ponto de vista conceitual, mas porque a sua implementação computacional não é fácil. Como veremos ao longo desta tese, existem pontos de sela que não podem ser considerados, pois não há como deformar o contorno original de integração para os caminhos de declive mais íngremes que passam por eles, sem alterar o valor numérico da integral. Em geral, a inclusão equivocada destes pontos leva a resultados descontínuos, e esta característica, até o momento, é a única maneira prática de identificá-los. O capítulo 4 retomará essa discussão com mais detalhes.

1.4 Trajetórias Clássicas Complexas

O propagador de Feynman (1.10), escrito em função de $\mathbf{q}_j$ e $\mathbf{p}_j$, envolve a integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2 \mathbf{q}_j d^2 \mathbf{p}_j}{4\hbar^2 \pi^2} \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{\mathbf{q}_{k+1} - \mathbf{q}_k}{\epsilon} \frac{\mathbf{p}_{k+1} + \mathbf{p}_k}{2} - \frac{1}{2} \frac{\mathbf{p}_{k+1} - \mathbf{p}_k}{\epsilon} \frac{\mathbf{q}_{k+1} + \mathbf{q}_k}{2} - \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \right] \right\},$$

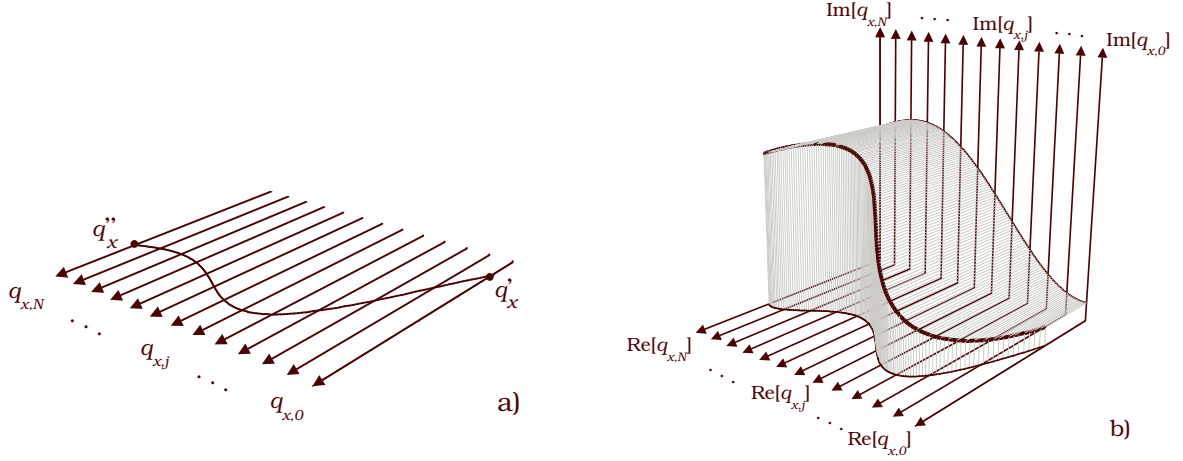


Figura 1.2: Representação das integrais de linha de Feynman e a sua extensão analítica. Representamos $(N - 1)$ caminhos de integração da equação (1.10): $q_{x,1}, q_{x,2}, \dots, q_{x,N-1}$. Os outros $3(N - 1)$ eixos, relativos às variáveis $q_{y,j}, p_{x,j}$ e $p_{y,j}$, também poderiam ser representados de maneira análoga. Na figura (a) os pontos críticos da integral, representados pela curva que conecta q'_x a q''_x , pertencem ao caminho de integração. A figura (b) representa a situação genérica onde não há pontos estacionários no eixo real. Para se resolver o problema, faz-se uma extensão analítica das variáveis de integração, de modo que se possa encontrar pontos de sela para $\mathcal{F}$, como mostra a curva mais grossa. Os contornos originais de integração (eixos reais) devem ser deformados de tal maneira que passe pelos pontos de sela.

que é equivalente à integral (1.13), pois as variáveis de integração são consideradas (até agora) reais e o argumento da exponencial $\mathcal{F}$ também é uma função real. A diferença está no fato da equação (1.10) conter uma integral em $4(N - 1)$ dimensões, enquanto que a integral (1.13) é unidimensional. Porém, como veremos *no final desta seção*, $\mathcal{F}$ não apresenta, em geral, pontos estacionários nos caminhos originais de integração, que são os eixos reais $q_{x,j}, q_{y,j}, p_{x,j}$ e $p_{y,j}$, para $j = 1, 2, \dots, N - 1$. Entretanto, se considerarmos a continuação analítica das variáveis de integração, poderemos encontrar pontos de sela para $\mathcal{F}$. Ou seja, os pontos críticos de $\mathcal{F}$ habitam o espaço de fase complexo. Dessa maneira, a equação (1.10) deixa de ser comparada à equação (1.13) para ser comparada à (1.14), só que $4(N - 1)$ -dimensional, e sendo C o eixo real desde $-\infty$ até $+\infty$ para cada variável de integração.

Na figura 1.2 procuramos ilustrar a idéia apresentada no parágrafo anterior. Na figura 1.2a representamos $(N - 1)$ caminhos de integração da equação (1.10): $q_{x,1}, q_{x,2}, \dots, q_{x,N-1}$. Os outros

$3(N-1)$ eixos, relativos às variáveis $q_{y,j}$, $p_{x,j}$ e $p_{y,j}$ também poderiam ser representadas de maneira análoga. Se houver pontos de fase estacionária de $\mathcal{F}$ pertencentes aos eixos representados, como indicado pela linha grossa que conecta q'_x a q''_x , na figura 1.2a, os caminhos de integração passarão necessariamente por eles, e uma expansão de $\mathcal{F}$ em torno destes pontos será suficiente para o cálculo do propagador (1.10). No entanto, se não houver pontos estacionários no eixo real, não há como calcular o propagador, a não ser pela extensão das variáveis de integração ao plano complexo, como representado na figura 1.2b. Nesta figura, os caminhos originais de integração continuam sendo os eixos reais. Mas, desta vez, os pontos de sela habitam a região fora destes eixos, como indicado pela linha mais grossa. Supondo que podemos deformar o contorno das integrais nos caminhos de declive mais íngremes que passam por cada ponto de sela, basta expandir $\mathcal{F}$ em torno deles para obter uma aproximação do propagador (1.10). A figura 1.2a representa a situação bastante particular onde o propagador (1.10) pode ser comparado à equação (1.13), e, por outro lado, a figura 1.2b representa a situação genérica onde a equação (1.10) é equivalente à (1.14).

Novas Variáveis

A partir daqui, passaremos a considerar, portanto, que as variáveis de integração, $q_{x,j}$, $q_{y,j}$, $p_{x,j}$ e $p_{y,j}$, podem tomar valores complexos. Desta forma, $z_{r,j}$ não é mais complexo conjugado de $z_{r,j}^*$, e vice-versa: O complexo de $z_{r,j} = \frac{1}{2} \left[\frac{q_{r,j}}{b_r} + i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right]$ deve ser $z_{r,j} = \frac{1}{2} \left[\frac{\bar{q}_{r,j}}{b_r} - i \frac{\bar{p}_{r,j}}{c_r} \right]$, onde a barra significa complexo conjugado, e não $\frac{1}{2} \left[\frac{q_{r,j}}{b_r} - i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right]$, como foi construído $z_{r,j}^*$. Sendo assim, para não haver confusão neste espaço de fase complexo, introduziremos uma nova notação que substitua z_r e z_r^* (eliminamos o índice j para simplificar), pois como vimos, devem ser tratados de forma independente:

$$z_r \rightarrow u_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right) \quad \text{e} \quad z_r^* \rightarrow v_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} - i \frac{p_r}{c_r} \right), \quad (1.16)$$

onde, agora, q_r e p_r são variáveis complexas. Vetorialmente escrevemos $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ e $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$. Devemos também realizar a mudança de notação para as variáveis de integração. Desta forma, temos:

$$\frac{d^4 \mathbf{z}_j}{\pi} = \frac{d^2 \mathbf{z}_j d^2 \mathbf{z}_j^*}{(2\pi i)^2} \rightarrow \left[\frac{d^2 \mathbf{u}_j d^2 \mathbf{v}_j}{-4\pi^2} \right]. \quad (1.17)$$

Trajetória Crítica e Limite Contínuo

Baseados no que foi discutido até agora, executaremos o primeiro passo para resolver a integral (1.10), que é a determinação dos pontos de sela de $\mathcal{F}$. Eles formam um conjunto de $4(N-1)$ pontos, que definem uma *trajetória crítica* num espaço de fase complexo de 4 dimensões. Os pontos de sela, devem satisfazer à seguinte condição:

$$\delta\mathcal{F} = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial u_{r,j}} \delta u_{r,j} + \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial v_{r,j}} \delta v_{r,j} \right] = 0. \quad (1.18)$$

Na nova notação fica claro que podemos considerar variações independentes de $\delta u_{r,j}$ e $\delta v_{r,j}$, o que não ocorria quando usávamos z_r e z_r^* . Procedendo assim, escrevemos a condição (1.18) explicitamente como:

$$-v_{r,k} + v_{r,k+1} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial u_{r,k}} \quad \text{e} \quad u_{r,k} - u_{r,k+1} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial v_{r,k+1}}, \quad (1.19)$$

onde $k = 1, \dots, N-1$ na primeira equação e $k = 0, \dots, N-2$ na segunda. No limite contínuo, $\epsilon \rightarrow 0$, as equações (1.19) tornam-se:

$$i\hbar \dot{u}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v_r} \quad \text{e} \quad -i\hbar \dot{v}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u_r}, \quad (1.20)$$

onde $\tilde{H}$, com base no que foi definido pela equação (1.8), toma a forma $\tilde{H} \equiv \langle \mathbf{v} | \hat{H} | \mathbf{u} \rangle$. O fato de escrever $\tilde{H}$ desta maneira, e não como $\tilde{H} \equiv \langle \mathbf{z} | \hat{H} | \mathbf{z} \rangle$, serve para reforçar que $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$ agora são complexos. Note que $\mathbf{u}(T)$ e $\mathbf{v}(0)$ somente serão determinados com a integração das equações de movimento. Isso porque $u_x(T)$, $u_y(T)$, $v_x(0)$ e $v_y(0)$ não aparecem nas equações (1.19), sendo portanto desvinculados das condições de contorno da equação da trajetória. Salientamos que, se z_r'' e $z_r'^*$ aparecessem na equação (1.19), na forma de $u_r(T)$ e $v_r(0)$, respectivamente, teríamos mais estas condições de contorno: $u_r(T) = \mathbf{z}'' = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q_r''}{b_r} + i \frac{p_r''}{c_r} \right]$ e $\mathbf{v}(0) = \mathbf{z}'^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q_r'}{b_r} - i \frac{p_r'}{c_r} \right]$. Isto eliminaria a possibilidade de fazer a continuação analítica do espaço de fase, pois as condições $\mathbf{u}(0) = \mathbf{z}'$, $\mathbf{v}(T) = \mathbf{z}''$, $\mathbf{u}(T) = \mathbf{z}''$ e $\mathbf{v}(0) = \mathbf{z}'^*$ só seriam satisfeitas para $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$ reais.

Neste ponto da dedução, podemos supor que a trajetória crítica, $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$, é obtida pela equação (1.20), com condições de contorno $\mathbf{u}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\mathbf{v}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$. Com relação à hamiltoniana suavizada $\tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, enfatizamos que ela difere da hamiltoniana clássica $H_c(\mathbf{q}(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \mathbf{p}(\mathbf{u}, \mathbf{v}))$ por termos de ordem $\hbar$. Como discutido em [30] estas diferenças são importantes e não podem ser descartadas. Segundo a referência [53], uma fórmula semiclássica do propagador, que envolva trajetórias da hamiltoniana clássica H_c , pode ser obtida, utilizando uma definição do operador unidade diferente daquela que usamos.

Escrevendo as equações (1.20) em termos dos valores médios $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$, verificamos que elas são as equações de Hamilton governadas por uma hamiltoniana $\tilde{H}$. Ou seja, *a trajetória crítica é a trajetória clássica de um sistema equivalente $\tilde{H}$* , e as condições de contorno são explicitamente escritas como:

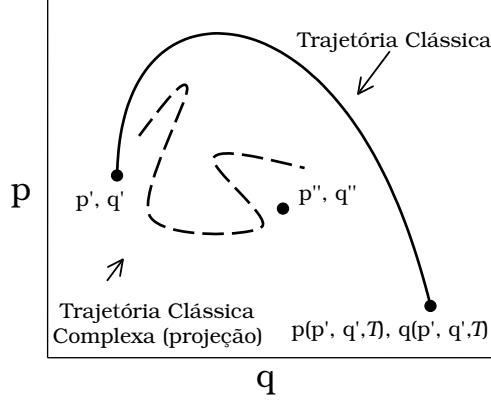


Figura 1.3: Espaço de fase real arbitrário. Representamos a única trajetória clássica determinada pela evolução temporal do estado $\mathbf{z}'$ ($\mathbf{q}' \equiv \mathbf{q}(0)$ e $\mathbf{p}' \equiv \mathbf{p}(0)$), no caso de $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$ reais. Em geral, $\mathbf{q}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T) \neq \mathbf{q}''$ e $\mathbf{p}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T) \neq \mathbf{p}''$, o que quebra a condição de contorno final. No entanto, numa extensão analítica do problema, existem trajetórias complexas, cuja projeção no espaço de fase real é representada, nesta figura, pela curva tracejada, que satisfazem às condições de contorno apropriadas.

$$\begin{aligned}
 u'_x = z'_x &\implies q'_x = \text{Re}[q_x(0)] - \frac{b_x}{c_x} \text{Im}[p_x(0)] & \text{e} & \quad p'_x = \text{Re}[p_x(0)] + \frac{c_x}{b_x} \text{Im}[q_x(0)], \\
 v''_x = z'^*_x &\implies q''_x = \text{Re}[q_x(T)] + \frac{b_x}{c_x} \text{Im}[p_x(T)] & \text{e} & \quad p''_x = \text{Re}[p_x(T)] - \frac{c_x}{b_x} \text{Im}[q_x(T)], \\
 u'_y = z'_y &\implies q'_y = \text{Re}[q_y(0)] - \frac{b_y}{c_y} \text{Im}[p_y(0)] & \text{e} & \quad p'_y = \text{Re}[p_y(0)] + \frac{c_y}{b_y} \text{Im}[q_y(0)], \\
 v''_y = z'^*_y &\implies q''_y = \text{Re}[q_y(T)] + \frac{b_y}{c_y} \text{Im}[p_y(T)] & \text{e} & \quad p''_y = \text{Re}[p_y(T)] - \frac{c_y}{b_y} \text{Im}[q_y(T)],
 \end{aligned} \tag{1.21}$$

onde salientamos que $(\mathbf{q}' = (q'_x, q'_y), \mathbf{p}' = (p'_x, p'_y))$ e $(\mathbf{q}'' = (q''_x, q''_y), \mathbf{p}'' = (p''_x, p''_y))$ são as posições médias, no espaço de fase, do estado coerente inicial e final, respectivamente, e portanto são *parâmetros reais*.

O Porquê do Espaço de Fase Complexo

Finalmente, apresentaremos uma explicação para o fato de estarmos considerando uma continuação analítica do espaço de fase: Suponha, a princípio, que o ponto inicial da trajetória crítica seja real. Portanto, vale dizer, com base na equação (1.21), que $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}'$ e $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}'$. Esta informação é suficiente para determinar de maneira única a trajetória real que parte deste ponto. Portanto, o ponto final $(\mathbf{q}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T), \mathbf{p}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T))$ desta trajetória também fica pré-determinado. Logo, em geral, não conseguimos satisfazer as condições de contorno $\mathbf{q}(T) = \mathbf{q}''$ e $\mathbf{p}(T) = \mathbf{p}''$. A

única maneira de satisfazê-las aconteceria no caso muito particular onde $\mathbf{q}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T) = \mathbf{q}''$ e $\mathbf{p}(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T) = \mathbf{p}''$. Por outro lado, se estendermos $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$ ao plano complexo, as condições de contorno deixam de ser tão restritivas, como indica as equações (1.21), e o problema se resolve. Para ilustrar esta idéia veja a figura 1.3, onde temos representado um espaço de fase real. A linha contínua representa a única trajetória clássica real que sai do ponto $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}'$ e $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}'$, mas, em geral, não se conecta ao ponto $\mathbf{q}''$ e $\mathbf{p}''$. Entretanto, no espaço de fase estendido existem trajetórias que satisfazem às novas condições de contorno no espaço complexo (1.21). A projeção desta trajetória complexa, no espaço real, é mostrada também na figura 1.3 através da curva tracejada. Note que nem a projeção conecta diretamente $\mathbf{q}', \mathbf{p}'$ a $\mathbf{q}'', \mathbf{p}''$.

1.5 Vizinhança da Trajetória Clássica Complexa

Até este ponto da dedução, identificamos os caminhos que mais contribuem para a fórmula do propagador (1.10), que são as trajetórias clássicas *complexas*, regidas pela equação (1.20), que satisfazem as condições de contorno (1.21). A partir de agora deduziremos a contribuição de cada trajetória ao valor do propagador. Seguindo a idéia do Método do Ponto de Sela, expandimos o objeto $\mathcal{F}$ em torno da trajetória crítica, até segunda ordem: $\mathcal{F} = \bar{\mathcal{F}} + \frac{1}{2}\delta^2\mathcal{F}$, onde $\bar{\mathcal{F}}$ é $\mathcal{F}$ calculado sobre a trajetória. Procedendo desta maneira e utilizando a nova notação descrita na seção anterior, a equação (1.10) fica:

$$K(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{I} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \bar{\mathcal{F}} \right], \text{ onde } \mathcal{I} = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2\mathbf{u}_j d^2\mathbf{v}_j}{-4\pi^2} \right) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \delta^2\mathcal{F} \right]. \quad (1.22)$$

Resolveremos, portanto, a integral $\mathcal{I}$, que, da maneira como foi construída, obviamente contém a contribuição da vizinhança da trajetória crítica. Para resolvê-la, devemos analisar a variação em segunda ordem, $\delta^2\mathcal{F}$. Porém, antes de analisar este termo em detalhe, é importante comentar que a integral $\mathcal{I}$ é convergente, pois, conforme a referência [30], $\delta^2\mathcal{F}$ contém sempre uma parte imaginária diferente de zero e positiva, mesmo quando a trajetória crítica é real. A partir da equação (1.18), podemos obter facilmente a relação:

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\hbar} \delta^2\mathcal{F} = & -\frac{1}{2} \sum_{r,r'=x,y} \left\{ \sum_{k=1}^{N-2} \left[2\mathcal{C}_{r,r'}^{k+1/2} \delta v_{r,k+1} \delta u_{r',k} - \delta v_{r,k+1} \delta u_{r,k} \right] \right. \\ & \left. + \sum_{k=1}^{N-1} \left[\mathcal{A}_{r,r'}^k \delta v_{r,k} \delta v_{r',k} + \mathcal{B}_{r,r'}^k \delta u_{r,k} \delta u_{r',k} + \delta v_{r,k} \delta u_{r,k} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.23)$$

onde:

$$\mathcal{A}_{r,r'}^k = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{H}_{k-\frac{1}{2}}}{\partial v_{r,k} \partial v_{r',k}}, \quad \mathcal{B}_{r,r'}^k = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial u_{r,k} \partial u_{r',k}} \quad \text{e} \quad \mathcal{C}_{r,r'}^{k+1/2} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial v_{r,k+1} \partial u_{r',k}}. \quad (1.24)$$

Os três objetos listados acima são calculados sobre a trajetória crítica. Com a ajuda da relação (1.23), podemos notar que a integral $\mathcal{I}$, definida pela equação (1.22), tem a forma de uma integral gaussiana com um argumento exponencial não-diagonalizado. Ou seja, podemos escrever:

$$\frac{i}{2\hbar} \delta^2 S = -\frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{Q} \mathbf{v}, \quad (1.25)$$

onde $\mathbf{v}^T$ é o vetor $4(N-1)$ dimensional, transposto de $\mathbf{v}$, escrito como:

$$\mathbf{v}^T = \left(\delta u_{x,N-1} \quad \delta u_{y,N-1} \quad \delta v_{x,N-1} \quad \delta v_{y,N-1} \quad \dots \quad \delta u_{x,1} \quad \delta u_{y,1} \quad \delta v_{x,1} \quad \delta v_{y,1} \right), \quad (1.26)$$

e a matriz $\mathbf{Q}$, de dimensão $4(N-1) \times 4(N-1)$, é dada por:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{N-1} & \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \mathbf{I} & \mathbf{A}^{N-1} & \mathbf{C}^{N-3/2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \mathbf{C}^{T N-3/2} & \mathbf{B}^{N-2} & \mathbf{I} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \mathbf{I} & \mathbf{A}^{N-2} & \mathbf{C}^{N-5/2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{C}^{T N-5/2} & \mathbf{B}^{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

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

$$\mathbf{A}^k = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{xx}^k & \mathcal{A}_{xy}^k \\ \mathcal{A}_{yx}^k & \mathcal{A}_{yy}^k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^k = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{xx}^k & \mathcal{B}_{xy}^k \\ \mathcal{B}_{yx}^k & \mathcal{B}_{yy}^k \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C}^{k+1/2} = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_{xx}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{xy}^{k+1/2} \\ \mathcal{C}_{yx}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{yy}^{k+1/2} \end{pmatrix}.$$

A idéia então é obter uma transformação unitária $\mathbf{U} \Rightarrow \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}$, de modo que a matriz transformada $\mathbf{Q}' = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{U}$ seja diagonal. Com isso chegaríamos a uma integral de variáveis separáveis, onde cada uma delas teria formato gaussiano, cujo modo de resolver é conhecido. Para uma integral gaussiana do tipo da equação (1.22), podemos obter o resultado [30]:

$$\mathcal{I} = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2 \mathbf{u}_j d^2 \mathbf{v}_j}{-4\pi^2} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{Q} \mathbf{v} \right] = \sqrt{\frac{1}{\det \mathbf{Q}}} \equiv \sqrt{\frac{1}{|\Delta|}} e^{-\frac{i}{2} \sigma}, \quad (1.28)$$

onde Δ é o determinante de $\mathbf{Q}$ e σ a sua fase. O cálculo do determinante é realizado no apêndice A e vale:

$$\Delta = [\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt \right\}, \quad (1.29)$$

onde $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ é o bloco 2×2 da matriz estabilidade M , que é responsável pela propagação de pequenos deslocamentos, $\delta \mathbf{u}'$ e $\delta \mathbf{v}'$, em torno da trajetória crítica durante o tempo T :

$$\begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}'' \\ \delta \mathbf{v}'' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} M_{\mathbf{u}\mathbf{u}} & M_{\mathbf{u}\mathbf{v}} \\ M_{\mathbf{v}\mathbf{u}} & M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

1.6 Ação Complexa

Nesta seção voltaremos ao termo $\exp [(i/\hbar) \bar{\mathcal{F}}]$ que aparece na equação (1.22), para reescrevê-lo de uma maneira mais adequada. Para facilitar, vamos omitir a “barra” sobre $\mathcal{F}$, já que agora sabemos que qualquer função de $\mathbf{u}(t)$ ou $\mathbf{v}(t)$ deve ser calculado sobre a trajetória crítica.

Para reescrever $\mathcal{F}$ na nova notação definida por (1.16), devemos ficar atentos para algumas particularidades. Tanto $\mathbf{z}'^*$ quanto $\mathbf{z}''$ não podem ser substituídos por $\mathbf{v}'$ e $\mathbf{u}''$, respectivamente, pois os primeiros, na equação (1.11), são os conjugados de $\mathbf{z}'$ e $\mathbf{z}''^*$, enquanto que $\mathbf{v}'$ e $\mathbf{u}''$ não são. Portanto, para evitar este erro, faremos a substituição direta, sem nos preocuparmos com este problema, e, em seguida, subtrairemos os termos que contenham $\mathbf{v}'$ e $\mathbf{u}''$, ou seja, $-\frac{1}{2}\mathbf{v}''\mathbf{u}'' - \frac{1}{2}\mathbf{v}'\mathbf{u}'$, e adicionaremos a sua forma correta em função de $\mathbf{z}'^*$ e $\mathbf{z}''$, ou seja, $-\frac{1}{2}\mathbf{z}'^*\mathbf{z}' - \frac{1}{2}\mathbf{z}''^*\mathbf{z}'' = -\frac{1}{2}|\mathbf{v}''|^2 - \frac{1}{2}|\mathbf{u}'|^2$. Depois disto, podemos tomar o limite $\epsilon \rightarrow 0$ de modo que obtemos:

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} = \int_0^T \left[\frac{1}{2} (\dot{\mathbf{v}} \mathbf{u} - \mathbf{v} \dot{\mathbf{u}}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt - \frac{1}{2} [|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2 - \mathbf{u}' \mathbf{v}' - \mathbf{u}'' \mathbf{v}''] . \quad (1.31)$$

Enfim, definimos a ação complexa $\mathcal{S}$:

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \int_0^T \left[\frac{1}{2} (\dot{\mathbf{v}} \mathbf{u} - \mathbf{v} \dot{\mathbf{u}}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt + \frac{1}{2} (\mathbf{u}' \mathbf{v}' + \mathbf{u}'' \mathbf{v}'') , \quad (1.32)$$

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

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v_r''} = -i\hbar u_r'', \quad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial u_r'} = -i\hbar v_r' \quad \text{e} \quad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} = -E = -\tilde{H}(\mathbf{u}', \mathbf{v}') = -\tilde{H}(\mathbf{u}'', \mathbf{v}''). \quad (1.33)$$

1.7 Formulário para o Propagador Semiclássico

Nesta seção pretendemos sintetizar a aproximação semiclassical realizada. Como resultado final, obtivemos uma fórmula que é função somente de trajetórias clássicas complexas que obedecem a determinadas condições de contorno. Alcançamos, portanto, a essência de uma fórmula semiclassical; realizar o cálculo aproximado de uma grandeza quântica, que é o propagador, a partir do cálculo

de grandezas de um sistema clássico correspondente, que são as trajetórias. A equação final do propagador semiclássico, construída a partir das equações (1.22), (1.28), (1.29) e (1.31), tem a forma:

$$K(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T) \approx \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\frac{1}{|\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} F \right\}. \quad (1.34)$$

Nesta equação, F e $\mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ são funções das trajetórias clássicas complexas, $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$, regidas pela hamiltoniana suavizada, $\tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \equiv \langle \mathbf{v} | \hat{H} | \mathbf{u} \rangle$, com as condições de contorno $\mathbf{u}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\mathbf{v}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$, que levam às equações (1.21). O somatório da equação (1.34) indica que devemos considerar todas aquelas trajetórias que satisfazem as condições acima descritas. Lembramos que $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ são variáveis auxiliares, cujas componentes u_r e v_r (com $r = x$ ou y) se relacionam com as componentes das variáveis *complexas* de posição e momento, q_r e p_r , segundo estas equações:

$$u_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right) \quad \text{e} \quad v_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} - i \frac{p_r}{c_r} \right). \quad (1.35)$$

Os números b_r e c_r são as larguras dos estados coerentes, $|z_r'\rangle$ e $|z_r''\rangle$, em relação à posição e ao momento médios, respectivamente, e são condicionados à relação $b_r c_r = \hbar$. Além disso, as equações de Hamilton para as variáveis $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ são escritas como:

$$i\hbar \dot{u}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v_r} \quad \text{e} \quad -i\hbar \dot{v}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u_r}. \quad (1.36)$$

Na equação (1.34), o objeto F , que chamamos de fase total, pode ser escrito como:

$$F(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) + \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) - \frac{\hbar}{2} \sigma + \frac{i\hbar}{2} \left[|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2 \right], \quad (1.37)$$

onde $\mathcal{S}$ é a ação complexa da trajetória envolvida e $\mathcal{G}$ pode ser entendido como uma correção devido a utilização das trajetórias da hamiltoniana suavizada ao invés da hamiltoniana clássica [30]. O número real σ é a fase de $\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$. As funções $\mathcal{S}$ e $\mathcal{G}$ são escritas em termos das trajetórias complexas como:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \int_0^T \left[\frac{i\hbar}{2} (\dot{\mathbf{u}} \mathbf{v} - \mathbf{u} \dot{\mathbf{v}}) - \tilde{H} \right] dt - \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{u}'' \mathbf{v}'' + \mathbf{u}' \mathbf{v}'], \\ \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Com relação a matriz $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ da equação (1.34), lembramos que ela é definida pela equação (1.30), o que significa dizer que a matriz $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ é um bloco 2×2 da matriz estabilidade M , que, como o próprio nome diz, contém informações sobre a vizinhança da trajetória complexa em questão.

A idéia de escrever o propagador semiclássico (1.34) somente em função de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ e F é interessante pois indica duas tendências para o comportamento do propagador, que serão discutidos a seguir:

- O significado de F para a fórmula semiclássica pode ser entendido conceitualmente com a ajuda de uma comparação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. Sabemos que pontos clássicos no espaço de fase se conectam somente através de trajetórias reais, ou seja, dois estados clássicos só admitem correlação não nula, num dado tempo T , se houver trajetória real que ligue os dois pontos, neste mesmo período de tempo. Caso não exista tal trajetória, não há como conectar os dois pontos. No limite semiclássico, pontos quânticos no espaço de fase (estados coerentes) devem seguir aproximadamente esta orientação clássica, dado o Princípio da Correspondência. Portanto, esperamos ter valores mais altos para o propagador que envolva estados conectados por trajetórias reais. Na medida em que esta conexão vai sendo descrita por trajetórias cada vez mais complexas, devemos ver o módulo do propagador diminuir. Aliando esta previsão física à função matemática de F , podemos pensar que este objeto é o principal responsável por descrever este comportamento. Para trajetórias reais, o módulo da exponencial da fórmula (1.34) é $e^{-\frac{1}{2}(|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2)}$. Se pensarmos que a parte imaginária de F é sempre positiva, trajetórias complexas produzirão $e^{-\frac{1}{\hbar}|\text{Im}[F]|}e^{-\frac{1}{2}(|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2)}$, que é sempre menor que o primeiro, reproduzindo, assim, o comportamento físico esperado. Note como este raciocínio aponta para uma condição para parte imaginária de F , assunto que será tratado na seção 1.10.
- Pela equação (1.30) podemos ver que $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ nos informa como pequenos deslocamentos, $\delta\mathbf{u}'$ e $\delta\mathbf{v}'$, em torno do ponto inicial da trajetória clássica complexa se manifestam, através de $\delta\mathbf{u}''$ e $\delta\mathbf{v}''$, decorrido o tempo T . Portanto, podemos dizer que neste termo está incluída a informação da vizinhança da trajetória envolvida. Assim como no caso de F , tratado no parágrafo anterior, também podemos entender o papel do pré-fator, $[\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}]^{-1/2}$, através de uma comparação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. Sabemos que pacotes clássicos (*ensembles*) no espaço de fase se esparramam mais no decorrer do tempo quando as trajetórias que descrevem sua dinâmica são mais instáveis. Então, podemos pensar que o fato do pacote se esparramar leva a uma menor sobreposição (correlação) do *ensemble* evoluído sobre o inicial, quando, por exemplo, o centro destes dois pacotes for conectado por uma trajetória real. Então, com relação aos estados coerentes (pacotes quânticos), no limite semiclássico, podemos prever que trajetórias estáveis produzem um valor do propa-

gador maior do que aquele que envolve trajetórias instáveis, uma vez que o propagador é a superposição de dois estados quânticos. Em linhas gerais, esta predição semiclássica ocorre da seguinte maneira: quanto mais (menos) instável for a trajetória complexa contribuinte para o cálculo do propagador, maiores (menores) serão os módulos dos autovalores de M , dada a equação (1.30), e, conseqüentemente, menor (maior) será o valor do propagador.

Estes dois pontos ilustram muito bem o comportamento do propagador através das características da trajetória envolvida no seu cálculo: Quanto mais complexa for a trajetória, menor será o valor do propagador, e vice-versa; Quanto mais estável ela for, maior será o valor do propagador, e vice-versa. Para completar esta análise qualitativa, lembramos que, além destas duas características, ainda pode existir a interferência devido a existência de mais de uma trajetória contribuindo para o valor do propagador. A idéia de ter (pelo menos) duas trajetórias envolvidas no cálculo do propagador, $|K|^2 = |K_{\text{traj1}} + K_{\text{traj2}}|^2$, é uma maneira semiclássica de entender fenômenos de interferência.

1.8 Oscilador Harmônico Simples

Encerrada a aproximação semiclássica do propagador, aplicaremos sua fórmula ao oscilador harmônico simples. Neste sistema, tanto o propagador exato quanto o semiclássico tem solução analítica, de modo que podemos compará-los. Veremos que, neste sistema, a fórmula semiclássica é equivalente à exata.

Como o operador hamiltoniano do oscilador harmônico simples em duas dimensões é separável, faremos o tratamento apenas para a direção x . A outra direção pode ser determinada de maneira análoga. O operador hamiltoniano do oscilador harmônico, em função dos operadores de criação e aniquilação, é escrito como:

$$\hat{H} = \hbar\omega_x \left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \tilde{H}(v_x, u_x) \equiv \langle v_x | \hat{H} | u_x \rangle = \hbar\omega_x \left(v_x u_x + \frac{1}{2} \right). \quad (1.39)$$

Como desejamos calcular o propagador semiclássico, devemos encontrar as trajetórias clássicas complexas (1.36) que satisfazem às condições de contorno apropriadas (1.21). Resolvendo-as, encontramos:

$$\left. \begin{aligned} i\hbar\dot{u}_x &= \hbar\omega_x u_x \\ i\hbar\dot{v}_x &= -\hbar\omega_x v_x \end{aligned} \right\} u_x(t) = u'_x e^{-i\omega_x t} \quad \text{e} \quad v_x(t) = v''_x e^{i\omega_x(t-T)} \Rightarrow \det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = e^{i\omega_x T}. \quad (1.40)$$

Encontradas as trajetórias, podemos usá-las diretamente na fórmula semiclássica (1.34), o que nos leva a:

$$K_{\text{semi}}(z_x^{\prime\prime*}, z_x', T) = e^{\frac{1}{2}\{2z_x' z_x^{\prime\prime*} e^{-i\omega_x T} - |z_x'|^2 - |z_x^{\prime\prime*}|^2 - i\omega_x T\}}. \quad (1.41)$$

Esta equação deve ser comparada ao cálculo exato:

$$\begin{aligned} K_{\text{exato}}(z_x^{\prime\prime*}, z_x', T) &= \langle z_x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} | z_x' \rangle = \langle z_x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega_x (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \frac{1}{2}) T} | z_x' \rangle = e^{-\frac{i}{2} \omega_x T} \langle z_x'' | e^{-i\omega_x T} | z_x' \rangle \\ &= e^{\frac{1}{2}\{2z_x' z_x^{\prime\prime*} e^{-i\omega_x T} - |z_x'|^2 - |z_x^{\prime\prime*}|^2 - i\omega_x T\}}. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Como vemos, a aproximação semiclássica (1.41) é equivalente ao propagador exato (1.42).

1.9 Redução do Problema: O Propagador Diagonal

A aproximação semiclássica alcançada (1.34) é escrita em função de *nove parâmetros* reais: q_r', q_r'', p_r' e p_r'' (para $r = x$ e y) e T , já considerando fixas as larguras do estado coerente inicial e final. Uma aplicação levando em conta tantas variáveis é muito complicada. Por isso, daqui em diante trabalharemos exclusivamente com o propagador diagonal, o que significa:

$$\mathbf{z}' = \mathbf{z}'' \implies \begin{cases} q_x' = q_x''; & q_y' = q_y''; \\ p_x' = p_x''; & p_y' = p_y''. \end{cases} \quad (1.43)$$

Assim, cada resultado apresentado no capítulo 5, deve envolver o propagador em função destas *cinco variáveis* reais: $q_x', q_y', p_x', p_y', T$. Fisicamente, reduzimos o nosso problema ao cálculo da amplitude de probabilidade de um estado inicial $|\mathbf{z}'\rangle$ retornar nele mesmo, decorrido um tempo T . Por isso, chamaremos o módulo ao quadrado do propagador diagonal de *probabilidade de retorno*: $R(q_x', q_y', p_x', p_y', T) = |K(q_x', q_y', p_x', p_y', T)|^2$.

Quando limitamos nosso estudo ao propagador diagonal também deslocamos nossa atenção para as *órbitas periódicas* da hamiltoniana clássica equivalente. Isto porque, no limite semiclássico, esperamos que a evolução temporal do estado coerente, definido por $\mathbf{q}'$ e $\mathbf{p}'$, acompanhe aproximadamente a trajetória clássica que parte deste ponto, pelo menos para tempos curtos, como sugere o resultado da seção anterior. Portanto, quanto menor o valor de T e quanto mais próximas (no espaço de fase) estiverem as órbitas periódicas do centro do estado coerente, maior será a probabilidade de retorno. Por isso, todos os cálculos numéricos que fizemos durante o doutorado foram feitos para parâmetros $(\mathbf{q}', \mathbf{p}', T)$ tais que pelo menos uma órbita periódica estivesse perto. Apesar desta importância das órbitas periódicas para o propagador diagonal, note que a única maneira da trajetória envolvida no cálculo do propagador ser periódica é quando ela for real. Isto pode ser verificado facilmente através das equações (1.21). As condições de contorno não restringem

as trajetórias à condição de periodicidade para cada uma das oito coordenadas (partes real e imaginária de $\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}$) independentemente. As condições de contorno para o propagador diagonal são incomuns, pois exigem o retorno ao valor inicial para combinações lineares das coordenadas de posição e momento.

1.10 Problemas na Fórmula Semiclássica do Propagador

Para encerrar este capítulo, investigaremos as possíveis dificuldades existentes na fórmula semiclássica do propagador (1.34). A idéia desta seção, portanto, é trazer uma discussão qualitativa sobre o assunto. Com isso, pretendemos fornecer uma motivação para os três capítulos que se seguem, onde, de fato, desenvolveremos o estudo dos problemas e proporemos alternativas para resolvê-los.

Começaremos, então, a identificar situações onde o cálculo semiclássico do propagador pode apresentar problemas. Pretendemos mostrar que, apesar da idéia de fazer cálculos quânticos utilizando somente ingredientes clássicos ser bastante interessante, este procedimento pode trazer alguns inconvenientes. Através de uma análise qualitativa da equação (1.34), enumeramos os seguintes pontos:

1. Encontrar as trajetórias complexas envolvidas no cálculo é a primeira dificuldade que aparece. Além das condições de contorno não serem simples, pretendemos aplicar o estudo a potenciais não integráveis, o que torna inviável encontrar as trajetórias de maneira direta.
2. Aparentemente não existe nenhuma restrição matemática que evite a divergência do pré-fator, nome dado ao termo que precede a exponencial existente na fórmula semiclássica (1.34). Assim, podemos encontrar valores de $\mathbf{z}'$, $\mathbf{z}''^*$ e T , para os quais a trajetória envolvida no cálculo do propagador nos forneça $|\det M_{vv}| = 0$. Neste caso, o pré-fator diverge e o cálculo do propagador fica comprometido. Além disso, o efeito desta singularidade afeta toda uma região em sua vizinhança. Portanto, podemos dizer que a fórmula (1.34) deixa de valer para uma vizinhança ao redor do ponto que leva ao resultado $|\det M_{vv}| = 0$. Para fundamentar melhor este comentário, lembramos que pode-se provar que o módulo do propagador quântico está limitado entre 0 e 1, já que este tem interpretação de probabilidade. Por outro lado, o módulo do propagador semiclássico também deve cumprir esta exigência, o que evidentemente não ocorre para a região de divergência do pré fator. Veremos que as trajetórias que produzem $|\det M_{vv}| \approx 0$ não são contempladas pela aproximação realizada. Nessas regiões são necessárias correções de ordem superior.
3. Assim como no caso anterior não havia restrição formal à divergência do pré fator, também não há nada que impeça a parte imaginária da fase total ($\text{Im}[F]$) de tomar valores negativos.

Igualmente àquela situação já discutida, se este fato ocorrer, a fórmula (1.34) produzirá resultados fora do intervalo fisicamente aceito. Para se entender esta afirmação, devemos pensar na dependência do módulo do propagador semiclássico com relação ao termo exponencial de sua fórmula, $\exp\{-\text{Im}[F]/\hbar\}$. Se supusermos que uma trajetória, com $\text{Im}[F] < 0$, possa contribuir para a fórmula semiclássica do propagador, o módulo desta contribuição conterá o termo $\exp\{|\text{Im}[F]|/\hbar\}$, que produz resultados fisicamente não aceitos, no limite $\hbar \rightarrow 0$. Portanto, trajetórias com esta característica não devem ser incluídas na fórmula semiclássica do propagador.

4. Por último, analisamos o somatório presente na fórmula (1.34). Suponha que estamos interessados em calcular o propagador para parâmetros tais que somente uma trajetória complexa é encontrada. A seguir, passamos a variar os parâmetros suavemente de modo a obter uma curva contínua para o valor do módulo do propagador semiclássico. Se, a partir de certo ponto, passamos a encontrar outra trajetória que deva ser levada em consideração, teremos uma descontinuidade na curva do módulo do propagador. Este comportamento do propagador semiclássico não deve ser aceito, uma vez que o propagador quântico não apresenta descontinuidades. Assim como no item anterior, a trajetória que produzir tal descontinuidade deve ser excluída da fórmula (1.34).

Dentre os quatro problemas citados, o primeiro foi de ordem mais técnica e pode ser tratado de forma independente dos outros. Portanto, no capítulo 2, estudaremos exclusivamente os métodos empregados para se encontrar as trajetórias. A segunda dificuldade, embora tenha relação com as duas últimas, pode ser tratada separadamente. Assim o faremos no capítulo 3, onde investigaremos as circunstâncias que podem levar à divergência do pré-fator, o que torna inválida a aproximação semiclássica do propagador. Além disso, proporemos uma alternativa para evitar esta divergência.

Os problemas relacionados aos itens 3 e 4 sinalizam para a existência de trajetórias que não devem ser consideradas (trajetórias não-contribuintes) e serão tratados no capítulo 4. Neste capítulo, também estabeleceremos uma relação entre os três últimos problemas: Em geral, numa expansão assintótica, que é o caso da aproximação que fizemos, quando o pré-fator diverge (problema número 2), aparecem mais de um ponto crítico, e emanam do ponto de divergência linhas delimitando regiões onde um e/ou outro ponto de sela pode ser utilizado. A correta determinação destas regiões evita os problemas enumerados por 3 e 4.

Capítulo 2

Busca das Trajetórias Complexas

Como vimos no último capítulo, o cálculo do propagador quântico depende essencialmente das trajetórias complexas que intermeiam o estado inicial e o final. Então, apresentaremos neste capítulo (seção 2.2), uma maneira de obter tais trajetórias, utilizando uma adaptação do método numérico da matriz de monodromia [54]. 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. Na seção 2.3, apresentaremos uma outra maneira de procurar as trajetórias, baseada numa mudança de variáveis introduzida em [20]. Nestas novas variáveis, a condição de contorno inicial é satisfeita de maneira trivial, e ainda sobram parâmetros livres. Procura-se, então, neste espaço de parâmetros, os valores para os quais a condição de contorno final também é satisfeita. Porém, antes de apresentar estes dois métodos, mostraremos como ficam as trajetórias complexas no espaço de fase estendido.

2.1 Espaço de Fase Estendido

Realizaremos, nesta seção, a complexificação de uma hamiltoniana genérica $\tilde{H}(q_x, q_y, p_x, p_y)$ e escreveremos as equações de movimento (1.20) e as condições de contorno (1.21) em termos das partes reais e imaginárias das coordenadas do espaço de fase. Tal procedimento pode ser encontrado em [26, 55, 56]. Utilizaremos a seguinte transformação para a obtenção do espaço de fase estendido:

$$q_x = x_1 + ix_3, \quad p_x = p_1 - ip_3, \quad q_y = x_2 + ix_4, \quad \text{e} \quad p_y = p_2 - ip_4, \quad (2.1)$$

onde $x_1, \dots, x_4, p_1, \dots, p_4$ são números reais. Aplicando estas relações à forma conhecida da hamiltoniana, $\tilde{H}(q_x, q_y, p_x, p_y)$, obtemos a hamiltoniana complexa $\tilde{H}(q_x(x_1, x_3), \dots, p_y(p_2, p_4))$, de modo que podemos definir $\tilde{H}(q_x(x_1, x_3), \dots, p_y(x_2, x_4)) = \tilde{H}_R(x_1, \dots, p_4) + i\tilde{H}_I(x_1, \dots, p_4)$.

Para converter as equações de movimento (1.20), segundo as novas variáveis (2.1), precisamos de alguns resultados parciais obtidos a partir da definição (1.35):

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{x_1}{b_x} + \frac{p_3}{c_x} \right) + i \left(\frac{p_1}{c_x} + \frac{x_3}{b_x} \right) \right\}, \quad u_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{x_2}{b_y} + \frac{p_4}{c_y} \right) + i \left(\frac{p_2}{c_y} + \frac{x_4}{b_y} \right) \right\}, \\ v_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{x_1}{b_x} - \frac{p_3}{c_x} \right) - i \left(\frac{p_1}{c_x} - \frac{x_3}{b_x} \right) \right\}, \quad v_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{x_2}{b_y} - \frac{p_4}{c_y} \right) - i \left(\frac{p_2}{c_y} - \frac{x_4}{b_y} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

e também:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_x} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left(b_x \frac{\partial}{\partial x_1} + c_x \frac{\partial}{\partial p_3} \right) - i \left(c_x \frac{\partial}{\partial p_1} + b_x \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right\}, \\ \frac{\partial}{\partial u_y} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left(b_y \frac{\partial}{\partial x_2} + c_y \frac{\partial}{\partial p_4} \right) - i \left(c_y \frac{\partial}{\partial p_2} + b_y \frac{\partial}{\partial x_4} \right) \right\}, \\ \frac{\partial}{\partial v_x} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left(b_x \frac{\partial}{\partial x_1} - c_x \frac{\partial}{\partial p_3} \right) + i \left(c_x \frac{\partial}{\partial p_1} - b_x \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right\}, \\ \frac{\partial}{\partial v_y} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left(b_y \frac{\partial}{\partial x_2} - c_y \frac{\partial}{\partial p_4} \right) + i \left(c_y \frac{\partial}{\partial p_2} - b_y \frac{\partial}{\partial x_4} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Devemos agora aplicar estas relações nas equações (1.20), resolvendo-as para as partes real e imaginária. Se restringirmos a hamiltoniana $\tilde{H}$ 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:

$$\dot{x}_j = \frac{\partial \tilde{H}_R}{\partial p_j} \quad \text{e} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial \tilde{H}_R}{\partial x_j}, \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \text{ e } 4. \quad (2.4)$$

Podemos inclusive escrevê-las de maneira mais conveniente, através de uma forma matricial:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{J} \left(\nabla \tilde{H}_R \right), \quad \text{onde } \mathbf{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_4 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I}_{4 \times 4} \\ -\mathbf{I}_{4 \times 4} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_4} \\ \frac{\partial}{\partial p_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial p_4} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Nestas novas variáveis (2.2), as condições de contorno (1.21) são escritas como:

$$\begin{aligned} q'_x &= x_1(0) + \frac{b_x}{c_x} p_3(0), & p'_x &= p_1(0) + \frac{c_x}{b_x} x_3(0), \\ q''_x &= x_1(T) - \frac{b_x}{c_x} p_3(T), & p''_x &= p_1(T) - \frac{c_x}{b_x} x_3(T), \\ q'_y &= x_2(0) + \frac{b_y}{c_y} p_4(0), & p'_y &= p_2(0) + \frac{c_y}{b_y} x_4(0), \\ q''_y &= x_2(T) - \frac{b_y}{c_y} p_4(T), & p''_y &= p_2(T) - \frac{c_y}{b_y} x_4(T). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Dois comentários devem ser feitos a partir dos resultados desta seção. Primeiro, note como as equações de movimento para um espaço complexo 4-dimensional (1.20) é equivalente àquelas de um espaço de fase real com o dobro de graus de liberdade (2.4), sendo que a hamiltoniana total $\tilde{H}$ é substituída por sua parte real $\tilde{H}_R$. *Portanto, a busca por trajetórias complexas no espaço de fase em quatro dimensões é reduzida pela procura de trajetórias reais num espaço 8-dimensional.* O outro comentário é relacionado às condições de contorno. Note como elas não são nada usuais; não é o valor de uma coordenada que deve ser satisfeito, e sim uma combinação linear de momento e posição.

2.2 Método Numérico da Matriz de Monodromia

Para desenvolver o método que resolve as equações (2.5) e (2.6), fizemos uma adaptação do método utilizado em [26], que por sua vez é uma adaptação do Método da Matriz de Monodromia [54], utilizado para encontrar trajetórias periódicas de um dado sistema. Para encontrar as trajetórias, em primeiro lugar, é necessário discretizar a equação (2.5), ou seja, dividir o tempo em intervalos infinitesimais de tamanho ϵ , sendo que $T = N\epsilon$. A equação de movimento discretizada tem a forma:

$$\mathbf{r}^{(n+1)} = \mathbf{r}^{(n)} + \epsilon \mathbf{J} \left(\nabla \tilde{H}_R \right) \Bigg|_{\mathbf{r}^{(n+1/2)}}, \quad (2.7)$$

onde $\mathbf{r}^{(n+1/2)} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}^{(n+1)} + \mathbf{r}^{(n)})$, sendo que o índice superior direito indica a coordenada temporal discreta. Além disso, $\mathbf{r}(0) \equiv \mathbf{r}^{(0)}$ e $\mathbf{r}(T) \equiv \mathbf{r}^{(N)}$.

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

$$\mathbf{r}^{(j)} = \bar{\mathbf{r}}^{(j)} + \mathbf{d}^{(j)}, \quad \text{onde} \quad \mathbf{d}^{(j)} = \begin{pmatrix} \delta x_1^{(j)} \\ \vdots \\ \delta x_4^{(j)} \\ \delta p_1^{(j)} \\ \vdots \\ \delta p_4^{(j)} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

O próximo passo é impor que a trajetória corrigida (2.8) satisfaça às equações de movimento (2.5) e condições de contorno (2.6). Assim, inserindo a trajetória (2.8) em (2.5), podemos encontrar uma equação para as correções $\mathbf{d}^{(j)}$. Para resolver esta equação, é suficiente impor as condições de

contorno (2.6), como faremos a seguir. Com a expansão de $\tilde{H}_R$ em torno de $\bar{\mathbf{r}}^{(j)}$, podemos escrever a inserção da equação (2.8) em (2.7) como:

$$\bar{\mathbf{r}}^{(n+1)} + \mathbf{d}^{(n+1)} = \bar{\mathbf{r}}^{(n)} + \mathbf{d}^{(n)} + \epsilon \mathbf{J} \left[\left(\nabla \tilde{H}_R \right) + \frac{1}{2} \left(\nabla^2 \tilde{H}_R \right) \left(\mathbf{d}^{(n+1)} + \mathbf{d}^{(n)} \right) \right], \quad (2.9)$$

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

$$\nabla^2 = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_4} & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial p_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial p_4} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_4 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_4 \partial x_4} & \frac{\partial^2}{\partial x_4 \partial p_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_4 \partial p_4} \\ \frac{\partial^2}{\partial p_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial p_1 \partial x_4} & \frac{\partial^2}{\partial p_1 \partial p_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial p_1 \partial p_4} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial p_4 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial p_4 \partial x_4} & \frac{\partial^2}{\partial p_4 \partial p_1} & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial p_4 \partial p_4} \end{pmatrix}.$$

Manipulando a equação anterior (2.9), podemos escrevê-la de forma mais compacta:

$$\mathbf{d}^{(n+1)} = \left(\mathbf{V}^{-1(n+1/2)} \mathbf{U}^{(n+1/2)} \right) \mathbf{d}^{(n)} + \mathbf{V}^{-1(n+1/2)} \mathbf{R}^{(n+1/2)}, \quad (2.10)$$

onde:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^{(n+1/2)} &= \mathbf{I}_{8 \times 8} - \frac{\epsilon}{2} \mathbf{J} \left(\nabla^2 \tilde{H}_R \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}}, \\ \mathbf{U}^{(n+1/2)} &= \mathbf{I}_{8 \times 8} + \frac{\epsilon}{2} \mathbf{J} \left(\nabla^2 \tilde{H}_R \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}}, \\ \mathbf{R}^{(n+1/2)} &= \epsilon \mathbf{J} \left(\nabla \tilde{H}_R \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}} - \left(\bar{\mathbf{r}}^{(n+1)} - \bar{\mathbf{r}}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Como vemos, as correções $\mathbf{d}^{(j)}$ obedecem à equação (2.10). Note que, se soubermos a correção para o primeiro ponto $\mathbf{d}^{(0)}$, podemos calculá-la para todos os demais $\mathbf{d}^{(j)}$. Fazendo isto, poderíamos utilizar a correção encontrada para nos aproximar da trajetória desejada. E, no caso de não conseguirmos uma boa convergência na primeira iteração, podemos aplicar o método sucessivas vezes, alimentando uma iteração com a trajetória obtida no passo anterior, até obter a convergência.

É justamente através das condições de contorno (2.6) que encontraremos um modo de calcular $\mathbf{d}^{(0)}$. O fato é que a relação (2.6) pode ser convenientemente escrita como:

$$\mathbf{d}^{(0)} = \mathbf{E} \mathbf{w} + \mathcal{E}_0 \quad \text{e} \quad \mathbf{d}^{(N)} = \mathbf{F} \mathbf{w} + \mathcal{E}_N, \quad \text{onde} \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} \delta x_1^{(0)} \\ \delta x_1^{(N)} \\ \delta x_2^{(0)} \\ \delta x_2^{(N)} \\ \delta p_1^{(0)} \\ \delta p_1^{(N)} \\ \delta p_2^{(0)} \\ \delta p_2^{(N)} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Os outros objetos que aparecem nesta equação são:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -b_x/c_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -b_y/c_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -c_x/b_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -c_y/b_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathcal{E}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{b_x}{c_x} e'_1 \\ \frac{b_y}{c_y} e'_2 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{c_x}{b_x} e'_3 \\ \frac{c_y}{b_y} e'_4 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_x/c_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_y/c_y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & c_x/b_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_y/b_y & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathcal{E}_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{b_x}{c_x} e'_5 \\ -\frac{b_y}{c_y} e'_6 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{c_x}{b_x} e'_7 \\ -\frac{c_y}{b_y} e'_8 \end{pmatrix},$$

onde:

$$e'_1 \equiv p'_x - \left[\bar{p}_1^{(0)} + \frac{c_x}{b_x} \bar{x}_3^{(0)} \right], \quad e'_2 \equiv p'_y - \left[\bar{p}_2^{(0)} + \frac{c_y}{b_y} \bar{x}_4^{(0)} \right],$$

$$\begin{aligned}
e'_3 &\equiv q'_x - \left[\bar{x}_1^{(0)} + \frac{b_x}{c_x} \bar{p}_3^{(0)} \right], & e'_4 &\equiv q'_y - \left[\bar{x}_2^{(0)} + \frac{b_y}{c_y} \bar{p}_4^{(0)} \right], \\
e'_5 &\equiv p''_x - \left[\bar{p}_1^{(N)} + \frac{c_x}{b_x} \bar{x}_3^{(N)} \right], & e'_6 &\equiv p''_y - \left[\bar{p}_2^{(N)} + \frac{c_y}{b_y} \bar{x}_4^{(N)} \right], \\
e'_7 &\equiv q''_x - \left[\bar{x}_1^{(N)} + \frac{b_x}{c_x} \bar{p}_3^{(N)} \right], & e'_8 &\equiv p''_y - \left[\bar{x}_2^{(N)} + \frac{b_y}{c_y} \bar{p}_4^{(N)} \right].
\end{aligned}$$

Note que, se a trajetória tentativa satisfizer as condições iniciais (2.6), os objetos $\mathcal{E}_0$ e $\mathcal{E}_N$ serão nulos, uma vez que $e'_1, \dots, e'_8$ valem zero nesta situação.

Para resolver $\mathbf{d}^{(0)}$, precisamos de uma outra relação entre $\mathbf{d}^{(0)}$ e $\mathbf{d}^{(N)}$, além daquela (2.12). Podemos obtê-la ao resolver a equação (2.10) recursivamente:

$$\mathbf{d}^{(N)} = \mathcal{M} \mathbf{d}^{(0)} + \mathcal{B}, \quad (2.13)$$

onde $\mathcal{M}$ é a matriz estabilidade, que leva este nome pois contém informações sobre a vizinhança da curva $\bar{\mathbf{r}}$: informa como pequenos deslocamentos em torno do ponto inicial de $\bar{\mathbf{r}}$ evoluem até o tempo T . No caso de $\bar{\mathbf{r}}$ ser uma trajetória periódica, $\mathcal{M}$ é a conhecida matriz de monodromia [54]. $\mathcal{B}$, como pode ser observado em sua forma (2.14), contém o erro $\mathbf{R}$, definido pela equação (2.11), que é diferente de zero somente quando a curva tentativa $\bar{\mathbf{r}}$ não obedece às equações de movimento do problema. Para a equação anterior temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{M} &= \prod_{n=0}^{N-1} \mathbf{V}^{-1(n+1/2)} \mathbf{U}^{(n+1/2)}, \\
\mathcal{B} &= \sum_{n=0}^{N-2} \left[\left(\prod_{n'=n+1}^{N-1} \mathbf{V}^{-1(n'+1/2)} \mathbf{U}^{(n'+1/2)} \right) \mathbf{V}^{-1(n+1/2)} \mathbf{R}^{(n+1/2)} \right] \\
&+ \mathbf{V}^{-1(N-1/2)} \mathbf{R}^{(N-1/2)},
\end{aligned} \quad (2.14)$$

onde o cálculo de todas as quantidades é feito sobre os pontos da trajetória tentativa.

Através das equações (2.12) e (2.13) podemos resolver $\mathbf{d}^{(0)}$. Uma simples substituição de (2.12) em (2.13) nos leva à uma equação com uma única incógnita $\mathbf{w}$. Ao resolvê-la, temos:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{F} - \mathcal{M} \mathbf{E})^{-1} (\mathcal{M} \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_N + \mathcal{B}), \quad (2.15)$$

que pode ser introduzido diretamente na equação (2.12), produzindo:

$$\mathbf{d}^{(0)} = \mathbf{E} \left[(\mathbf{F} - \mathcal{M} \mathbf{E})^{-1} (\mathcal{M} \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_N + \mathcal{B}) \right] + \mathcal{E}_0. \quad (2.16)$$

Como já havíamos comentado, de posse deste resultado, encontramos a correção para todos os pontos da trajetória, se encerrando, assim, uma iteração do método. Se esta primeira correção não for suficiente para uma boa precisão, basta utilizar a trajetória resultante numa nova iteração.

Quanto a (primeira) trajetória tentativa, vale a pena discorrer um pouco sobre ela. Por exemplo, quando não conhecemos nada sobre as trajetórias do sistema em questão, mas sabemos que, dentro de alguma aproximação, ele pode ser comparado ao oscilador harmônico simples ou partícula livre, que têm solução analítica, podemos utilizar suas trajetórias como primeira tentativa. No entanto, faremos uma aplicação da teoria apresentada no capítulo 1 ao potencial Nelson, cujas órbitas periódicas são conhecidas, pois foram amplamente estudadas [54], [57] e [58]. Somando a isto o fato de estarmos calculando a probabilidade de retorno, onde são importantes as órbitas periódicas (ver comentário no final da seção 1.9), essas serão as trajetórias que utilizaremos como tentativas. Portanto, em nossas aplicações, partiremos de uma órbita periódica real do potencial Nelson, convergindo-a para a trajetória complexa adequada. É uma maneira de “garantir” que as trajetórias complexas encontradas contenham informação sobre as órbitas periódicas, já que, da forma como serão calculadas, devem pertencer a uma família que contém a órbita periódica real.

Finalmente, gostaríamos de ressaltar que pode ser estabelecida uma relação entre a matriz estabilidade $\mathcal{M}$, que é real e de dimensão 8×8 , e a matriz de propagação de deslocamentos infinitesimais M , que é complexa e de dimensão 4×4 , dada pela equação (1.30). Para isto, devemos notar, em primeiro lugar, que a função R , da equação (2.11), tende a zero quando calculada com a trajetória solução. Então, quando aplicamos a equação (2.13) à trajetória solução, temos $\mathcal{B}$ igual a zero. Logo, para a trajetória solução escrevemos:

$$\mathbf{d}^{(N)} = \mathcal{M} \mathbf{d}^{(0)}, \quad (2.17)$$

que, quando comparada à equação (1.30), nos indica que $\mathcal{M}$ é **equivalente** a M , a menos de uma mudança de coordenadas. Apresentamos abaixo as relações entre os elementos de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$, envolvidos no cálculo do propagador, e os elementos $\mathcal{M}_{ij}$ da matriz estabilidade:

$$\begin{aligned} M_{v_x v_x} &= \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_{11} - \frac{b_x}{c_x} \mathcal{M}_{53} - \frac{c_x}{b_x} \mathcal{M}_{17} + \mathcal{M}_{55} \right) \\ &+ \frac{i}{2} \left(-\mathcal{M}_{13} - \frac{b_x}{c_x} \mathcal{M}_{51} + \frac{c_x}{b_x} \mathcal{M}_{15} + \mathcal{M}_{57} \right), \\ M_{v_y v_y} &= \frac{1}{2} \left(\mathcal{M}_{22} - \frac{b_y}{c_y} \mathcal{M}_{64} - \frac{c_y}{b_y} \mathcal{M}_{28} + \mathcal{M}_{66} \right) \\ &+ \frac{i}{2} \left(-\mathcal{M}_{24} - \frac{b_y}{c_y} \mathcal{M}_{62} + \frac{c_y}{b_y} \mathcal{M}_{26} + \mathcal{M}_{68} \right), \\ M_{v_x v_y} &= \frac{1}{2} \left(\frac{b_y}{b_x} \mathcal{M}_{12} - \frac{b_y}{c_x} \mathcal{M}_{54} - \frac{c_y}{b_x} \mathcal{M}_{18} + \frac{c_y}{c_x} \mathcal{M}_{56} \right) \\ &+ \frac{i}{2} \left(-\frac{b_y}{b_x} \mathcal{M}_{14} - \frac{b_y}{c_x} \mathcal{M}_{52} + \frac{c_y}{b_x} \mathcal{M}_{16} \frac{c_y}{c_x} + \mathcal{M}_{58} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{v_y v_x} &= \frac{1}{2} \left(\frac{b_x}{b_y} \mathcal{M}_{21} - \frac{b_x}{c_y} \mathcal{M}_{63} - \frac{c_x}{b_y} \mathcal{M}_{27} + \frac{c_x}{c_y} \mathcal{M}_{65} \right) \\
&+ \frac{i}{2} \left(-\frac{b_x}{b_y} \mathcal{M}_{23} - \frac{b_x}{c_y} \mathcal{M}_{61} + \frac{c_x}{b_y} \mathcal{M}_{25} \frac{c_x}{c_y} + \mathcal{M}_{67} \right).
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Estas equações são importantes, pois utilizaremos no cálculo do propagador o sistema real 8-dimensional, onde $\mathcal{M}$ sai naturalmente. Por outro lado, na fórmula do propagador, precisamos da matriz M .

2.3 Busca no Plano Complexo

O método apresentado na seção anterior possui uma grande vantagem quando procuramos trajetórias complexas próximas a órbitas periódicas, que é exatamente o nosso estudo. Isto porque, na vizinhança de uma órbita periódica, em geral, uma trajetória complexa pode ser deformada continuamente a partir dela. Como já dissemos, é uma forma de garantir que a informação da órbita periódica está contida na complexa. Isto é interessante, pois, no limite semiclássico, esta é a informação mais relevante para o cálculo da probabilidade de retorno.

No entanto, na medida em que a posição média do estado coerente, no espaço de fase, vai se afastando das órbitas periódicas, pode acontecer de alguma trajetória complexa, sem qualquer conexão com a real, vir a ser importante para o cálculo da probabilidade de retorno. Nas referências [36, 21, 22, 23], por exemplo, mostra-se que famílias de trajetórias complexas, que têm uma órbita real como raiz, sempre terão contribuição dominante para o retorno de estados localizados em sua vizinhança. Porém, famílias inteiramente complexas são responsáveis por descrever certos comportamentos quânticos, não contemplados pela família de origem real. O grande problema destas famílias é que elas também contêm trajetórias que não podem ser consideradas, pois produzem resultados espúrios (problema que será tratado no capítulo 4).

Segundo o que foi dito, se pensarmos que o método apresentado na seção anterior seja capaz de fazer a continuação das órbitas reais ao complexo, na medida em que elas vão se distanciando da real, a sua contribuição para a probabilidade de retorno vai sumindo. Então, se existe uma trajetória complexa, não derivada de uma real, que contribua de modo significativo, este método não vai encontrá-la. Para suprir esta dificuldade, apresentaremos uma outra maneira de buscar trajetórias, introduzida por Klauder [20]. Começamos definindo as variáveis q_x , q_y , p_x e p_y em função de duas variáveis complexas auxiliares α_x e α_y :

$$q_x = q'_x + b_x \alpha_x, \quad q_y = q'_y + b_y \alpha_y, \quad p_x = p'_x + i c_x \alpha_x, \quad \text{e} \quad p_y = p'_y + i c_y \alpha_y. \tag{2.19}$$

Fazendo esta construção, note como as condições de contorno iniciais (1.21) são naturalmente satisfeitas:

$$\begin{aligned} u'_r &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q_r(0)}{b_r} + i \frac{p_r(0)}{c_r} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q'_r + b_r \alpha_r(0)}{b_r} + i \frac{p'_r + c_r \alpha_r(0)}{c_r} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q'_r}{b_r} + i \frac{p'_r}{c_r} \right] = z'_r \end{aligned} \quad (2.20)$$

Assim, todas as trajetórias complexas com esta característica são determinadas por quatro parâmetros livres (partes real e imaginária α_x e α_y). Evolui-se, então, cada ponto deste espaço 4-dimensional e verifica-se para quais valores de α_x e α_y a condição de contorno final é satisfeita. Note também que só existe uma única trajetória real, neste espaço 4-dimensional, para $\alpha_x = \alpha_y = 0$. Portanto, não precisamos procurar as trajetórias para valores de α_x e α_y muito distantes da origem, já que trajetórias muito complexas têm contribuição desprezível (veja o comentário sobre F na seção 1.7). Esclarecemos que trajetórias sem conexão com órbitas reais não são necessariamente muito complexas.

A utilização deste método para potenciais bidimensionais é muito difícil e, por isso, praticamente não o utilizamos. A dificuldade ocorre devido a busca das trajetórias ser num espaço de quatro dimensões. Para uma dimensão espacial, por exemplo x , a procura ocorre no plano complexo α_x , o que facilita bastante a aplicação do método (veja, por exemplo, [36, 21, 22, 23]). Basta construir as curvas de nível para quantidade determinada pelas condições de contorno finais, e verificar quando são satisfeitas. No capítulo 4, quando estudaremos as trajetórias não-contribuintes, para sistemas de uma dimensão espacial, este método será útil.

Capítulo 3

Divergência do Pré-fator

Neste capítulo estudaremos *exclusivamente* o problema da divergência do pré-fator, objeto que precede a exponencial da equação (1.34). No entanto, salientamos que a existência desta singularidade tem relação com o problema das trajetórias não-contribuintes, que será estudado no capítulo 4. Esta relação se deve ao fato da divergência do pré-fator aparecer em conjunto com o Fenômeno de Stokes, que, por sua vez, diz a respeito da existência de trajetórias não-contribuintes. Contudo, existe um enfoque no estudo da divergência do pré-fator que pode ser tratado de maneira independente, e assim o faremos neste capítulo. A questão é que, embora na região de divergência existam trajetórias que não possam ser levadas em consideração, todas elas, contribuintes ou não, são afetadas pela singularidade. Portanto, até onde for possível, deixaremos de lado o conhecimento prévio de que existem trajetórias que não podem ser incluídas no cálculo do propagador, e estudaremos as singularidades de $|\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}|^{-1/2}$.

A primeira parte deste capítulo, seção 3.1, terá como foco a estrutura clássica da fórmula semiclássica do propagador. Tentaremos entender quais ocorrências no sistema clássico implicam no comportamento $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} \rightarrow 0$. Mostraremos, especificamente, que a divergência do pré-fator corresponde à existência de um ponto de bifurcação de trajetórias (ou ponto focal, ou cáustica), e explicaremos o significado destes termos. A partir da segunda seção do capítulo, retornaremos ao assunto da divergência do pré-fator sob o ponto de vista da aproximação realizada e passaremos a perseguir uma maneira de contornar este problema analiticamente. Na seção 3.2, mostraremos porque a aproximação semiclássica realizada não é capaz de lidar com a região de cáusticas, e, na seção 3.3, apresentaremos a nossa proposta para resolver o problema da divergência do pré-fator.

3.1 Bifurcação de Trajetórias

Nesta seção, investigaremos o fenômeno que ocorre na dinâmica clássica envolvida na fórmula semiclássica do propagador (1.34), que pode torná-la inválida através da divergência do seu pré-fator: $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} \rightarrow 0$. Portanto, para facilitar o entendimento desta seção, a partir daqui, esqueceremos da fórmula do propagador e nos limitaremos a resolver o problema da busca das trajetórias complexas, $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$, regidas pelas equações clássicas de movimento (1.36), com as condições de contorno (1.21):

$$\mathbf{u}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}' \quad \text{e} \quad \mathbf{v}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*, \quad \text{dados os valores de } \mathbf{z}', \mathbf{z}''^* \text{ e } T. \quad (3.1)$$

O fato da matriz $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ de uma dada trajetória conter informações sobre a sua vizinhança sugere que o comportamento $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} \rightarrow 0$ ocorre devido a alguma especificidade das trajetórias vizinhas a ela. De fato, verificaremos que a igualdade $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = 0$ é a condição necessária e suficiente para que existam pelo menos duas trajetórias vizinhas (muito semelhantes entre si), satisfazendo às mesmas condições de contorno (3.1).

Para verificar o que foi dito no parágrafo anterior, por conveniência e sem que haja perda de generalidade, descreveremos duas trajetórias vizinhas da seguinte maneira:

$$\text{trajetória 1 : } \begin{cases} \mathbf{u}_1(t) \\ \mathbf{v}_1(t) \end{cases} \quad \text{e} \quad \text{trajetória 2 : } \begin{cases} \mathbf{u}_2(t) \equiv \mathbf{u}_1(t) + \delta\mathbf{u}(t) \\ \mathbf{v}_2(t) \equiv \mathbf{v}_1(t) + \delta\mathbf{v}(t) \end{cases}. \quad (3.2)$$

Nesta definição, tanto a trajetória 1 quanto a trajetória 2 satisfazem às equações de movimento (1.36). Além disso, $\delta\mathbf{u}(t) \neq 0$ e $\delta\mathbf{v}(t) \neq 0$ são as diferenças arbitrariamente pequenas entre as duas trajetórias.

Suponha agora que a trajetória 1 satisfaça às condições de contorno (3.1). Desta forma, podemos afirmar que as condições impostas a $\delta\mathbf{u}(t)$ e $\delta\mathbf{v}(t)$ para que a trajetória 2 satisfaça às mesmas condições de contorno (e continue distinta da trajetória 1) são:

$$\delta\mathbf{u}(T) \equiv \delta\mathbf{u}'' \neq 0, \quad \delta\mathbf{v}(0) \equiv \delta\mathbf{v}' \neq 0 \quad \text{e} \quad \delta\mathbf{u}' = \delta\mathbf{v}'' = 0. \quad (3.3)$$

Para saber em que condições estas últimas relações podem ser satisfeitas, voltaremos nossa atenção à equação (1.30). Resolvendo-a para a trajetória 1 e impondo-lhe as relações (3.3) obtemos:

$$\begin{pmatrix} \delta\mathbf{u}'' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(1)} & M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(1)} \\ M_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^{(1)} & M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \delta\mathbf{v}' \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \delta\mathbf{u}'' = M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(1)} \delta\mathbf{v}' \\ 0 = M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} \delta\mathbf{v}' \end{cases}, \quad (3.4)$$

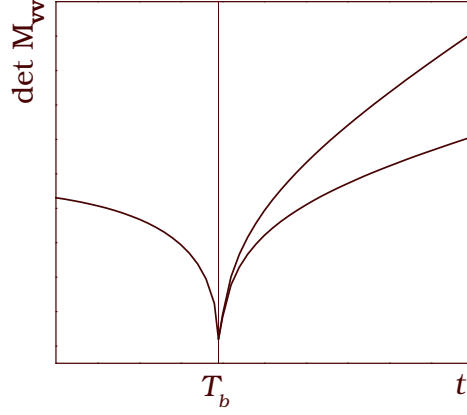


Figura 3.1: Ponto de bifurcação. Para valores de T menores que T_b existe somente uma família de trajetórias que satisfazem às condições de contorno $\mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$ em função de T . Quando o valor de $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ se anula, duas trajetórias aparecem, gerando duas famílias de trajetórias para T maiores que T_b .

onde o índice ⁽¹⁾ foi introduzido para se referir à trajetória 1.

A primeira das equações (3.4) não representa nenhuma limitação à existência das duas trajetórias vizinhas. Por outro lado, a segunda equação impõe a condição $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} = 0$, para que existam tais trajetórias. Em outras palavras, as equações (3.4) indicam que a vizinhança da trajetória 1 contém uma trajetória 2, ambas satisfazendo às mesmas condições de contorno (3.1), desde que $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} = 0$. Então, se encontrarmos uma trajetória qualquer, que produza $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = 0$, saberemos que existem alguns valores de $\delta \mathbf{v}'$, indicados pelo autovetor de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ associado ao seu autovalor nulo, que resolverá a segunda das equações (3.4).

Até aqui, demonstramos que uma trajetória, satisfazendo às condições (3.1), para a qual $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ seja igual a zero, é vizinha de uma outra que satisfaz às mesmas condições de contorno. A relação inversa é igualmente válida: Se duas trajetórias arbitrariamente próximas existem, com ambas satisfazendo às condições (3.1), então, para as duas trajetórias, poderemos observar que $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = 0$.

A partir deste ponto, mostraremos como as conclusões até aqui obtidas podem levar ao conceito de *bifurcação de trajetórias*. A idéia é que, para valores pequenos de T , em geral, temos somente uma trajetória relevante que satisfaz às condições (3.1). Mantendo fixos os valores de $\mathbf{z}'$ e $\mathbf{z}''^*$, e aumentando continuamente o valor de T , podemos observar a formação de uma família de trajetórias. O gráfico da figura 3.1 ilustra esta situação. Observe que, para valores baixos de T , obtemos uma curva contínua da quantidade $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ em função de T , caracterizando uma

família de trajetórias. No entanto, conforme T aumenta, podemos vir a observar o aparecimento de uma segunda família. Como representado na figura 3.1, o valor de $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ pode atingir o valor zero em $T = T_b$. Neste ponto, sabemos que existem duas trajetórias arbitrariamente próximas para os mesmos $\mathbf{z}'$ e $\mathbf{z}''^*$ fixos. Portanto, na figura 3.1, em $T = T_b$ e $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = 0$, existem dois pontos que, por estarem sobrepostos, não podemos visualizá-los. A partir de T_b , estas duas trajetórias vizinhas geram duas famílias distintas, pois, ao distanciar-se de T_b , as trajetórias vão deixando de ser semelhantes entre si. A idéia de bifurcação de trajetórias está aí. Para $T < T_b$ temos somente uma família de trajetórias; para $T \geq T_b$, esta família gera outras duas. Como mostrado na figura 3.1, a curva que representa a família para $T < T_b$ se divide em dois novos ramos. Por este motivo, $(\mathbf{z}', \mathbf{z}''^*, T_b)$ é chamado de ponto de bifurcação.

Uma outra possibilidade para ocorrer a divergência acontece quando $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} = 0$, mesmo para $T \rightarrow 0$. Nesses casos, que é genérico em sistemas unidimensionais, as singularidades começam muito longe das trajetórias reais e, conforme o tempo T avança, se aproximam das regiões onde existem órbitas não muito complexas, passando a serem importantes para o cálculo do propagador. Nesse caso não há bifurcação pois sempre existem duas trajetórias satisfazendo as condições de contorno adequadas. No entanto, a segunda trajetória só fica relevante para tempos longos.

A Interpretação de Cáustica (ou Ponto Focal)

Agora que explicamos porque o ponto $(\mathbf{z}', \mathbf{z}''^*, T_b)$ é chamado de ponto de bifurcação, explicaremos o porquê deste mesmo ponto também ser chamado de cáustica ou ponto focal. O conceito de cáustica se refere à convergência de raios. Em linhas gerais, veja como o ponto de bifurcação também possui esta característica: para as trajetórias vizinhas à trajetória 1 com $\delta \mathbf{u}' = 0$ e $\delta \mathbf{v}' \neq 0$, este último alinhado com o autovetor nulo de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$, encontraremos $\delta \mathbf{v}'' = 0$. Portanto, trajetórias (raios) vizinhas ($\delta \mathbf{v}' \neq 0$) convergem para o mesmo ponto no tempo T ($\delta \mathbf{v}'' = 0$).

Construiremos, agora, o conceito de cáustica de uma maneira mais rigorosa. Para isso, partiremos da seguinte relação, que foi derivada no capítulo 1 (seção 1.6) e envolve a ação complexa $\mathcal{S}$:

$$-i\hbar v'_r = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial u'_r} \quad \text{e} \quad -i\hbar u''_r = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v''_r}. \quad (3.5)$$

A idéia é simplesmente diferenciar os dois membros das duas equações anteriores:

$$-i\hbar \delta v'_r = \sum_{r'=x,y} \left[\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u'_{r'} \partial u'_r} \delta u'_{r'} + \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v''_{r'} \partial u'_r} \delta v''_{r'} \right], \quad (3.6)$$

$$-i\hbar\delta u_r'' = \sum_{r'=x,y} \left[\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_{r'}' \partial v_r''} \delta u_{r'}' + \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_{r'}'' \partial v_r''} \delta v_{r'}'' \right],$$

e arranjar os termos de modo que os deslocamentos finais ($\delta u_r''$ e $\delta v_r''$) sejam escritos em termos dos iniciais ($\delta u_r'$ e $\delta v_r'$):

$$\begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}'' \\ \delta \mathbf{v}'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\hbar} [\mathcal{S}_{\mathbf{u} \mathbf{v}} - \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{v}} \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{u}}^{-1} \mathcal{S}_{\mathbf{u} \mathbf{u}}] & \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{v}} \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{u}}^{-1} \\ -\mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{u}}^{-1} \mathcal{S}_{\mathbf{u} \mathbf{u}} & -i\hbar \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{v}}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

onde:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\mathbf{u} \mathbf{u}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_x'^2} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_x' \partial u_y'} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_y' \partial u_x'} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_y'^2} \end{pmatrix}, & \mathcal{S}_{\mathbf{u} \mathbf{v}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_x' \partial v_x''} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_y' \partial v_x''} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_x' \partial v_y''} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u_y' \partial v_y''} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{v}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x''^2} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial v_y''} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial v_x''} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y''^2} \end{pmatrix}, & \mathcal{S}_{\mathbf{v} \mathbf{u}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_x'} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_x'} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_y'} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_y'} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Comparando o resultado obtido (3.7) com a equação (1.30), podemos estabelecer a relação:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{vv}} = -i\hbar \left(\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_x'} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_y'} - \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_y'} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_x'} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_y'} & \frac{-\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_y'' \partial u_x'} \\ \frac{-\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_y'} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v_x'' \partial u_x'} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Utilizando novamente as equações (3.5) na (3.9), encontramos:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{vv}} = \left(\frac{\partial v_x'}{\partial v_x''} \frac{\partial v_y'}{\partial v_y''} - \frac{\partial v_y'}{\partial v_x''} \frac{\partial v_x'}{\partial v_y''} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \partial v_y' / \partial v_y'' & -\partial v_x' / \partial v_y'' \\ -\partial v_y' / \partial v_x'' & \partial v_x' / \partial v_x'' \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

o que nos leva a:

$$\sqrt{\frac{1}{|\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}|}} = \left| \frac{\partial v_x'}{\partial v_x''} \frac{\partial v_y'}{\partial v_y''} - \frac{\partial v_y'}{\partial v_x''} \frac{\partial v_x'}{\partial v_y''} \right|^{1/2}. \quad (3.11)$$

Esta expressão representa a idéia de ponto focal. Para sistemas unidimensionais, ela se reduz a $|\partial v' / \partial v''|^{1/2}$, que diverge quando um pequeno deslocamento $\delta v'$, no instante inicial, leva ao mesmo ponto v'' no instante final ($\delta v'' = 0$), caracterizando, assim, o ponto focal ou cáustica. A figura 3.2 ilustra esta situação. Ela mostra a evolução temporal de pequenos deslocamentos $\delta v'$, em torno do ponto inicial de uma trajetória de referência. Para $t = T_b$, as trajetórias vizinhas colapsam na de referência, aparecendo o ponto focal. Já para sistemas bidimensionais, como mostra a equação

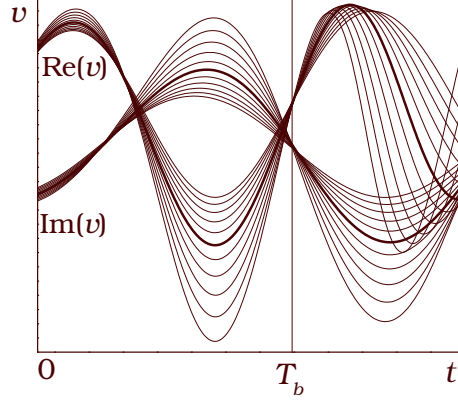


Figura 3.2: Ponto Focal. O gráfico mostra a parte real e imaginária de uma trajetória $v(t)$ em função do tempo T . A linha mais grossa representa a trajetória de referência. As outras dez linhas finas são as trajetórias vizinhas à de referência, construídas com $\delta u' = 0$ e $\delta v' \neq 0$. Para $t = T_b$, note que $\delta v'' = 0$, caracterizando um ponto focal.

(3.11), o pré-fator é mais complicado e o ponto focal pode ocorrer, genericamente, em quatro maneiras diferentes. Por exemplo, ocorre quando um pequeno deslocamento inicial $\delta v'_x$ leva ao mesmo v''_y . Em geral, acontece para uma combinação particular de $\delta v'_x$ e $\delta v'_y$, correspondente ao autovetor nulo de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$.

De qualquer forma, a aproximação semiclássica realizada no primeiro capítulo não vale na vizinhança do ponto de bifurcação, ou cáustica.

3.2 Colapso de Pontos Críticos

Na seção anterior, mostramos que o problema da divergência do pré-fator é bem entendido do ponto de vista da dinâmica clássica que está por trás da fórmula semiclássica do propagador.

Nesta seção pretendemos abordar o problema com base na aproximação semiclássica realizada. De fato, quando duas trajetórias críticas estão muito próximas, como ocorre na vizinhança da bifurcação, a expansão quadrática (1.22) não é suficiente, porque as correções $\delta^3 \mathcal{F}$ não são desprezíveis. Portanto, para a aproximação semiclássica valer, deveríamos ter incluído essas correções de ordem superior: $\mathcal{F} = \bar{\mathcal{F}} + \frac{1}{2}\delta^2 \mathcal{F} + \frac{1}{6}\delta^3 \mathcal{F}$. Entretanto, resolver a integral $\mathcal{I}$, definida pela equação (1.22), com as correções de ordem cúbica em $\delta^3 \mathcal{F}$, é uma tarefa impossível. Por isso a nossa proposta para resolver este problema envolve a criação de uma representação dual para o propagador. Assim, enquanto uma representação não pode ser calculada na região de cáustica, a

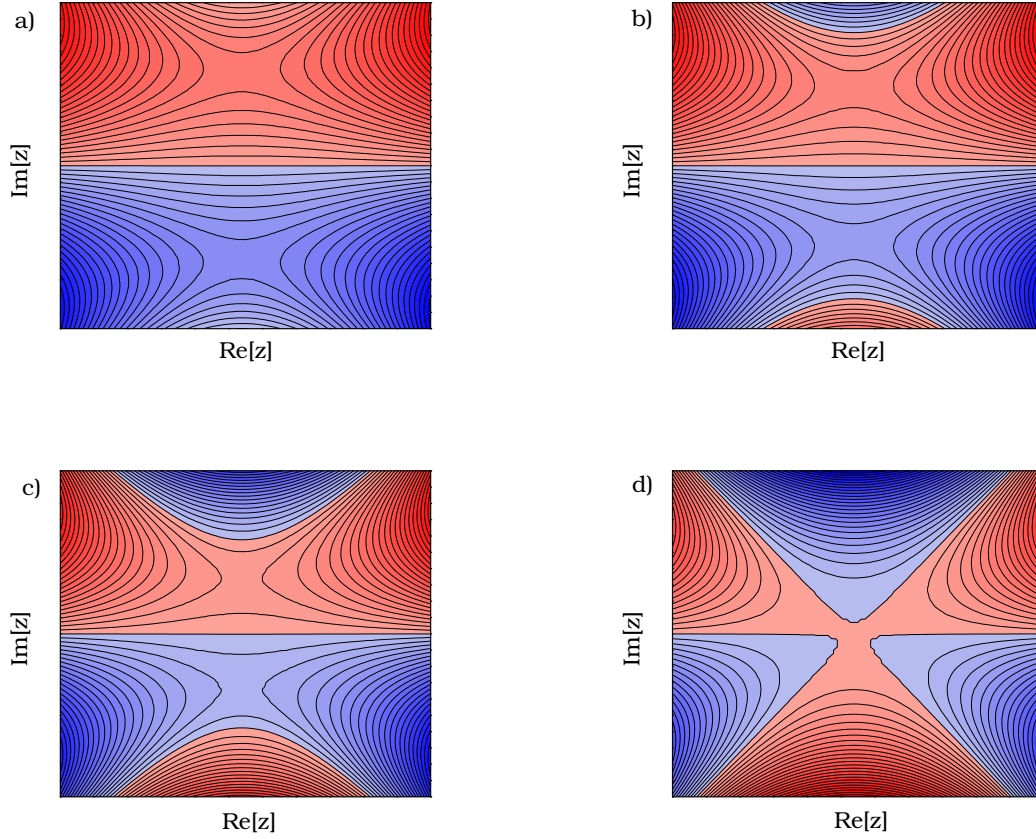


Figura 3.3: Colapso de dois pontos críticos. Representamos as curvas de nível da parte imaginária de $f(z) = z^3 + z^2 + cz$. Os valores de c são: (a) $c = 4/3$, (b) $c = 1$, (c) $c = 2/3$ e (d) $c = 1/3$. As regiões onde $\text{Im}[f(z)] > 0$ são pintadas em vermelho (quanto mais escuro, maior $\text{Im}[f(z)]$), e as regiões onde $\text{Im}[f(z)] < 0$ são pintadas em azul (quanto mais escuro, menor $\text{Im}[f(z)]$). Na sequência de (a) para (d), note como os dois pontos de sela de $f(z)$ colapsam. Note também o relevo da vizinhança do ponto de sela: quando distintos, cada um possui dois vales e duas montanhas; quando idênticos, cada um possui três vales e três montanhas.

outra é bem comportada e capaz de fornecer as informações desejadas. A apresentação destas duas representações ocorrerá na seção 3.3.

É muito difícil visualizar o comportamento de $\mathcal{F}$, quando duas trajetórias estão arbitrariamente próximas, a fim de entender a quebra da hipótese de que ela pode ser aproximada por uma função quadrática, pois $\mathcal{F}$ depende de muitas variáveis. Por isso, optamos por apresentar, na figura 3.3,

o caso simples de uma função complexa de uma variável, $f(z) = z^3 + z^2 + cz$, onde ocorre um fenômeno análogo quando variamos o parâmetro c . O número de pontos de sela desta função, soluções de $3z^2 + 2z + c = 0$, depende do valor de c : para $c \neq 1/3$, temos sempre dois pontos de sela, e, na medida em que $c \rightarrow 1/3$, estes dois pontos colapsam em um só. Podemos pensar no ponto de bifurcação de maneira análoga; para $T \geq T_b$ duas trajetórias críticas distintas existem, e, na medida em que $T \rightarrow T_b$, as duas trajetórias vão se aproximando, até o colapso. Para a figura 3.3a, temos $c = 4/3$ e, portanto, os dois pontos de sela estão bem separados. Note como a vizinhança de cada um deles pode ser aproximada por uma função quadrática: o relevo de $\text{Im}[f(z)]$ possui dois vales e duas montanhas. O mesmo comentário vale para as figuras 3.3b e 3.3c, onde c vale 1 e $2/3$, respectivamente. Porém, para estas figuras, os pontos de sela começam a se aproximar. Quando $c = 1/3$, figura 3.3d, os dois pontos de sela viram um só e, neste caso, o relevo de $\text{Im}[f(z)]$ ao seu redor passa ter três vales e três montanhas. Pode-se demonstrar que uma função de ordem quadrática *não pode* representar este tipo de relevo [51, 52]. Neste exemplo simples, vimos que o colapso de dois pontos de sela torna impossível aproximar o seu entorno por uma função de ordem quadrática. No caso do propagador acontece um fenômeno semelhante: duas trajetórias colapsadas implicam que o relevo de $\mathcal{F}$ em sua vizinhança não pode ser tratado como uma expansão até segunda ordem, como fizemos em (1.22). No apêndice B, revisitamos o método do ponto de sela com este mesmo enfoque, por isso, a sua leitura pode ajudar a esclarecer quaisquer dúvidas.

Em síntese, a aproximação semiclássica realizada no capítulo 1 *não contempla* a região de bifurcação, onde duas trajetórias semelhantes existem, porque, neste caso, a expansão de $\mathcal{F}$ (equação (1.22)) tem que ir além da segunda ordem.

3.3 Representação Dual para o Propagador

No apêndice B desenvolvemos a matemática envolvida no cálculo assintótico de integrais complexas *bidimensionais*, incluindo correções de ordem cúbica. Então, pretendemos desenvolver, a partir desta ferramenta, uma aproximação semiclássica do propagador para regiões próximas de bifurcações. Como já demonstramos, o aparecimento deste fenômeno está intimamente ligado ao fato das correções em segunda ordem, em torno da trajetória crítica, se anularem. Portanto, desenvolveremos uma aproximação que considere este aspecto.

Começaremos pela conhecida fórmula do propagador em duas dimensões, que foi detalhada no capítulo 1, seção 1.7:

$$K(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') \simeq \underbrace{\sqrt{\frac{1}{\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') + \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') \right]}_{k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')} e^{-\frac{1}{2}(|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2)}, \quad (3.12)$$

onde omitimos a variável T e a soma sobre as trajetórias, para simplificar a notação. Note que, na equação (3.12), definimos uma forma reduzida do propagador $k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$, com a qual trabalharemos para atingir nossos objetivos.

A idéia central da nossa aproximação é bastante parecida com a de Maslov [45] na sua colaboração para o desenvolvimento de métodos semiclássicos. Para obter a função de onda semiclássica na representação de coordenadas, para uma partícula sujeita a um potencial confinante, segundo o método WKB, deve-se encontrar tanto as soluções para a região classicamente permitida quanto para a proibida, a menos de algumas constantes. Para a determinação destas últimas, e, consequentemente, para a obtenção de uma solução global, pelo fato da solução divergir na fronteira entre as duas regiões, faz-se a conexão das duas soluções via plano complexo (veja a seção 4.2). Como outra alternativa, para alcançar a solução na região classicamente permitida, Maslov habilmente lidou com funções de onda no espaço de coordenadas e espaço de momentos, sem calcular a solução para a região proibida. Quando a aproximação era ruim no espaço de coordenadas, ele utilizava a representação de momentos, e, quando o problema estava na representação de momentos, ele migrava para a de coordenadas. Fazendo esta alternância, pode-se conectar todas as regiões separadas por divergências, sem precisar da técnica de conexão via plano complexo, afim de se obter as constantes para a região classicamente permitida. Outros trabalhos, como por exemplo [47, 48], utilizam o mesmo artifício da possibilidade de trabalhar com duas representações, para lidar com o problema da divergência de fórmulas semiclássicas.

No nosso caso, trabalhamos com estados coerentes, que englobam tanto posição quanto momento. Então, com o intuito de termos duas representações, onde, para qualquer região do espaço de parâmetros, pelo menos uma delas seja válida, trabalharemos com o propagador na representação $\mathbf{v}''$, o já conhecido $k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$, e criaremos a sua forma transformada $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$, na representação $\mathbf{u}''$, a ser definida a seguir. Desta forma, a aproximação do propagador na representação $\mathbf{u}''$ não deve ser ruim na mesma região em que a representação $\mathbf{v}''$ o é. Ou seja, $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$ não deve divergir na região onde encontramos as bifurcações. Portanto, primeiro chegaremos numa fórmula para $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$. Em seguida, para um ponto que possui uma bifurcação em sua vizinhança, retornaremos à fórmula para $k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$, porém, nesta transformação inversa, devemos incluir correções além da segunda ordem, pois, se pararmos nesta, sabemos que teremos problemas.

Fórmula do Propagador na Representação $\mathbf{u}''$

Antes de construir uma fórmula para $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$, vamos voltar nossa atenção para a ação complexa $\mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$, definida pela equação (1.32). Lembramos que:

$$\mathbf{u}'' = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathbf{v}''}, \quad (3.13)$$

o que sugere que façamos uma transformada de Legendre em $\mathcal{S} \rightarrow \tilde{\mathcal{S}}$ através da mudança de variáveis $\mathbf{v}'' \rightarrow (i/\hbar)(\partial \mathcal{S}/\partial \mathbf{v}'')$:

$$\tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') = \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') + i\hbar \mathbf{u}'' \mathbf{v}'', \quad (3.14)$$

que nos leva a:

$$\tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') = \int_0^T \left[\frac{i\hbar}{2} (\dot{\mathbf{u}} \mathbf{v} - \mathbf{u} \dot{\mathbf{v}}) - \tilde{H} \right] dt + \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{u}'' \mathbf{v}'' - \mathbf{u}' \mathbf{v}'], \quad (3.15)$$

$$\mathbf{v}'' = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\mathcal{S}}}{\partial \mathbf{u}''} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}' = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\mathcal{S}}}{\partial \mathbf{u}'}. \quad (3.16)$$

Tendo em vista estes resultados, é conveniente definir a transformação que leva $k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$ a $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$ como:

$$\begin{aligned} \tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_C k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') e^{-\mathbf{u}'' \mathbf{v}''} d^2 \mathbf{v}'' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_C \sqrt{\frac{1}{\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') + \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') + i\hbar \mathbf{u}'' \mathbf{v}''] \right\} d^2 \mathbf{v}'' . \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde o caminho de integração C deve ser definido de forma que a integral convirja. Para resolver esta integral, utilizamos o método do ponto de sela, apresentado na seção 1.3. A identificação dos pontos críticos se dá pela resolução da equação:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}''} [\mathcal{S} + \mathcal{G} - i\hbar \mathbf{u}'' \mathbf{v}''] = 0. \quad (3.18)$$

Para resolver esta equação, consideraremos que $\mathcal{G}$ varia lentamente em comparação com $\mathcal{S}$, pois contém termos de ordem $\hbar$, enquanto que $\mathcal{S}$ contém termos de ordem $\hbar^0$. Isto pode ser verificado

através das equações (1.39). Para uma discussão mais cuidadosa, veja também a referência [30]. Desta forma, encontramos que, dentre todos os possíveis $\mathbf{v}''$, a trajetória que mais contribuirá para a integral será aquela que satisfaz:

$$\mathbf{u}'' = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathbf{v}''} = \mathbf{u}(T), \quad (3.19)$$

ou seja, dentre todas as infinitas possíveis trajetórias que sai de $\mathbf{u}'$ fixo, a que mais contribui é aquela correspondente a $\mathbf{u}(T)$ igual ao rótulo $\mathbf{u}''$ da transformada. Expandindo (3.17) até segunda ordem em torno desta trajetória e resolvendo a integral gaussiana que resta, encontramos:

$$\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') = \sqrt{\frac{1}{\det M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') + \frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') \right\}, \quad (3.20)$$

sendo que as trajetórias que contribuem para este propagador são aquelas com condições de contorno $\mathbf{u}' = \mathbf{u}(0)$ e $\mathbf{u}'' = \mathbf{u}(T)$. $\tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$ é a função $\mathcal{G}$ calculada nesta nova trajetória. O novo pré-fator $[\det M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}]^{-1/2}$ pode ser obtido da equação (1.30) ou (3.7), e não diverge na vizinhança de bifurcações, como pode ser verificado na equação (3.4).

Agora que temos o propagador tanto para a representação $\mathbf{v}''$ quanto $\mathbf{u}''$, podemos adotar as idéias mencionadas no início da seção para lidar com a região de bifurcação.

Fórmula do Propagador na Representação $\mathbf{v}''$ para a Região da Bifurcação

A partir daqui, suponha que queremos calcular o propagador $k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')$ próximo de uma bifurcação. Não podemos calculá-lo na sua forma (3.12) pois teremos péssimos resultados. No entanto, sabemos que não devemos ter problemas, nesta região, para o propagador transformado $\tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}')$. A idéia então é fazer a transformação inversa em $\tilde{k}$ para obter k . Só que, para esta transformada inversa, devemos incluir correções além da segunda ordem, senão voltaremos para a mesma equação (3.12). É neste ponto que pretendemos aproveitar a teoria apresentada no apêndice B. Começamos por apresentar a transformação inversa:

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C'} \tilde{k}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') e^{\mathbf{u}'' \mathbf{v}''} d^2 \mathbf{u}'' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{C'} \sqrt{\frac{1}{\det M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') + \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') - i\hbar \mathbf{u}'' \mathbf{v}'' \right] \right\} d^2 \mathbf{u}'' . \end{aligned} \quad (3.21)$$

O cálculo do ponto de sela para esta integral, como era de se esperar, nos fornece a trajetória que sai de $\mathbf{u}'$ e chega em $\mathbf{v}''$ como sendo a que mais contribui. Para resolver (3.21), faremos uma comparação com a equação (B.1), estabelecendo a seguinte correspondência:

$$z_x \rightarrow u''_x \quad \text{e} \quad z_y \rightarrow u''_y, \quad g(z_x, z_y) \rightarrow \sqrt{\frac{1}{\det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}}}$$

$$f(z_x, z_y) \rightarrow \left[\tilde{\mathcal{S}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') + \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{u}'', \mathbf{u}') + i\hbar \mathbf{u}'' \mathbf{v}'' \right].$$

Portanto, de acordo com a equação (B.4), escrevemos:

$$k(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') = \mathcal{Y} \left[\sqrt{\frac{1}{\det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}') + \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}')] \right\} \right], \quad (3.22)$$

onde $\mathcal{Y}$, dado pela equação (B.33), vale:

$$\mathcal{Y} = \left(\frac{\hbar}{3G'_1} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A+C-\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{2\epsilon^3}{27G'^2_1} \right\} \text{Ai} \left(z = - \left(\frac{\epsilon^6}{81G'^4_1 \hbar^2} \right)^{1/3} \right), \quad (3.23)$$

sendo que as constantes que aparecem nesta expressão, são definidas em (B.6), (B.22) e (B.28):

$$G'_1 = - \left(\frac{\sqrt{1+\beta^2+2\beta\epsilon'}}{2\epsilon' - \alpha + \beta} \right)^3 [\beta^3 D + \beta^2 E + \beta F + G] \quad \text{e} \quad \epsilon = \frac{4AC - B^2}{4(A+C)},$$

para $\alpha = \frac{2A}{B}$, $\beta = \frac{-2C}{B}$ e $\epsilon' = \frac{2\epsilon}{B}$. E:

$$A = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''^2_x} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \quad B = \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''_x \partial u''_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \quad C = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''^2_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}},$$

$$D = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''^3_x} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \quad E = \frac{1}{2} \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''^2_x \partial u''_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \quad F = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''_x \partial u''^2_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \quad G = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{S}}}{\partial u''^3_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}},$$

que devem ser calculadas sobre a trajetória crítica ($\bar{\mathbf{p}}$). Como vemos, estas constantes envolvem segundas e terceiras derivadas da ação $\tilde{\mathcal{S}}$. Como, em geral, não existe uma função explícita da ação para as trajetórias, não é possível obter estas derivadas a partir da equação (3.15). Portanto, no apêndice C, desenvolvemos uma maneira de calcular estas derivadas numericamente, através da solução de equações diferenciais auxiliares.

Enfim, podemos dizer que alcançamos uma fórmula semiclássica do propagador *para a região de bifurcação*, envolvendo o cálculo da função de Airy para argumentos complexos, que pode ser feito numericamente.

Capítulo 4

Trajeto rias n o-Contribuintes

Na se  o 1.10, afirmamos que existem trajet rias que n o devem ser inclu das na f rmula semicl ssica do propagador (1.34). Para isso, utilizamos argumentos baseados em crit rios f sicos: trajet rias que produzem diverg ncias ou descontinuidades n o devem ser levadas em considera  o. No entanto, ainda n o demos uma explica  o mais rigorosa sobre este assunto. Apenas levantamos a hip tese de que o contorno original da integral de Feynman n o pode ser deformado de modo que inclua a trajet ria cr tica em quest o. Neste cap tulo, mostraremos alguns exemplos relacionados com este t pico, para refor ar a id ia de que os crit rios f sicos *s o suficientes* para excluir trajet rias.

A id ia principal deste cap tulo   mostrar que solu  es assint ticas, como   o caso do propagador semicl ssico, podem ter f rmulas distintas para diferentes regi es do espa o, sem, contudo, provocar descontinuidades no seu valor num rico. De fato, pode haver uma descontinuidade, desde que seja menor do que o erro inerente da aproxima  o. Uma maneira de entender esta situa  o   pensar numa fun  o $g(z)$ como sendo a aproxima  o assint tica de $f(z)$, com rela  o a determinado par metro, em uma determinada regi o do espa o z . Assim, podemos fazer uma extens o anal tica de $g(z)$ para obter uma aproxima  o de $f(z)$ al m daquela regi o. Entretanto, a partir de determinado limite, a continua  o anal tica de $g(z)$ pode deixar de ser uma solu  o para a continua  o de $f(z)$, de modo que a sua aproxima  o passa a ser descrita por uma outra fun  o.

O fato de uma aproxima  o assint tica ser escrita de v rias maneiras, para regi es diferentes,  , na verdade, uma manifesta  o do Fen meno de Stokes. Este termo simplesmente traduz a id ia de que solu  es assint ticas podem aparecer ou desaparecer subitamente, em determinadas regi es, sem que haja uma descontinuidade sens vel no valor num rico da aproxima  o, com a finalidade de manter fiel a solu  o aproximada   exata. Segundo as refer ncias [17, 18, 19], este tipo de fen meno foi observado pela primeira vez por Stokes [59], por isso recebe este nome.

A relação do Fenômeno de Stokes com o nosso problema das trajetórias não-contribuintes pode ser entendida da seguinte maneira: Suponha que as trajetórias envolvidas no cálculo do propagador semiclássico (1.34) possam ser escritas como uma função vetorial $\mathbf{t}_1(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T; t)$. Suponha ainda que exista uma outra função $\mathbf{t}_2(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T; t)$ que também seja solução das equações de movimento (1.36). Portanto, o propagador será escrito como $K(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T) = \mathcal{K}_1(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T) + \mathcal{K}_2(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T)$, onde $\mathcal{K}_i$, para $i = 1$ ou 2 , é o propagador calculado com a trajetória dada por $\mathbf{t}_i(\mathbf{u}', \mathbf{v}'', T; t)$. Assim, se pensarmos que $\mathbf{t}_1$ e $\mathbf{t}_2$ definem duas famílias de trajetórias, dizemos que o propagador semiclássico envolve duas soluções, dadas por $\mathcal{K}_1$ e $\mathcal{K}_2$. Desta forma, se, para determinados parâmetros $\mathbf{u}'$, $\mathbf{v}''$ e T , a solução $\mathcal{K}_2$ contiver resultados não-físicos, como por exemplo, se a parte imaginária da função F tornar-se negativa (veja a seção 1.10), devemos excluí-la da fórmula, com base no Fenômeno de Stokes. Entretanto, a região no espaço de parâmetros, $\mathbf{u}'$, $\mathbf{v}''$ e T , onde uma solução é excluída, deve ser maior (ou igual) do que aquela onde $\text{Im}[F] < 0$. Para entender esta afirmação, pense no caso em que desejamos calcular o propagador semiclássico para $\mathbf{u}'$ e $\mathbf{v}''$ fixos, em função de T , onde as duas famílias de trajetórias forneçam contribuições relevantes ao valor do propagador. Como já dissemos, se, a partir de determinado tempo T_N , a solução dada por $\mathbf{t}_2$ passar a produzir $\text{Im}[F] < 0$, podemos excluí-la da fórmula. No entanto, num instante anterior à T_N esta solução contribuía para a fórmula do propagador, de modo que a sua exclusão naquele ponto provocaria uma descontinuidade. Para evitar este problema, devemos procurar o valor de $T = T_{LS}$, onde a contribuição da família $\mathbf{t}_2$ seja desprezível em relação à de $\mathbf{t}_1$. Portanto, a partir de T_{LS} , ponto pertencente à chamada *linha de Stokes*, uma das soluções pode ser banida da aproximação, sem causar problemas para a solução global.

O primeiro assunto que apresentaremos será, na seção 4.1, o cálculo assintótico da integral contida na função de Airy, que também apresenta o Fenômeno de Stokes. Inclusive, para este caso, pode-se provar analiticamente que as diferentes fórmulas, para cada região, segue como consequência da desconsideração de determinados pontos críticos, que, por sua vez, decorre do fato do contorno original da integral de Airy não poder ser deformado de modo que os inclua. Em seguida, na seção 4.2, mostraremos que, no Método WKB, também temos a presença do Fenômeno de Stokes. Segundo este método, a função de onda semiclássica é escrita como a soma de duas soluções assintóticas da equação de Schrödinger. Porém, para a região classicamente proibida, não podemos considerar uma das soluções, pois a sua inclusão leva a uma divergência, evidentemente proibida por critérios físicos. Por outro lado, as duas soluções são importantes para a região classicamente permitida. Esta diferença entre as fórmulas, para cada região, também é uma manifestação do Fenômeno de Stokes. Mostraremos, então, como uma das soluções da equação de Schrödinger pode ser “perdida”, sem ônus para a solução global, quando passamos da região permitida para a proibida. Finalmente, na terceira seção, mostraremos um estudo analítico da

fórmula do propagador semiclássico em uma dimensão, realizado por Rubin e Klauder [21], onde é tratado o problema das trajetórias não-contribuintes e sua relação com o Fenômeno de Stokes.

4.1 Função de Airy

Neste exemplo, baseado nas referências [51] e [52], veremos analiticamente que existem pontos críticos que não podem ser levados em consideração para resolver uma integral assintoticamente, gerando o Fenômeno de Stokes. A integral que estudaremos é uma solução da equação de Airy, que é escrita como:

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} - z f(z) = 0, \quad \text{para } z \text{ complexo.} \quad (4.1)$$

Para esta equação, procuramos soluções que envolvam a seguinte transformada de Laplace:

$$f(z) = \int_C F(s) e^{sz} ds, \quad (4.2)$$

que, inserida na equação em (4.1), fornece:

$$\int_C (s^2 - z) F(s) e^{sz} ds = 0 \implies -F(s) e^{sz} |_C + \int_C \left[s^2 F(s) + \frac{dF(s)}{ds} \right] e^{sz} ds = 0. \quad (4.3)$$

Desta equação, encontramos $F(s) = e^{-s^3/3}$, e a condição para o caminho C : $F(s) e^{sz} = \exp \left\{ -\frac{s^3}{3} + sz \right\}$ deve se anular nos seus extremos. Portanto, como mostra a figura 4.1, a condição básica para C é que suas extremidades tendam ao infinito nos seguintes setores:

$$\frac{-\pi}{6} < \arg(s) < \frac{\pi}{6}, \quad \frac{\pi}{2} < \arg(s) < \frac{5\pi}{6}, \quad \text{e} \quad \frac{-5\pi}{6} < \arg(s) < \frac{-\pi}{2}, \quad (4.4)$$

considerando que $-\pi < \arg(s) \leq \pi$. Desta forma, também através da equação 4.1, podemos definir três soluções para a equação de Airy:

$$f_n(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_n} \exp \left[sz - \frac{z^3}{3} \right] dz, \quad n = 1, 2, 3, \quad (4.5)$$

onde os caminhos C_n são mostrados na figura 4.1. Porém, somente duas destas soluções são linearmente dependentes, já que, segundo o teorema de Cauchy, $f_1 + f_2 + f_3 = 0$. A equação (4.5), para $n = 1$, é conhecida como função de Airy do primeiro tipo:

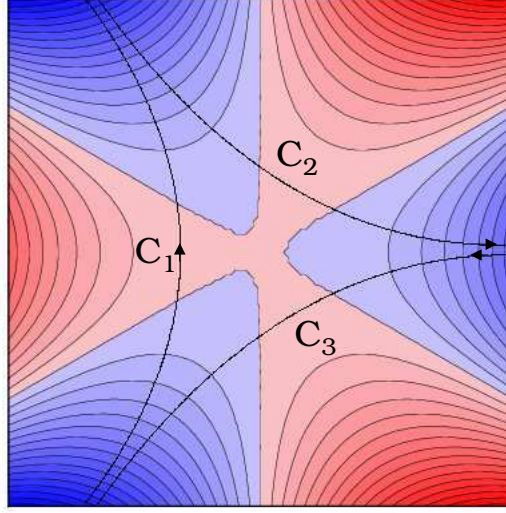


Figura 4.1: Curvas de nível para a parte real de $-s^3$. Os setores em cor azul corresponde à $\text{Re}[-s^3] < 0$ (quanto maior a tonalidade, menor o valor de $\text{Re}[-s^3]$) e os setores em vermelho corresponde à $\text{Re}[-s^3] > 0$ (quanto maior a tonalidade, maior o valor de $\text{Re}[-s^3]$). As curvas C_1 , C_2 , e C_3 representam os três possíveis caminhos para a integral de (4.2), segundo a equação (4.3).

$$Ai(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} \exp \left[sz - \frac{z^3}{3} \right] dz. \quad (4.6)$$

Esta função, para um argumento complexo $s = |s|e^{i\theta}$, com $-\pi < \theta \leq \pi$, é o nosso objeto de estudo nesta seção. De fato, para o nosso propósito, é conveniente realizar a mudança de variáveis $z \rightarrow \sqrt{|s|}z$. Feito isto, encontramos:

$$Ai(s) = \frac{\sqrt{|s|}}{2\pi i} \int_{C_1} \exp \left\{ |s|^{3/2} w(z, \theta) \right\} dz, \quad \text{com } w(z, \theta) = ze^{i\theta} - \frac{z^3}{3}, \quad (4.7)$$

que será resolvida, via Método do Ponto de Sela¹, no limite assintótico $|s| \rightarrow \infty$.

Seguindo as idéias contidas na seção 1.3, realizamos o primeiro passo para o cálculo da equação (4.7), que é a determinação dos pontos de sela de $w(z, \theta)$. Fazendo isto, concluímos que são dois:

¹Na seção 1.3, quando apresentamos o Método do Ponto de Sela, analisamos uma integral semelhante a que tratamos aqui. Para que os resultados apresentados naquela seção continuem válidos, precisamos relacionar: $|s|^{3/2} \rightarrow \hbar^{-1}$; $w(z, \theta) \rightarrow -if(z)$.

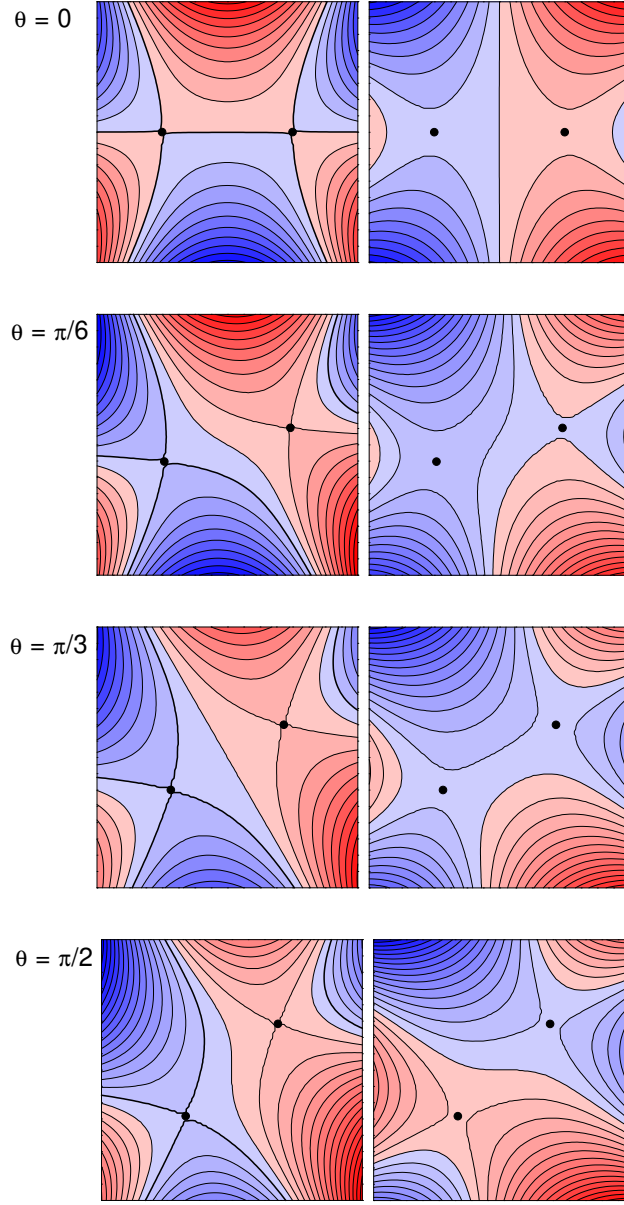


Figura 4.2: Curvas de nível para $\text{Im}[w(z, \theta)]$ (lado esquerdo) e $\text{Re}[w(z, \theta)]$ (lado direito), no plano complexo z . Para cada dupla de gráficos, os valores de θ estão indicados no lado esquerdo. Os pontos pretos representam os pontos de sela $z_{\pm}$. Para cada gráfico, as regiões em cor vermelha possuem valores mais altos do que aquelas em azul. Quanto mais alta a tonalidade do vermelho, maior o valor da função e, quanto mais alta a tonalidade do azul, menor o valor da função. As curvas de nível destacadas, nos gráficos de $\text{Im}[w(z, \theta)]$, satisfazem $\text{Im}[w(z, \theta)] = \text{Im}[w(z_{-}, \theta)]$. Portanto, compreendem os caminhos que passam pelo ponto de sela z_{-} , ao longo dos quais o integrando da equação (4.7) não oscila. São equivalentes aos caminhos mais íngremes, que passam pelo ponto de sela z_{-} , com relação ao relevo de $\text{Re}[w(z, \theta)]$, como pode ser verificado nos gráficos à direita.

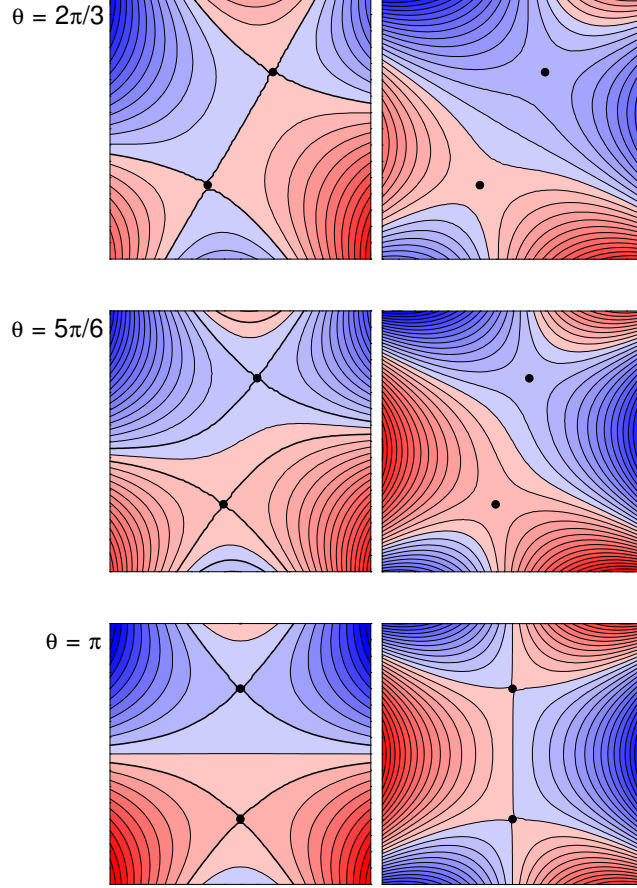


Figura 4.3: Análoga à figura 4.2. A exceção está no destaque das curvas de nível de $\text{Im}[w(z, \theta)]$, que também satisfazem $\text{Im}[w(z, \theta)] = \text{Im}[w(z_+, \theta)]$, pois, para estes gráficos, o ponto de sela z_+ também deve ser considerado.

$z_{\pm} = \pm e^{i\frac{\theta}{2}}$. Precisamos, portanto, para cada valor de θ , deformar o caminho original de integração C_1 , em caminhos de declive mais íngreme, com relação ao relevo de $\text{Re}[w(z, \theta)]$, que passam por $z_{\pm}$. Depois disso é só expandir $w(z, \theta)$ em torno de cada ponto crítico, pertencente ao novo caminho de integração, e calcular a integral resultante. Finalmente, devemos somar todas as expansões realizadas. A tarefa de deformar o contorno original de integração, que é a parte principal desta seção, será realizada a seguir com o auxílio das figuras 4.2 e 4.3.

Para valores de θ dentro do intervalo $0 \leq \theta < 2\pi/3$, percebemos que o caminho original C_1 ,

da figura 4.1, pode ser deformado no caminho de declive mais íngreme, com relação ao relevo de $\text{Re}[w(z, \theta)]$, que parte do ponto de sela z_- . Note, portanto, que o ponto de sela z_+ *não deve* ser incluído na expansão da integral (4.7). Inclusive, pelas curvas de nível de $\text{Re}[w(z, \theta)]$, podemos verificar que, para $0 \leq \theta < \pi/3$, como $\text{Re}[w(z_-, \theta)] < \text{Re}[w(z_+, \theta)]$, a expansão em torno do ponto de sela z_- produz um valor, em módulo, muito menor do que produziria a expansão em torno de z_+ , considerando o limite $|s| \rightarrow \infty$. Por isso, a inclusão equivocada de z_+ levaria à erros enormes. A mesma coisa acontece para $\theta = \pi/3$, quando os dois pontos de sela passam a ter contribuições iguais, como indica os gráficos de $\text{Re}[w(z, \theta)]$: $\text{Re}[w(z_-, \theta)] = \text{Re}[w(z_+, \theta)]$. Para valores de θ maiores do que $\pi/3$, a contribuição de z_- passa a dominar sobre z_+ . Neste caso, incluir equivocadamente a expansão em torno de z_+ não causará um erro tão grande.

Para valores de θ dentro do intervalo $2\pi/3 < \theta \leq \pi$, segundo a figura 4.3, o caminho original C_1 da integral (4.7) não pode mais ser deformado de modo que inclua somente o ponto de sela z_- . Para estes casos, a deformação do contorno só pode ser feita se incluirmos também o ponto z_+ . Assim, o caminho C_1 é melhor visualizado como a soma de $-C_2$ com $-C_3$, conforme indica a figura 4.1. Portanto, a solução de (4.7) deve envolver tanto a expansão em torno de z_- , quanto a de z_+ . No entanto, para $2\pi/3 \leq \theta < \pi$, a exclusão equivocada de z_+ não provoca um erro muito grande, pois a sua contribuição é menor que a de z_- , como pode ser verificado através dos gráficos de $\text{Re}[w(z, \theta)]$. Contudo, para $\theta = \pi$, voltamos à situação onde os dois pontos possuem contribuições equivalentes, de modo que a exclusão de um deles produziria erros muito grandes.

Fazendo uma análise análoga a esta também para $\pi < \theta \leq 0$, poderemos concluir que a solução assintótica ($|s| \rightarrow \infty$) da função de Airy (4.7) é escrita em função destas duas contribuições: uma expansão em torno de z_- e outra em torno de z_+ . No entanto, elas não podem ser usadas simultaneamente em toda a região $-\pi < \theta \leq \pi$, fato que tem relação com o Fenômeno de Stokes. Segundo a análise feita, para $|\theta| < 2\pi/3$, devemos usar somente a expansão em torno de z_- . Para $|\theta| \geq 2\pi/3$, as duas soluções devem ser incluídas. Entretanto, se desprezarmos todas as soluções sub-dominantes, de modo a simplificar o problema, obtemos as duas fórmulas:

$$\begin{aligned} Ai(s) &= \frac{s^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -\frac{2}{3}s^{3/2} \right\}, \quad |s| \rightarrow \infty, \quad |\theta| < \pi, \\ Ai(s) &= \frac{|s|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \text{sen} \left\{ \frac{2}{3}s^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right\}, \quad |s| \rightarrow \infty, \quad |\theta| = \pi, \end{aligned} \tag{4.8}$$

que ilustram muito bem a existência do Fenômeno de Stokes.

4.2 Método WKB

Nesta seção, desenvolveremos o método semiclássico WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin), seguindo as idéias contidas nas referências [60, 1, 61, 62]. No entanto, a partir de certo ponto da apresentação, abordaremos este assunto com enfoque no *Fenômeno de Stokes*, que existe nesta aproximação. Este ponto de vista, em geral, não é tratado nos livros de Mecânica Quântica. Porém, em livros cujo assunto são as expansões assintóticas, como por exemplo [17, 18, 19], o método WKB é bastante utilizado como exemplo.

O método em discussão é utilizado para obter soluções aproximadas $\psi(x)$ da Equação de Schrödinger, independente do tempo, em uma dimensão:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)] \psi(x) = 0, \quad (4.9)$$

no limite semiclássico $\hbar \rightarrow 0$. $U(x)$ é o potencial ao qual é submetida a partícula de massa m que desejamos estudar, e E é a sua energia. Para a equação (4.9), procura-se uma solução do tipo $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}$, onde, dado o limite estudado, expandimos: $\sigma = \sigma_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots$. Portanto, substituindo esta solução tentativa em (4.9) obtemos:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma}{dx} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2 \sigma}{dx^2} = E - U, \quad (4.10)$$

onde, por praticidade, ocultamos a dependência em x . Quando expandimos a função σ , conforme fizemos acima, esta equação se torna:

$$\frac{1}{2m} \left\{ \sigma_0'^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) [2\sigma_0' \sigma_1' + \sigma_0''] + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 [2\sigma_0' \sigma_2' + \sigma_2'^2 + \sigma_1''] + \mathcal{O}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3 \right\} = E - U, \quad (4.11)$$

onde a linha (') indica a derivada com relação a x . Para encontrar a função de onda nesta aproximação semiclássica, devemos resolver, separadamente, cada termo desta expansão. Começamos, então, com o termo de ordem $\hbar^0$:

$$\frac{\sigma_0'^2}{2m} = E - U \implies \sigma_0 = \pm \int^x \sqrt{2m[E - U(q)]} dq = \pm \int^x p(q) dq, \quad (4.12)$$

onde identificamos o momento clássico $p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}$. O cálculo de σ_1 é feito ao resolver o termo de ordem $\hbar^1$, da equação (4.11):

$$\sigma_0' \sigma_1' + \frac{1}{2} \sigma_0'' = 0 \implies \sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{p'}{2p} \implies \sigma_1 = -\frac{1}{2} \log p. \quad (4.13)$$

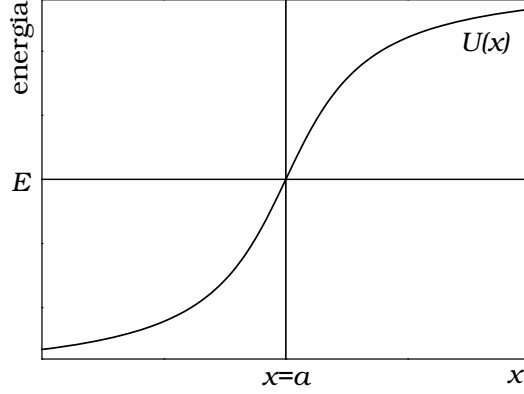


Figura 4.4: Potencial $U(x)$.

Portanto, se considerarmos $\sigma \approx \sigma_0 + \frac{i}{\hbar}\sigma_1$, ou seja, se desprezarmos os termos em $\hbar^2$, temos duas soluções para a equação (4.9):

$$\phi_+(x) = \frac{c_+}{\sqrt{p(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int^x p(q) dq} \quad \text{e} \quad \phi_-(x) = \frac{c_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(q) dq}, \quad (4.14)$$

de modo que a solução global $\psi(x)$ tem a forma: $\psi = \phi_+ + \phi_-$, onde c_+ e c_- são constantes arbitrárias. O limite inferior das integrais em (4.14) também são arbitrários, uma vez que a sua escolha alteraria somente o valor das constantes. Note que a única limitação para este resultado é que a expansão em σ seja convergente, ou seja, que $|\sigma'_0| \gg |\frac{i}{\hbar}\sigma'_1| \Rightarrow \frac{m\hbar|F|}{|p^3|} \ll 1$, onde F é a força clássica $-dU/dx$. Portanto, segundo esta condição, a solução semiclássica não é válida na vizinhança dos pontos clássicos de retorno, onde $p = 0$. Com esta condição, $\psi(x)$ diverge devido ao termo $p^{-1/2}$.

Já que encontramos uma solução assintótica ($\hbar \rightarrow 0$) da Equação de Schrödinger (4.9) para um potencial arbitrário $U(x)$, faremos a seguinte aplicação: Considere que desejamos estudar semiclassicamente uma partícula de massa m , com uma energia E , sujeita a um potencial $U(x)$, para o qual existe um ponto de retorno, $x = a$, de modo que $E = U(a)$. Considere também que, para $x < a$, o movimento é permitido segundo a mecânica clássica ($E > U$), e, para $x > a$, o movimento é proibido ($E < U \Rightarrow$ o momento clássico $p(x)$ é um número imaginário puro). A figura 4.4 ilustra este tipo de potencial.

Nesta aplicação, com exceção da vizinhança do ponto $x = a$, a solução dada por (4.14) continua valendo, de modo que podemos escrever, convenientemente, uma solução para o lado esquerdo do ponto de retorno ($\psi_e(x)$ – região classicamente permitida) e outra para o lado direito ($\psi_d(x)$ –

região classicamente proibida):

$$\begin{aligned}\psi_e(x) &= \frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq} + \frac{c_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq}, \\ \psi_d(x) &= \frac{d_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq} + \frac{d_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq},\end{aligned}\tag{4.15}$$

onde definimos o limite inferior das integrais como sendo $x = a$, de modo que $\int_a^x |p(q)| dq$ seja maior que zero para a região proibida, e menor que zero para a permitida. Para escrever $\psi_d(x)$, lembramos que as exponenciais complexas, ϕ_+ e ϕ_- , se tornam reais, crescente e decrescente, devido ao fato do momento clássico se tornar um número imaginário puro.

Usualmente, para resolver as constantes das equações (4.15), em primeiro lugar, impomos que d_1 seja igual a zero, para evitar que $\psi_d(x)$ tenha uma divergência quando $x \rightarrow \infty$, que é um resultado obviamente não-físico. Assim, sobram três constantes, c_1 , c_2 e d_2 , para serem determinadas. Se conseguirmos escrever c_1 e c_2 em função de d_2 , resolveríamos o problema, já que uma única constante pode ser determinada impondo-se que a função de onda semiclássica seja normalizada. Para encontrar esta relação entre as três constantes, devemos impor o critério de que a função de onda *inteira* seja contínua. No entanto, do modo que o problema foi colocado, não há como conectar ψ_e com ψ_d , pois, no limite entre as duas regiões, nenhuma das funções encontradas são válidas. A idéia do método WKB para lidar com isso é considerar x como uma variável complexa. Desta forma, no plano complexo x , podemos conectar ψ_e com ψ_d através de duas semi-circunferências (“por cima” e “por baixo”) em torno de $x = a$, evitando assim o eixo real, onde se localiza a divergência. Este procedimento padrão de fazer a conexão de ψ_d para ψ_e , em cada semi-circunferência, produz os seguintes resultados: $c_2 = d_2 e^{-i\pi/4}$ e $c_1 = d_2 e^{i\pi/4}$, de modo que obtemos:

$$\begin{aligned}\psi_d(x) &= \frac{d_2}{\sqrt{|p|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left| \int^x p(q) dq \right| \right], \\ \psi_e(x) &= \frac{2d_2}{\sqrt{p}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \left| \int^x p(q) dq \right| - \frac{\pi}{4} \right].\end{aligned}\tag{4.16}$$

Este é o resultado final para a função de onda semiclássica. Os detalhes desta conexão, via plano complexo, foram omitidos, pois a seguir faremos um procedimento análogo.

Agora vamos encarar esta mesma aplicação do método WKB da seguinte maneira. A função de onda $\psi(x) = \phi_+(x) + \phi_-(x)$, obtida através das equações (4.14), é uma *solução global*, válida, portanto, para as *duas regiões* separadas pelo ponto de retorno. Então, ao invés de escrever uma solução para cada lado do ponto de retorno, escrevê-la-emos somente para o lado esquerdo, assim como ψ_e na equação (4.15), e a continuaremos, via plano complexo, para o lado direito. Nesta

dedução, veremos que as duas soluções, dadas pelas equações (4.14), continuam distintas após fazer a conexão entre os dois lados, como representado por ψ_d em (4.15). Isto vai implicar que, para o lado direito, *a priori*, temos uma exponencial crescente e outra decrescente, o que levaria a uma suposta divergência. Estamos, portanto, diante do seguinte problema: como posso desaparecer com a exponencial crescente do lado direito sem desaparecer com sua respectiva forma do lado esquerdo, uma vez que se trata da mesma função? Esta questão só é resolvida quando percebemos que a solução que produziria a divergência, em determinado ponto do caminho da conexão, pertencente a chamada de *linha de Stokes*, é desprezível em relação à outra solução. Assim, neste ponto, podemos excluí-la da solução global, sem afetar a continuidade da função de onda em todo espaço e evitando a divergência existente no lado direito. Desta forma, quando dissemos que $d_1 = 0$, na equação (4.15), já admitíamos, de certa maneira, que uma das soluções do lado esquerdo *foi* “perdida” durante a conexão. Ressaltamos que a exclusão conveniente de uma das soluções da Equação de Schödinger, para uma certa região, é baseada na idéia do Fenômeno de Stokes. Note também que este tipo de exclusão de uma das soluções não é simplesmente um ajuste de constantes arbitrárias, pois a mesma função é considerada em determinada região e excluída em outra, como se a sua respectiva constante pudesse variar de 0 a 1 para algumas regiões [63].

Seguindo o que propomos no início do parágrafo anterior, consideraremos:

$$\psi_e(x) = \frac{c_+}{\sqrt{p(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(q) dq} + \frac{c_-}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(q) dq}, \quad (4.17)$$

onde x ainda é considerada real. Para fazer a pretendida conexão, através das duas semi-circunferências em torno de $x = a$, restringiremos x para valores tais que $|x - a|$ seja grande o suficiente para não cair dentro da região de divergência, mas ainda pequeno para que possamos aproximar: $E - U(x) \approx F_0(x - a)$, considerando que $U(x) \approx U(a) - F_0(x - a)$ e $F_0 = -\frac{dU}{dx}|_{x=a} < 0$. Tendo em vista o que foi dito, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \psi_e(x) &\approx \frac{c_+}{[2m|F_0|(a-x)]^{1/4}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m|F_0|(a-q)} dq} \\ &+ \frac{c_-}{[2m|F_0|(a-x)]^{1/4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m|F_0|(a-q)} dq}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Resolvendo a integral, obtemos:

$$\begin{aligned} \psi_e(x) &\approx \frac{c_+}{[2m|F_0|(a-x)]^{1/4}} e^{-\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} (a-x)^{3/2}} \\ &+ \frac{c_-}{[2m|F_0|(a-x)]^{1/4}} e^{+\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} (a-x)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Agora, passaremos a considerar que x pode ser complexo: $(a - x) \equiv \rho e^{i(\theta - \pi)}$. Assim, quando $\theta = \pi$, x estará real e na região classicamente permitida, e, quando $\theta = 0$, x estará real e na região classicamente proibida. Desta forma, a continuação analítica da equação (4.19) toma a forma:

$$\begin{aligned} \psi(\rho, \theta) \approx & \frac{c_+}{[2m|F_0|\rho e^{i(\theta - \pi)}]^{1/4}} e^{-\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}(\theta - \pi)}} \\ & + \frac{c_-}{[2m|F_0|\rho e^{i(\theta - \pi)}]^{1/4}} e^{+\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}(\theta - \pi)}}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

para o intervalo $0 \leq \theta < 2\pi$, e valores de ρ tais que a aproximação linear de $U(x)$ e a relação $\frac{m\hbar|F|}{|p^3|} \ll 1$ sejam válidas. A equação (4.20) é uma expressão global² da função de onda semiclássica, por isso, deixamos de chamá-la de ψ_e para chamá-la simplesmente de ψ . Note como, para $\theta = \pi$, a equação (4.20) é equivalente à (4.19). Agora podemos observar a que se reduz esta função de onda para valores de x sobre o eixo real, do lado direito do ponto de retorno:

$$\psi(\rho, \theta = 0) = \frac{c_+ e^{i\pi/4}}{[2m|F_0|\rho]^{1/4}} e^{+\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2}} + \frac{c_- e^{i\pi/4}}{[2m|F_0|\rho]^{1/4}} e^{-\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2}}, \quad (4.21)$$

considerando a conexão pela semi-circunferência superior ($\theta = 0$), ou:

$$\psi(\rho, \theta \rightarrow 2\pi) = \frac{c_+ e^{-i\pi/4}}{[2m|F_0|\rho]^{1/4}} e^{-\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2}} + \frac{c_- e^{-i\pi/4}}{[2m|F_0|\rho]^{1/4}} e^{+\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|F_0|} \rho^{3/2}}, \quad (4.22)$$

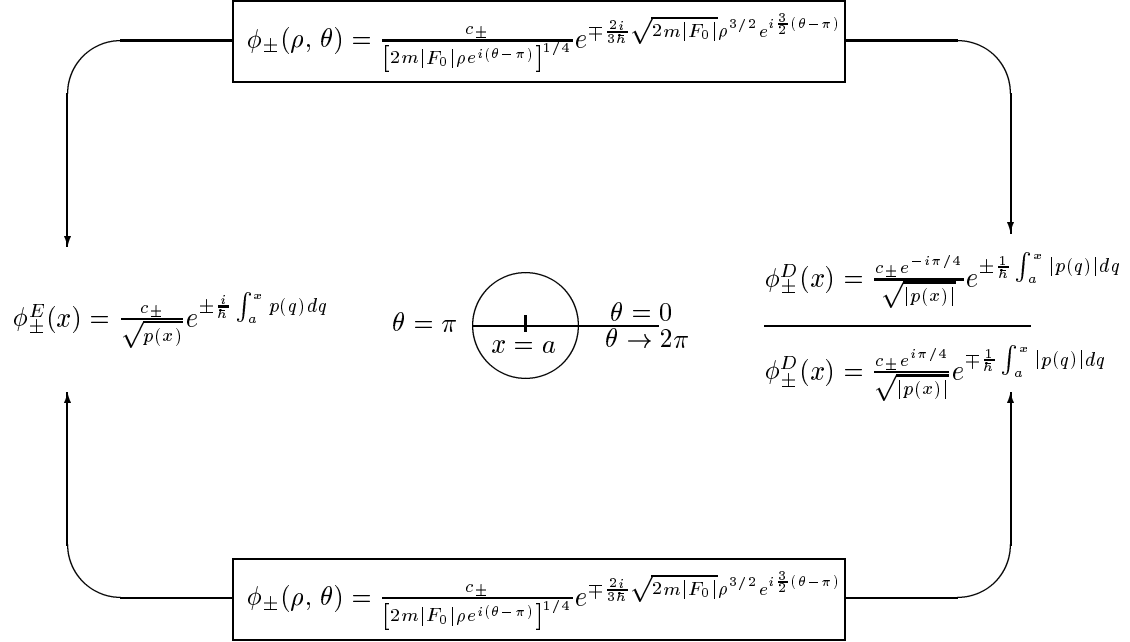
através da semi-circunferência inferior ($\theta \rightarrow 2\pi$). As equações (4.21) e (4.22) são equivalentes a, respectivamente:

$$\begin{aligned} \psi_d(x) &= \frac{c_+ e^{i\pi/4}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq} + \frac{c_- e^{i\pi/4}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq}, \\ \psi_d(x) &= \frac{c_+ e^{-i\pi/4}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq} + \frac{c_- e^{-i\pi/4}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(q)| dq}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

Com base neste resultado, podemos construir o esquema 1. Neste esquema, representamos, dentro dos retângulos, as duas soluções da função de onda, ϕ_+ e ϕ_- , válidas para todo $0 \leq \theta < 2\pi$. No eixo real, estas soluções se reduzem à $\phi_\pm^E$ (com $\theta = \pi$), na região classicamente permitida, e $\phi_\pm^D$ (com $\theta = 0$ e $\theta \rightarrow 2\pi$), na região proibida. No entanto, sabemos que não podemos ter uma função exponencial crescente do lado direito do ponto de retorno. Assim, precisamos arrumar uma maneira de excluí-la, sem que $\phi_\pm$ fique descontínua. Note que, se simplesmente excluirmos a função

²no sentido de ser válida para os dois lados do ponto de retorno, embora seja limitada para alguns valores de ρ .

crecente somente no eixo real, a função de onda global ficará descontínua, e, se a excluirmos em todo o espaço, não conseguiremos reproduzir o resultado exato na região classicamente permitida.



ESQUEMA 1

O valor de θ correto para excluir a solução indesejada deve ser aquele onde ela é *mais* desprezível em relação à outra. Para determiná-lo, veja a figura 4.5 onde mostramos as curvas de nível de $\text{Im}[i\rho^{3/2}e^{i\frac{3}{2}(\theta-\pi)}]$ e $\text{Re}[i\rho^{3/2}e^{i\frac{3}{2}(\theta-\pi)}]$, no plano complexo x . Para $\theta = 2\pi/3$, não só a solução ϕ_- é maior, em módulo, que ϕ_+ , como é maior também a diferença entre elas, já que $\frac{i}{c_+} \text{Re}[\phi_+] = -\frac{i}{c_-} \text{Re}[\phi_-]$. Portanto, a exclusão de ϕ_+ neste ponto é conveniente. Fazendo uma análise semelhante à esta, concluímos também que, ao longo da semi-circunferência inferior, ϕ_- pode ser descartada em $\theta = 4\pi/3$. Por isso, finalmente, podemos construir o esquema 2. Nele, vemos as duas *Linhas de Stokes* (linhas mais grossas), que emanam de $x = a$. Trata-se do limite entre a região onde duas soluções $\phi_{\pm}$ existem (à esquerda), e aquela onde somente uma solução ϕ_- existe (à direita). Como vemos, admitindo a existência do Fenômeno de Stokes, construímos uma solução global que satisfaça às condições impostas pela física do problema, reproduzindo melhor a solução exata.

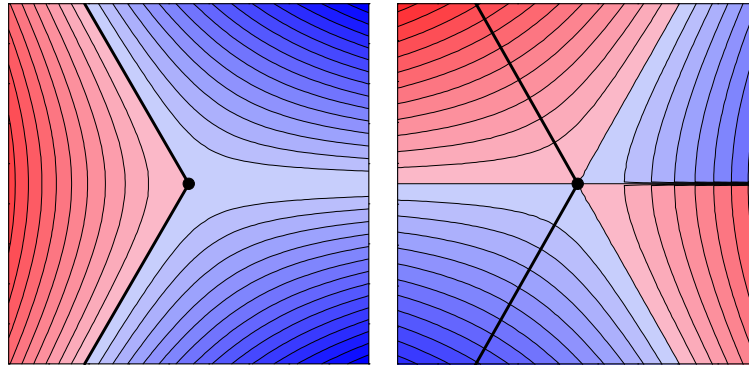
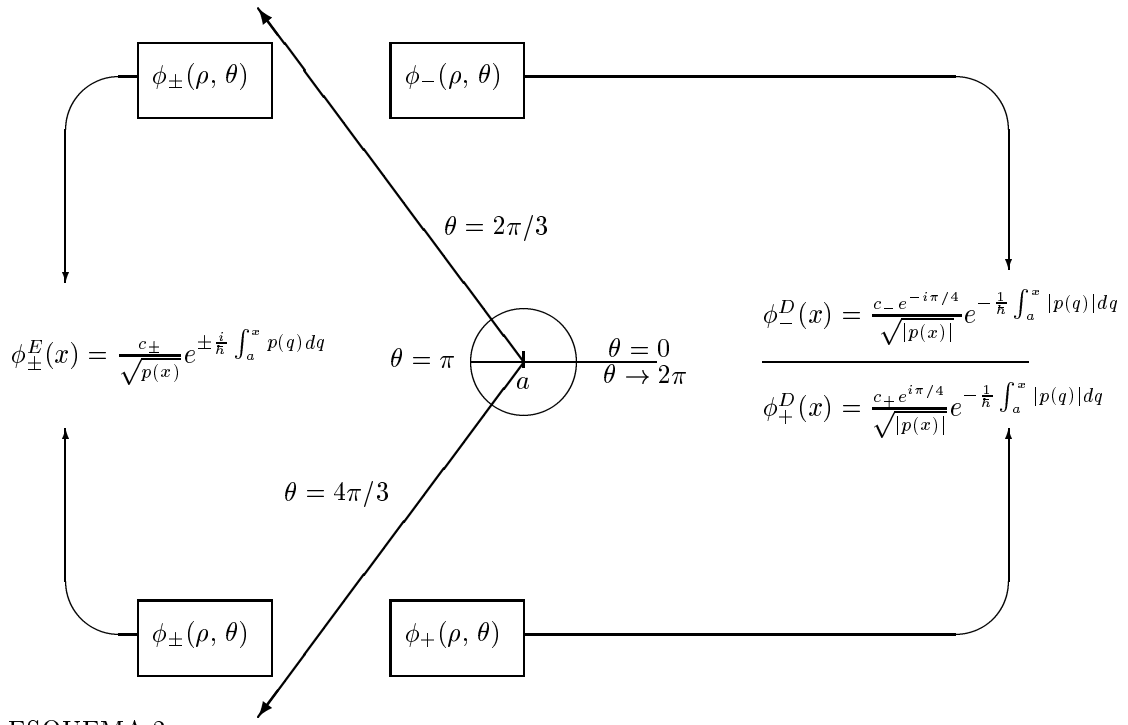


Figura 4.5: Curvas de nível de $\text{Im}[i\rho^{3/2}e^{i\frac{3}{2}(\theta-\pi)}]$ (lado esquerdo) e $\text{Re}[i\rho^{3/2}e^{i\frac{3}{2}(\theta-\pi)}]$ (lado direito) no plano complexo x . O ponto preto trata-se de $x = a$. As linhas que emanam do ponto central, que fazem ângulos de $2\pi/3$ e $4\pi/3$ com o eixo real positivo, representam dois caminhos mais ígremes, partindo de $x = a$, com relação ao relevo de $\text{Re}[i\rho^{3/2}e^{i\frac{3}{2}(\theta-\pi)}]$. As regiões em cor azul correspondem aos valores da função negativos (quanto maior a tonalidade, menor o valor) e as regiões em vermelho correspondem aos valores da função positivos (quanto maior a tonalidade, maior o valor)

4.3 Trajetórias não-Contribuintes (Propagador – 1D)

A referência [21] traz uma discussão sobre as trajetórias não-contribuintes relacionadas com a fórmula semiclássica do propagador em uma dimensão. Como consideramos este trabalho importante para o entendimento deste tipo de trajetórias, o resumiremos aqui. A fórmula semiclássica do propagador em uma dimensão espacial pode ser obtida de maneira análoga à equação (1.34), discutida na seção 1.7, e é escrita como:

$$\begin{aligned} K(z'', z', T) &\approx \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\frac{\partial v'}{\partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[S(v', u', T) + \frac{1}{2} \int_0^T \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u \partial v} dt - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right] \right\} \\ &\equiv \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\frac{\partial v'}{\partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} F \right\}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Com relação ao pré-fator desta fórmula, ao invés de escrevê-lo em função da matriz de estabilidade M , por conveniência, utilizamos as relações (3.5) e (3.9) para deixá-lo em função de $\partial v' / \partial v''$. Assim como no caso bidimensional, o somatório da equação (4.24) é sobre todas as trajetórias regidas pelas Equações de Hamilton:

$$i\hbar \dot{u} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v} \quad \text{e} \quad -i\hbar \dot{v} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u}, \quad (4.25)$$

com condições de contorno $u(0) \equiv u' = z' = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q'}{b} + i \frac{p'}{c} \right)$ e $v(T) \equiv v'' = z''^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} - i \frac{p}{c} \right)$, e sendo:

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right) \quad \text{e} \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} - i \frac{p}{c} \right). \quad (4.26)$$

Para estudar as trajetórias envolvidas no cálculo do propagador semiclássico, é conveniente utilizar as variáveis complexas auxiliares α , introduzidas na seção 2.3: $q = q' + b\alpha$ e $p = p' + i c \alpha$. Desta forma, a condição de contorno inicial $u' = z'$ é imediatamente satisfeita, de modo que o valor de v'' é determinado somente como função do parâmetro α : $v'' = v''(\alpha)$. Se, além disso, utilizarmos as equações (4.26) para obter $\alpha(v')$, podemos afirmar que o rótulo final v'' depende apenas do valor de v' , ou seja, $v'' = v''(v')$.

A existência de mais de uma trajetória satisfazendo $v'' = z''^*$ ocorre quando o mapa $v' \rightarrow v''$ possui dois valores distintos de v' que levam ao mesmo v'' . Para verificar em que condições teremos duas (por simplicidade) trajetórias contribuindo, analisaremos a função $f(z)$, que é uma representação do mapa $v' \rightarrow v''$. Em geral, se $f(z)$ contém um ponto crítico z_0 , então $f'(z_0) = 0$, e, na vizinhança deste ponto, o mapa deixa de ser univalente. Por exemplo, se z_0 for tal que

$f''(z_0) \neq 0$, podemos aproximar $f(z) \approx f(z_0) + \frac{f''(z_0)}{2}(z - z_0)^2$ ao seu redor, o que significa dizer que existem dois valores de z que resultam no mesmo $f(z)$. Por outro lado, se a função $f(z)$ for analítica em todo o espaço, o mapa associado à ela será conforme, e, portanto, univalente. Então, se o mapa $v' \rightarrow v''$ for analítico, teremos somente uma trajetória contribuinte para o cálculo do propagador. Entretanto, um ponto singular aparece na fórmula (4.24), quando $\partial v''/\partial v' = 0$, que é exatamente a situação onde aparecem cáusticas no espaço de fase, discutida no capítulo 3. Vale comentar que, para a partícula livre e o oscilador harmônico, não temos cáusticas, pois $\partial v''/\partial v'$ nunca se anula. Portanto, nestes casos, para todo u' , v'' e T , somente uma trajetória contribuirá. Além disso, quando $T = 0$, independentemente do hamiltoniano considerado, também não temos cáusticas, pois $\partial v''/\partial v' = 1$. Dessa discussão, concluímos que só teremos mais de uma trajetória contribuinte para o propagador, quando existirem cáusticas no espaço de fase.

Como foi discutido na seção 1.10, trajetórias cuja parte imaginária de F é negativa não podem ser consideradas no cálculo do propagador, pois, se as incluirmos, teremos uma divergência. Novamente, para a partícula livre e o oscilador harmônico, é fácil de verificar que trajetórias com tais características não existem. Isto é importante, pois, como o mapa $v' \rightarrow v''$ é univalente para estes sistemas, se elas existissem, não teríamos como calcular o propagador para tais valores de v'' .

Quando consideramos tempos maiores e sistemas mais complicados, aparecem cáusticas e, conseqüentemente, múltiplas trajetórias. Para verificar isto numericamente, na figura 4.6a, mostramos, para oscilador quártico, $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{4}q^4$, as curvas de nível da parte imaginária de F , no plano complexo v' , para $u' = 0$ e $T = 0,03$. Desta forma, somente em $v' = 0$, a trajetória é real e, por isso, neste ponto, $\text{Im}[F] = 0$. Nas duas regiões escuras, próximas às cáusticas, encontramos $\text{Im}[F] < 0$. Assim como já havia sido observado numericamente por Adachi [16], trajetórias não-contribuintes aparecem na presença de cáusticas, confirmando a discussão realizada anteriormente. Na figura 4.6b, podemos verificar que o mapa $v' \rightarrow v''$ é conforme para todo espaço, exceto na cáustica, onde $\partial v''/\partial v' = 0$.

De maneira análoga ao método WKB, existe uma linha saindo da cáustica, chamada de linha de Stokes, a partir da qual podemos deixar de incluir determinadas contribuições, sem causar descontinuidades para o valor numérico do propagador semiclássico. Se tomássemos como linha de Stokes a fronteira entra a região onde $\text{Im}[F] < 0$ e $\text{Im}[F] > 0$, somente as trajetórias com parte imaginária de F negativa seriam descartadas. Ou seja, todos os v' da região escura da figura 4.6a não poderiam ser usados. No entanto, se assim fizermos, continuaremos vendo descontinuidades. Afinal, trajetórias próximas à região escura, mas ainda fora dela, contribuem para o valor do propagador, de modo que a sua exclusão súbita causaria uma descontinuidade. Para resolver isto, a linha de Stokes deve estar na região onde aquela família de trajetórias não-contribuintes produz resultados desprezíveis, podendo, portanto, ser excluída.

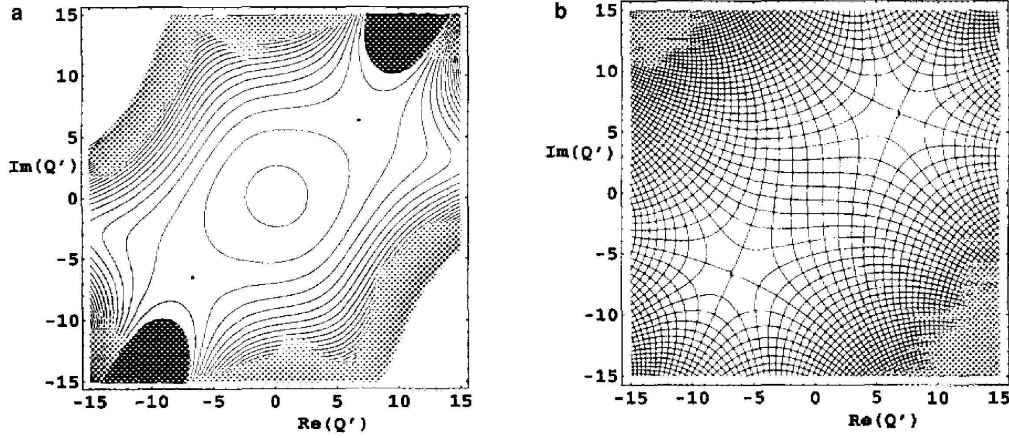


Figura 4.6: (a) Curvas de nível para $\text{Im}[F]$, no plano complexo v' (na figura, onde estiver Q' , leia v'). (b) Sobreposição das curvas de nível de $\text{Re}[v'']$ e $\text{Im}[v'']$. Os dois gráficos foram construídos para o oscilador quártico, para $u' = 0$, $T = 0,03$ e $b = c$. Do lado esquerdo, os dois pontos são as cáusticas e a região escura corresponde aos v' que produzem $\text{Im}[F] < 0$. Note como a cáustica está localizada bem próxima a ela. Para o gráfico do lado esquerdo, podemos verificar que o mapa $v' \rightarrow v''$ é conforme, com exceção das cáusticas. Por isso, estes pontos são vistos como defeitos no padrão da rede. Esta figura foi retirada da referência [21].

Para localizar as linhas de Stokes, assumiremos que, na vizinhança da cáustica, existem dois valores de v' que levam ao mesmo v'' . Desta forma, para um dado v' existirá um v'_p , tal que $v''(v') = v''(v'_p)$. Podemos construir, então, uma função ΔF_I tal que $\Delta F_I(v') = \text{Im}[F(v')] - \text{Im}[F(v'_p)]$, que, na cáustica, vale zero. No plano v' , as curvas, partindo da cáustica, que possuem declive mais íngreme, indicam a situação onde não somente a contribuição devido a v' é dominante em relação a v'_p , como também a diferença entre elas é máxima. Portanto, nestas linhas, podemos tranquilamente excluir a família sub-dominante, pois não causaremos nenhuma descontinuidade. Assim, localizadas no plano v' as linhas de Stokes, basta desconsiderar todos os pontos v' além dela. Este critério de localização de linhas de Stokes foi o mesmo utilizado para se excluir uma das contribuições no Método WKB, e é chamado de Princípio de Dominância Exponencial pelas referências [17, 18, 19]. Este critério, que na essência é um critério de otimização de continuidade, foram utilizados também em [16, 22, 23], para excluir trajetórias da fórmula semiclássica do propagador (1D).

Para ilustrar esta discussão, suponha que o mapa $v' \rightarrow v''$ seja dado por $v'' = v'^2$. Portanto,

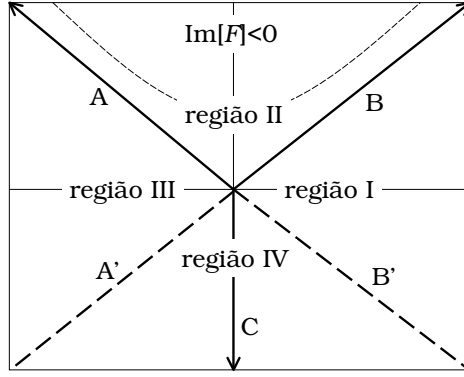


Figura 4.7: Ilustração das linhas de Stokes (A e B) em torno da cáustica (ponto central), no plano complexo v' , para o mapa $v'' = v'^2$. As linhas A, B e C são os caminhos mais íngremes de ΔF_I , a partir da cáustica $v' = 0$. Acima da linha tracejada mais fina temos a região onde $\text{Im}[F] < 0$. Entre cada uma das linhas, A, B, A' e B', definimos as regiões: I (entre B e B'), II (entre A e B), III (entre A e A') e IV (entre A' e B').

teremos uma cáustica em $v' = 0$. Na figura 4.7 representamos os três caminhos mais íngremes, A, B e C, da função ΔF_I . Como a região a ser excluída deve necessariamente conter os pontos v' que geram $\text{Im}[F] < 0$, tomamos como linhas de Stokes as curvas A e B, de modo que a região II passa a ser considerada como não-contribuinte. Note como existe uma região, onde $\text{Im}[F] > 0$, que, por este critério, também deve ser excluída.

Ainda com relação à figura 4.7, todos os valores de v' , não pertencentes à região delimitada pelas linhas de Stokes, geram todos os valores possíveis de v'' . No entanto, para valores de v'' tais que $\text{Re}[v''] > 0$, existem dois valores de v' que levam ao mesmo v'' . Isto pode ser verificado quando notamos que as regiões I e III são mapeadas em $\text{Re}[v''] > 0$. Já para os valores de v'' tais que $\text{Re}[v''] < 0$, para cada v'' , temos somente um valor de v' correspondente. Isto ocorre porque a região II, que seria mapeada também em $\text{Re}[v''] < 0$, não deve ser mais considerada. Portanto, no plano complexo v'' , a linha de Stokes é o eixo imaginário: Para todos os pontos à sua direita ($\text{Re}[v''] > 0$), duas trajetórias existem e devem ser incluídas na fórmula do propagador; e, para os pontos à sua esquerda ($\text{Re}[v''] < 0$), duas trajetórias existem, mas aquelas originadas de um v' , pertencente à região II do gráfico 4.7, não devem ser consideradas.

O trabalho [21] também estuda a natureza das duas trajetórias envolvidas no cálculo do propa-

gador semiclássico para o oscilador quártico, o que tem relação com a dinâmica das cáusticas no espaço de fase. São apontadas duas classificações: 1) Trajetórias Continuamente Conectadas e 2) Trajetórias Continuamente Desconectadas. As trajetórias incluídas na primeira categoria nunca deixam de contribuir para a fórmula do propagador. O termo “continuamente conectada” diz respeito ao seguinte comportamento: Suponha que, para $T \neq 0$, existe uma trajetória conectando $v_T'^C$ a um dado v_T'' , e outra conectando $v_T'^D$ ao mesmo v_T'' . Pretendemos verificar o que ocorre com os valores de v_T' , quando tomamos continuamente o limite $T \rightarrow 0$, para v_T'' fixo. É natural esperarmos que, neste limite, pelo menos um dos v_T' tenda a v_T'' . Quando isto ocorrer, $v_T'^C \rightarrow v_T''$, tais trajetórias são classificadas como “continuamente conectadas”. No entanto, para as trajetórias classificadas como “continuamente desconectadas”, quando $T \rightarrow 0$, temos o comportamento $v_T'^D \rightarrow \infty$. Só conseguimos entender isto quando notamos que as cáusticas, no plano complexo v' , para tempos baixos, localizam-se no infinito e rapidamente se deslocam para o centro do plano, quando aumentamos o tempo. Como vimos que a segunda trajetória contribuinte aparece junto às cáusticas, é também natural que o rótulo $v_T'^D$ se comporte da maneira que descrevemos. O fato das cáusticas estarem no infinito, quando tomamos tempos baixos, também pode ser entendido, pois, para sistemas unidimensionais, as famílias de trajetórias existem para qualquer tempo, já que o sistema é integrável. Portanto, uma vez verificada a existência das cáusticas, elas devem permanecer sempre. Como no limite $T = 0$ não existem cáusticas, para este limite, é compreensível que elas se afastam para o infinito. Atravé desta análise, também podemos pensar que as trajetórias continuamente conectadas formam a família que possui conexão com as trajetórias reais, enquanto que a família das trajetórias continuamente desconectadas contém somente trajetórias complexas.

Para a fórmula do propagador em duas dimensões espaciais (1.34), toda a discussão realizada nesta seção pode ser aplicada. No entanto, para duas dimensões, temos uma outra complicação. Conforme discutido no capítulo 3, no ponto de cáustica, surge uma nova família de trajetórias, enquanto que, para sistemas unidimensionais, as famílias sempre existem. Desta forma, o surgimento da nova família implica necessariamente em uma descontinuidade, que deve ser tratada segundo os critérios físicos de continuidade, a exemplo de todos os assuntos apresentados neste capítulo.

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Neste capítulo, faremos uma aplicação numérica da fórmula semiclássica do propagador (1.34), para o caso diagonal (probabilidade de retorno), comparando-o com o resultado exato. O sistema escolhido foi o potencial Nelson, devido ao fato dele ter sido intensamente estudado, tanto do ponto de vista da Mecânica Clássica, [54, 57, 64], quanto do ponto de vista da Mecânica Quântica, [65, 66, 67, 58]. A grande vantagem é que este sistema é não-integrável, apresentando regiões regulares e caóticas em seu espaço de fase. Suas órbitas periódicas, que são importantes para o cálculo da probabilidade de retorno, foram descritas em detalhes na referência [54]. Ressaltamos, porém, que as trajetórias clássicas que procuramos não são governadas exatamente pelo potencial Nelson (5.1), mas sim pela sua média em estados coerentes, equação (5.3), o que implica numa dinâmica ligeiramente modificada.

Na seção 5.1, apresentaremos o potencial Nelson e mostraremos as órbitas periódicas relevantes para a nossa aplicação. Em seguida, na seção 5.2, mostraremos como o cálculo do propagador exato foi realizado, para que se pudesse comparar com o resultado semiclássico. Na seção 5.3, mostraremos nossa primeira aplicação numérica da fórmula (1.34), para parâmetros próximos da órbita periódica mais simples do potencial Nelson. A seguir, na seção 5.4, calcularemos o propagador semiclássico para parâmetros tais que, em sua vizinhança, existem mais de uma órbita periódica. Na seção 5.5, nossa aplicação numérica se concentrará em uma região distante de tais trajetórias. Mostraremos também, na seção 5.6, alguns resultados numéricos para valores mais altos de T . E, finalmente, na seção 5.7, apresentaremos os resultados semiclássicos finais, lado a lado com os análogos quânticos, para comparação. No decorrer deste capítulo, encontraremos exemplos que ilustrarão completamente os assuntos discutidos nos capítulos anteriores.

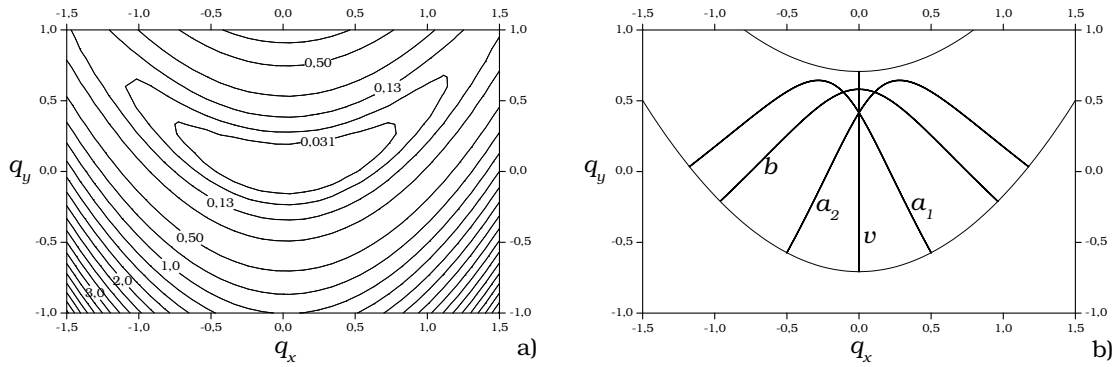


Figura 5.1: (a) Curvas de nível do potencial Nelson. Para $q_x = 0$ temos exatamente o potencial de um oscilador harmônico simples. (b) Órbitas periódicas do potencial para períodos (P) baixos. Para a órbita vertical v , $P = 4,443$, para trajetória *boomerang* b , $P = 7,081$ e, para as trajetórias a_1 e a_2 , $P = 7,384$.

5.1 Potencial Nelson e suas Órbitas Periódicas

A primeira vez que o potencial Nelson apareceu na literatura foi na referência [57], sendo que a motivação física de sua invenção é atribuída à sua forma: “um vale profundo em forma de parábola, cercado por altas montanhas”, como mostra a figura 5.1a. Em física nuclear, este formato representaria um grau de liberdade coletivo de vibração do núcleo. A equação que o descreve é escrita como:

$$V(q_x, q_y) = \left(q_y - \frac{q_x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{q_x^2}{2} \quad (\text{para } \mu = 0, 1), \quad (5.1)$$

através da qual podemos notar a simetria com relação a inversão $q_x \rightarrow -q_x$, que também estará presente em todos os resultados obtidos neste capítulo.

O potencial Nelson é parcialmente caótico, sendo que, para energias baixas, ele apresenta muitas regiões de regularidade, como mostra a seção de Poincaré $q_x - p_x$, para $E = 0,05$, na figura 5.2. Já para energias maiores, o potencial Nelson é praticamente caótico, como mostra o outro gráfico da figura 5.2, onde utilizamos $E = 0,5$. Para fazer todos os cálculos semiclássicos encontrados neste capítulo, fixamos a energia em 0,5. Portanto, trabalharemos num regime de energia bastante caótico.

Como pretendemos calcular a probabilidade de retorno, $R(q'_x, q'_y, p'_x, p'_y, T)$, discutida na seção 1.9, daremos uma atenção especial para as trajetórias periódicas do potencial Nelson. A mais

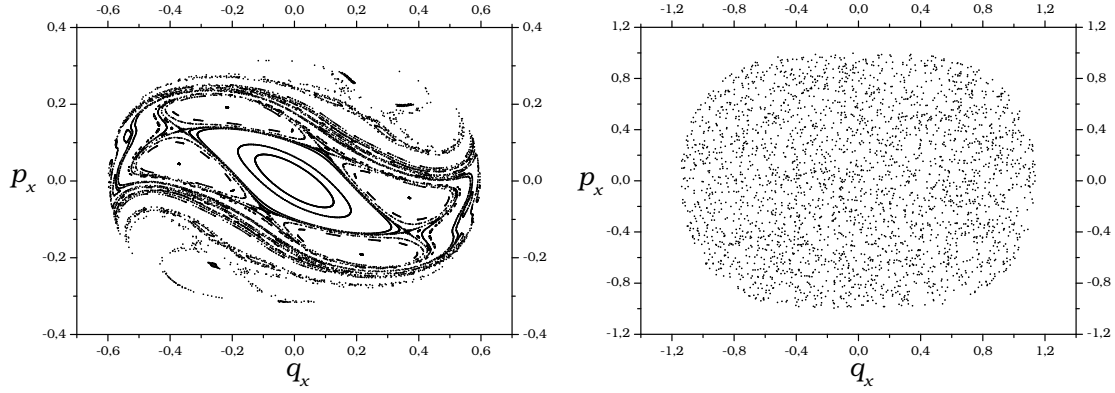


Figura 5.2: Seção de Poincaré ($q_x - p_x$) para o potencial Nelson, com energia igual a 0,05 (à esquerda) e 0,5 (à direita).

simples delas é conhecida como *trajetória vertical*, que leva este nome porque ela aparece quando $q_x = p_x = 0$. Para esta situação, o potencial Nelson é reduzido a um oscilador harmônico simples na direção y , como sugere a figura 5.1a. A frequência de oscilação da trajetória vertical é igual a $\sqrt{2}$ e o período é igual a $\pi\sqrt{2} \approx 4,443$. A segunda trajetória de período mais curto é a chamada *boomerang*, com período $P = 7,081$. Temos ainda outras duas órbitas periódicas, a_1 e a_2 , com $P = 7,384$, sendo que uma pode ser obtida a partir da outra através da operação $q_x \rightarrow -q_x$ e $p_x \rightarrow -p_x$. Estas quatro trajetórias são mostradas na figura 5.1b. Será na vizinhança destas trajetórias que faremos as nossas primeiras aplicações numéricas. Pela expressão “vizinhança de trajetórias” queremos dizer que calcularemos o probabilidade de retorno para tempos T próximos destes períodos. Como já discutimos no capítulo 1, se $\mathbf{q}'$, $\mathbf{p}'$ e T for aproximadamente igual a $\mathbf{q}'_0$, $\mathbf{p}'_0$ e T_0 , por onde passa uma órbita periódica de período T_0 , a probabilidade de retorno deve ser alta, já que, no limite estudado, a evolução temporal do estado descrito por $\mathbf{q}'$ e $\mathbf{p}'$ segue aproximadamente a trajetória clássica periódica que sai de $\mathbf{q}'_0$ e $\mathbf{p}'_0$ e T_0 . Na medida em que estes parâmetros começam a ficar diferentes entre si, a probabilidade de retorno vai diminuindo.

Antes de iniciar o cálculo de R , mostraremos alguns resultados parciais, necessários para a nossa aplicação numérica. O operador hamiltoniano Nelson é escrito como:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \left(\hat{q}_y - \frac{\hat{q}_x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{\hat{q}_x^2}{2} \quad (\text{para } \mu = 0, 1). \quad (5.2)$$

Portanto, a sua média em estados coerentes vale:

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + \left(q_y - \frac{q_x^2}{2} \right)^2 + \mu \frac{q_x^2}{2} + \\ &+ b_x^2 \left(\frac{3q_x^2}{4} - \frac{q_y}{2} \right) + \frac{1}{4} (\mu b_x^2 + c_x^2 + 2b_y^2 + c_y^2) + \frac{3}{16} b_x^4,\end{aligned}\quad (5.3)$$

onde lembramos que b_r e c_r são, respectivamente, as incertezas na posição e momento médios do estado $|z_r\rangle$, para $r = x$ ou y . Para todos os nossos cálculos, utilizamos $b_x = b_y = 0,2$ e $c_x = c_y = 0,25$, o que nos leva a $\hbar = b_r \cdot c_r = 0,05$, que é pequeno em relação ao valor de uma ação típica (de ordem 1), justificando, assim, o limite semiclássico. Ao considerar que o espaço de fase é complexo, conforme as equações (2.1), podemos escrever as equações de movimento (2.4) para o sistema equivalente 8-dimensional como:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= - \left(\frac{3}{2} b_x^2 + \mu \right) x_1 - 2 (x_3 x_4 - x_1 x_2) + 3 x_1 x_3^2 - x_1^3, \\ \ddot{x}_2 &= \frac{1}{2} b_x^2 - 2 x_2 + x_1^2 - x_3^2, \\ \ddot{x}_3 &= - \left(\frac{3}{2} b_x^2 + \mu \right) x_3 + 2 (x_3 x_2 + x_1 x_4) - 3 x_3 x_1^2 + x_3^3, \\ \ddot{x}_4 &= 2 (x_1 x_3 - x_4),\end{aligned}\quad (5.4)$$

e $\dot{x}_1 = p_1$, $\dot{x}_2 = p_2$, $\dot{x}_3 = -p_3$, e $\dot{x}_4 = -p_4$. A função hamiltoniana utilizada para gerar estas equações é a parte real do objeto $\tilde{H}$:

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{Real}(x_1, \dots, x_4, p_1, \dots, p_4) &= \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2 - p_4^2 - p_3^2) + \frac{\mu}{2} (x_1^2 - x_3^2) + \\ &+ (x_2^2 - x_4^2) + (x_3^2 x_2 - x_1^2 x_2 + 2 x_1 x_3 x_4) + \frac{1}{4} (x_1^4 - 6 x_1^2 x_3^2 + x_3^4) + \\ &+ \frac{3}{4} b_x^2 (x_1^2 - x_3^2) - \frac{b_x^2}{2} x_2 + \frac{3 b_x^4}{16} + \frac{1}{2} \left(\mu \frac{b_x^2}{2} + \frac{c_x^2}{2} + b_y^2 + \frac{c_y^2}{2} \right).\end{aligned}\quad (5.5)$$

Portanto, o nosso trabalho de calcular a probabilidade de retorno do estado $|\mathbf{z}'\rangle$, dados q'_x, q'_y, p'_x, p'_y e T , consiste, em primeiro lugar, em buscar trajetórias complexas regidas pelas equações (5.4), com condições de contorno dadas por (2.6). Faremos isto através do Método Numérico da Matriz de Monodromia, apresentado na seção 2.2. Como a informação importante para o cálculo da probabilidade de retorno está nas órbitas periódicas e calcularemos a probabilidade de retorno em sua vizinhança, nós as utilizaremos como trajetórias tentativas no método numérico adotado. De posse das trajetórias complexas, devemos simplesmente inseri-las na fórmula (1.34), para obter a probabilidade de retorno.

Para ter uma idéia de quantos níveis de energia $N(E)$ existem com energia menor ou igual a E , podemos realizar o seguinte cálculo semiclássico:

$$N(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \Theta \left(E - \left[\frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + V(q_x, q_y) \right] \right) dq_x dq_y dp_x dp_y , \quad (5.6)$$

onde Θ é a função degrau. A integral desta equação é uma medida de volume no espaço de fase da região classicamente permitida. Considerando que o menor volume no espaço de fase (com duas dimensões espaciais) tem tamanho $(2\pi\hbar)^2$, verifica-se que a equação (5.6) estima semiclassicamente a quantidade de níveis com enegregia menor ou igual a E . A integral da equação (5.6) pode ser resolvida quando notamos que a integral *em momento* é equivalente à área de um círculo de raio $\sqrt{2(E - V(q_x, q_y))}$, o que a reduz à forma:

$$N(E) = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^2} \int \Theta(E - V(q_x, q_y)) (E - V(q_x, q_y)) dq_x dq_y . \quad (5.7)$$

Considerando $V(q_x, q_y)$ como sendo o potencial Nelson (equação (5.1)), podemos simplificar o cálculo desta integral através de uma mudança de variáveis, $q_x = \sqrt{\frac{2}{\mu}} q_1$ e $q_y = q_2 + \frac{u^2}{q_1}$, o que produz:

$$N(E) = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^2} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \int \Theta(E - q_1^2 + q_2^2) (E - q_1^2 - q_2^2) dq_1 dq_2 . \quad (5.8)$$

Esta última integral pode ser resolvida facilmente em coordenadas polares:

$$N(E) = \frac{1}{2\sqrt{2\mu}} \left(\frac{E}{\hbar} \right)^2 . \quad (5.9)$$

Através desta expressão, para $E = 0, 5$, $\hbar = 0, 05$ e $\mu = 0, 1$, concluímos que existem 111 níveis de energia com energia entre 0 e 0,5. Como veremos nas seções seguintes, foi esta a situação em que trabalhamos.

5.2 Cálculo Exato e Construção dos Gráficos Polares

O cálculo quântico do propagador foi realizado de maneira usual, na referência [41]: 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 $\{|n_x, n_y\rangle\}$. Depois diagonaliza-se esta matriz numericamente, encontrando seus autovalores e autovetores. De posse destes valores, é possível escrever os elementos diagonais do propagador (1.6) como:

$$K(\mathbf{z}'^*, \mathbf{z}', T) = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^*(\mathbf{z}') \psi_m(\mathbf{z}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m T\right) = \sum_{m=0}^{\infty} |\psi_m(\mathbf{z}')|^2 e^{(-\frac{i}{\hbar} E_m T)} \quad (5.10)$$

onde E_m são os autovalores, e $\psi_m(\mathbf{z}') = \langle \mathbf{z}' | m \rangle$ as auto funções do operador hamiltoniano, ou seja, os estados $\{|m\rangle\}$ 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 $\{|n_x, n_y\rangle\}$.

Construção dos Gráficos Polares

Como já vimos na seção 1.9, o cálculo da probabilidade de retorno R envolve 5 parâmetros: q'_x, q'_y, p'_x, p'_y e T , ou, de modo equivalente, q'_x, q'_y, θ, E e T , onde θ é o ângulo tal que $p'_x = |\mathbf{p}'| \cos \theta$ e $p'_y = |\mathbf{p}'| \sin \theta$, e E é a energia. Para este último conjunto de parâmetros, o valor do módulo de $\mathbf{p}'$ pode ser obtido da expressão $|\mathbf{p}'| = \sqrt{2(E - V(\mathbf{q}'))}$. Para diminuir o número de parâmetros, de modo que se possa representá-los graficamente, para cada gráfico construído, fixaremos o valor de T , e, como já dissemos, fixaremos também o valor de $E = 0,5$. Desta forma, sobram três parâmetros livres por gráfico: $R(q'_x, q'_y, \theta)$. Construir gráficos em função destas três variáveis seria equivalente a estudar a probabilidade de retorno para toda a superfície de energia $E = 0,5$, o que não é uma tarefa fácil. A maneira encontrada em [41], para construir gráficos que consigam expressar todos estes parâmetros de maneira satisfatória, será explicada a seguir.

Definimos, para a região classicamente permitida, $V(q_x, q_y) \leq E$, uma grade de pontos (q'_x, q'_y) ao redor da origem, com espaçamento entre dois pontos consecutivos igual a $0,08$, ou seja, seguimos a relação $(q'_x = 0,08n, q'_y = 0,08m)$, para $m, n = \dots, -1, 0, 1, \dots$. Para cada ponto desta grade, desenhamos a probabilidade de retorno em função do ângulo θ ($R(\theta)$). Para representar estes resultados, os esboçamos como um gráfico polar, centrado no ponto (q'_x, q'_y) dado, onde o raio é representado por $R(q'_x, q'_y, \theta)$, e o ângulo é representado por θ . Para que os gráficos polares não se sobrepusessem no plano $q'_x - q'_y$, reescalamos o valor de R por um fator F que é citado em cada figura. Os valores de θ utilizados foram iguais a $10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, \dots, 360^\circ$, para todos os (q'_x, q'_y) .

Para encerrar esta explicação, explicitamos a situação dos cinco parâmetros envolvidos no cálculo da probabilidade de retorno: T e E são dados; q'_x e q'_y são variáveis; $p'_x = |\mathbf{p}'(q'_x, q'_y, E)| \cos \theta$ e $p'_y = |\mathbf{p}'(q'_x, q'_y, E)| \sin \theta$ são, para um dado (q'_x, q'_y) , variáveis através do parâmetro θ .

A grande vantagem de construir este tipo de gráfico é que, para cada (q'_x, q'_y) , nós temos uma idéia da direção na qual devemos “lançar” o estado coerente de modo a garantir uma probabilidade de retorno grande. Por exemplo, quando $q'_x = q'_y = 0$ e o tempo T é bem próximo do período da órbita vertical, se lançarmos o pacote na direção vertical ($\theta = 90^\circ$ ou 270°), esperamos obter uma probabilidade de retorno alta, no limite semiclássico. Por outro lado, se lançarmos na direção horizontal ($\theta = 0^\circ$ ou 180°), a probabilidade será pequena. Por isso, o gráfico polar será longo na direção vertical e curto na horizontal.

Para ter uma referência para o valor numérico da probabilidade de retorno em cada gráfico, informamos que a distância entre dois pontos adjacentes da grade (q'_x, q'_y) é equivalente a uma probabilidade de retorno $R_{\text{ref}} = 0,08/F$. Para cada gráfico, informaremos esse valor.

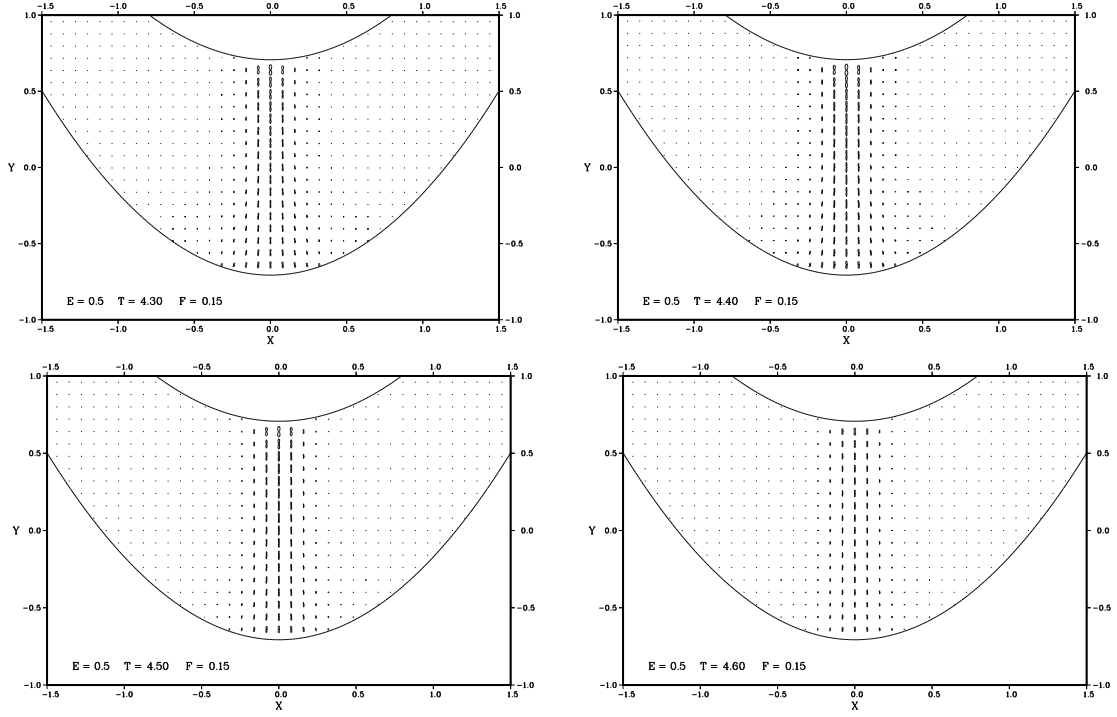


Figura 5.3: Probabilidade de retorno exata para $T = 4, 3, 4, 4, 4, 5$ e $4, 6$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). O período de oscilação da órbita periódica é $T \approx 4,443$.

5.3 Vizinhança da Trajetória Vertical

Apresentamos, na figura 5.3¹, quatro gráficos polares, contendo o resultado exato da probabilidade de retorno, para $T = 4, 3$, $T = 4, 4$, $T = 4, 5$ e $T = 4, 6$, que foram obtidos em [41], assim como todos os outros gráficos exatos deste capítulo. *Com relação a estes gráficos, exatos ou semiclassicos, os eixos X e Y devem ser lidos como q'_x e q'_y .* Note como os valores de tempo da figura 5.3 são próximos ao período da órbita vertical. Por isso, verificamos que o estado coerente, lançado na direção vertical e próximo de $q'_x = 0$, apresenta uma maior probabilidade de retorno. Já esperávamos este tipo de comportamento, pois a evolução quântica do estado coerente, para valores pequenos de $\hbar$, deve acompanhar, aproximadamente, a trajetória clássica. Quando nos

¹Quanto ao tamanho das figuras, esclarecemos que as manteremos assim, enquanto estivermos apresentando os resultados parciais. Na seção 5.7, onde mostramos os resultados finais, as figuras estão maiores.

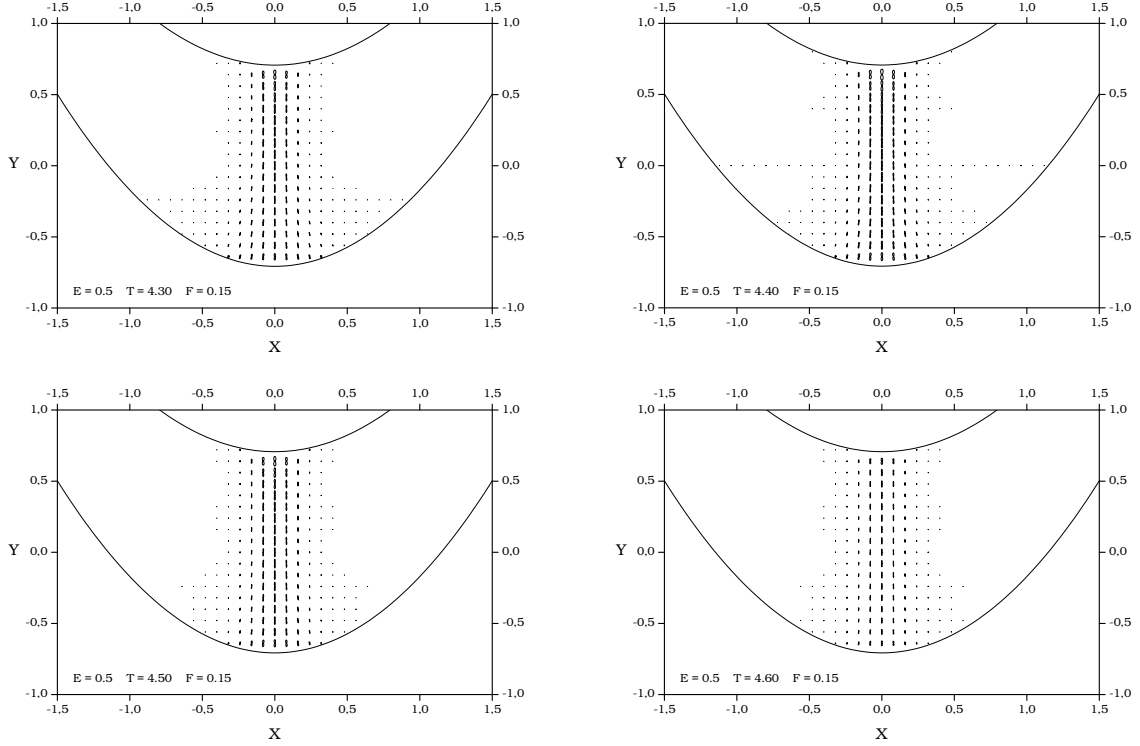


Figura 5.4: Probabilidade de retorno semiclássica para $T = 4, 3, 4, 4, 5$ e $4, 6$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para estes resultados, não encontramos trajetórias não-contribuintes nem cáusticas. Procuramos, para cada ponto, somente uma trajetória complexa, utilizando a órbita vertical, como trajetória tentativa.

afastamos do eixo $q'_x = 0$, os gráficos polares vão diminuindo, pois estamos nos afastando da órbita periódica. Portanto, nestes quatro gráficos, podemos observar a assinatura da órbita periódica nos resultados quânticos, que chamaremos de *imagem quântica da órbita periódica*. Note também que os gráficos polares são maiores quando o valor de T é mais próximo do período da trajetória vertical ($T = 4,443$), e vice-versa.

Na figura 5.4 mostramos os resultados semiclássicos para compararmos com aqueles da figura 5.3. Note como os resultados concordam muito bem entre si. Para realizar o cálculo semiclássico, partimos do pressuposto de que somente a trajetória vertical seria importante para estes parâmetros, uma vez que ela se encontra relativamente isolada de outras órbitas periódicas. Portanto, para encontrar a trajetória complexa contribuinte em cada cálculo, utilizamos o método numérico apresentado no capítulo 2, usando, como trajetória tentativa, a própria trajetória vertical. Pelos resultados, podemos dizer que algum tipo de informação da órbita vertical permanece nas trajetórias complexas convergidas, manifestando-se através daquilo que chamamos de imagem quântica da

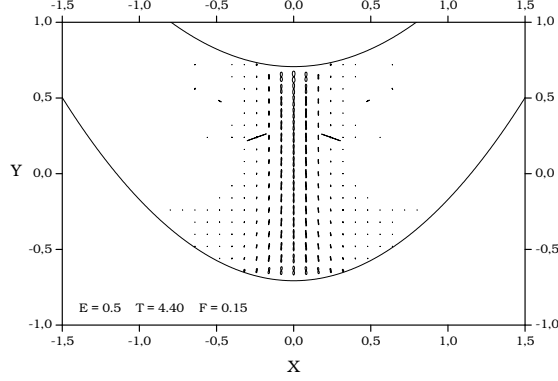


Figura 5.5: Probabilidade de retorno semiclássica para $T = 4,4$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Note como existem contribuições que claramente não podem ser consideradas, como por exemplo, em $q'_x = q'_y = 0,24$. Para cada ponto, procuramos somente uma trajetória complexa, utilizando, como trajetória tentativa, as trajetórias do oscilador harmônico simples, satisfazendo as equações (1.21).

órbita vertical.

Ressaltamos que praticamente não tivemos nenhum problema em reproduzir os resultados quânticos, para esta região de parâmetros. Trajetórias não-contribuintes e cáusticas quase não apareceram. A única vez que encontramos trajetórias não contribuintes foi quando, para teste, utilizamos como trajetória tentativa a solução do oscilador harmônico simples satisfazendo as condições de contorno (1.21). Mostramos, no gráfico 5.5, aquilo que encontramos. Note que ele é igual ao gráfico 5.4, para $T = 4,4$, exceto para os poucos pontos onde aparecem discontinuidades. Todas estas discrepâncias são eliminadas quando excluimos as trajetórias cuja parte imaginária de F é negativa.

5.4 Vizinhança das Trajetórias *Boomerang*, a_1 e a_2

Na figura 5.6, mostramos a probabilidade de retorno $R(q'_x, q'_y, \theta)$ exata para valores de $T = 7,0, 7,1, 7,4$ e $7,5$. Para os dois primeiros gráficos, podemos perceber a imagem quântica da trajetória *boomerang*. Note como estados coerentes, lançados na direção (θ) desta trajetória, possuem probabilidade de retorno maiores. Para os dois últimos gráficos, podemos ver, de forma sutil, a imagem quântica das trajetórias a_1 e a_2 .

Na figura 5.7, mostramos a probabilidade de retorno $R(q'_x, q'_y, T)$ semiclássica para valores de $T = 7,0, 7,1, 7,4$ e $7,5$, já excluindo as trajetórias cuja parte imaginária de F é negativa. Para

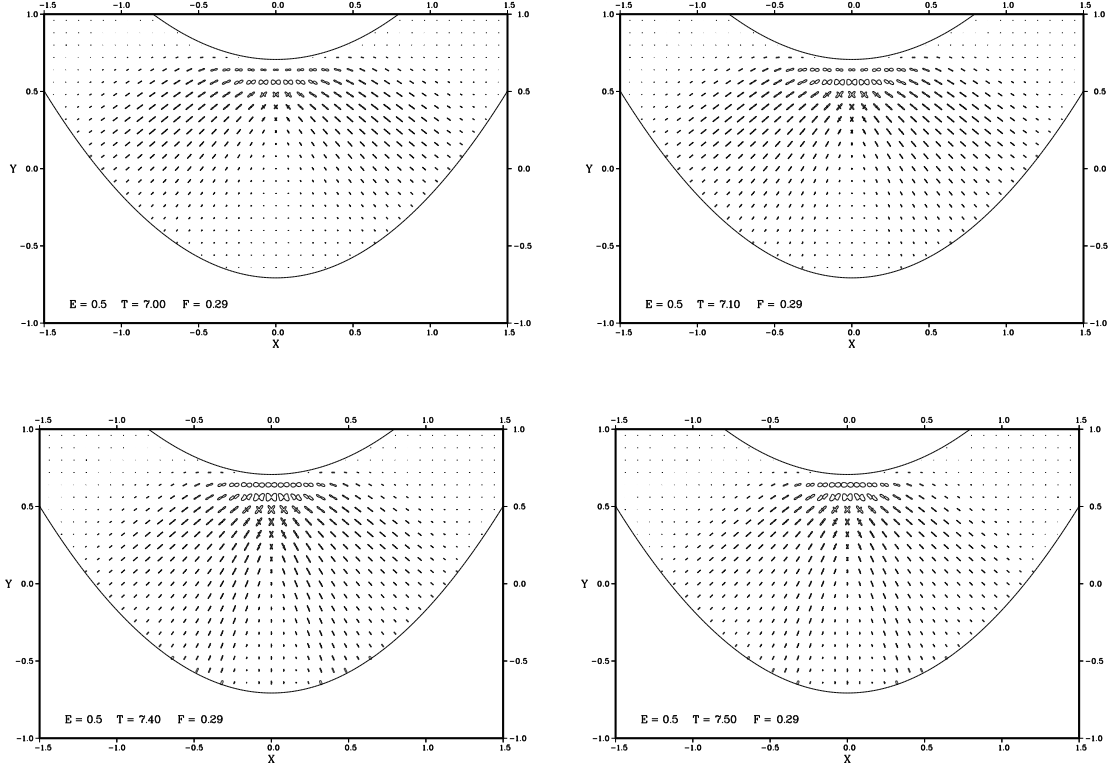


Figura 5.6: Probabilidade de retorno exata para $T = 7, 0, 7, 1, 7, 4$ e $7, 5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$).

cada ponto (q'_x, q'_y, θ) , procuramos três trajetórias complexas. Em cada busca, utilizamos, como trajetória tentativa, uma das três órbitas periódicas: *boomerang*, a_1 e a_2 . Porém, foi raro encontrar a situação onde mais de uma trajetória existia. Ou seja, as três convergências, em geral, resultaram numa mesma trajetória. Note como, para os dois primeiros gráficos, obtemos ótima concordância com o resultado exato.

Para os gráficos $T = 7,4$ e $7,5$ da figura 5.7, não obtivemos bons resultados, quando comparados com os exatos, para uma região bem definida, que tem a forma aproximada da trajetória *boomerang*. Fora desta região, consideramos que o cálculo semiclássico reproduziu muito bem as estruturas encontradas nos gráficos da figura 5.6. Com relação às discrepâncias, é necessário analisá-las para ver do que se tratam, como faremos a seguir.

A figura 5.8a mostra o mesmo cálculo semiclássico da figura 5.7, para $T = 7,4$, com a diferença que todas as trajetórias complexas encontradas foram incluídas, exceto aquelas que geravam, individualmente, probabilidades maiores que um. Note como existem muitos pontos onde a apro-

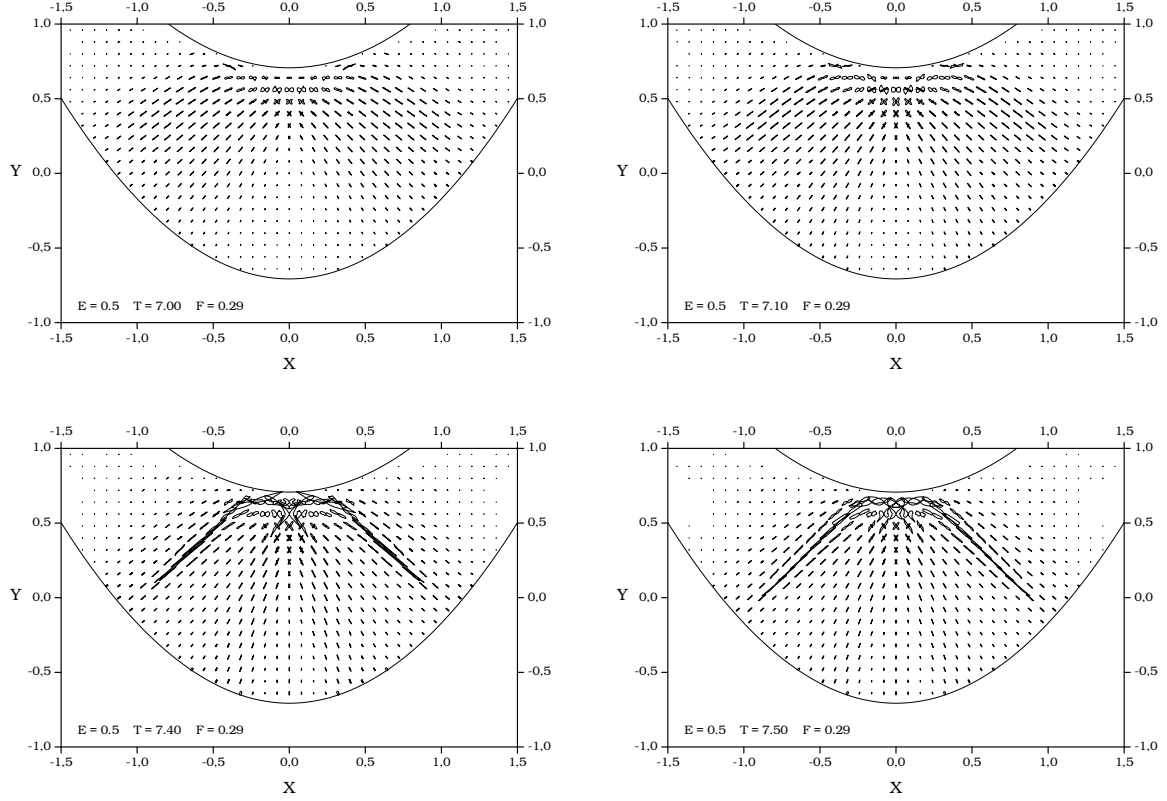


Figura 5.7: Probabilidade de retorno semiclássica, excluindo somente as trajetórias cuja parte imaginária de F é negativa, para $T = 7,0$, $7,1$, $7,4$ e $7,5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Procuramos, para cada ponto, três trajetórias complexas, utilizando, como trajetória tentativa, as órbitas periódicas *boomerang*, a_1 e a_2 . Entretanto, para a grande maioria dos pontos, encontramos somente uma trajetória complexa.

ximação semiclássica produz resultados espúrios, quando comparados com os resultados exatos. Quando usamos o critério de excluir trajetórias com $\text{Im}[F] < 0$, o resultado fica bem melhor, o que pode ser observado na figura 5.8b (idêntica à figura 5.7, para $T = 7,4$). No entanto, vemos que este critério não é suficiente para tornar os resultados semiclássicos fiéis aos exatos, pelo menos para uma determinada região. A idéia, então, é estudar tais parâmetros para verificar se eles estão próximos de uma cáustica, ou ponto focal, onde a fórmula semiclássica do propagador deixa de valer.

Por isso, na figura 5.9, mostramos uma comparação entre a probabilidade de retorno semiclássica para $T = 7,0$ e $T = 7,4$, considerando o ponto $q'_x = 0,72$ e $q'_y = 0,24$, em função de θ .

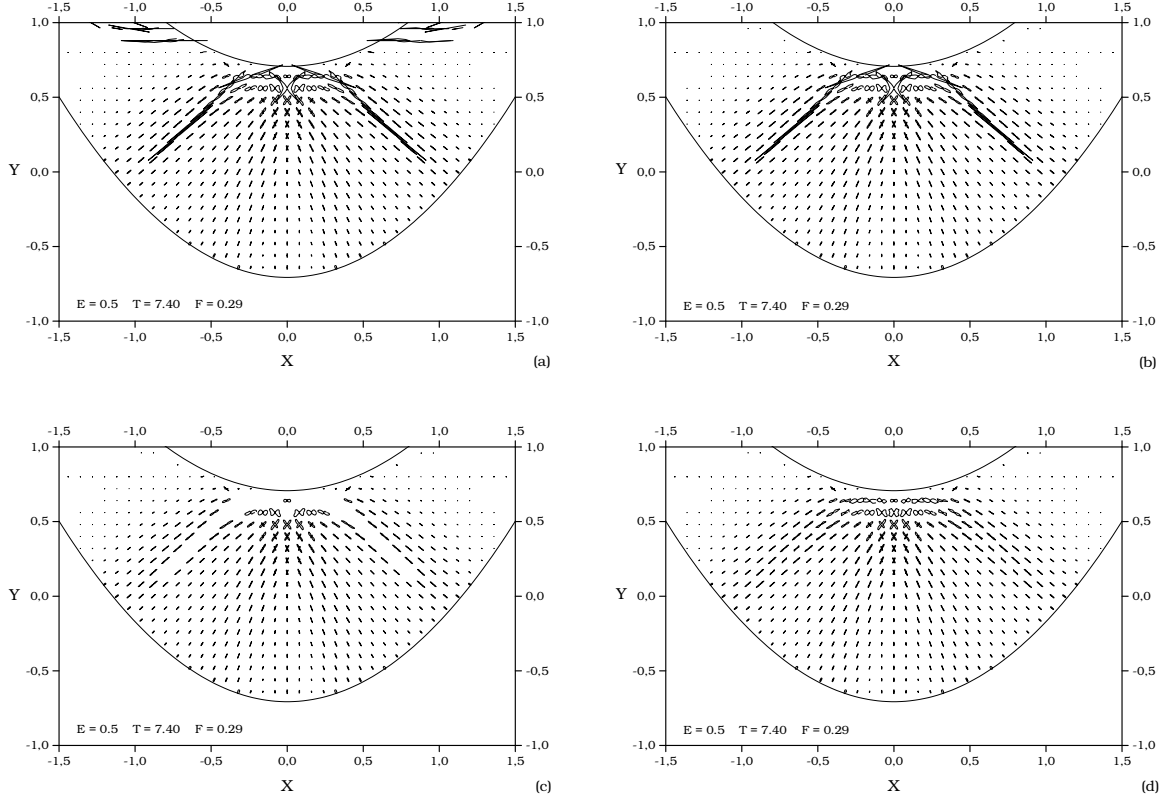


Figura 5.8: Probabilidade de retorno semiclássica para $T = 7,4$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$): (a) incluindo todas as contribuições das trajetórias complexas encontradas, exceto aquelas que geram, individualmente, $R > 1$; (b) todas as trajetórias com $\text{Im}[F] < 0$ foram removidas; (c) todos os pontos (q'_x, q'_y) próximos da cáustica foram removidos; (d) os pontos (q'_x, q'_y) foram mantidos e somente os ângulos θ perto das cáustica foram removidos.

Para $T = 7,4$, este é o ponto em que observamos o maior valor de R na figura 5.7, para $T = 7,4$, quando $\theta = 140^\circ$, o que pode ser confirmado pela figura 5.9a. Por outro lado, para $T = 7,0$, o comportamento de R é bastante suave. Para certificar-se de que a divergência observada em 5.9a não ocorra devido ao fato de $\text{Im}[F] < 0$, construímos o gráfico da figura 5.9b. Note como, em nenhum dos casos, a parte imaginária de F se torna negativa. Enfim, quando observamos o comportamento do pré-fator $|\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}|^{-1/2}$, concluímos que o pico observado no primeiro gráfico é uma consequência da (quase) divergência do pré-fator. Isto indica que as discrepâncias encontradas para $T = 7,4$ aparecem devido à proximidade de uma cáustica. O que confirma ainda mais a hipótese da presença da cáustica é que, somente para o ponto $\theta = 140^\circ$, encontramos duas

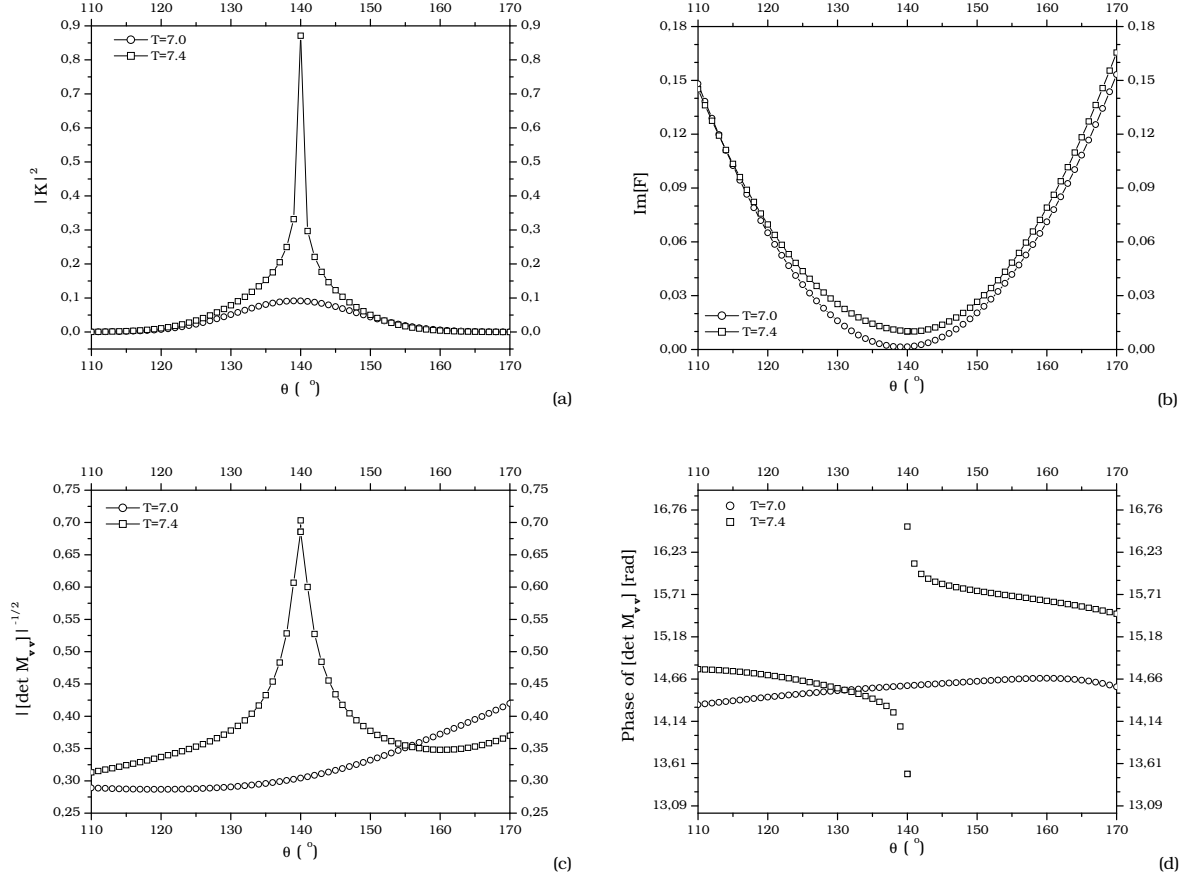


Figura 5.9: Comparação entre a probabilidade de retorno semiclássica para $q'_x = 0,72$ e $q'_y = 0,24$ em função de θ , para $T = 7.0$ (círculos) e $T = 7.4$ (quadrados). (a) Probabilidade de retorno; (b) Parte imaginária de F ; (c) pré-fator $|\det(M_{\mathbf{v}\mathbf{v}})|^{-1/2}$; (d) fase σ do pré-fator. Os gráficos (c) e (d) mostram que foram encontradas duas trajetórias complexas para $\theta = 140^\circ$, com diferença de fase σ igual a π .

trajetórias contribuindo para o propagador semiclássico (veja, no gráfico 5.9c, os dois quadrados em $\theta = 140^\circ$), o que sugere a existência de uma bifurcação de trajetórias, que são equivalentes às cústicas, para sistemas em duas dimensões espaciais. Na figura 5.9d, onde mostramos a fase do pré-fator, podemos ver claramente que existe uma família de trajetórias contribuindo sozinha para $\theta < 140^\circ$, e, outra, contribuindo sozinha para $\theta > 140^\circ$. Para $\theta = 140^\circ$, existe uma diferença de π entre a fase do pré-fator de cada família, exatamente como no caso de cústicas na representação de coordenadas.

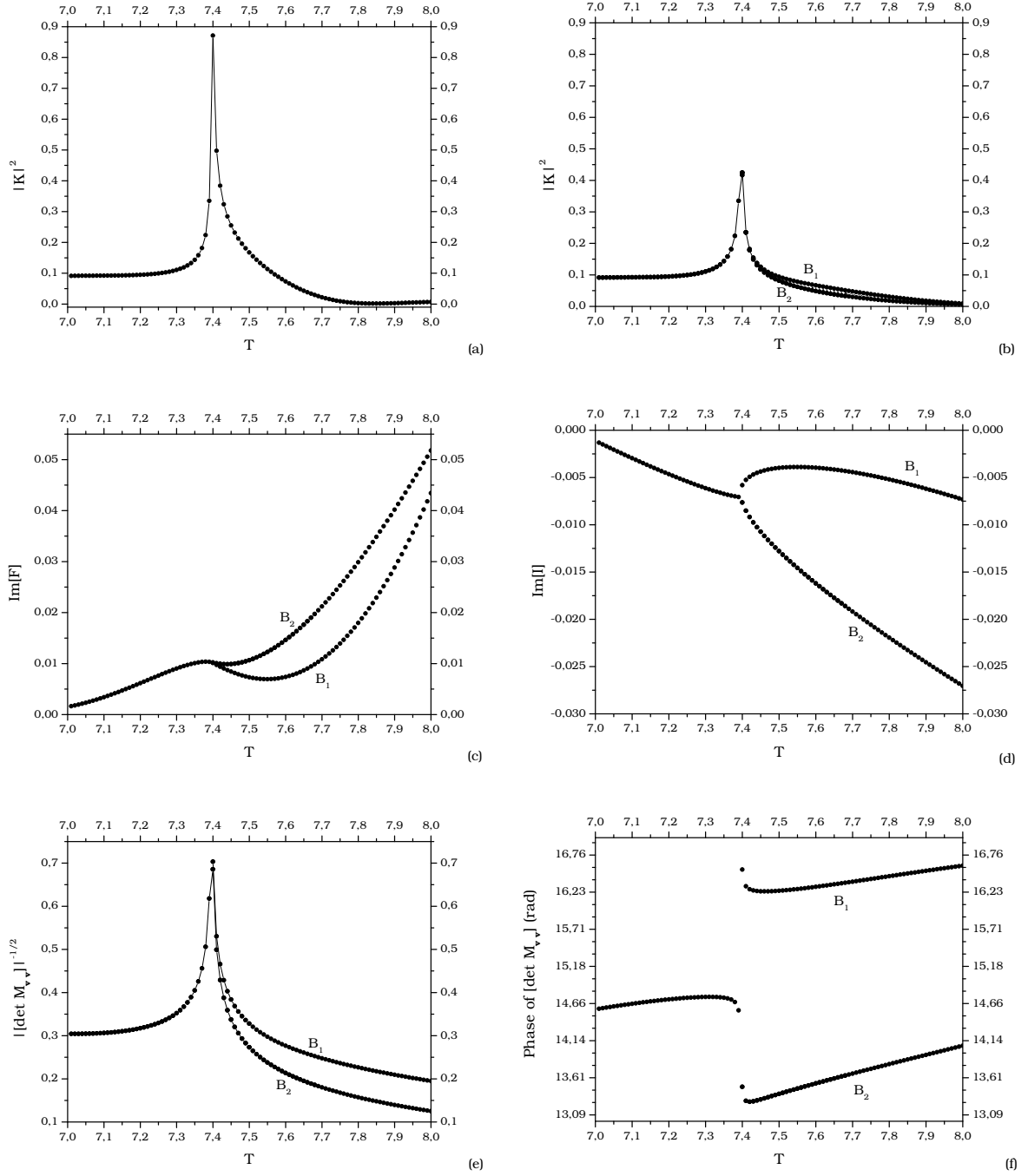


Figura 5.10: Bifurcação de trajetórias. Estudo da probabilidade de retorno semiclássica para $q'_x = 0,72$, $q'_y = 0,24$, e $\theta = 140^\circ$ em função de T : (a) Probabilidade de retorno total. (b)-(f) mostram a contribuição individual de cada trajetória: (b) probabilidade de retorno; (c) parte imaginária de F ; (d) parte imaginária de G ; (e) pré-fator; (f) fase do pré-fator. As ramificações após a bifurcação receberam os nomes B_1 e B_2 .

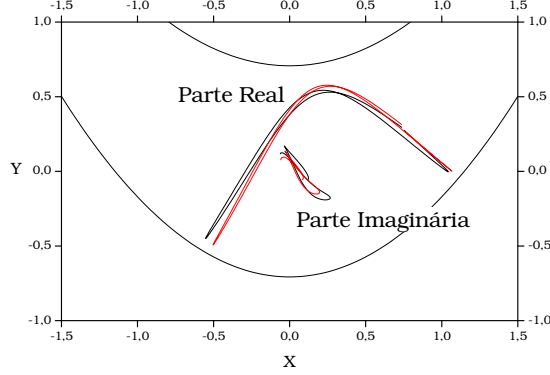


Figura 5.11: As duas trajetórias imediatamente após o ponto de bifurcação.

Para encerrar a discussão sobre este assunto, mostramos explicitamente a bifurcação na figura 5.10. Nela temos algumas quantidades envolvidas no cálculo da probabilidade de retorno para o ponto $q'_x = 0,72$, $q'_y = 0,24$ e $\theta = 140^\circ$, em função de T . Na figura 5.10a, a probabilidade de retorno tem um pico exatamente em $T = 7,4$, onde surge uma nova família de trajetórias, como indica os gráficos 5.10b-f. No gráfico 5.10b, mostramos as contribuições individuais de cada trajetória encontrada. Note como, antes de $T = 7,4$, havia somente uma família de trajetórias contribuindo, e, após este valor, duas famílias são candidatas a contribuir na fórmula semiclássica do propagador. Para $T = 7,4$, as contribuições das duas trajetórias encontradas são muito semelhantes entre si, devido ao fato delas serem muito próximas uma da outra, o que é verificado na figura 5.11. Neste gráfico, esboçamos as partes real e imaginária das coordenadas de posição destas duas trajetórias. Nas figuras 5.10c e 5.10d, mostramos as partes imaginárias de F e $\mathcal{G}$. Note como não há qualquer descontinuidade nestas funções. Elas apenas se ramificam na cáustica. Por último, nas figuras 5.10e e 5.10f, mostramos o pré-fator e sua fase. A bifurcação observada, tem uma provável conexão com a origem das famílias de órbitas periódicas assimétricas (a_1 e a_2), que bifurcam a partir da família de órbita simétrica (*boomerang*), que ocorre quando $E = 0,38$ e $T = 7,55$ [54]. A conexão entre a bifurcação de órbitas periódicas e bifurcação de trajetórias complexas demanda um novo estudo, que pretendemos realizar no futuro.

Vale comentar que, fixo q'_x, q'_y, θ , e E , as soluções das equações de Hamilton, satisfazendo $\mathbf{z}' = \mathbf{u}$ e $\mathbf{z}'^* = \mathbf{v}$, formam uma família de um único parâmetro T . Então, se encontramos valores $q_x^{(0)}, q_y^{(0)}, \theta^{(0)}$, onde um dos autovalores de $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$, λ , é zero, a dimensionalidade do conjunto de pontos singulares, onde $\lambda = 0$, pode ser obtida ao construir $\delta\lambda = a\delta q'_x + b\delta q'_y + c\delta\theta = 0$, onde a , b e c são derivadas de λ em relação a q'_x , q'_y e θ , calculadas em $q_x^{(0)}, q_y^{(0)}, \theta^{(0)}$. Como a , b e

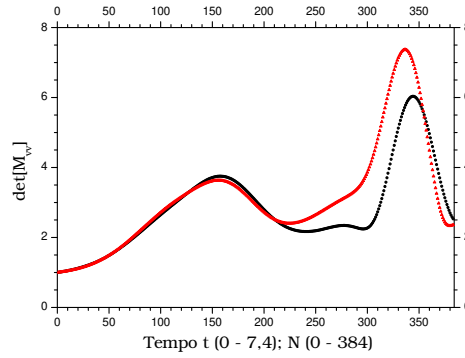


Figura 5.12: Mostramos a variação de $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$, em função de t , para as duas trajetórias da figura 5.11 (com a mesma correspondência de cores). Note como o valor do determinante começa em 1, pois, neste ponto, $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ se reduz à matriz identidade. Conforme t aumenta, o valor do determinante também aumenta. No entanto, quando $T \rightarrow 7,4$, ele sofre uma queda abrupta, que corresponde à divergência do pré-fator. Na abscissa, o tempo, que vai de 0 até 7,4, foi discretizado em 384 intervalos.

c são complexos, a equação $\delta\lambda = 0$ pode ser resolvida em função de $\delta\theta$ para $\delta q'_x = \delta q'_x(\delta\theta)$ e $\delta q'_y = \delta q'_y(\delta\theta)$. O que implica que o conjunto singular, onde ocorre a bifurcação, forma uma curva unidimensional no espaço q'_x, q'_y . Isto é compatível com o que observamos no gráfico 5.7 para $T = 7,4$; uma linha no formato da letra “V”, de cabeça para baixo. Vale comentar também que, como a nossa grade de pontos, q'_x, q'_y e θ , é muito espaçada, nós nunca atingimos exatamente a cáustica, apenas chegamos perto dela. Isto explica porque a região de discrepância, para $T = 7,5$, na figura 5.7, se alarga.

De volta a figura 5.8, mostramos, no item c, os mesmos resultados do item b, porém, retirando os pontos, q'_x, q'_y , próximos da bifurcação. No item d, os colocamos de volta e retiramos, um a um, os valores de θ onde notamos a divergência do pré-fator. Comparando a figura 5.8d com o resultado exato equivalente da figura 5.6, consideramos que o cálculo semiclássico, dentro do seu limite de validade, reproduz muito bem o cálculo exato. Ressaltamos que não calculamos a probabilidade de retorno para pontos perto de cáusticas. Apenas retiramos dos gráficos os resultados obtidos. No entanto, pretendemos, no futuro, realizar uma aplicação numérica da teoria apresentada no capítulo 3, para corrigir o valor da probabilidade de retorno na vizinhança de cáusticas.

Agora que ilustramos a bifurcação de trajetórias e mostramos a maneira pela qual lidamos com essa situação, apresentaremos rapidamente como pode ser visualizado o ponto focal. Para isso, usaremos as duas trajetórias mostradas na figura 5.11, trajetória 1 (curva preta) e trajetória

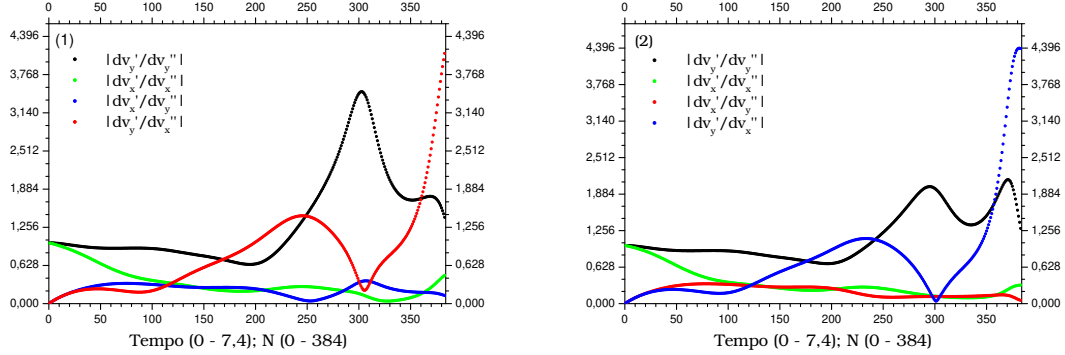


Figura 5.13: Mostramos, à esquerda, o módulo de $\partial v'_{r'}/\partial v''_r$ para a trajetória 1, que se refere à curva preta da figura 5.11, e, à direita, mostramos o mesmo para a trajetória 2, que se refere à curva vermelha da figura 5.11. Os índices r e r' podem assumir x ou y , conforme indica a legenda dos gráficos. Note, com o auxílio da equação (3.10), como a derivada parcial responsável pela divergência do pré-fator é $\partial v'_y/\partial v''_x$, para as duas trajetórias. Na abscissa, o tempo, que vai de 0 até 7,4, foi discretizado em 384 intervalos.

2 (curva vermelha), que são as mais próximas, uma da outra, que encontramos durante o nosso trabalho. Na figura 5.12, mostramos, para cada trajetória, o valor de $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ em função do tempo, calculado numericamente com o auxílio da equação (2.18). Note que, para $T = 0$, o valor do determinante é 1, para as duas trajetórias, uma vez que $M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ se reduz à matriz identidade. Conforme t aumenta, $\det M_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ começa a aumentar também, devido ao fato de estarmos trabalhando numa região bastante instável. No entanto, quando t se aproxima de 7,4, o valor do determinante sofre uma queda abrupta, indicando a presença da cáustica. Tendo em vista as equações (2.18) e (3.10), construímos, na figura 5.13, gráficos do módulo das derivadas parciais $\partial v'_{r'}/\partial v''_r$, para $r, r' = x$ ou y . Podemos verificar que, para ambas as trajetórias, a derivada parcial responsável pela divergência do pré-fator é $\partial v'_y/\partial v''_x$, o que significa dizer que, perto daquela região, uma pequena variação $\delta v'_y$, em torno da trajetória 1 ou 2, leva, aproximadamente, ao mesmo valor de v''_x . Note como as outras derivadas parciais continuam bem comportadas.

Nas figuras 5.14 e 5.15, mostramos a evolução temporal de trajetórias vizinhas à trajetória 1 e 2, respectivamente. O ponto focal aparece quando observamos a evolução da variável v_x das trajetórias vizinhas, construídas a partir da consideração $\delta u'_x = \delta u'_y = \delta v'_x = 0$ e $\delta v'_y \neq 0$, em torno da trajetória 1 ou 2. Isso é mostrado no gráfico superior direito das figuras 5.14 e 5.15. Note como os demais gráficos não apresentam ponto focal em 7,4. Note também como as órbitas inicialmente vizinhas à trajetória 1 ou 2 rapidamente se afastam delas, devido à situação ser caótica.

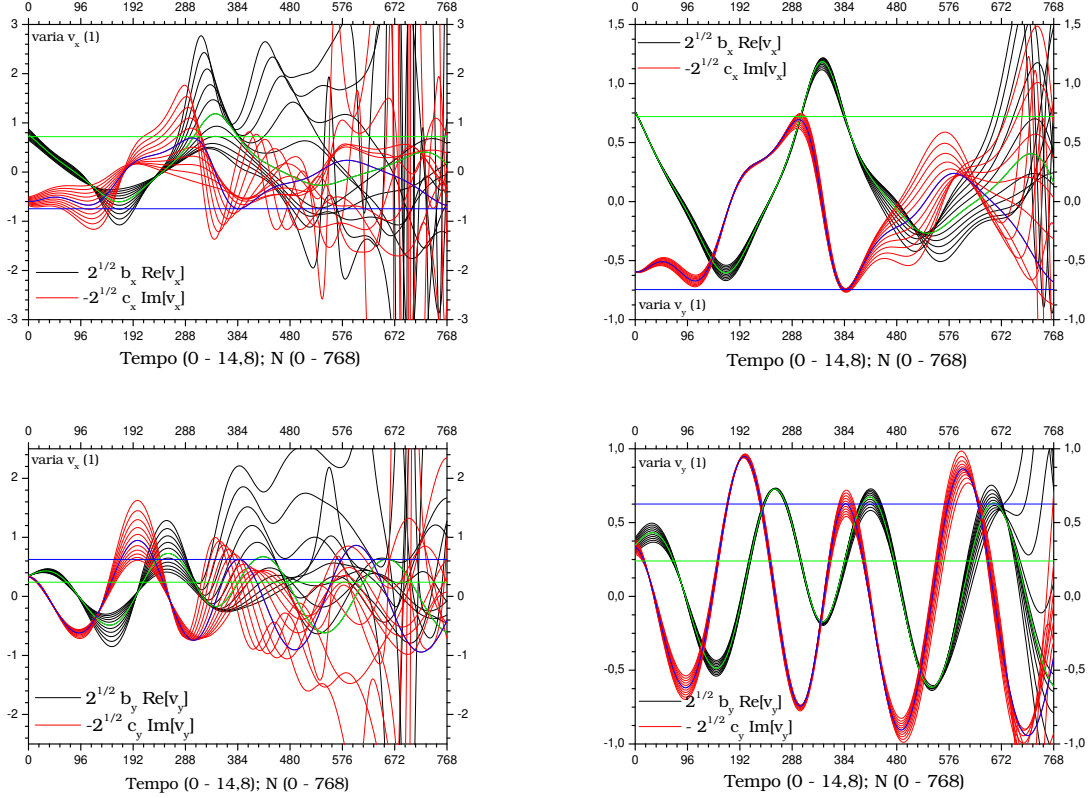


Figura 5.14: Evolução das trajetórias vizinhas à trajetória 1, que é representada pelas curvas azul e verde, no centro do feixe de trajetórias. No gráfico superior esquerdo, observamos a variável v_x (partes real e imaginária), quando evoluímos trajetórias vizinhas à 1, construídas com $\delta u'_x = \delta u'_y = \delta v'_y = 0$ e $\delta v'_x \neq 0$. Abaixo desse gráfico, observamos, para as mesmas trajetórias, a variável v_y . Note como não há nenhum ponto focal próximo de 7,4. Os gráficos do lado direito foram construídos de maneira análoga, sendo que as trajetórias vizinhas foram contruídas considerando que $\delta u'_x = \delta u'_y = \delta v'_x = 0$ e $\delta v'_y \neq 0$. Note como o gráfico superior apresenta um ponto focal nas redondezas de $t = 7,4$. As linhas horizontais, azul e verde, se referem ao valor da condição de contorno final $v''_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{0,72}{b_x} + i \frac{-0,7456}{c_x} \right)$ e $v''_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{0,24}{b_y} + i \frac{0,6257}{c_y} \right)$. Nos gráficos, a curva da trajetória 1 intercepta estas linhas horizontais em 7,4. Na abscissa, o tempo, que vai de 0 até 14,8, foi discretizado em 768 intervalos.

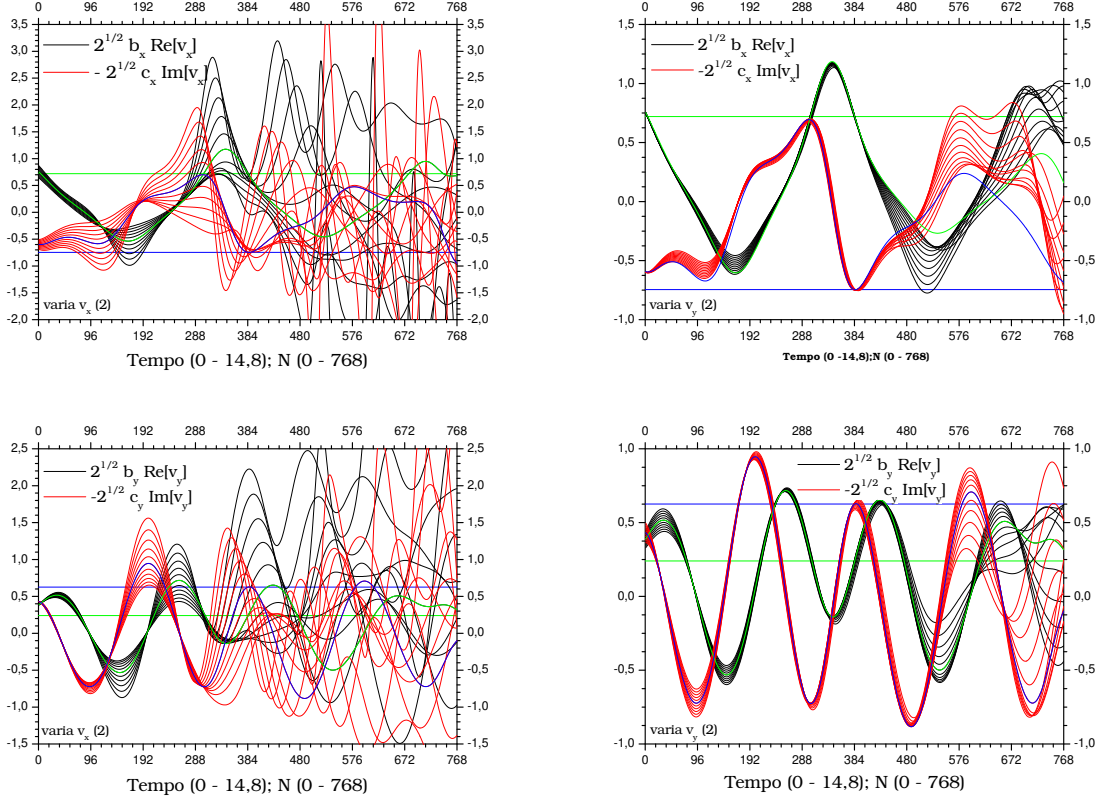


Figura 5.15: Evolução das trajetórias vizinhas à trajetória 2, que é representada pelas curvas azul e verde, no centro do feixe de trajetórias. No gráfico superior esquerdo, observamos a variável v_x (partes real e imaginária), quando evoluímos trajetórias vizinhas à 2, construídas com $\delta u'_x = \delta u'_y = \delta v'_y = 0$ e $\delta v'_x \neq 0$. Abaixo desse gráfico, observamos, para as mesmas trajetórias, a variável v_y . Note como não há nenhum ponto focal próximo de 7,4. Os gráficos do lado direito foram construídos de maneira análoga, sendo que as trajetórias vizinhas foram contruídas considerando que $\delta u'_x = \delta u'_y = \delta v'_x = 0$ e $\delta v'_y \neq 0$. Note como o gráfico superior apresenta um ponto focal nas redondezas de $t = 7,4$. As linhas horizontais, azul e verde, se referem ao valor da condição de contorno final $v''_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{0,72}{b_x} + i \frac{-0,7456}{c_x} \right)$ e $v''_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{0,24}{b_y} + i \frac{0,6257}{c_y} \right)$. Nos gráficos, a curva da trajetória 2 intercepta estas linhas horizontais em 7,4. Na abscissa, o tempo, que vai de 0 até 14,8, foi discretizado em 768 intervalos.

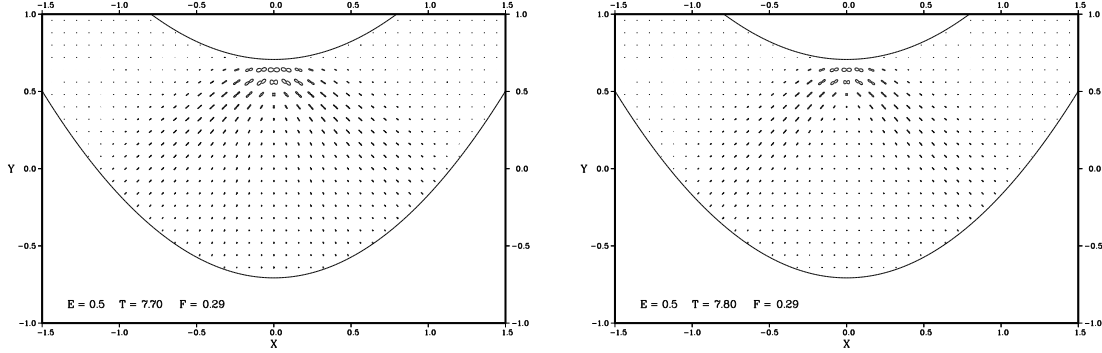


Figura 5.16: Probabilidade de retorno exata para $T = 7,7$ and $7,8$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$).

5.5 Região Distante das Órbitas Periódicas

Mostramos, na figura 5.16, os resultados exatos da probabilidade de retorno para $T = 7,7$ e $7,8$. Nestes gráficos, a imagem quântica das três trajetórias, *boomerang*, a_1 e a_2 , dão lugar a uma nova estrutura, parecida com a letra “V” de cabeça para baixo. Não fosse o valor de T estar tão distante do período da órbita *boomerang*, poderíamos dizer que trata-se da sua imagem quântica. Mas, como não é este o caso, concluímos que estamos numa região de parâmetros, onde não se forma nenhuma imagem de órbita real. No entanto, os resultados semiclássicos conseguem reproduzir este tipo de estrutura, como observamos na figura 5.17. Para construí-los, procuramos três trajetórias complexas, sendo que, cada uma, foi convergida a partir de uma das órbitas reais, *boomerang*, a_1 e a_2 . Nesta figura, para a região onde a probabilidade de retorno é evidentemente maior, encontramos duas trajetórias complexas, o que já poderíamos prever a partir da análise da figura 5.10b. Note como existem valores de R muito altos, quando comparados ao gráfico exato, mesmo já excluídas as trajetórias com parte imaginária de F negativa e pontos próximos de cáusticas.

Então, vendo que o resultado semiclássico não é tão fiel ao exato, podemos nos questionar sobre a inclusão de mais de uma trajetória no cálculo da probabilidade de retorno. Afinal, após a bifurcação, somente uma trajetória deve contribuir, pois, se considerarmos as duas, teremos necessariamente uma descontinuidade. Para estudar esta questão, construímos, na figura 5.18, gráficos da probabilidade de retorno ao longo da linha $q'_y = 2q'_x/3$, com $0 \leq q'_x \leq 1$, para um ângulo fixo $\theta = \theta_0 = 140^\circ$, $E = 0,5$, e $7,0 \leq T \leq 8,0$. Esta linha é um corte na região da bifurcação, que aparece, por exemplo, na figura 5.7, para $T = 7,4$. Na figura 5.18, a bifurcação aparece como um pico em $T \approx 7,4$ e $q'_x = 0,55$. Para $\theta \neq \theta_0$, a bifurcação ocorre em diferentes

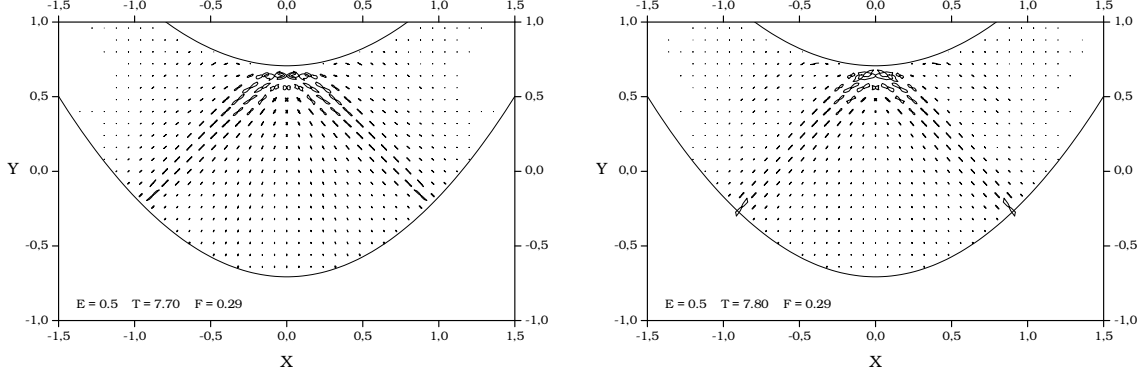


Figura 5.17: Probabilidade de retorno semiclássica, para $T=7,7$ and $7,8$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Procuramos, para cada ponto, três trajetórias complexas, utilizando, como trajetória tentativa, as órbitas periódicas *boomerang*, a_1 e a_2 . Já foram excluídas as trajetórias com $\text{Im}[F] < 0$ e os pontos perto de cáusticas.

pontos do plano $T - q'_x$. As duas linhas cinzas são a projeção, neste plano, dos pontos de bifurcação em outros valores de θ . Note que, à direita da linha cinza, mais de uma trajetória foi encontrada, enquanto que, à esquerda, somente uma foi encontrada. O motivo pelo qual não há divergência quando atravessamos a linha cinza, longe do ponto de bifurcação, é porque, como a cáustica não se localiza exatamente ali, as duas trajetórias não são tão próximas, de modo que a aproximação quadrática ainda é válida. Na figura 5.18a, mostramos a probabilidade de retorno devido a somente uma família de trajetórias, enquanto que, na figura 5.18b, a mostramos para a outra família. A região onde encontramos as duas contribuições formam duas folhas sobrepostas no plano $T - q'_x$. Se considerarmos as duas famílias de trajetórias para o cálculo de R , encontraremos o resultado apresentado na figura 5.18c, que, como era de se esperar, possui descontinuidades. Como a família do gráfico 5.18a é contínua quando atravessamos a linha cinza superior, e a do gráfico 5.18b, pela linha inferior, pensamos que existe, na região onde encontramos duas contribuições, uma linha que separa a região onde vale cada uma das contribuições. Esta é a linha de Stokes para o nosso problema. Como critério para encontrá-la, baseados na discussão do capítulo 4, imporemos continuidade para o valor de R .

A figura 5.19a e 5.19b, mostram a parte imaginária de F para as mesmas trajetórias das figuras 5.18a e 5.18b, respectivamente, no mesmo plano $T - q'_x$. Chamaremos de F_1 e F_2 as partes imaginárias das trajetórias das figuras 5.18a e 5.18b, respectivamente. Os dois mínimos onde $\text{Im}(F) \approx 0$, correspondem às órbitas periódicas para $T \approx 7,1$ e $T \approx 7,4$. Na figura 5.19c

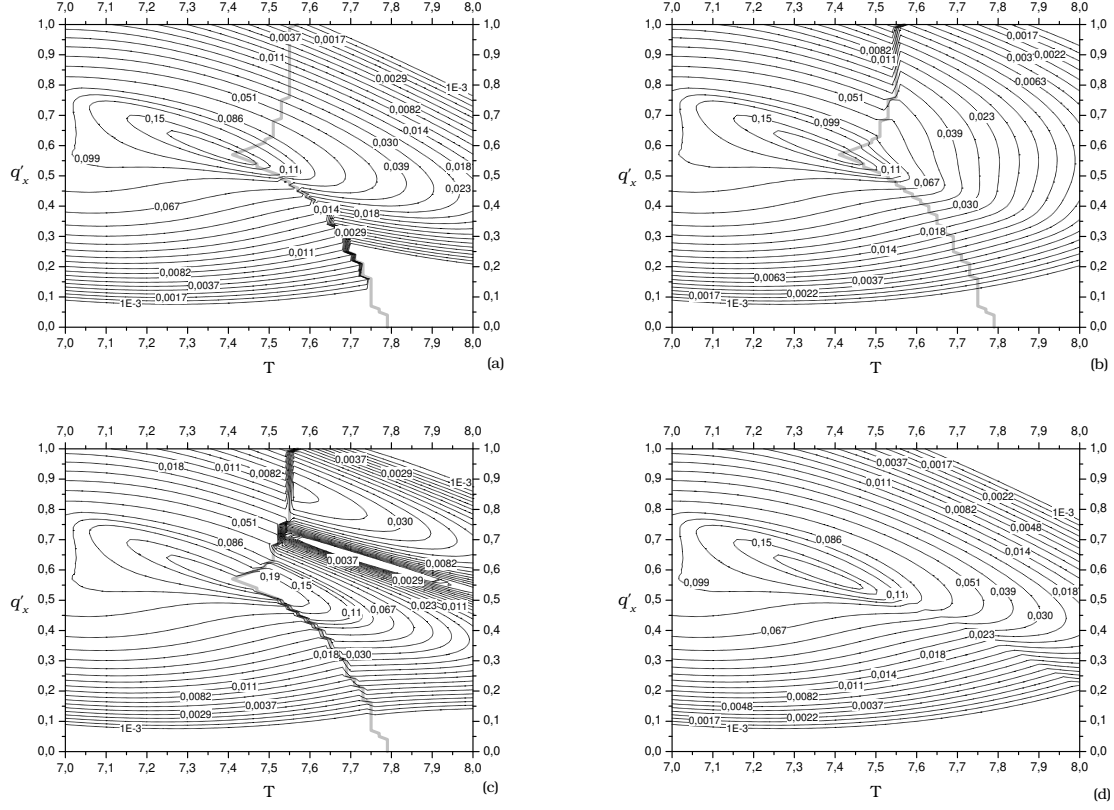


Figura 5.18: Probabilidade de retorno semiclássica no plano $T - q'_x$, para $\theta = 140^\circ$, $q'_y = 3q'_x/2$ e $E = 0,5$. O pico existente em $T \approx 7,4$ e $q'_x \approx 0,55$ é o ponto de bifurcação. À direita das linhas cinzas, existem duas famílias de trajetórias complexas candidatas a contribuir para a fórmula do propagador. A contribuição da primeira família (a) é contínua quando atravessamos a linha cinza superior, e a segunda família (b), quando atravessamos a linha cinza inferior. No item (c) ambas as contribuições são levadas em consideração, e, no item (d), para todo o plano, somente uma trajetória é considerada, de acordo com o critério de continuidade, para localização das linhas de Stokes (figura 5.19).

mostramos a diferença entre as duas partes imaginárias, $\Delta F = \text{Im}(F_1) - \text{Im}(F_2)$. Existem duas linhas que emanam do ponto de bifurcação, onde $\Delta F = 0$. Uma que vai inicialmente para cima F_+ e outra que vai para baixo F_- . Estas linhas dividem a região onde uma contribuição domina sobre a outra. Para assegurar continuidade, devemos considerar uma das contribuições e trocar pela outra exatamente onde as duas são equivalentes. Portanto, nós não devemos considerar somente a diferença ΔF , mas a diferença entre as duas contribuições para a probabilidade de retorno

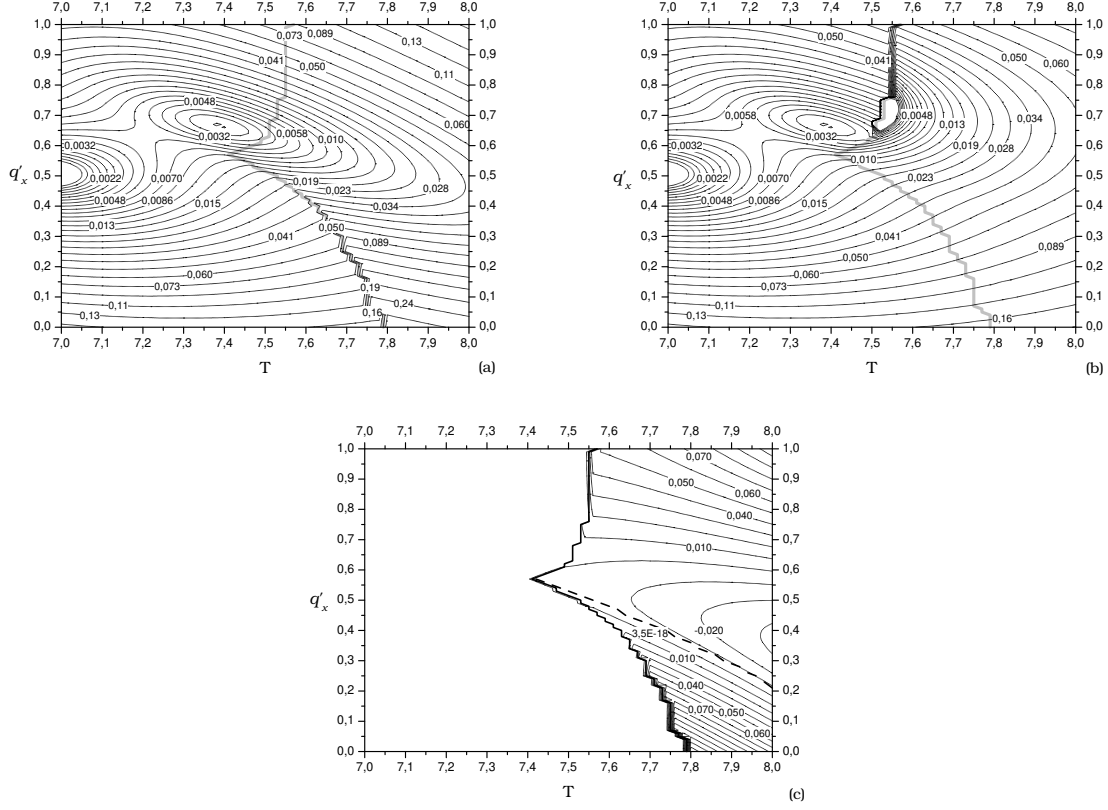


Figura 5.19: Parte imaginária de F , no plano $T - q'_x$, para o resultado da figura 5.18: (a) para a família de trajetória usada em 5.18a; (b) para a família de trajetória usada em 5.18b; (c) diferença entre as duas partes imaginárias, mostrando a linha de Stokes (linha tracejada), onde obtemos continuidade.

$\Delta R = R_1 - R_2$. A linha tracejada $\Delta R = 0$ se localiza muito perto de F_- , como podemos ver na figura 5.19c. Abaixo da linha tracejada, somente a família da figura 5.18b deve ser considerada, e, acima dela, consideraremos somente as trajetórias da figura 5.18a. O resultado final deste procedimento é mostrado na figura 5.18d. Note como obtemos uma figura contínua e suave para o resultado semiclássico. Nas figuras 5.18a e 5.18b a linha divisória é vista como o local onde as curvas de nível mudam suas curvaturas repentinamente.

Note que a linha cinza da figura 5.18a, que divide a região onde uma ou duas trajetórias foram encontradas, termina verticalmente em $T \approx 7.55$. Este é exatamente o período de bifurcação da família da órbita *boomerang* para a família de a_1 e a_2 , evidenciando uma conexão entre bifurcação de órbitas periódicas e bifurcação de trajetórias complexas.

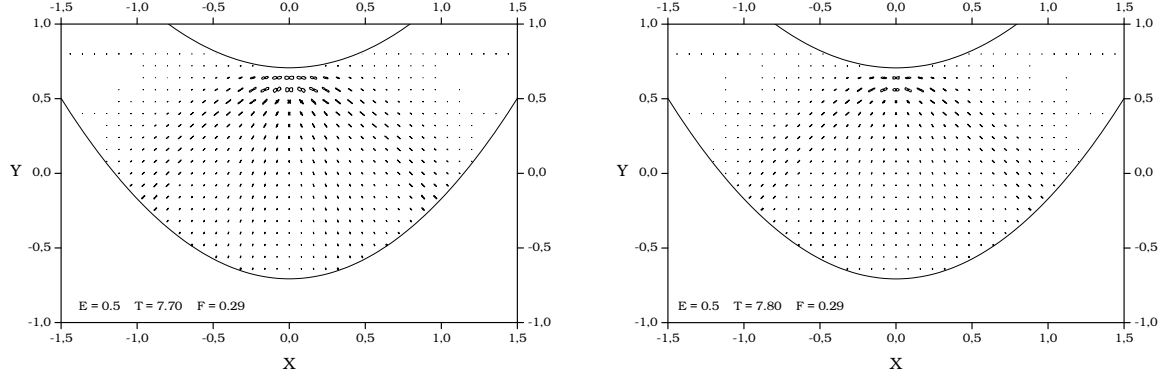


Figura 5.20: Probabilidade de retorno semiclássica para $T = 7,7$ e $7,8$, considerando uma única contribuição ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Neste caso, não encontramos trajetórias não-contribuintes.

Apesar da análise acima elucidar o intercâmbio entre as trajetórias depois da bifurcação, isto não indica um modo simples e direto para decidir qual trajetória deve contribuir, quando construímos, por exemplo, os gráficos da figura 5.17. No entanto, isto sugere que procuremos uma única trajetória. Para decidir como fazer a busca, utilizaremos como trajetória tentativa aquela que passar mais próxima, no espaço de fase, do ponto em que pretendemos calcular a probabilidade de retorno. Voltamos, portanto, aos resultados semiclássicos e verificamos que este método é eficiente. Como prova disto, na figura 5.20, mostramos a probabilidade de retorno para $T = 7,7$ e $7,8$, considerando somente uma trajetória. Comparado à figura 5.16, verificamos que, mesmo quando as órbitas periódicas estão longe, o resultado semiclássico é muito bom.

Antes de encerrar esta seção, observaremos duas trajetórias encontradas no ponto $q'_x = q'_y = 0,4$ e $\theta = 140^\circ$ do gráfico 5.17, para $T = 7,7$. Trata-se de um dos pontos onde duas trajetórias complexas foram encontradas, sendo que uma delas teve que ser eliminada. A idéia é ilustrar como ficam as variáveis complexas α_x e α_y , introduzidas na seção 2.3. As duas trajetórias encontradas podem ser geradas pelos valores iniciais: $\alpha_x^{(1)}(0) = 0,4916 - i0,3267$, $\alpha_y^{(1)}(0) = -0,4238 + i0,658$, $\alpha_x^{(2)}(0) = 0,3934 - i0,5134$ e $\alpha_y^{(2)}(0) = 0,132 + i0,046$, onde $^{(1)}$ e $^{(2)}$ se refere a cada uma das trajetórias. Fixando $\alpha_y(0)$ e variando as partes real e imaginária de $\alpha_x(0)$, num intervalo de -1 até 1, podemos calcular as curvas de nível da parte imaginária de F de cada trajetória gerada, no plano $\alpha_x(0)$, considerando uma evolução até $T = 7,7$. Foi o que fizemos nas figuras 5.21 e 5.22, para as trajetórias 1 e 2, respectivamente. Note como o relevo de F é muito complicado. A marca $\times$, nas figuras 5.21 e 5.22, correspondem, respectivamente, aos valores $\alpha_x^{(1)}(0) = 0,4916 - i0,3267$, e $\alpha_x^{(2)}(0) = 0,3934 - i0,5134$, e, portanto, indica a localização das trajetórias 1 e 2. Note, nos

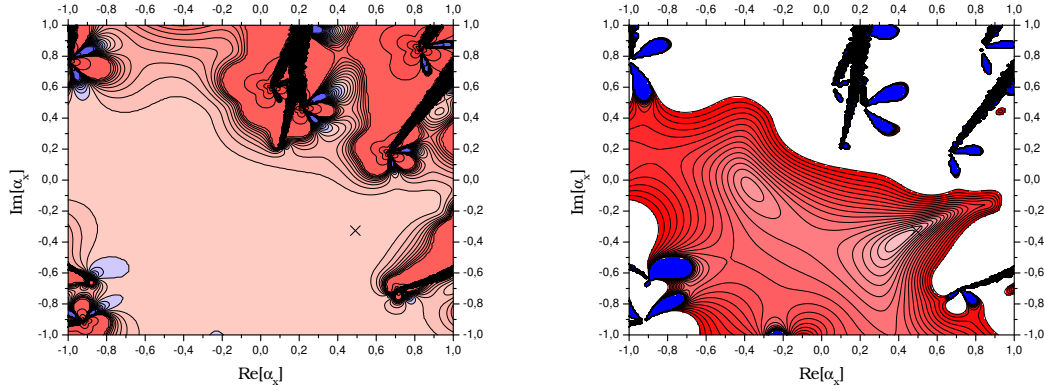


Figura 5.21: Curvas de nível de $\text{Im}[F]$ no plano $\alpha_x(0)$. O valor de α_y inicial é $-0,4238 + i 0,658$, que corresponde, quando $\alpha_x(0) = 0,4916 - i0,3267$, à trajetória 1, que foi encontrada no ponto $q'_x = q'_y = 0,4$ e $\theta = 140^\circ$ do gráfico 5.17, para $T = 7,7$. Os valores positivos de $\text{Im}[F]$ correspondem a cor vermelha (quanto maior a tonalidade, maior o valor), e os valores negativos correspondem a cor azul (quanto maior a tonalidade, menor o valor). Os pontos pretos correspondem aos valores de $\alpha_x(0)$ que o programa não conseguiu evoluir. Para o gráfico da esquerda, a região de cor vermelha mais clara corresponde a $\text{Im}[F] < 1$. Essa região é detalhada no gráfico do lado direito. De fato, todas as curvas de nível são da função $s \log\{\text{Im}[F]\}$, onde s é o sinal de $\text{Im}[F]$. Isso faz com que o relevo desses gráficos sejam mais acidentados do que já aparentam ser. O símbolo $\times$ indica o valor de $\alpha_x(0)$ correspondente à trajetória 1.

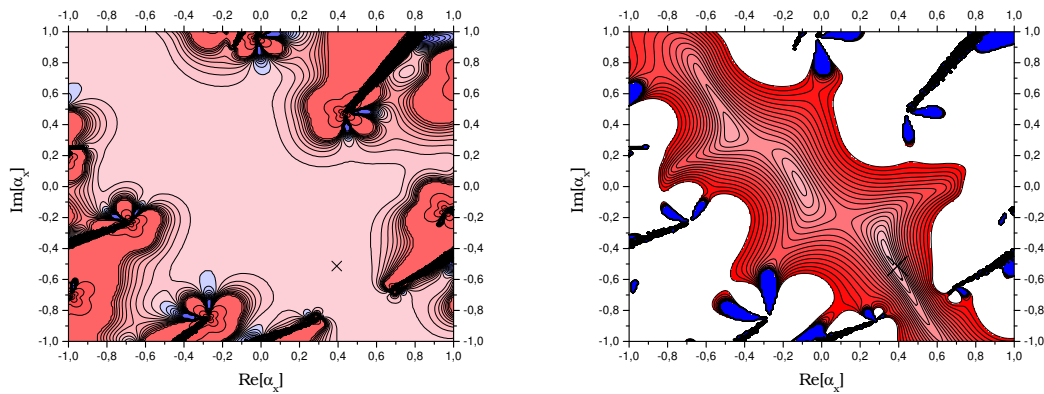


Figura 5.22: Idem à figura anterior para a trajetória 2, que corresponde à $\alpha_y(0) = 0,132 + i0,046$.

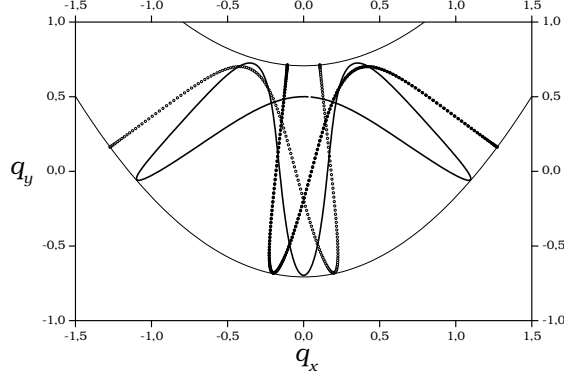


Figura 5.23: Órbitas periódicas do potencial Nelson para $T \approx 11$. A trajetória simétrica (linha continua) tem período igual à $T = 11,09$. Para as outras duas, $T = 11,87$.

gráficos à direita, que parece existir uma cáustica próxima desses ponto. No entanto, lembramos que o valor de $\alpha_y(0)$ é diferente para cada gráfico, o que dificulta qualquer tipo de análise. Veja também que as região onde $\text{Im}[F] < 0$ é sempre vizinha a uma cáustica, conforme afirmava as referências [16, 21].

5.6 Propagador para Períodos mais Altos

Para períodos mais altos, $T \approx 11$, podemos localizar três órbitas periódicas do potencial Nelson, como mostramos na figura 5.23. Nessa região, finalmente encontramos mais de uma trajetória contribuindo de fato para o valor do propagador. Lembramos que, até o momento, quando encontramos mais de uma trajetória, uma teve que ser excluída por critério de continuidade.

Nas figuras 5.24, mostramos o resultado exato e o semiclássico para $T = 11,0$. Note como a imagem das órbitas periódicas volta a aparecer. A comparação entre os dois gráficos é muito boa. Para este valor de T , inclusive, sequer encontramos trajetórias cuja parte imaginária de F é negativa. Para encontrar as trajetórias complexas envolvidas neste cálculo, procuramos três trajetórias complexas, uma para cada uma das trajetórias mostradas no gráfico 5.23. Encontramos diversos pontos onde duas trajetórias contribuíam de maneira relevante, demonstrando que, em alguns casos, a consideração de mais de uma trajetória é importante.

Apesar dos resultados semiclássicos concordarem muito bem com os exatos, existe uma estrutura no gráfico exato que não foi reproduzida pelos resultados semiclássicos. Note, para $q'_x \approx 0,65$ e $q'_y \approx -0,5$, um aumento na probabilidade de retorno exata na direção $\theta = 140^\circ$. Fizemos di-

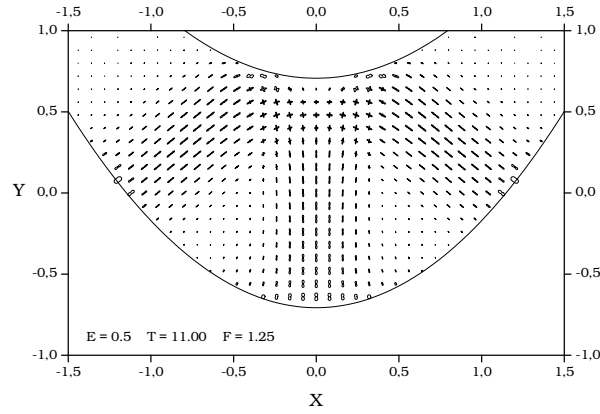
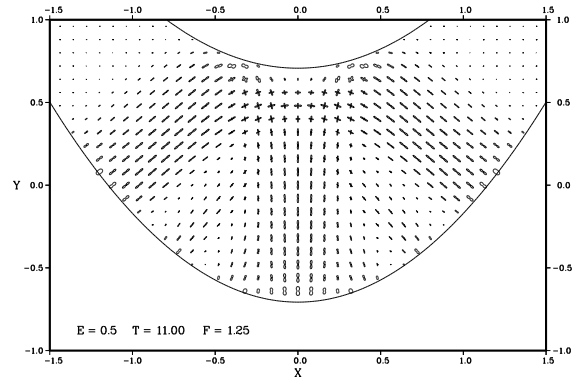


Figura 5.24: Probabilidade de retorno exata (acima) e semiclássica (abaixo) para $T = 11,0$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F = 0,064$). Os resultados semiclássico forma obtidos. Procuramos, para cada ponto, quatro trajetórias complexas, utilizando, como trajetória tentativa, as órbitas periódicas da figura 5.23.

versas tentativas, baseadas na convergência de outras órbitas periódicas relativamente próximas, para reproduzir esta estrutura. Como não conseguimos reproduzi-la, pensamos que ela possa ter relação com trajetórias sem conexão com as órbitas periódicas. Se este for o caso, justificamos o fato do método numérico empregado não encontrá-la.

5.7 Resultados Filtrados

Nesta seção, colocaremos todos os resultados semiclássicos realizados, para a comparação com os resultados quânticos. Para construir os gráficos procedemos da seguinte maneira.

- Para $T = 3, 5$: buscamos somente uma trajetória complexa, a partir das trajetórias do oscilador harmônico simples;
- Para $T = 4, 1, \dots, 4, 7$: buscamos uma única trajetória complexa, a partir da órbita vertical;
- Para $T = 6, 2, \dots, 7, 2$: buscamos somente uma trajetória complexa, a partir da órbita *boomerang*. Para os valores de $T = 7, 0$ e $7, 1$, note como, praticamente, não há diferenças com relação à figura 5.7, onde procuramos três trajetórias. Inclusive, pode-se verificar que as maiores discrepâncias com o cálculo exato estão nestas diferenças, o que sugere que uma das trajetórias encontradas não deve ser considerada, mesmo tendo parte imaginária de F positiva. Isto reforça a idéia de que para valores de T entre 7 e 8, onde aparecem cáusticas, devemos considerar somente uma trajetória;
- Para $T = 7, 3, \dots, 7, 7$: buscamos uma única trajetória complexa, a partir da órbita mais próxima: *boomerang*, a_1 e a_2 .
- Para $T = 8, 8, \dots, 9, 0$: buscamos uma única trajetória complexa, a partir da órbita vertical (dois períodos);
- Para $T = 11, 0, \dots, 11, 8$: buscamos três trajetórias complexas, a partir das órbitas da figura 5.23;

Como vemos, o cálculo numérico realizado no potencial Nelson possibilitou uma ilustração bastante completa do estudo realizado nos quatro primeiros capítulos. Apesar de todas as dificuldades apresentadas, a probabilidade de retorno semiclássica reproduz muito bem o resultado quântico.

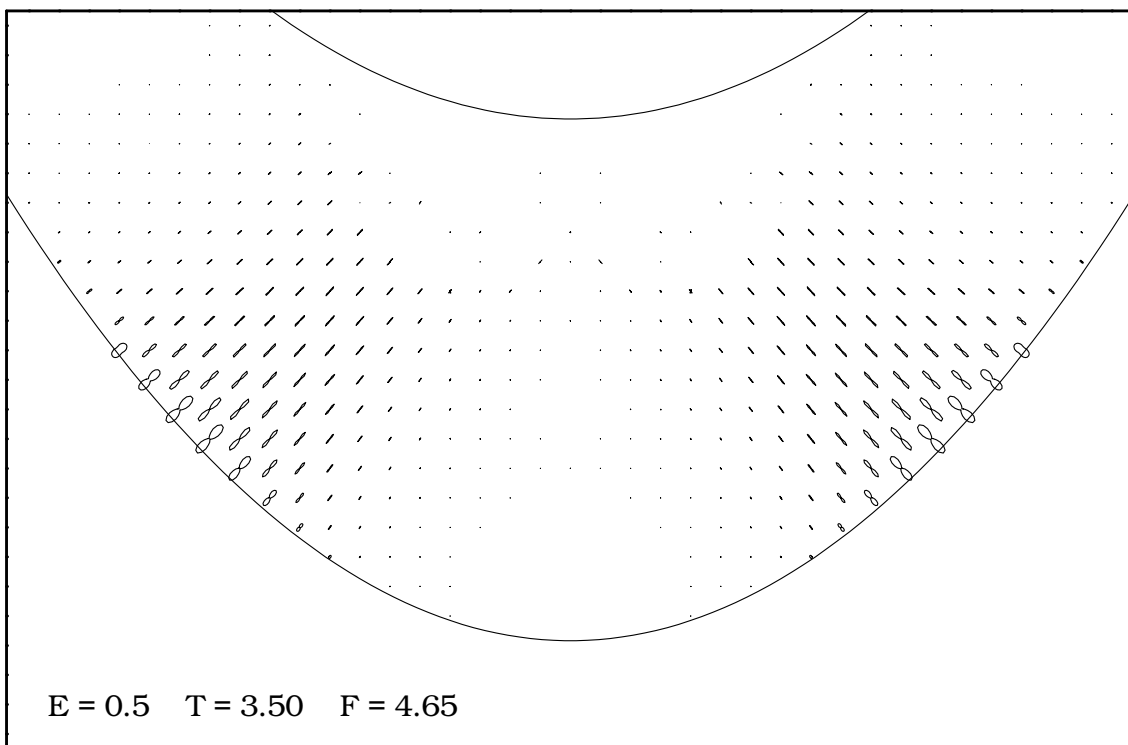
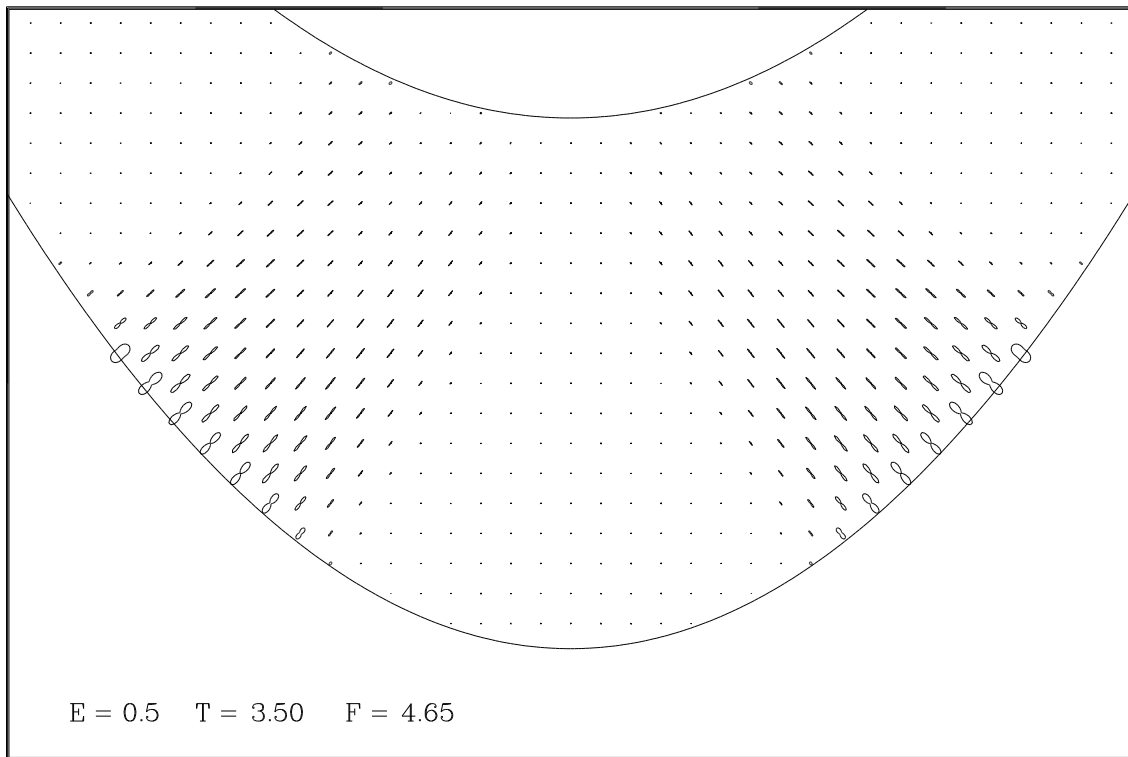


Figura 5.25: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 3,5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,017$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da solução do oscilador harmônico simples.

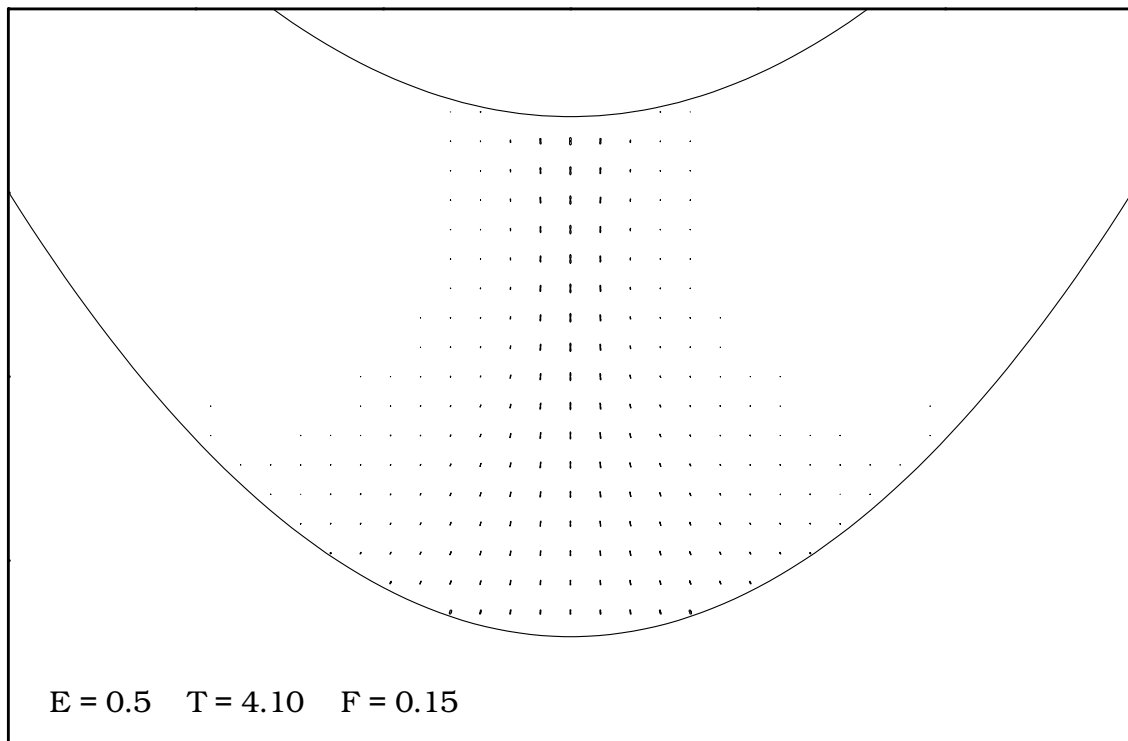
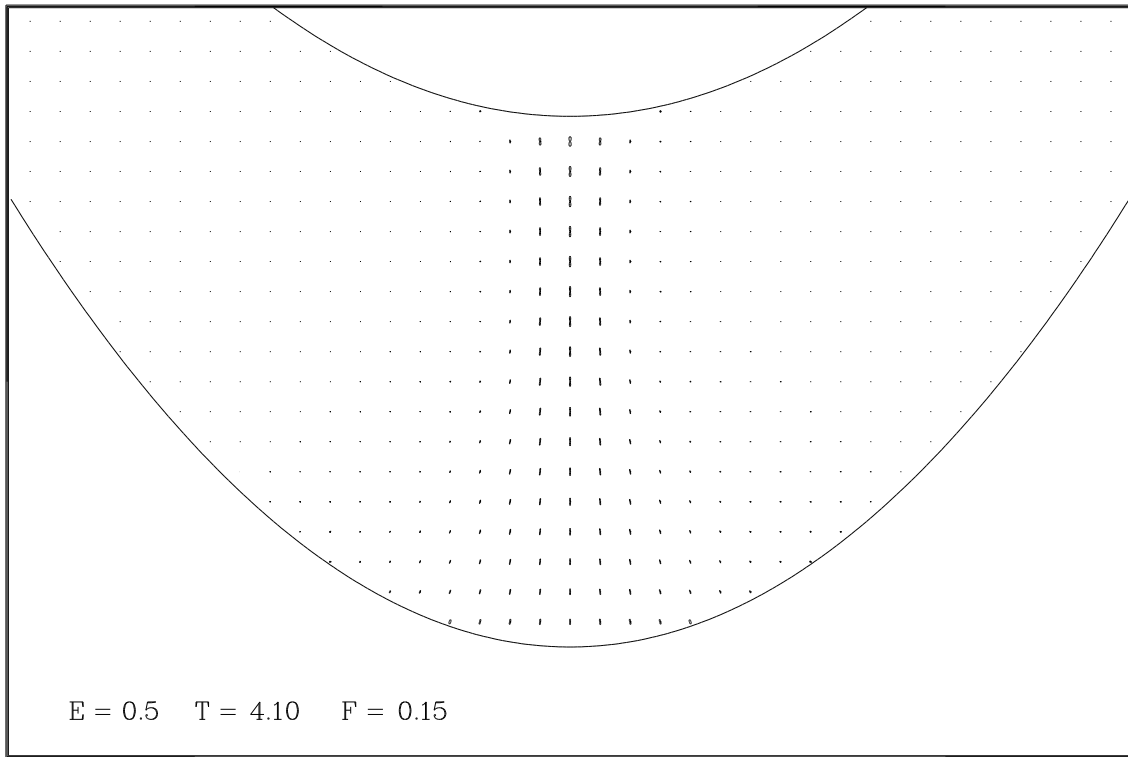


Figura 5.26: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 4,1$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

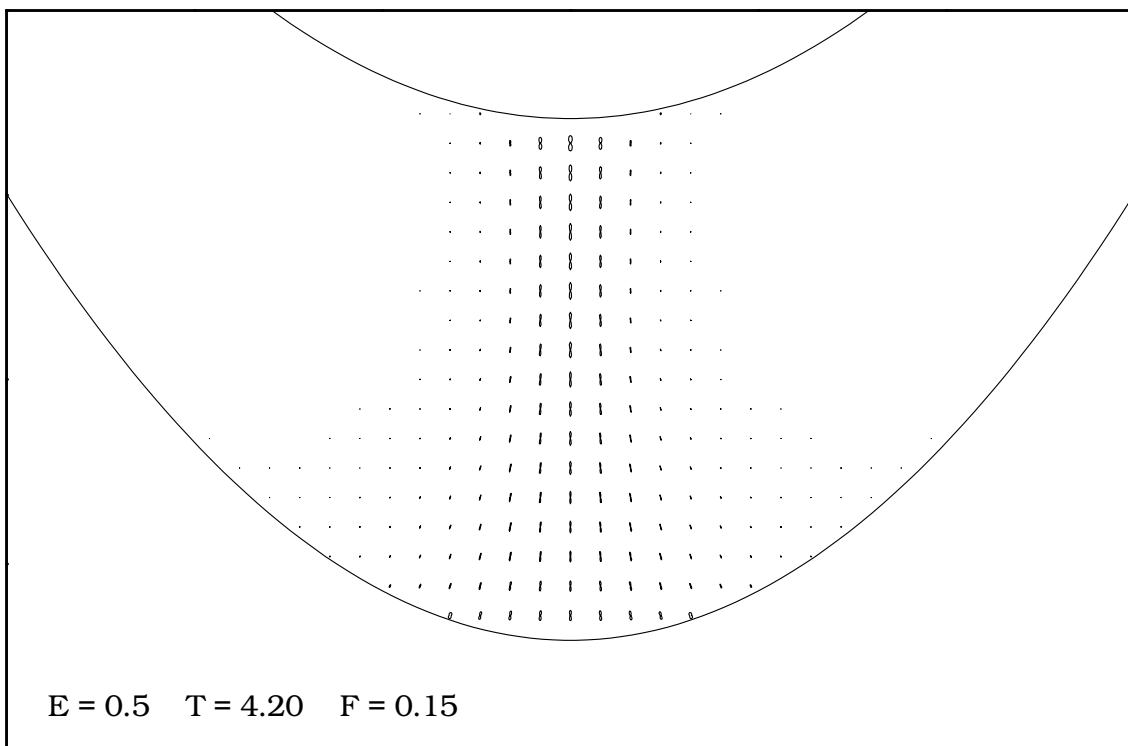
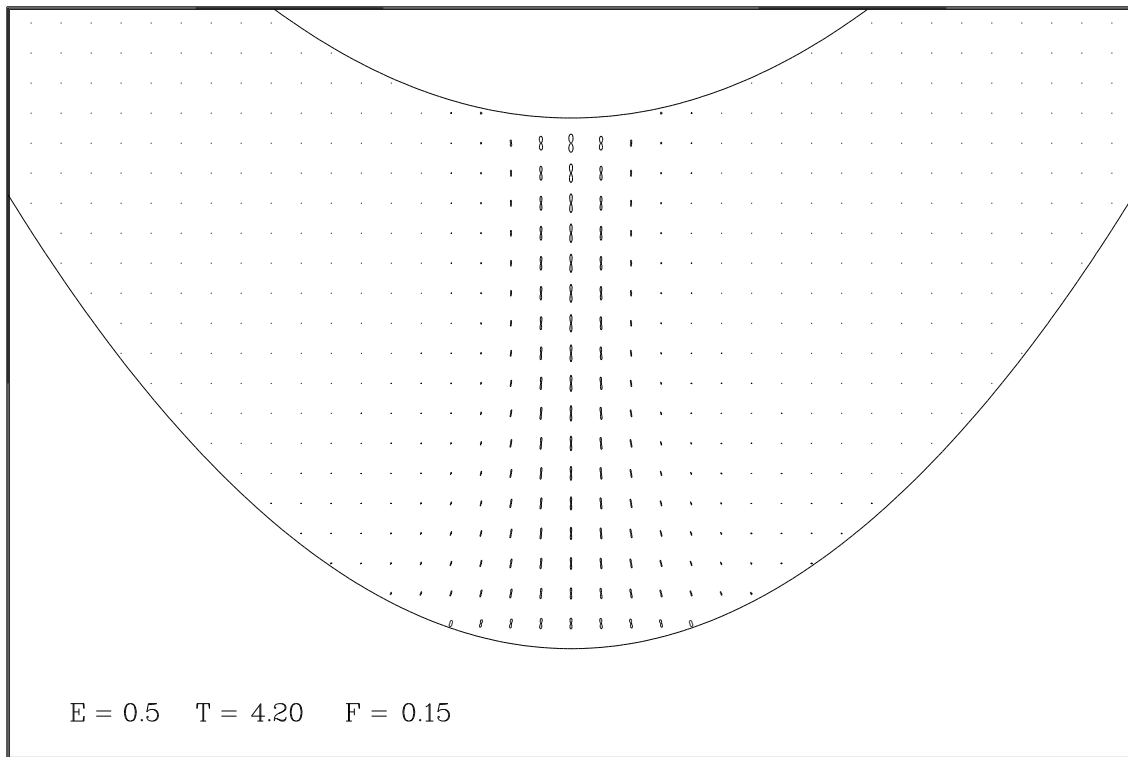


Figura 5.27: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 4,2$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

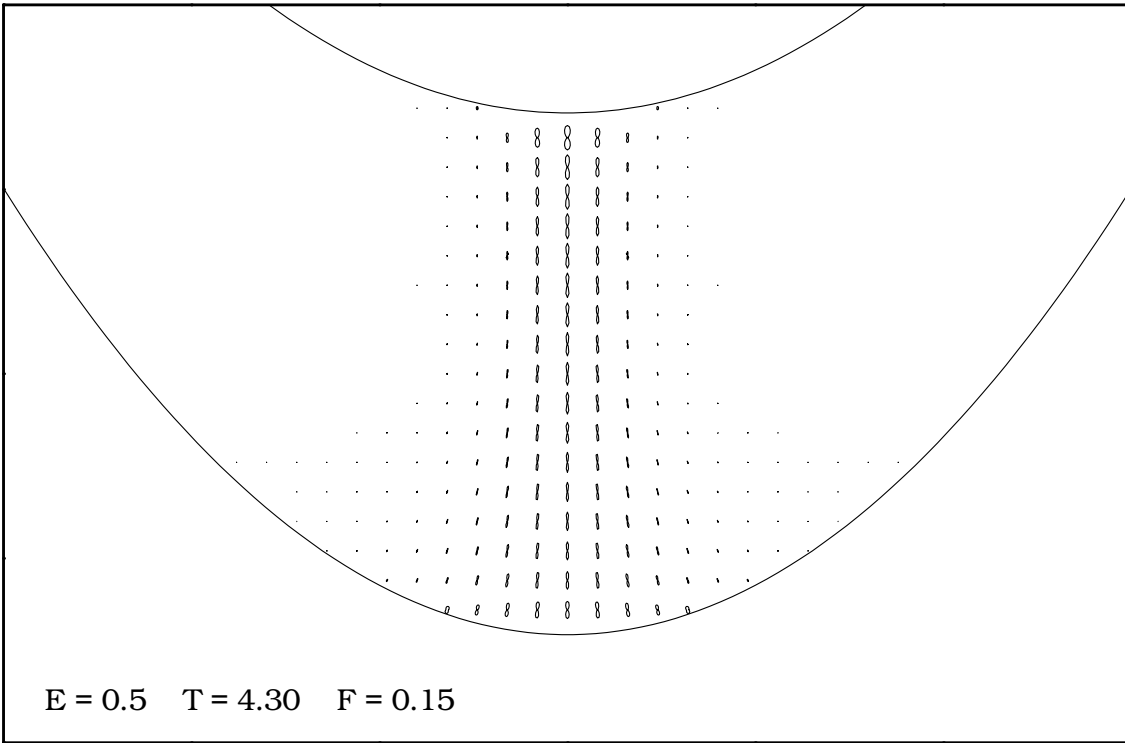
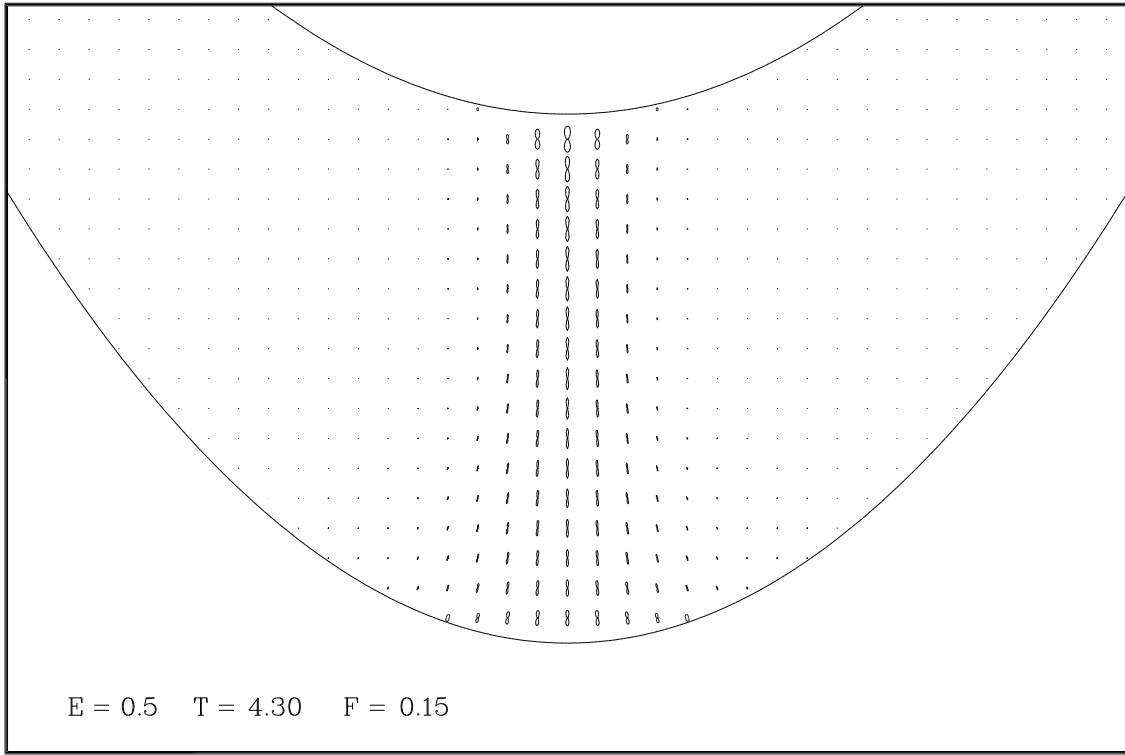


Figura 5.28: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 4,3$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

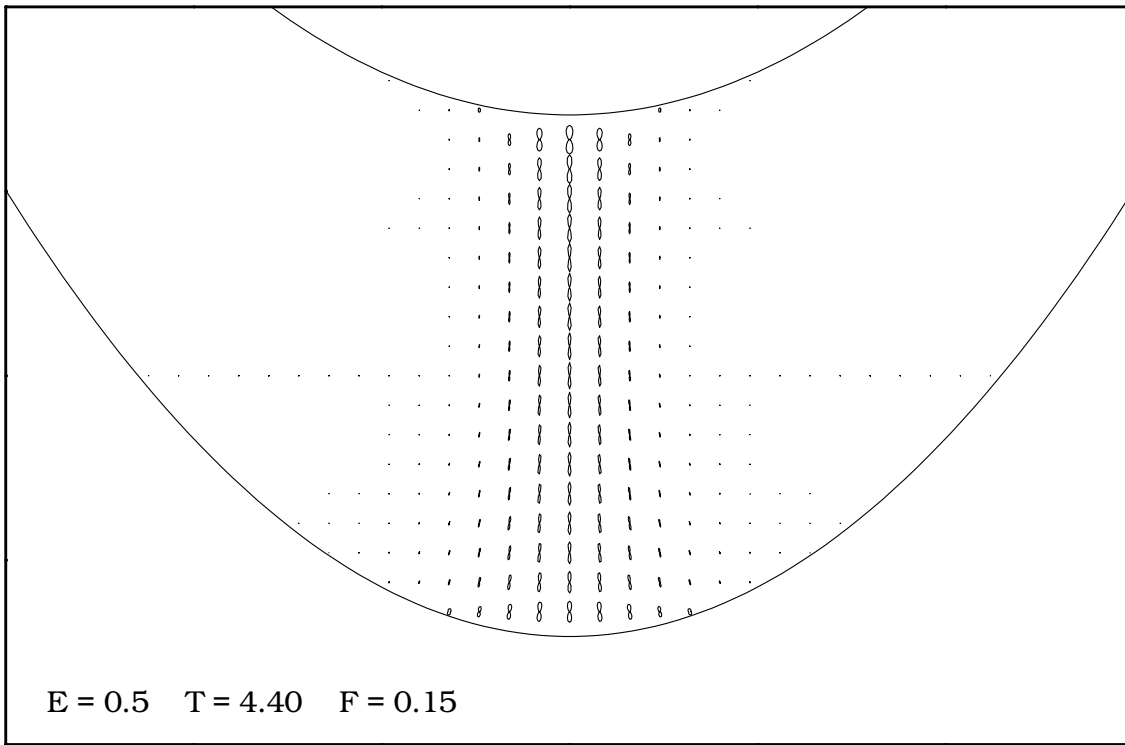
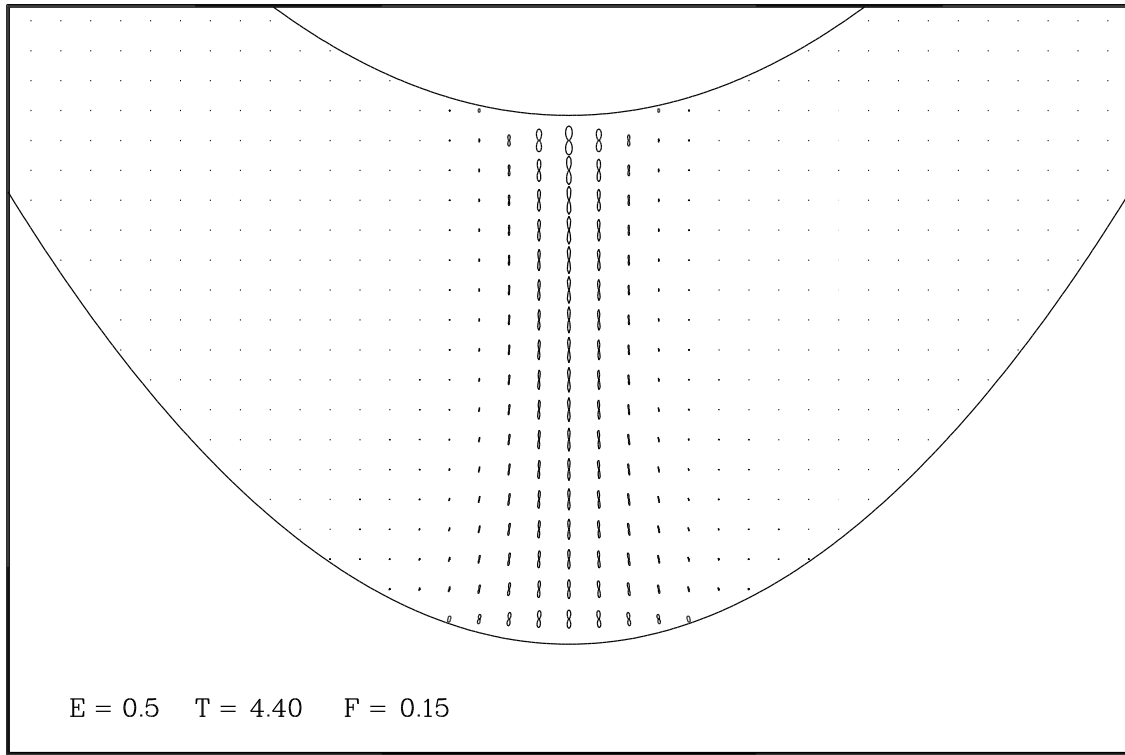


Figura 5.29: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 4,4$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

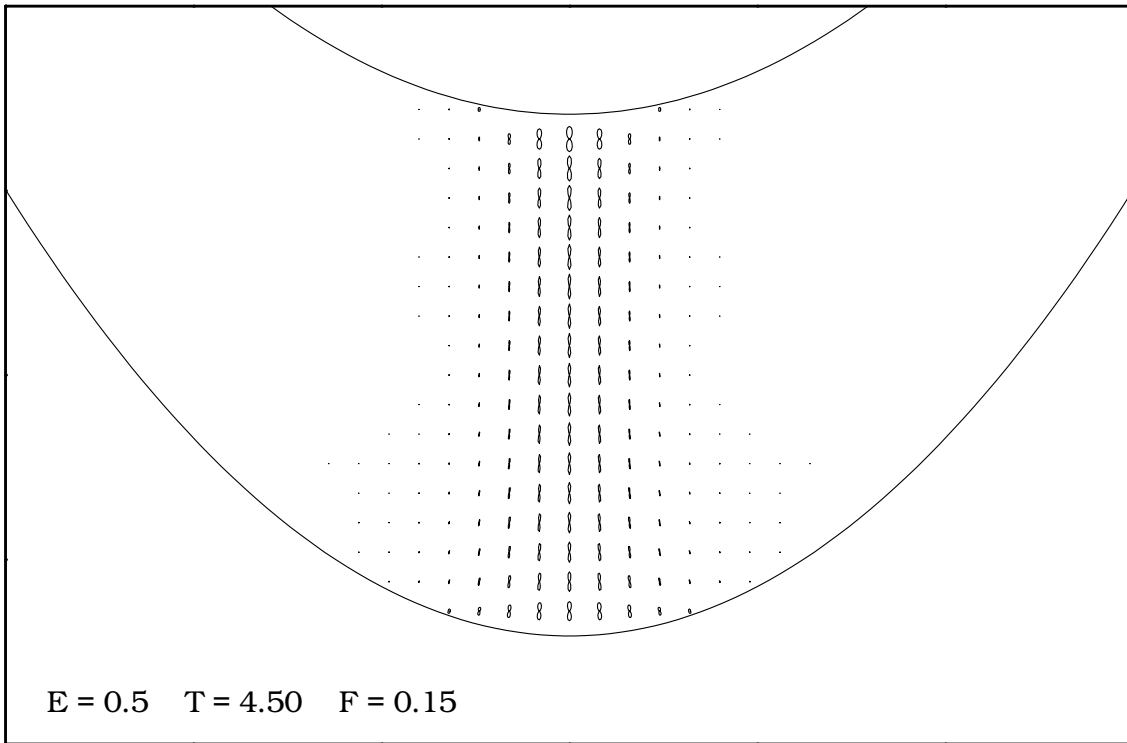
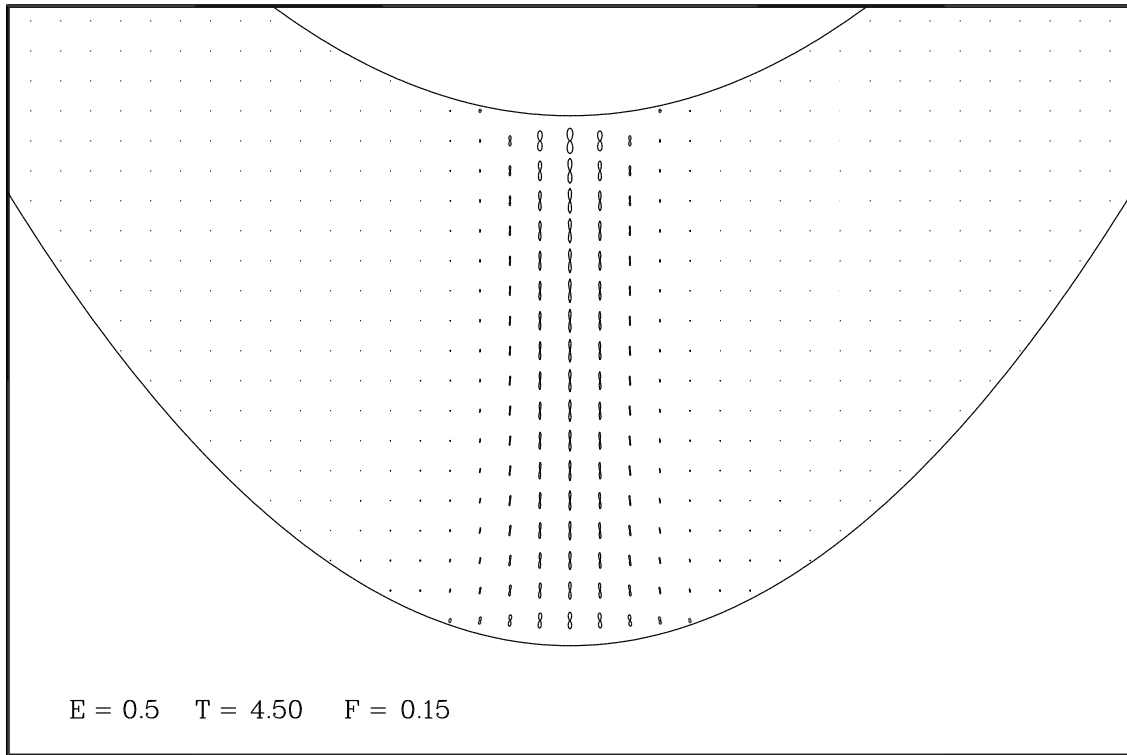


Figura 5.30: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 4,5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

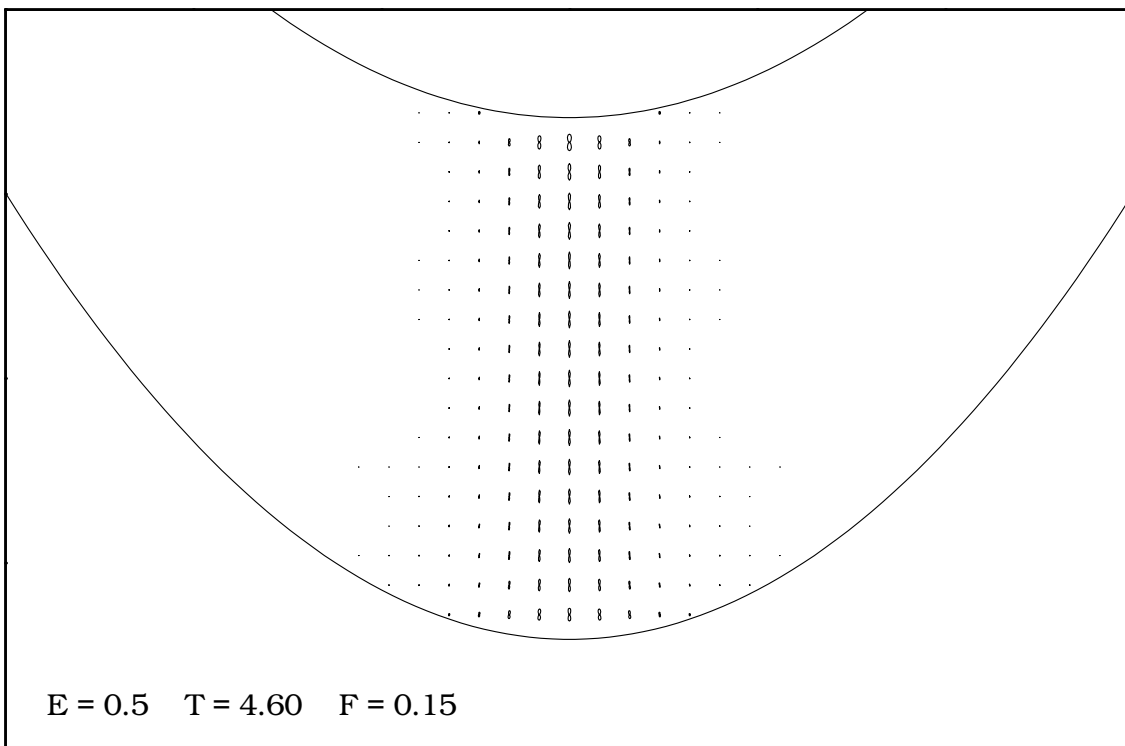
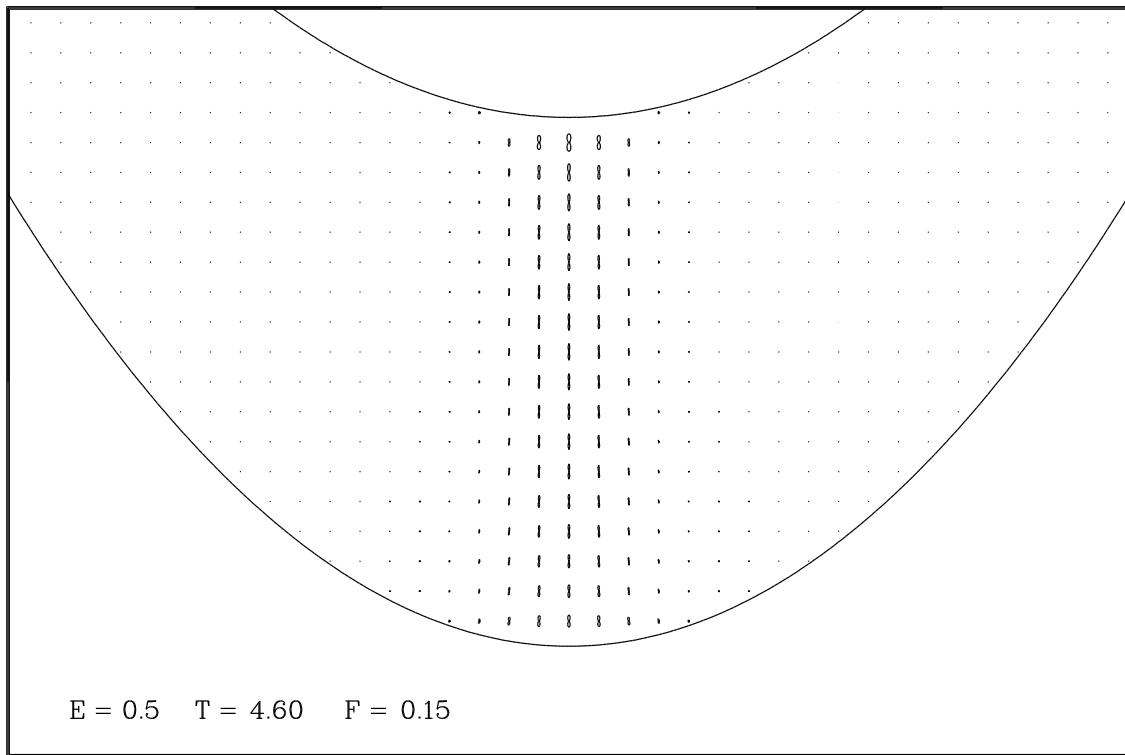


Figura 5.31: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 4,6$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

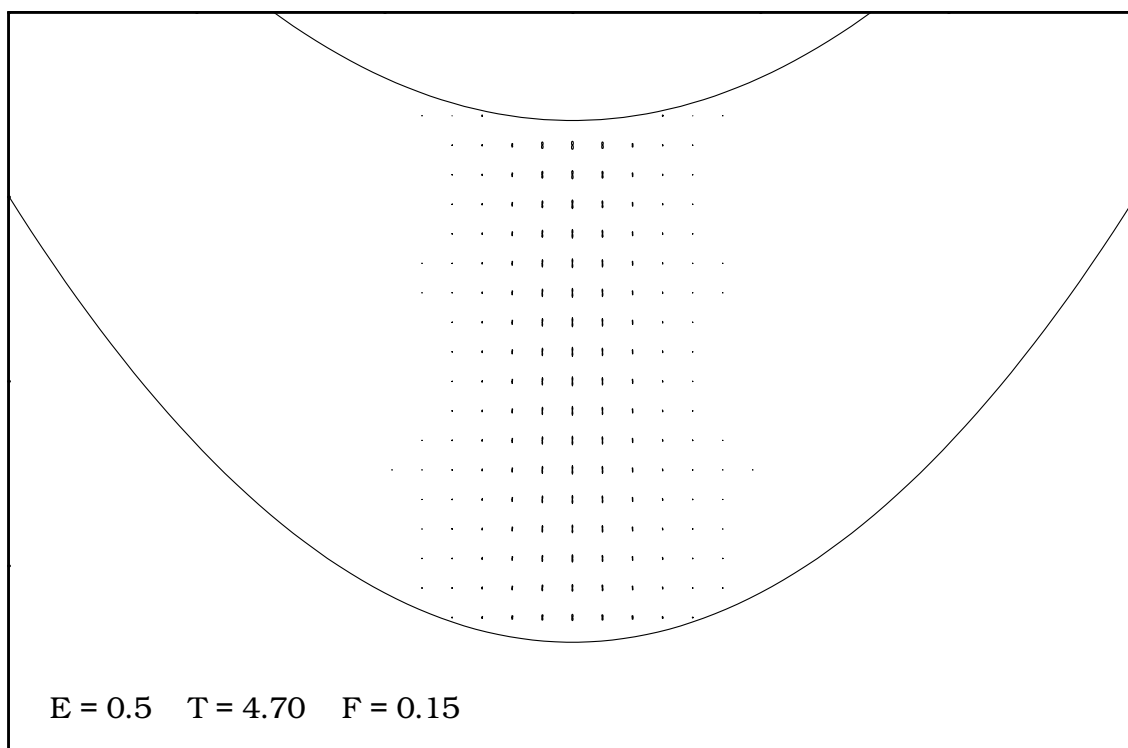
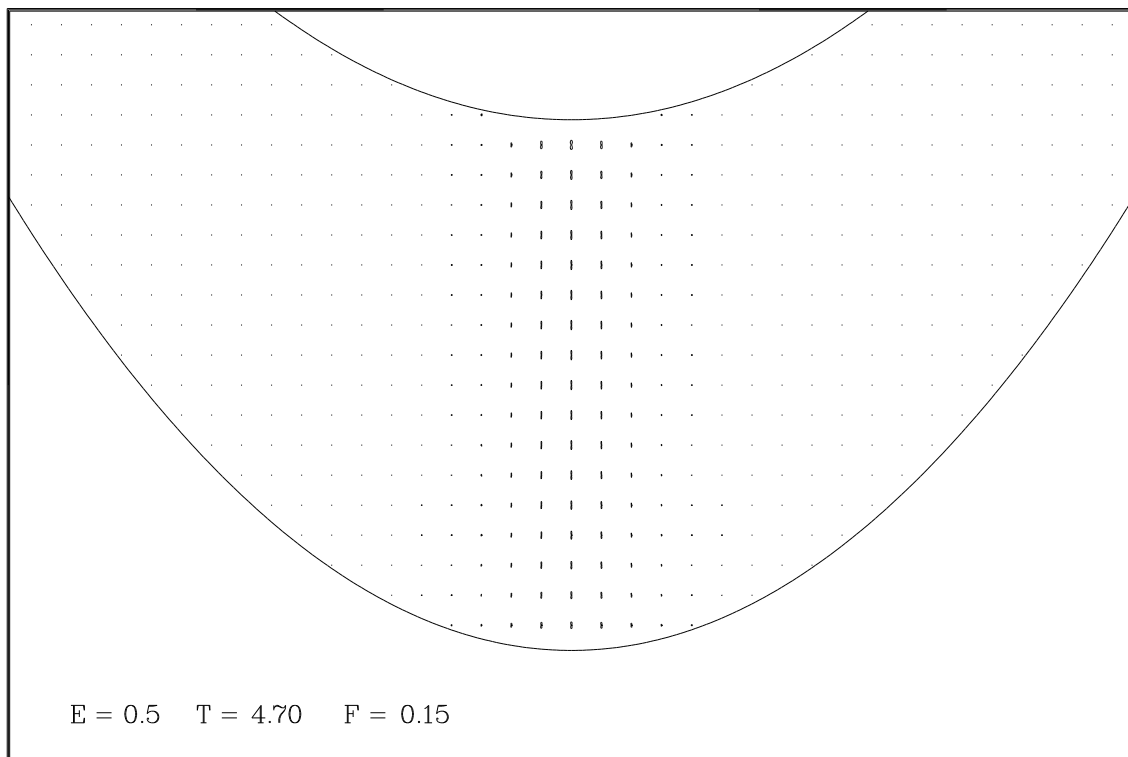


Figura 5.32: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 4,7$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,53$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical.

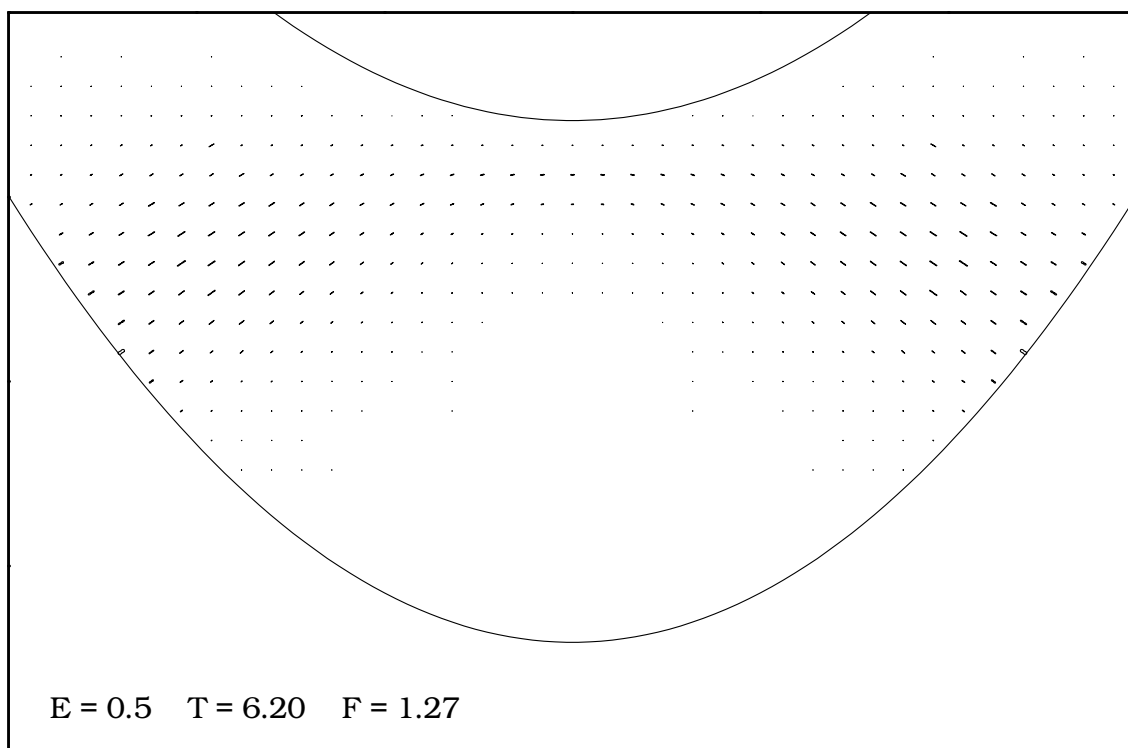
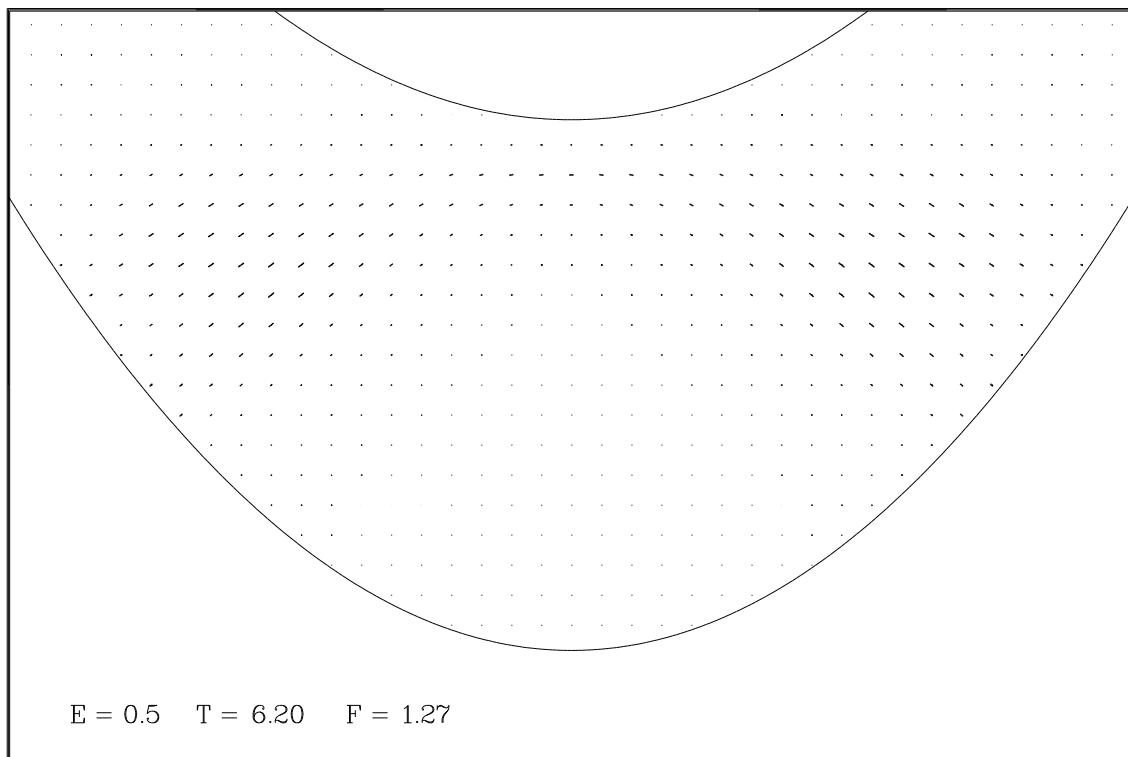


Figura 5.33: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 6,2$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,063$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

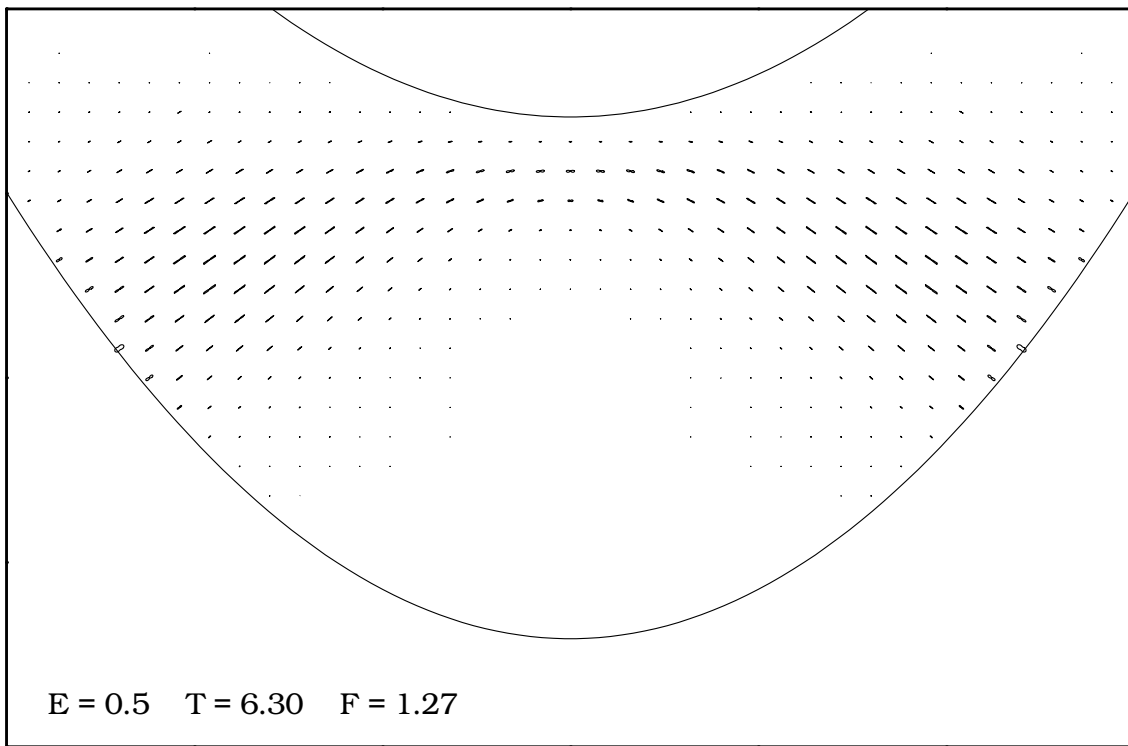
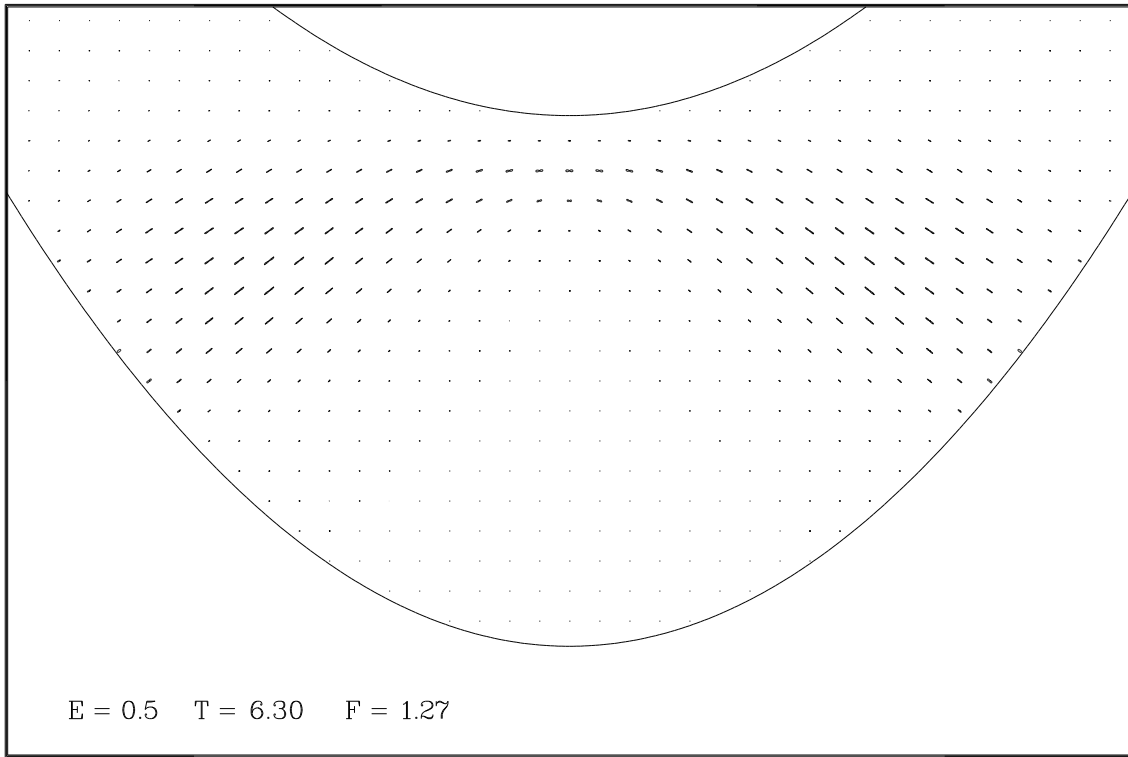


Figura 5.34: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 6,3$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,063$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

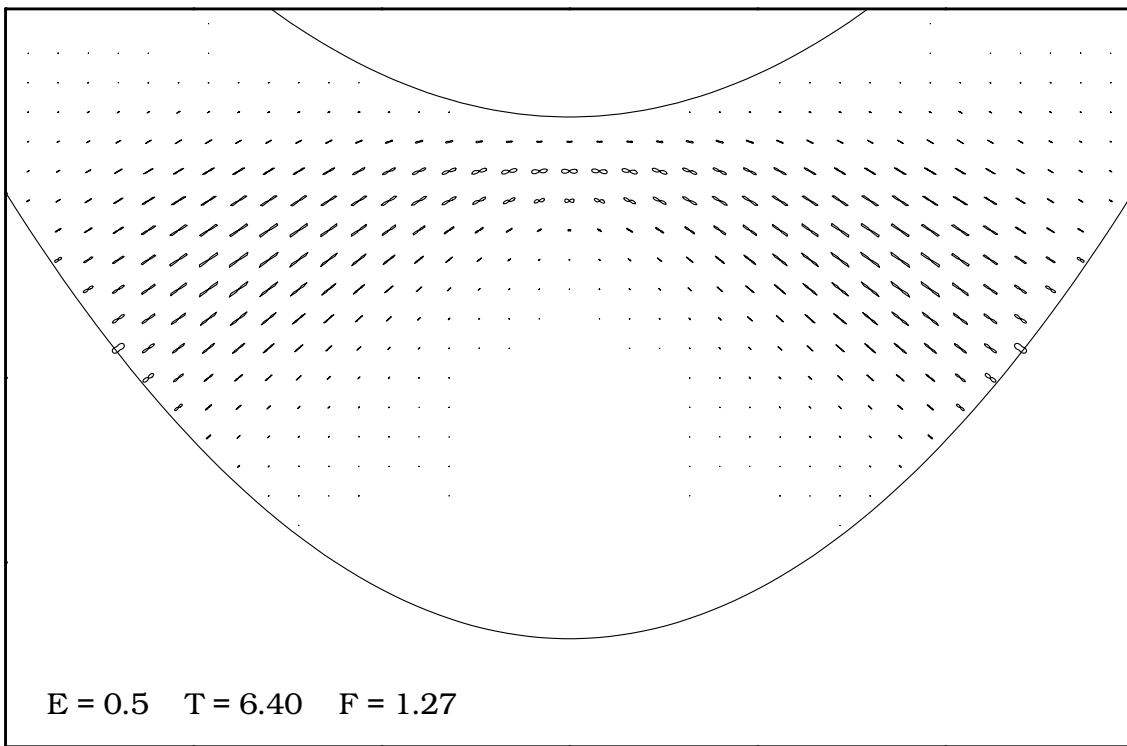
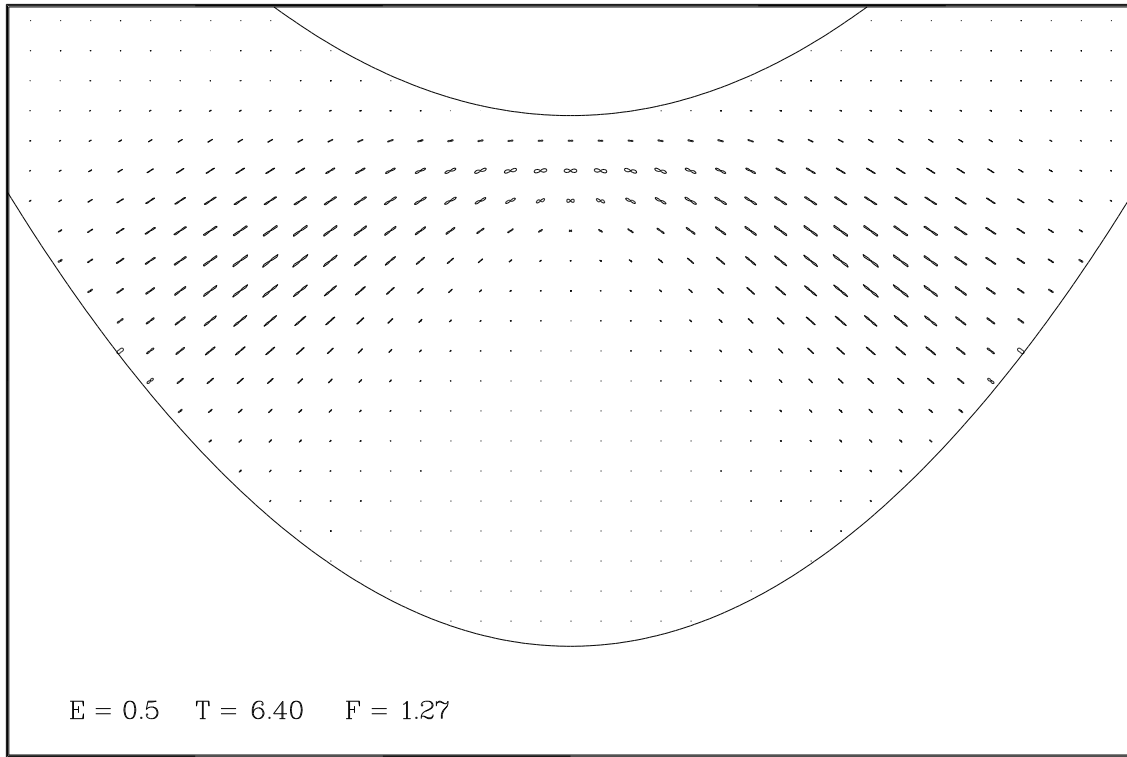


Figura 5.35: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 6,4$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,063$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

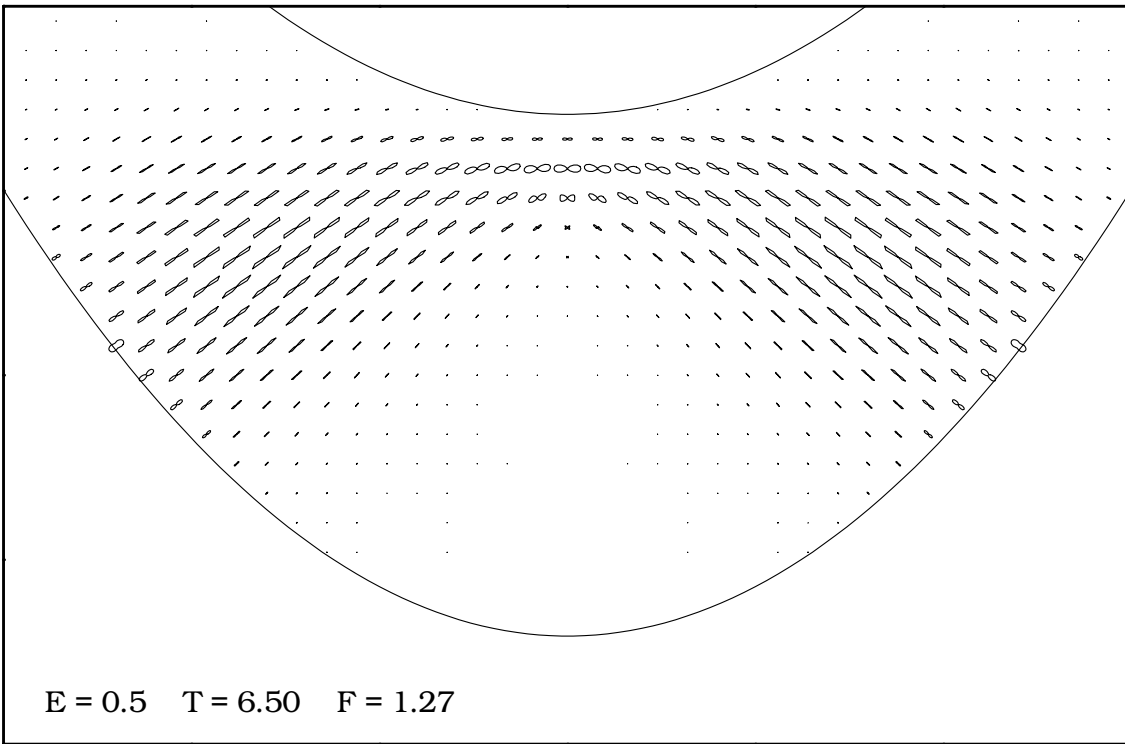
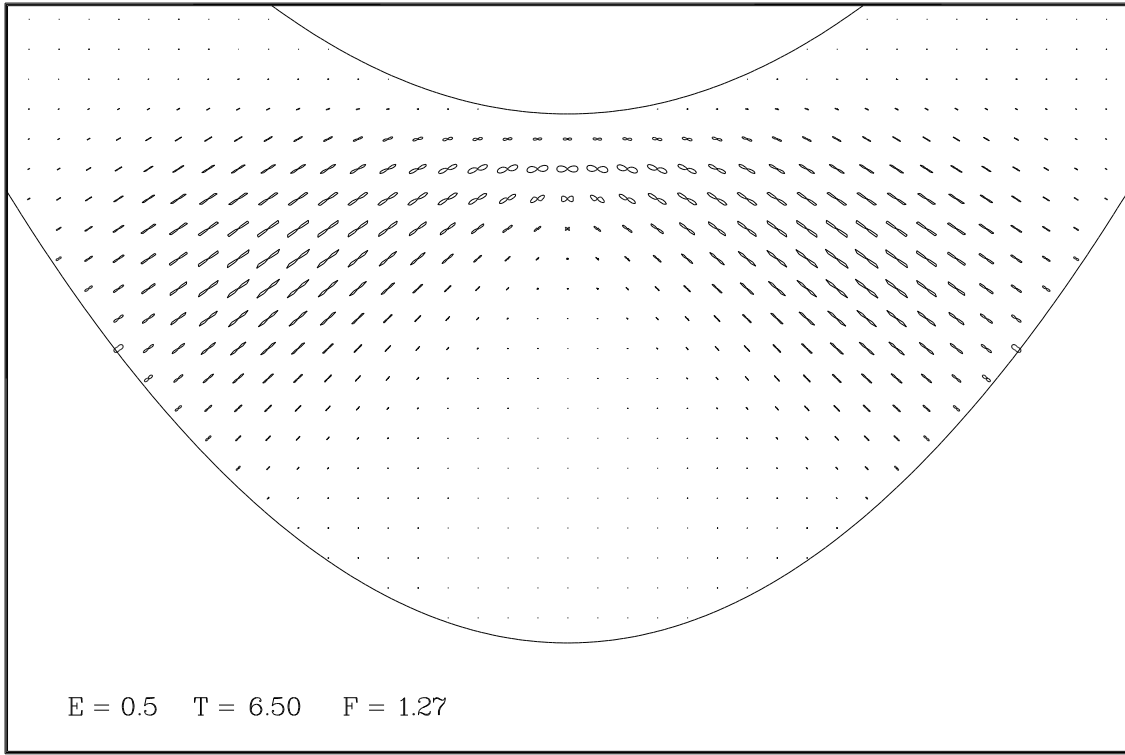


Figura 5.36: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 6,5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,063$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

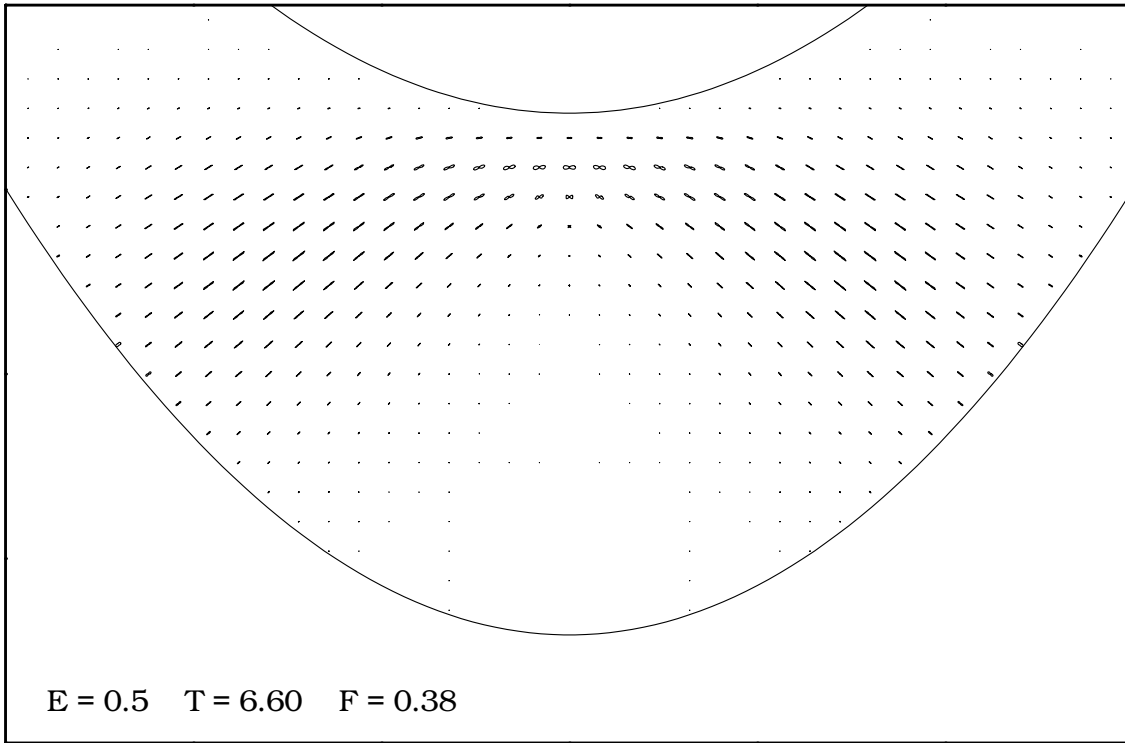
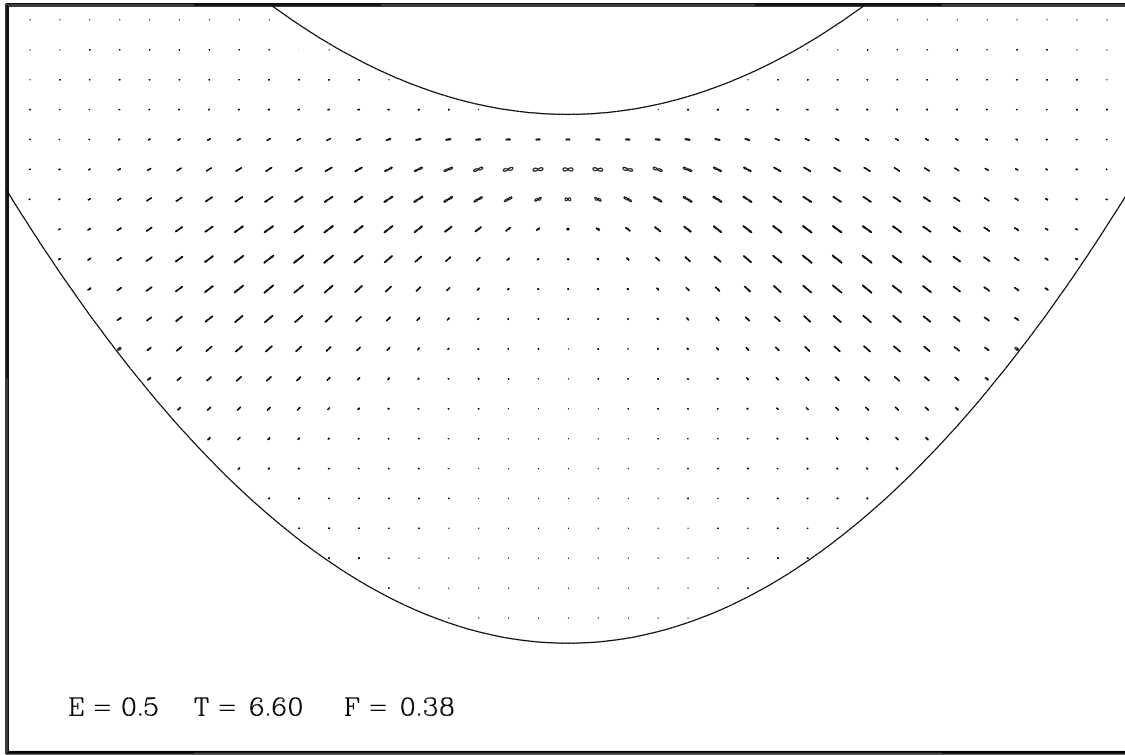


Figura 5.37: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 6,6$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,21$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

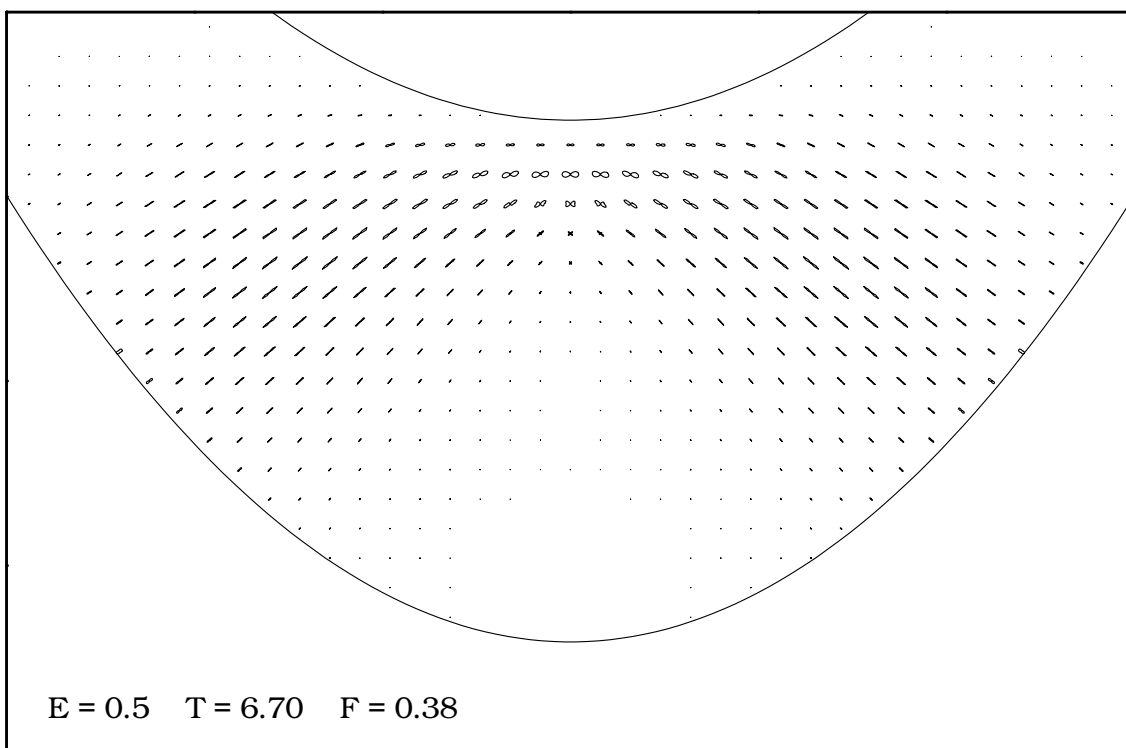
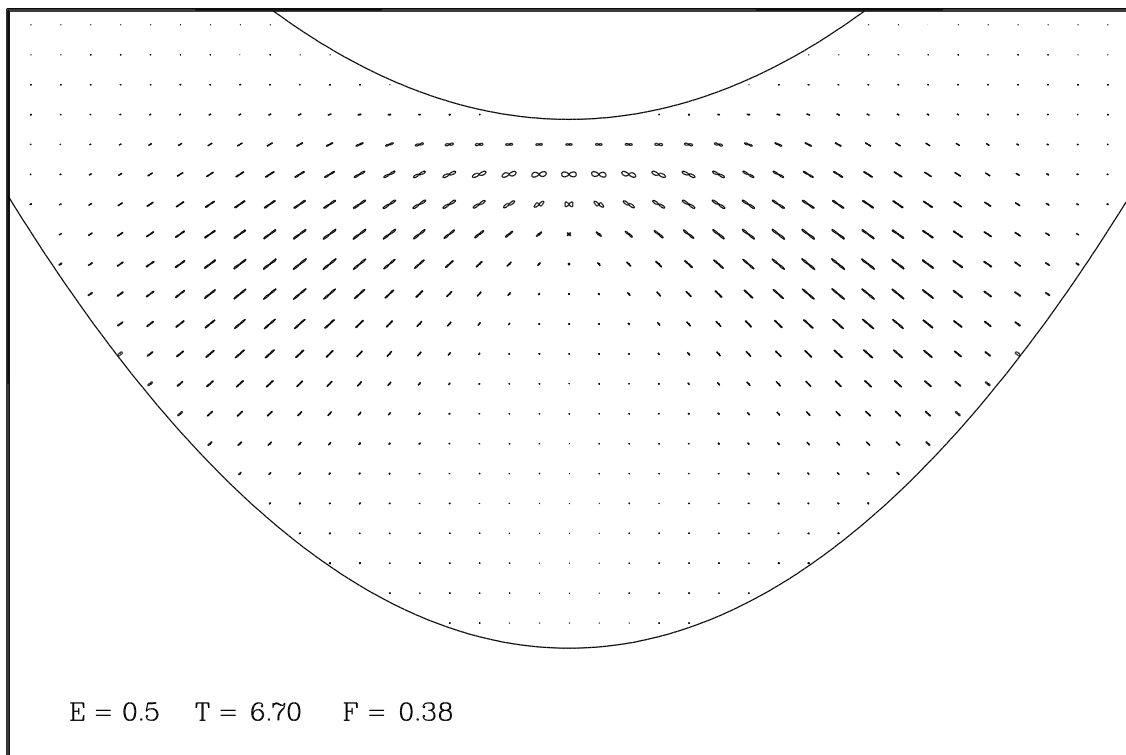


Figura 5.38: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 6,7$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,21$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

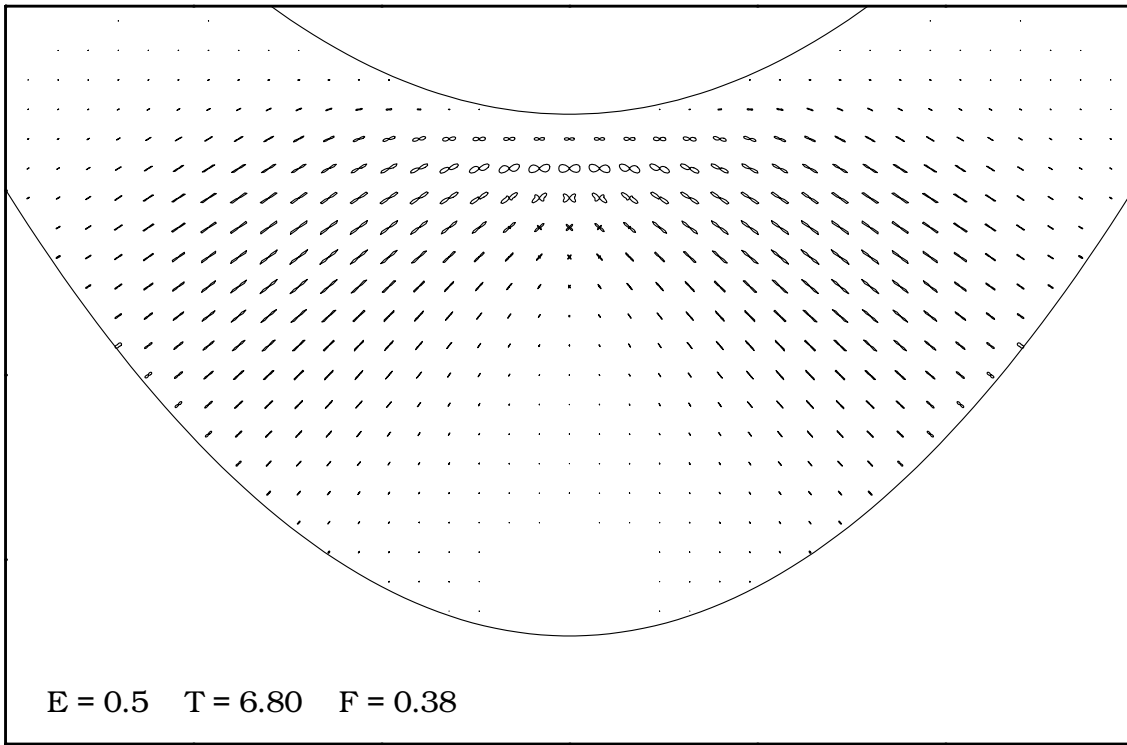
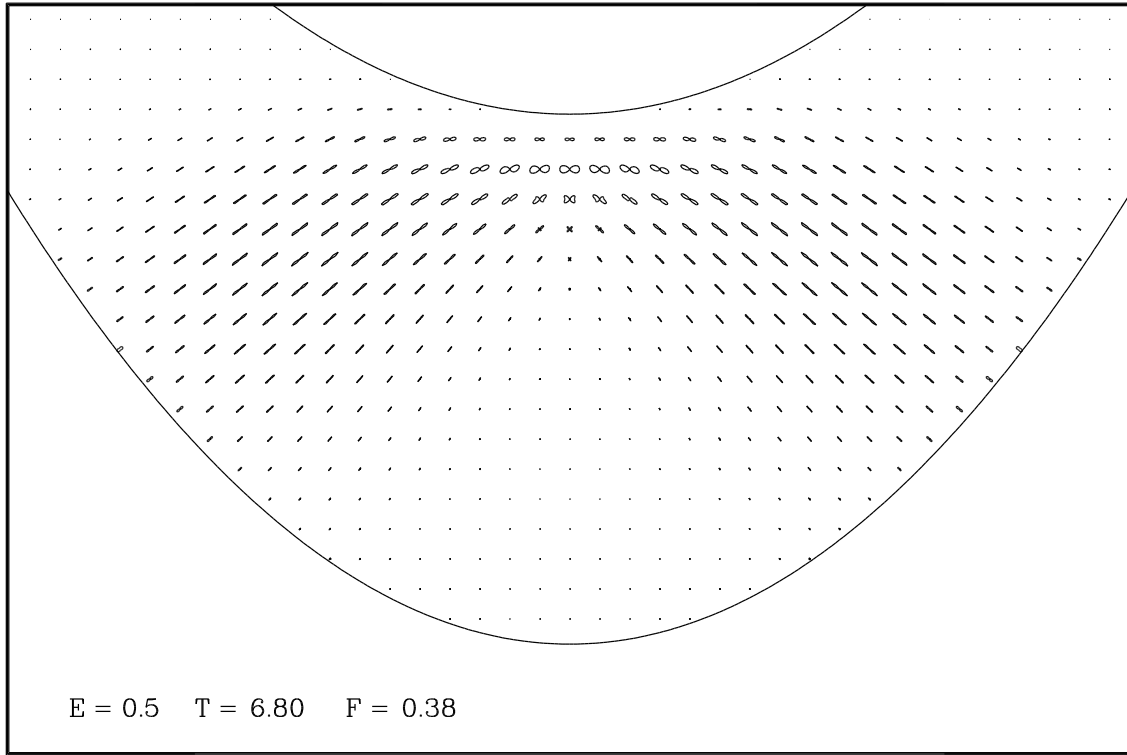


Figura 5.39: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 6,8$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,21$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

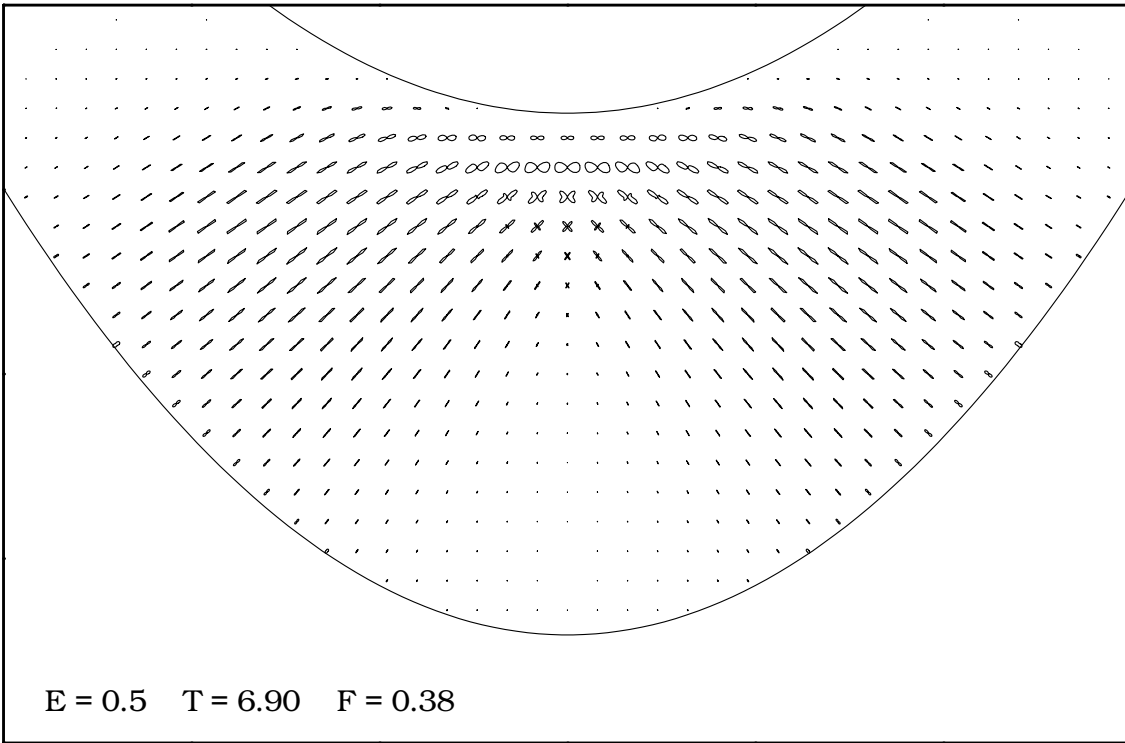
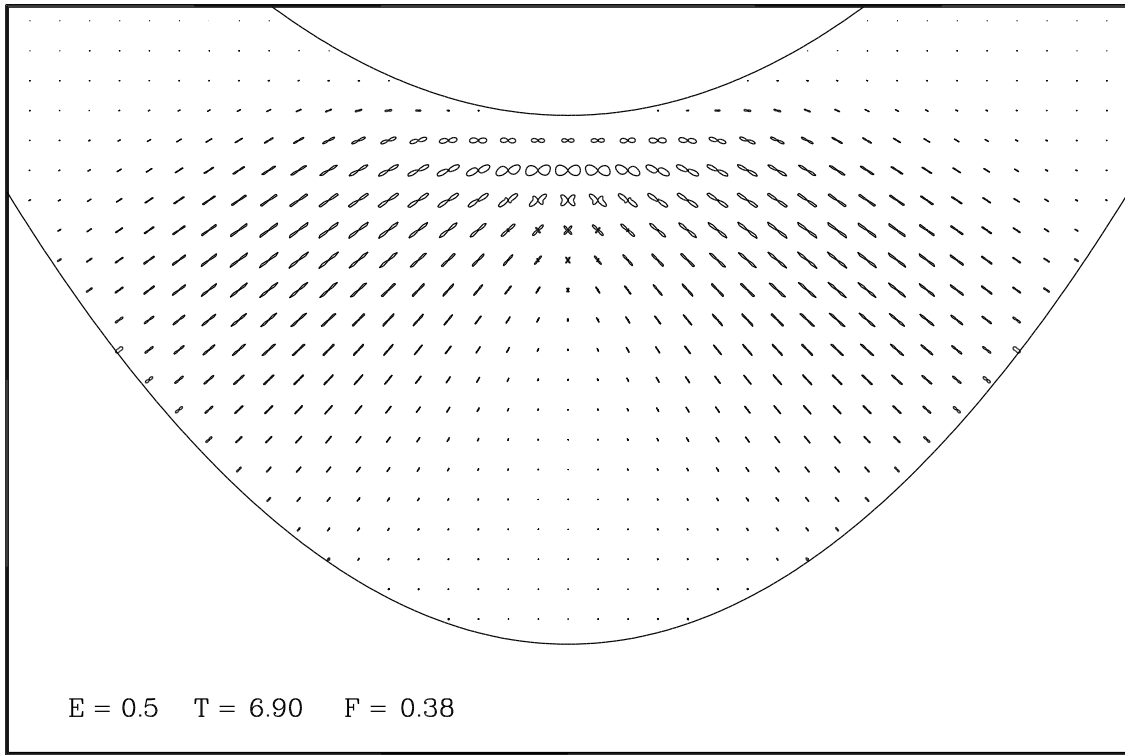


Figura 5.40: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 6,9$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,21$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

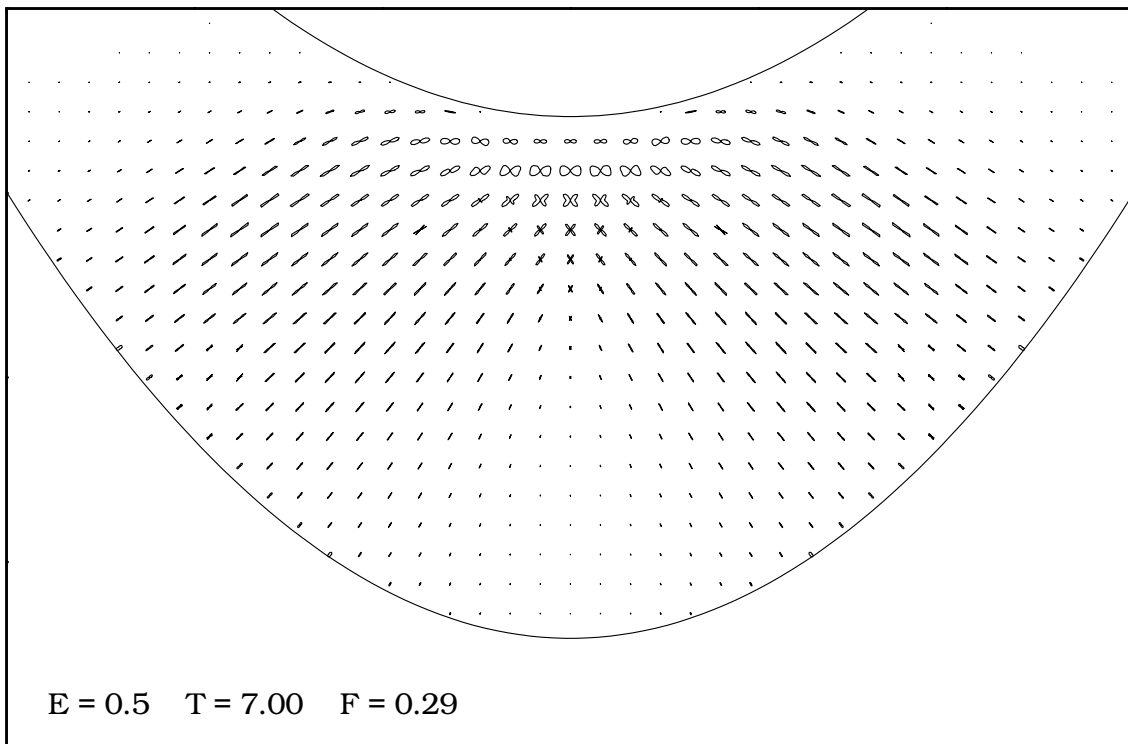
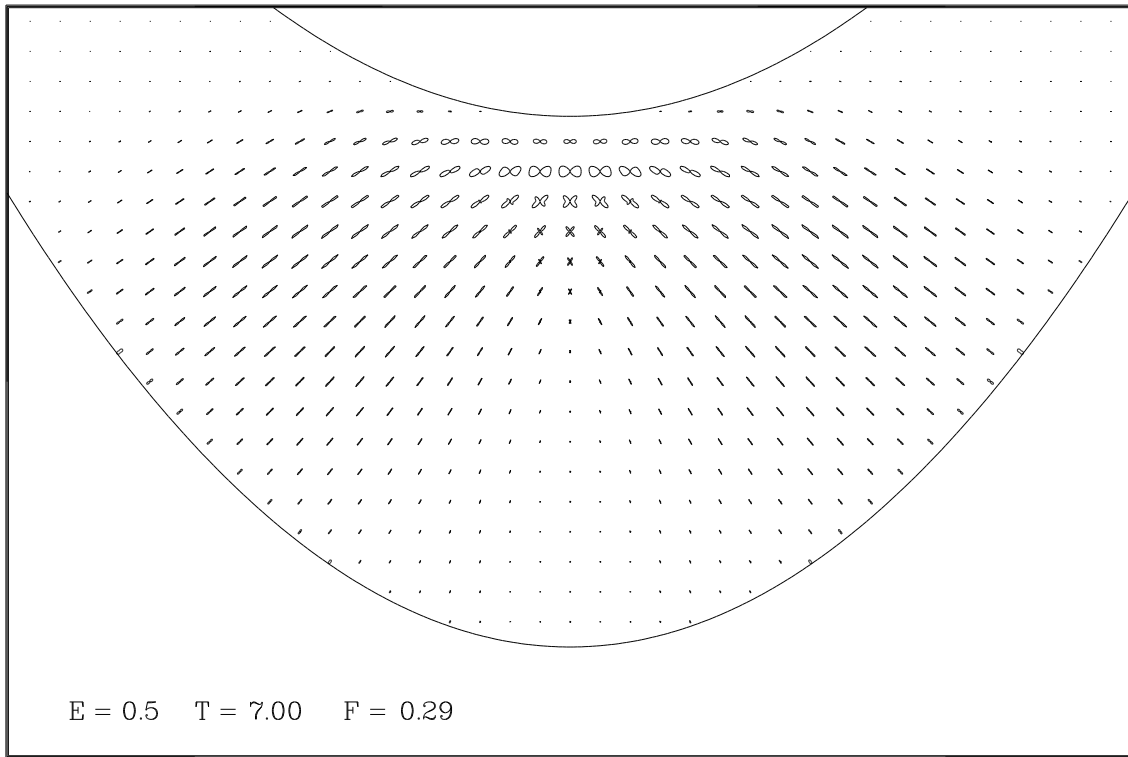


Figura 5.41: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 7,0$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

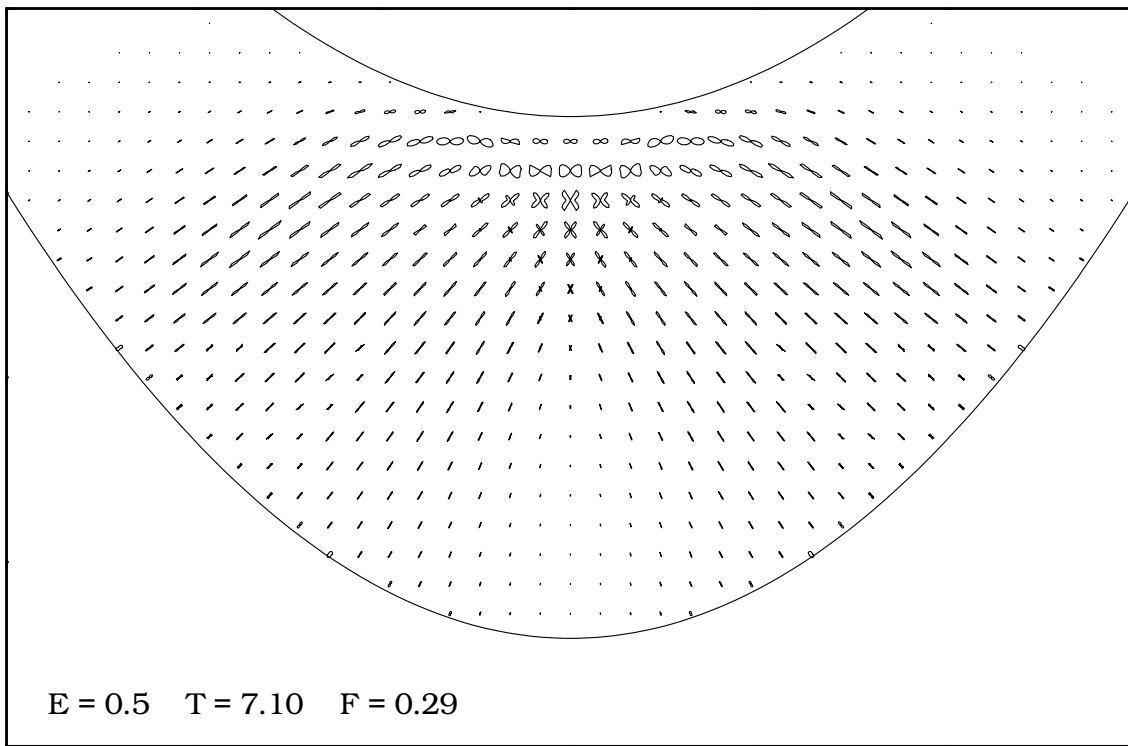
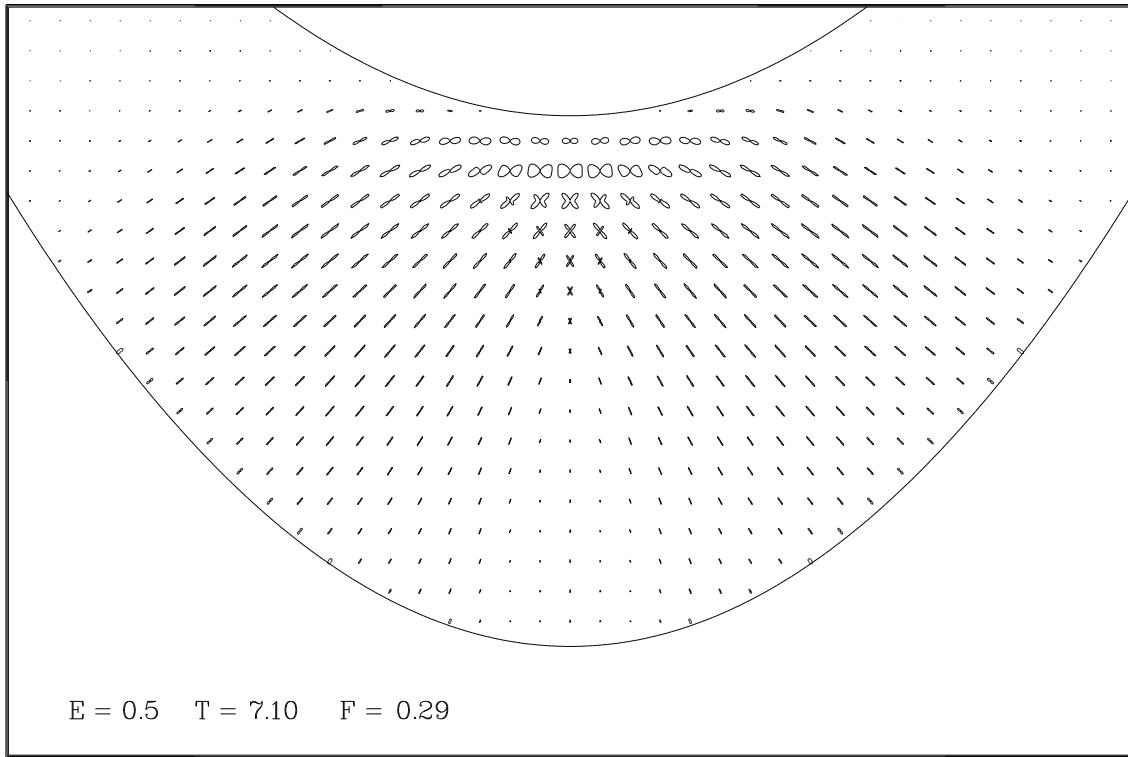


Figura 5.42: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 7,1$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

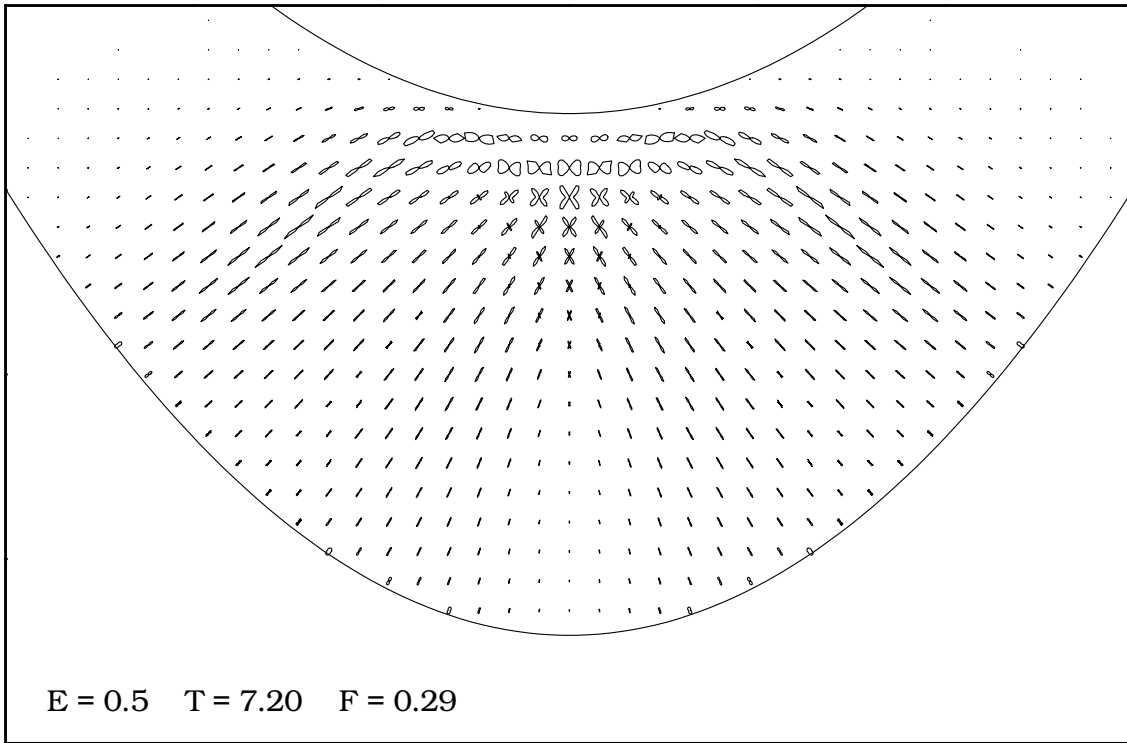
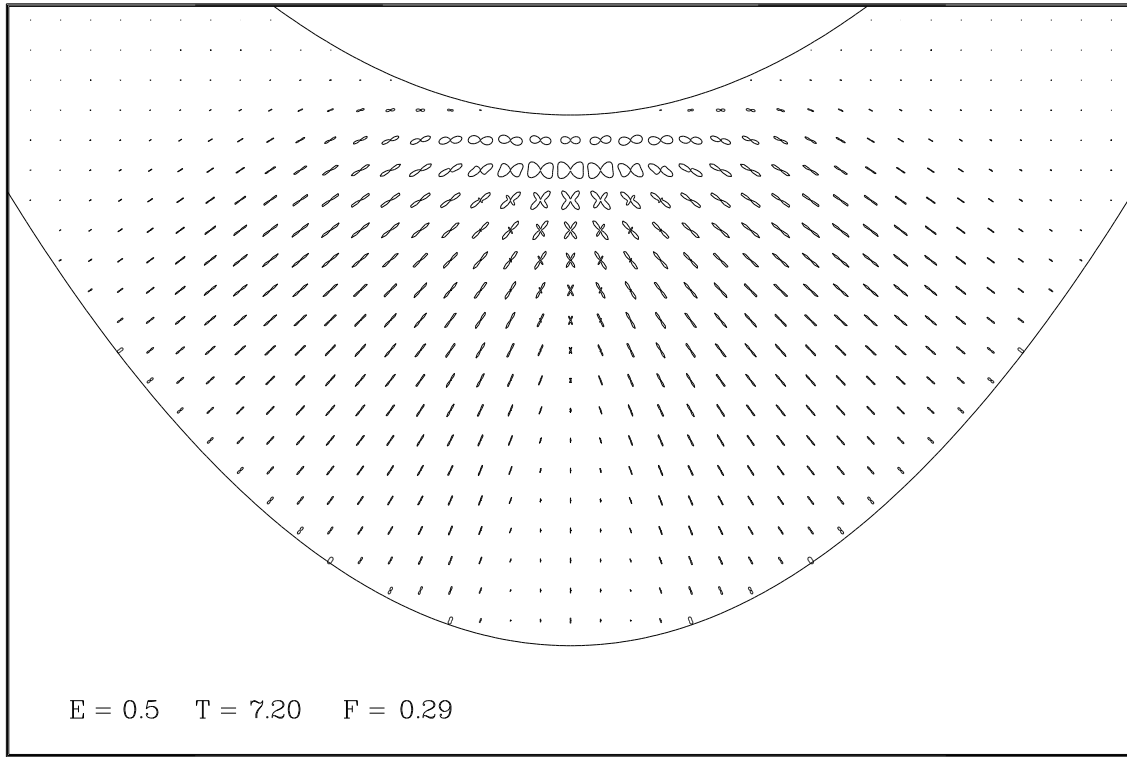


Figura 5.43: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 7,2$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita *boomerang*.

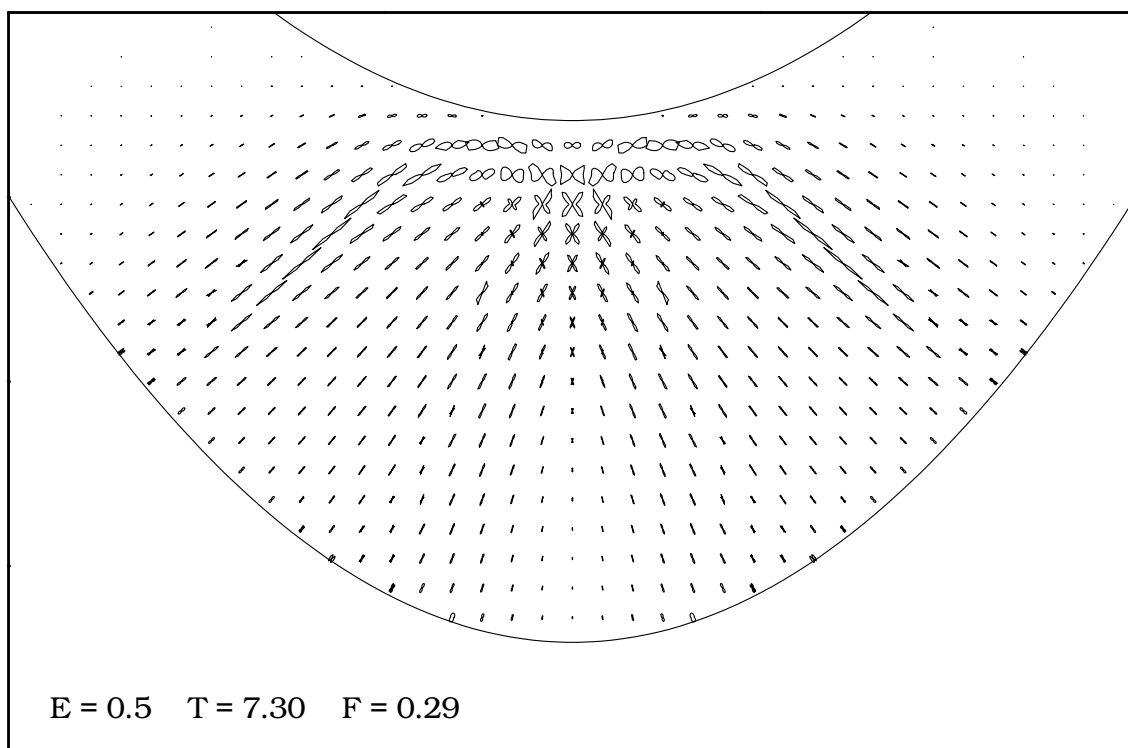
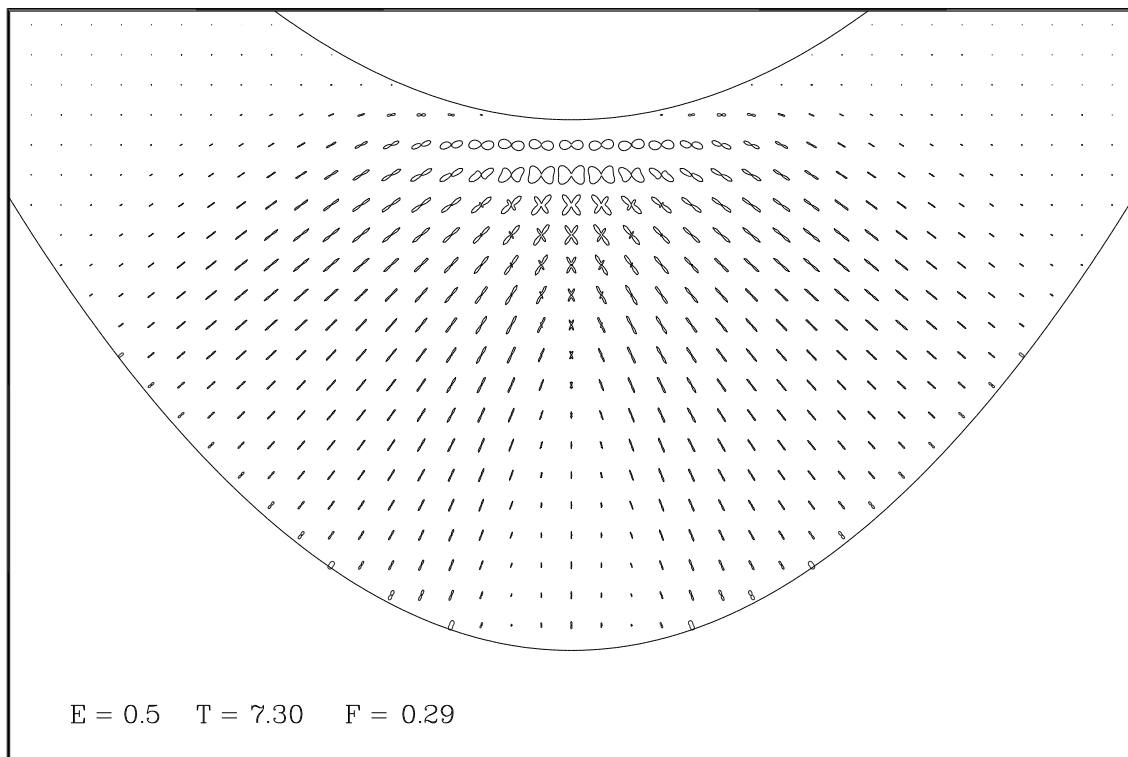


Figura 5.44: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 7,3$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

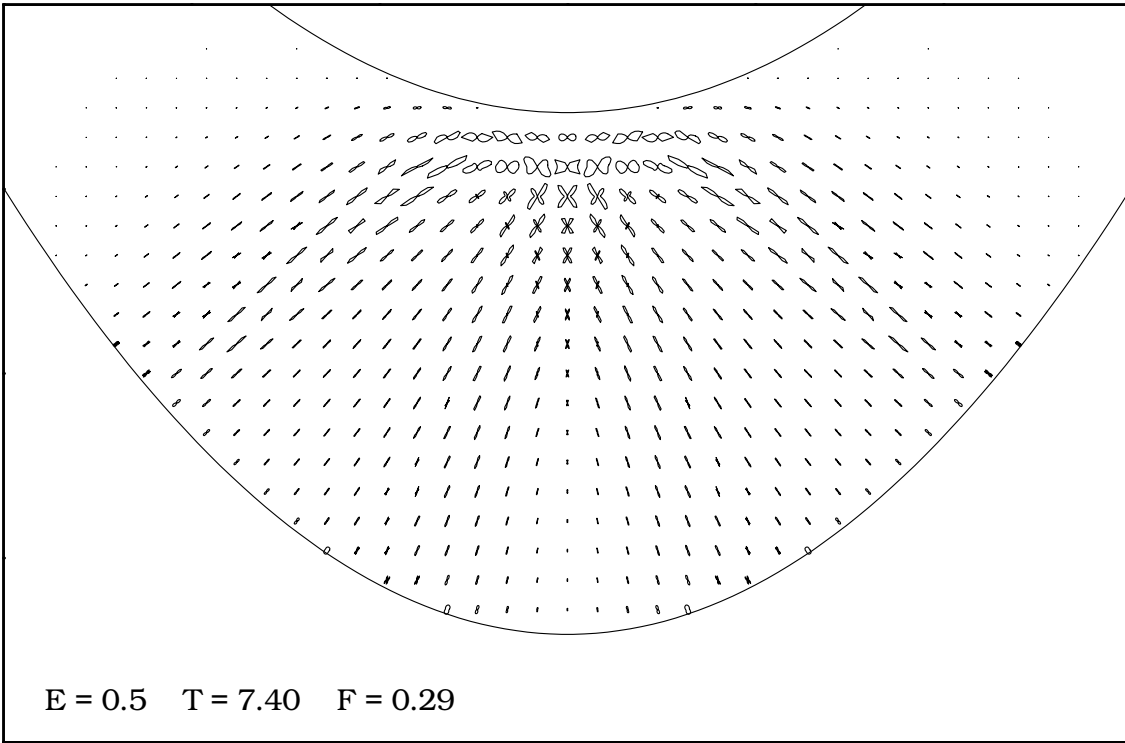
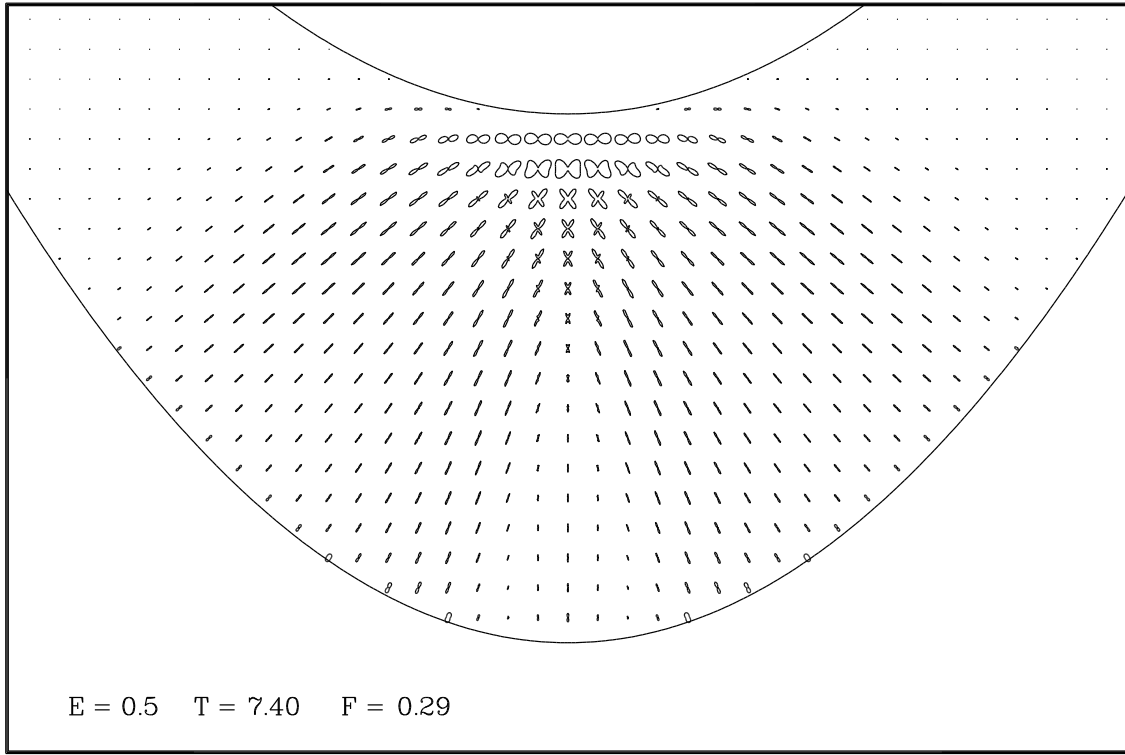


Figura 5.45: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 7,4$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

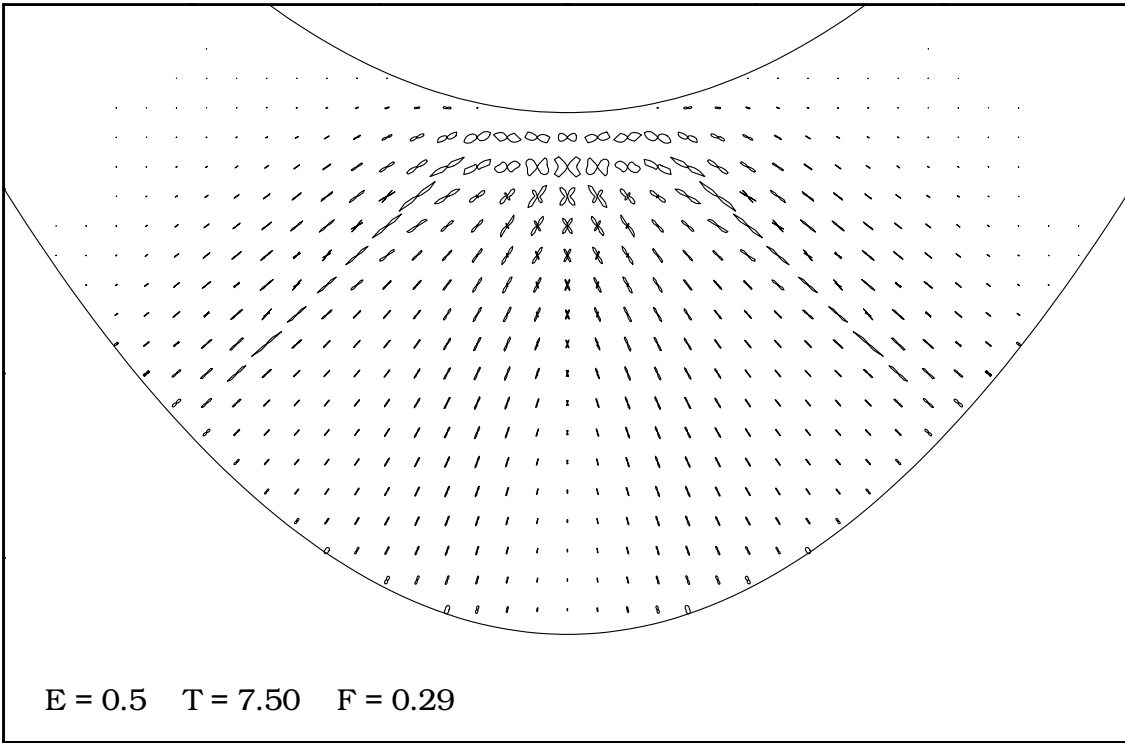
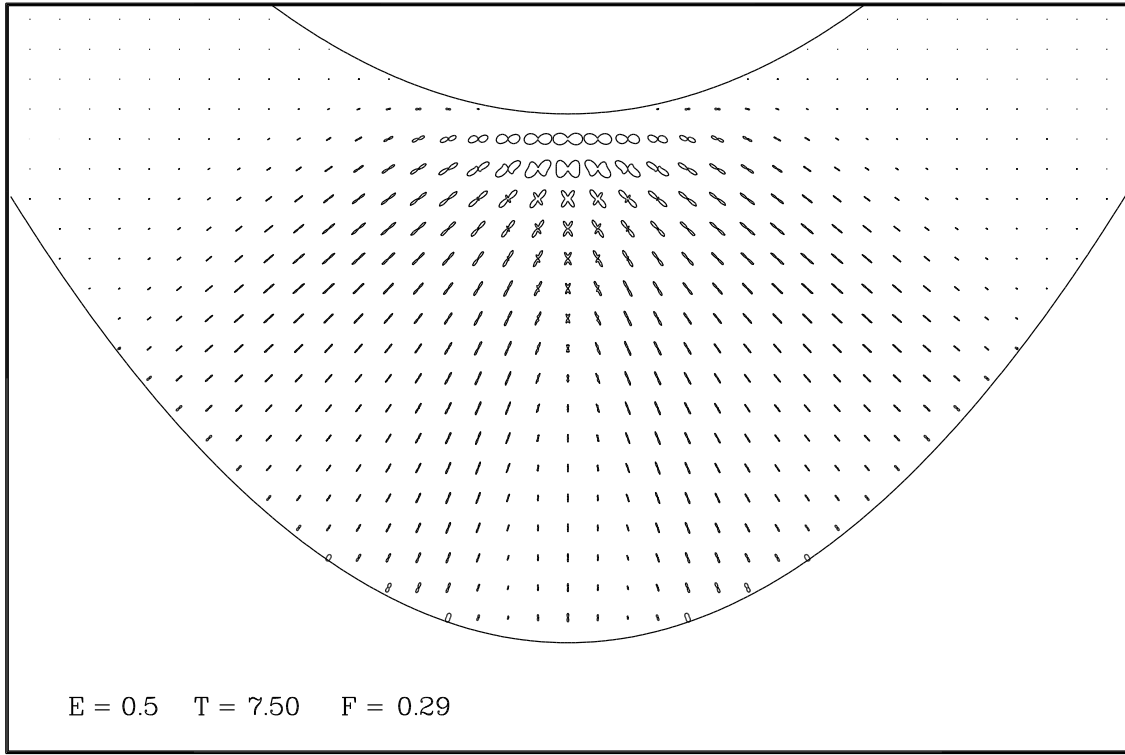


Figura 5.46: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 7,5$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclassico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

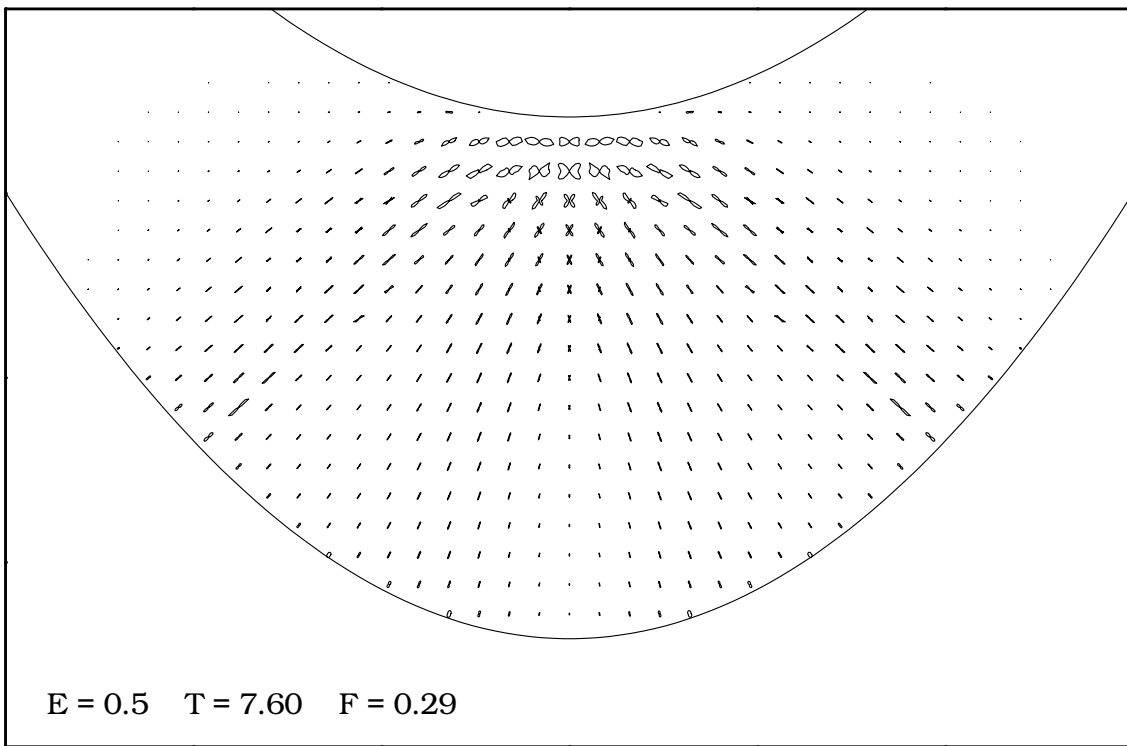
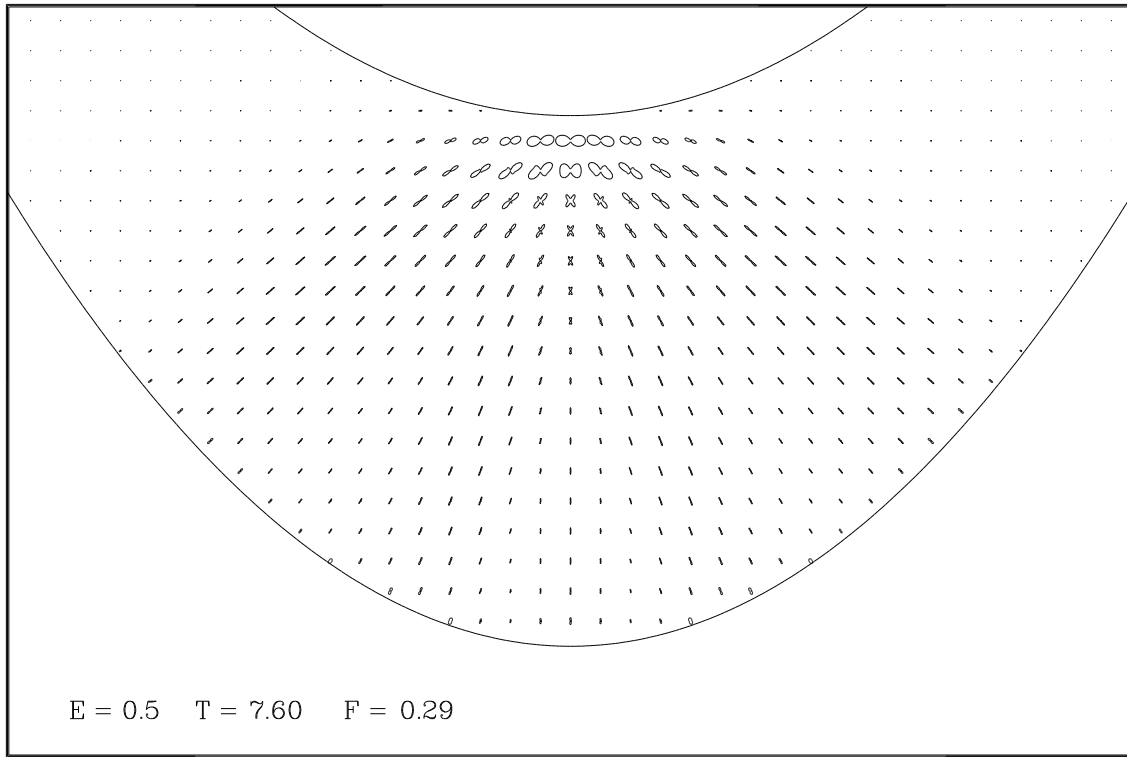


Figura 5.47: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 7,6$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

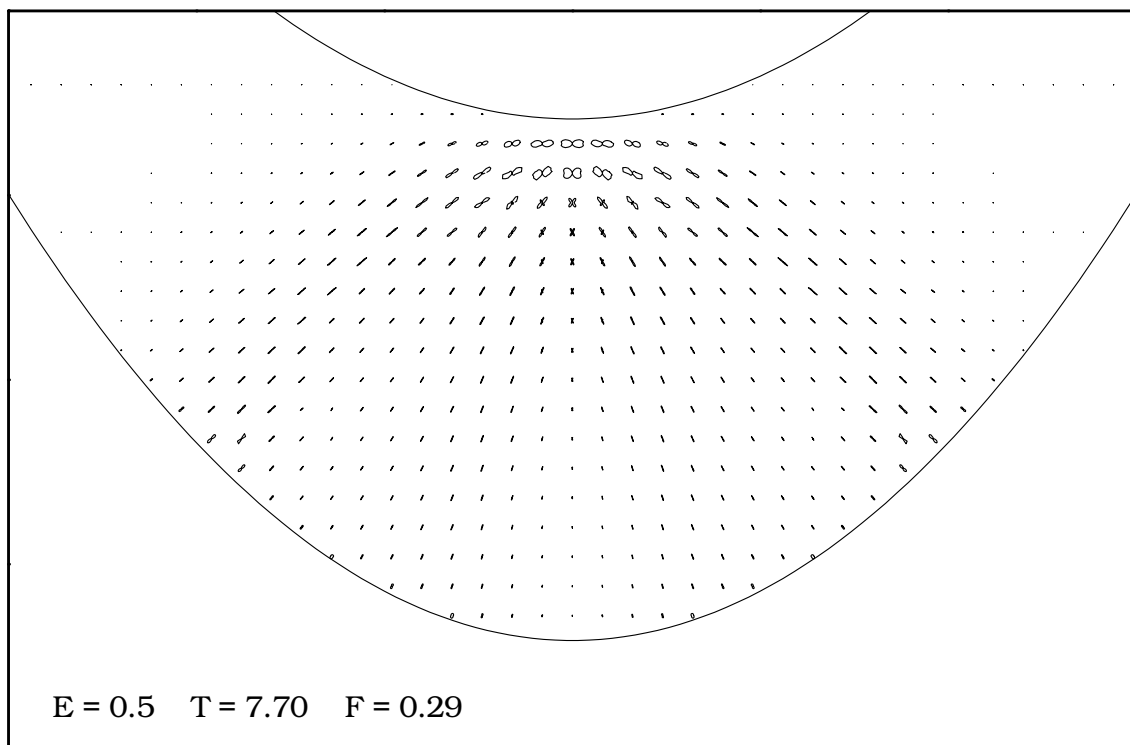
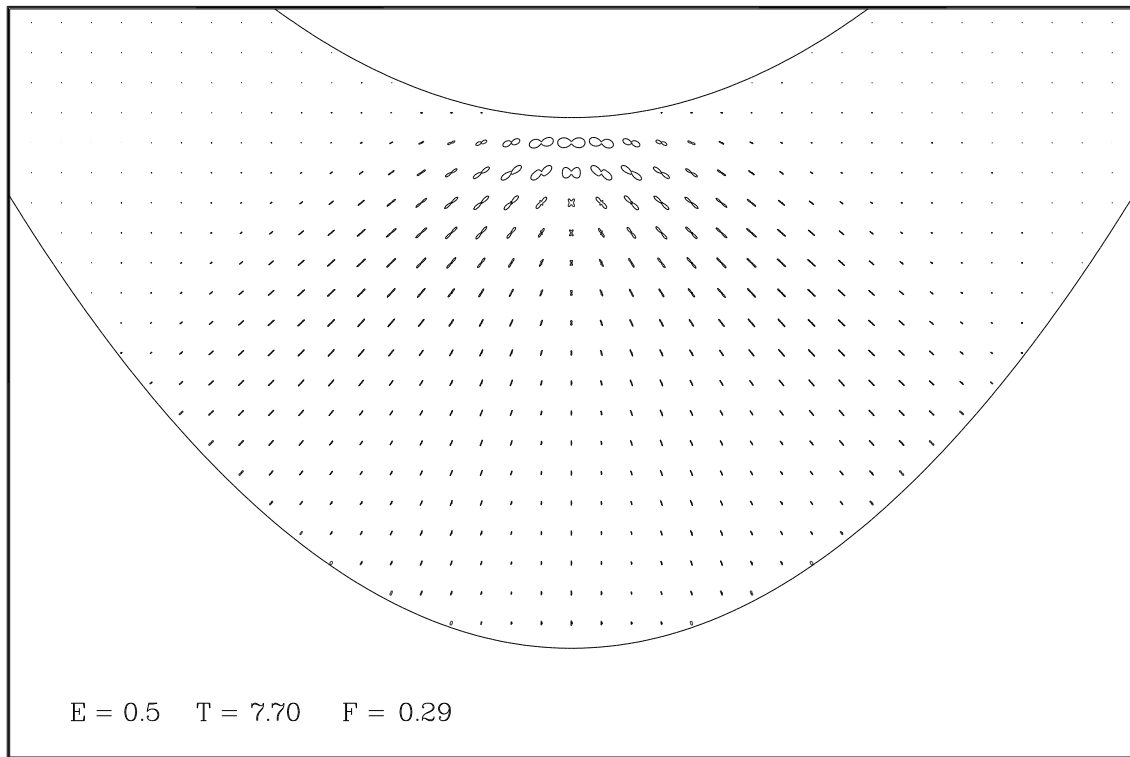


Figura 5.48: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 7,7$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

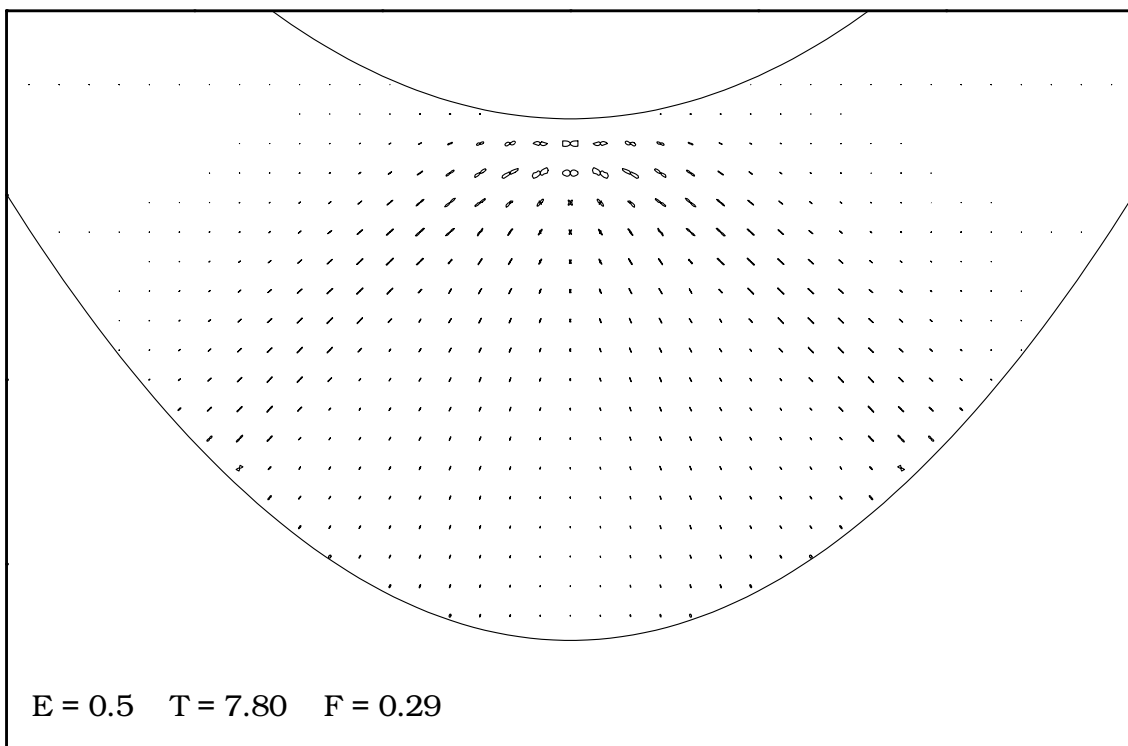
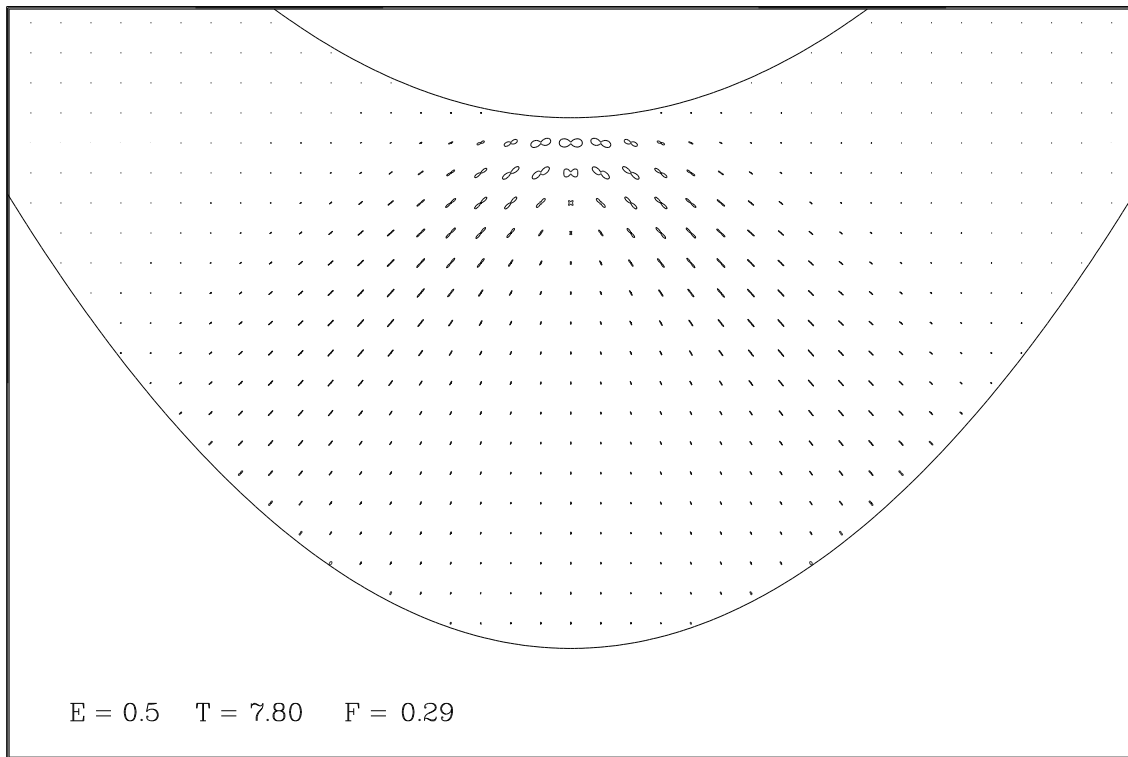


Figura 5.49: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 7,8$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,28$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir das três órbitas: *boomerang*, a_1 e a_2 .

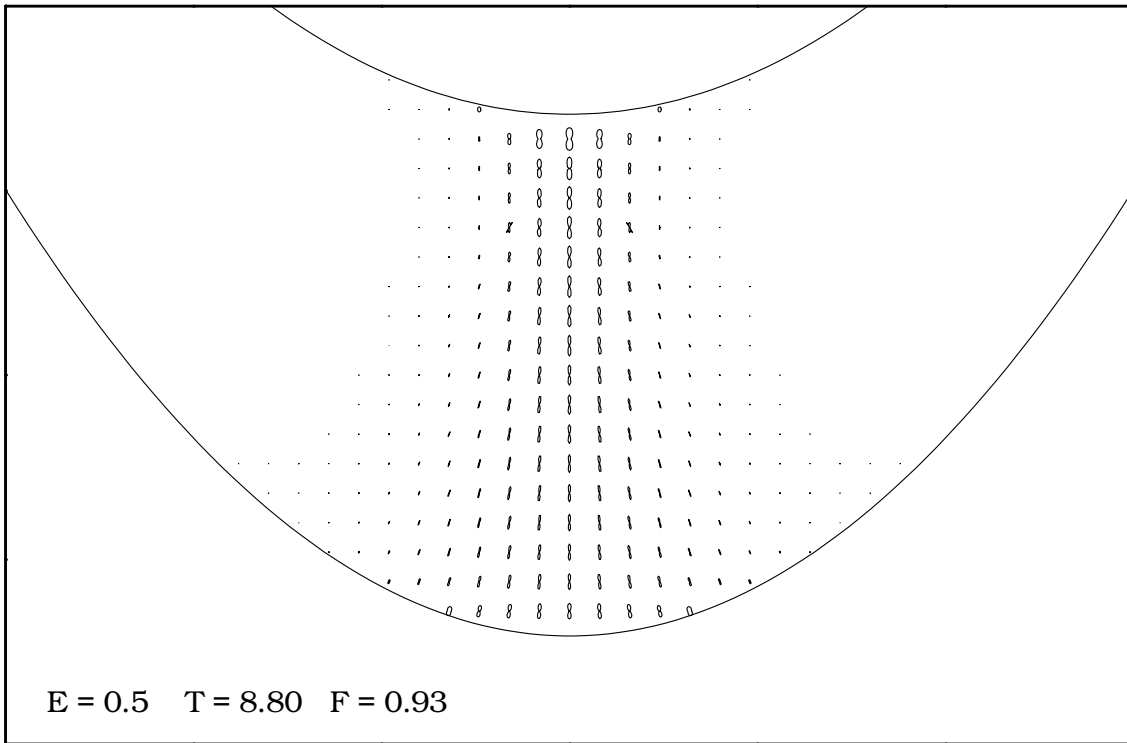
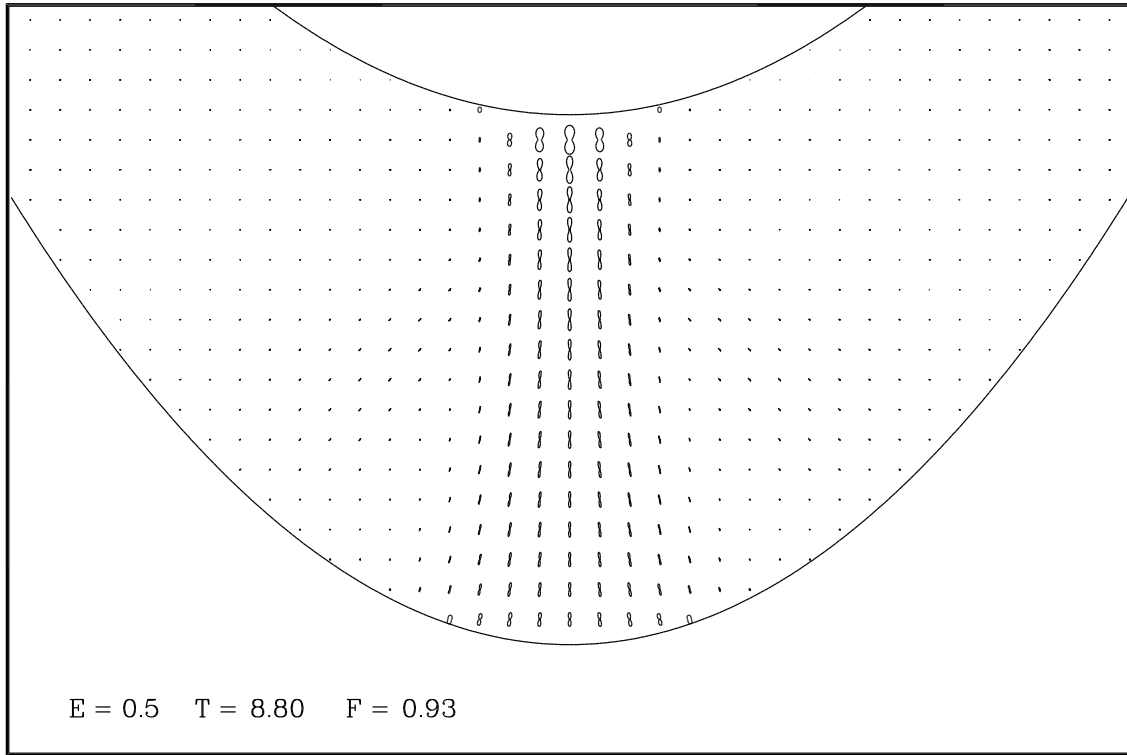


Figura 5.50: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 8,8$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,086$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical (duas voltas).

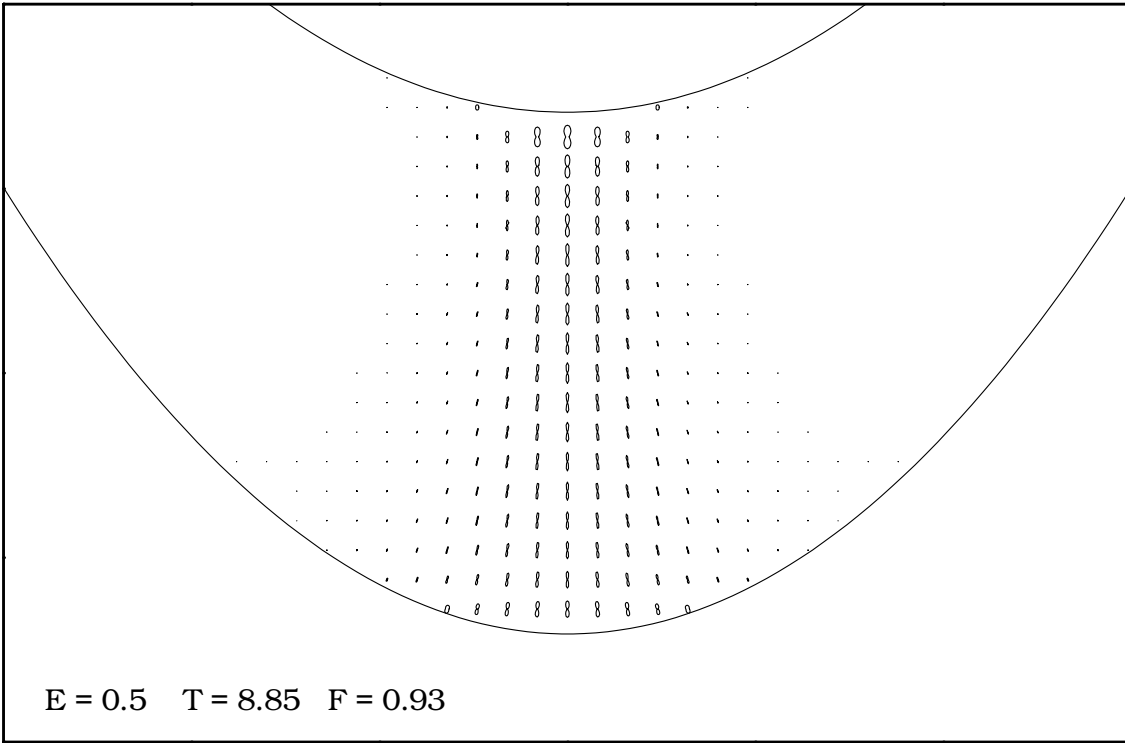
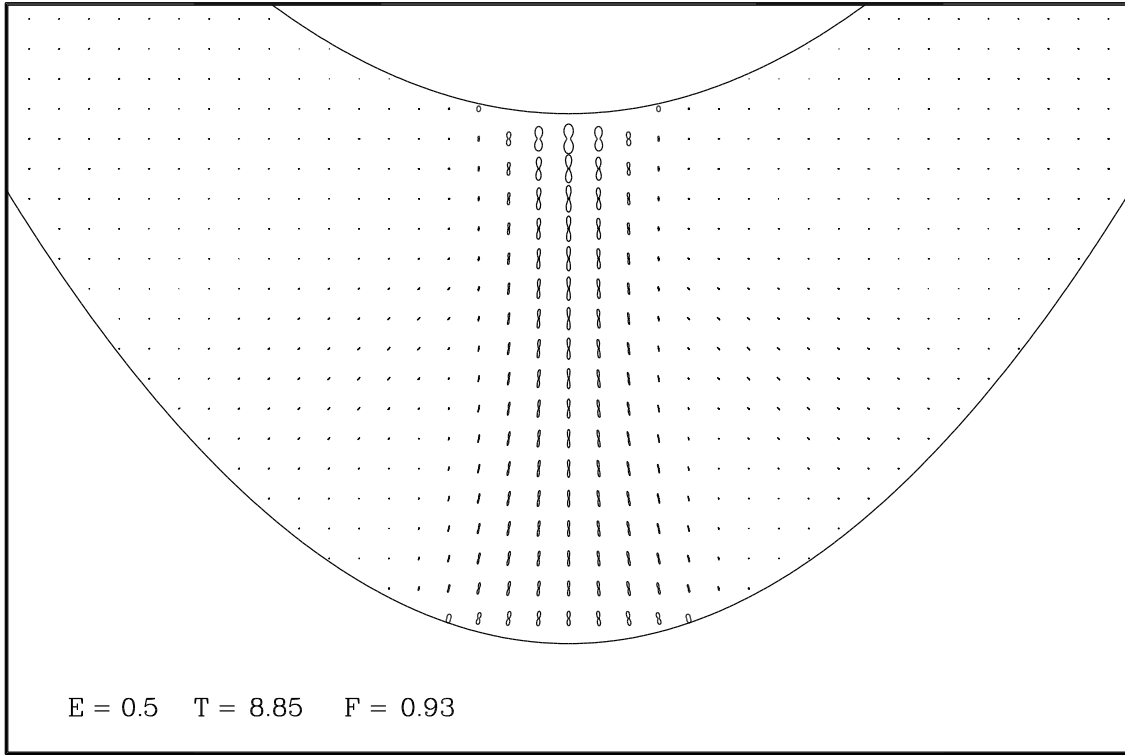


Figura 5.51: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 8,85$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,086$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical (duas voltas).

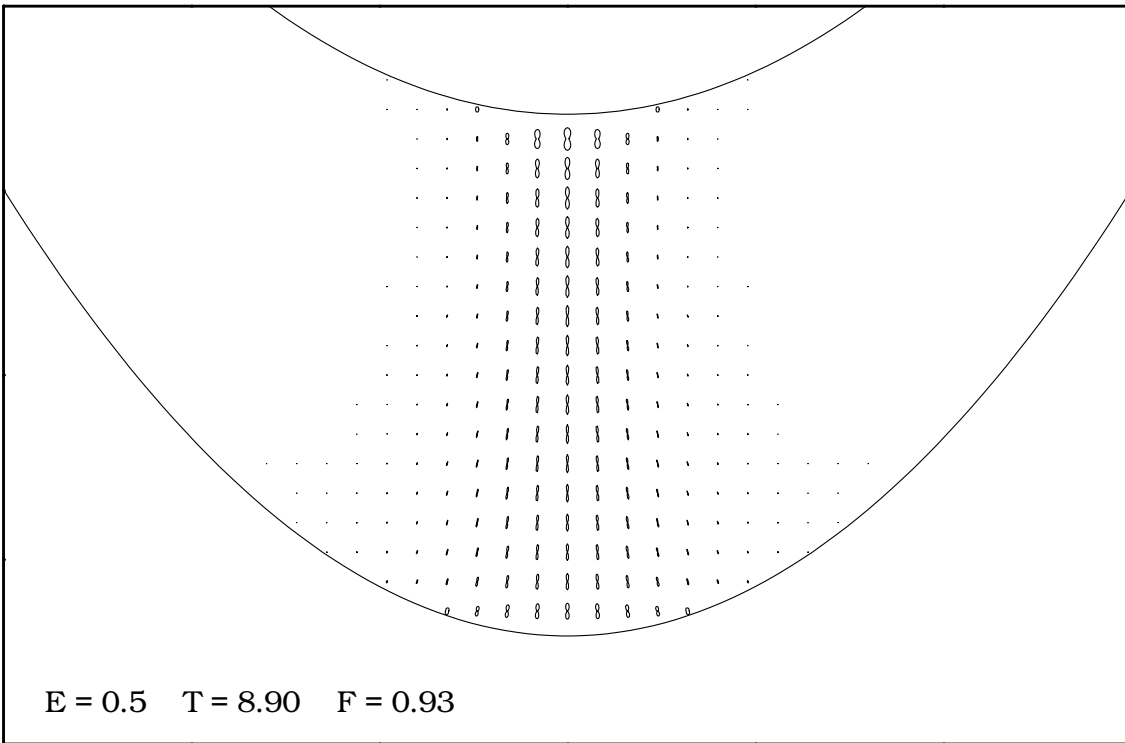
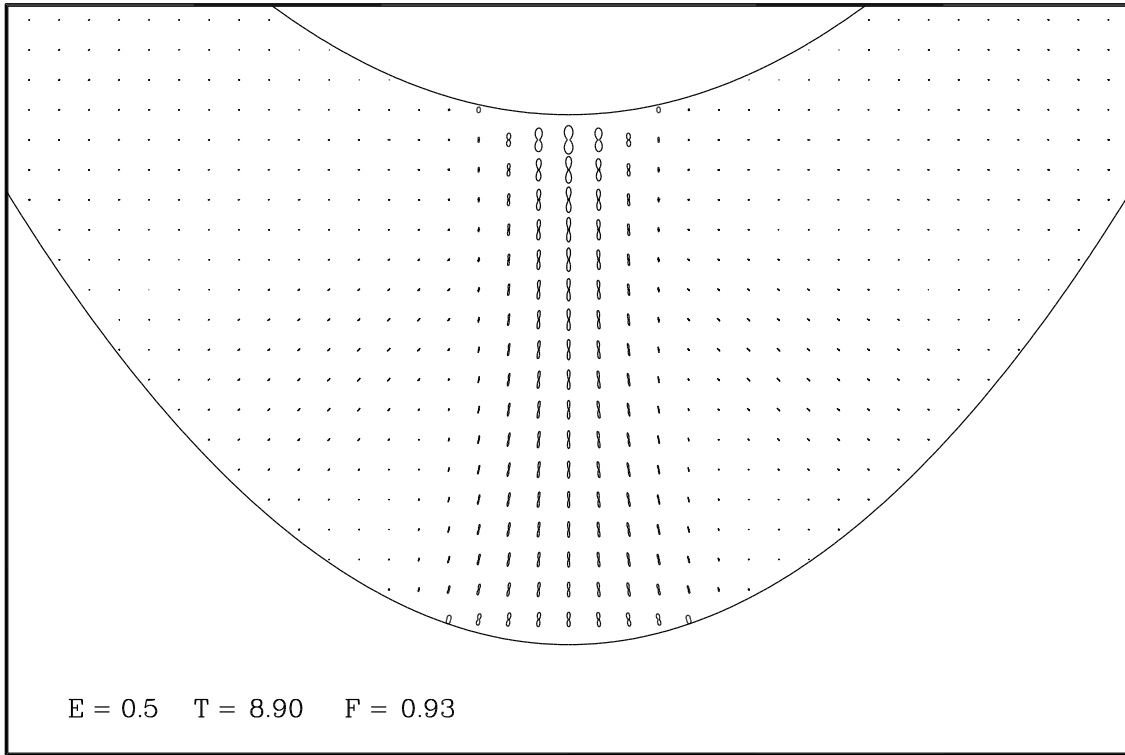


Figura 5.52: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 8,9$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,086$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical (duas voltas).

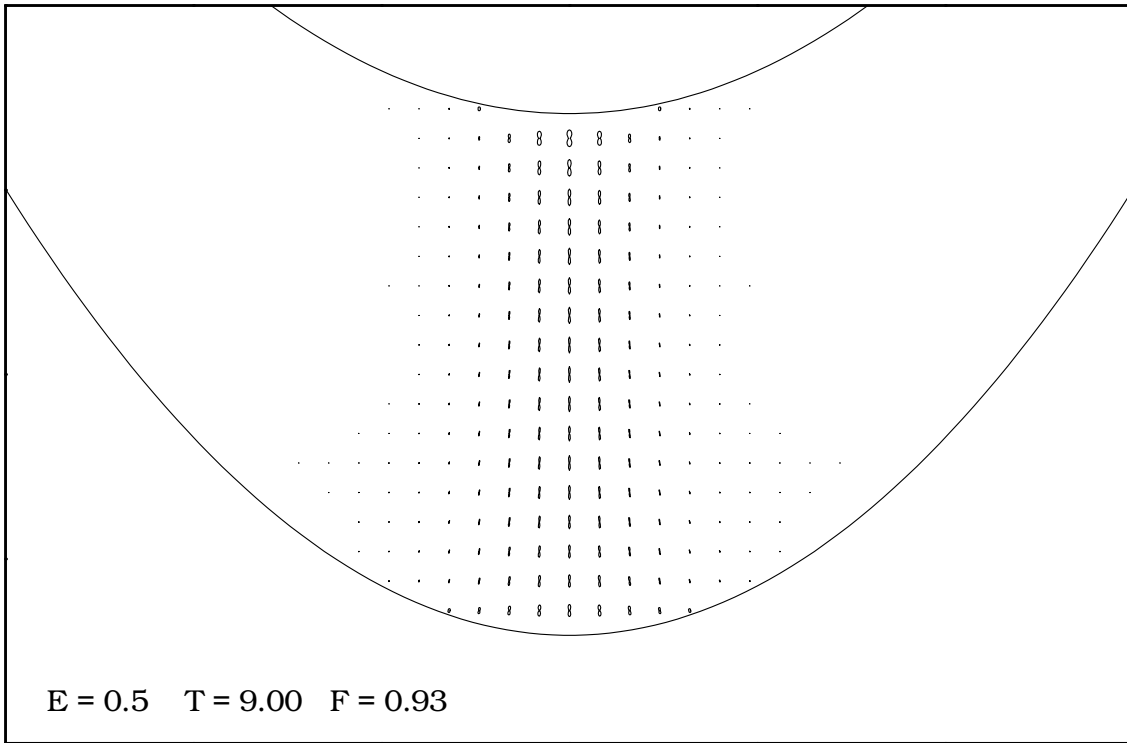
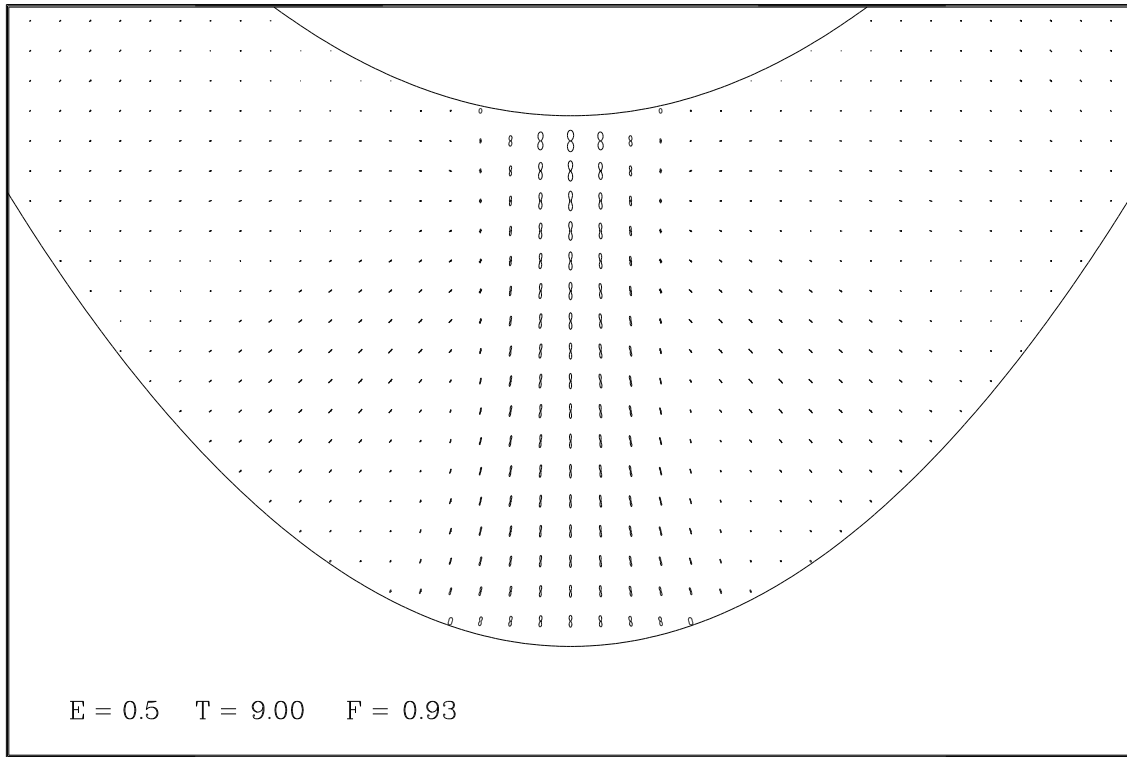


Figura 5.53: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 9,0$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,086$). Para o cálculo semiclássico procuramos somente uma trajetória complexa a partir da órbita vertical (duas voltas).

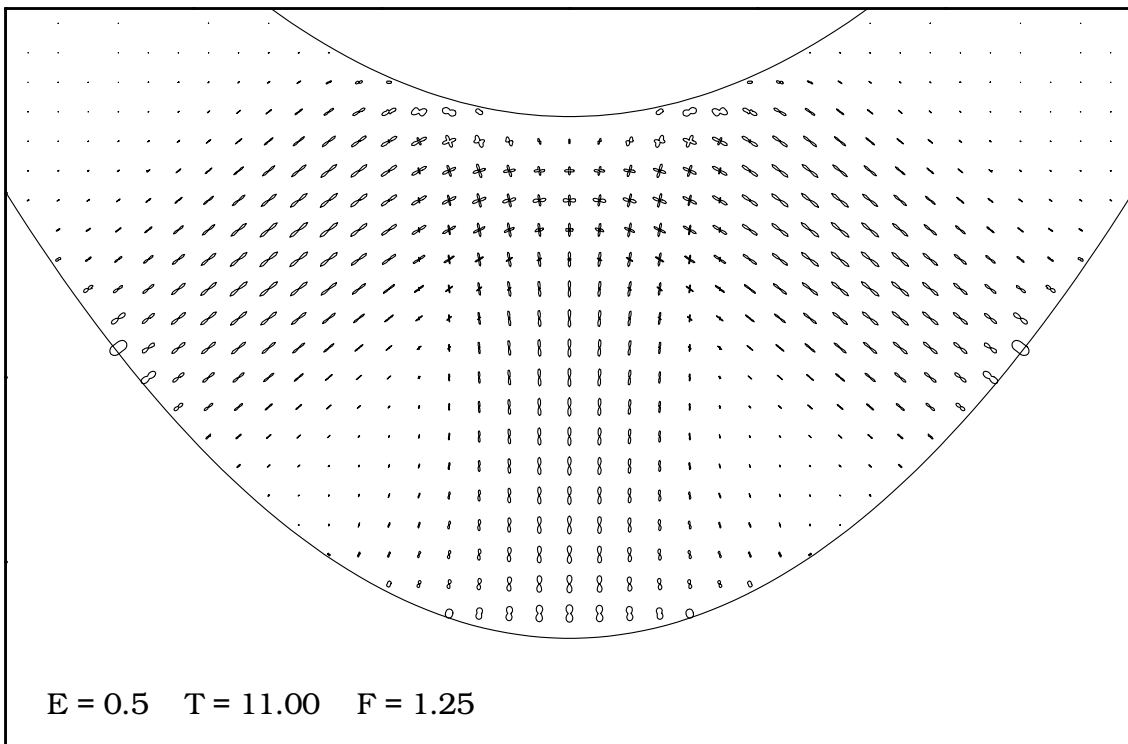
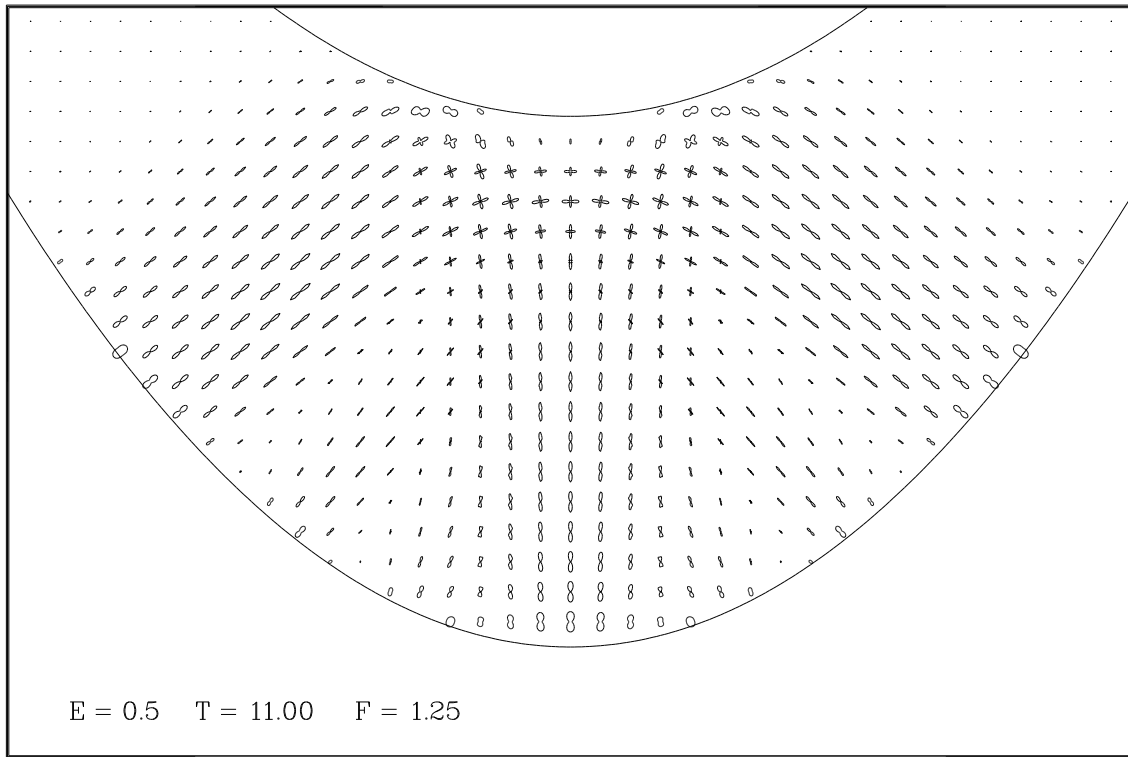


Figura 5.54: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 11,00$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F = 0,064$). Para o cálculo semiclassico procuramos três trajetórias complexas a partir das órbitas periódicas mostradas na figura 5.23.

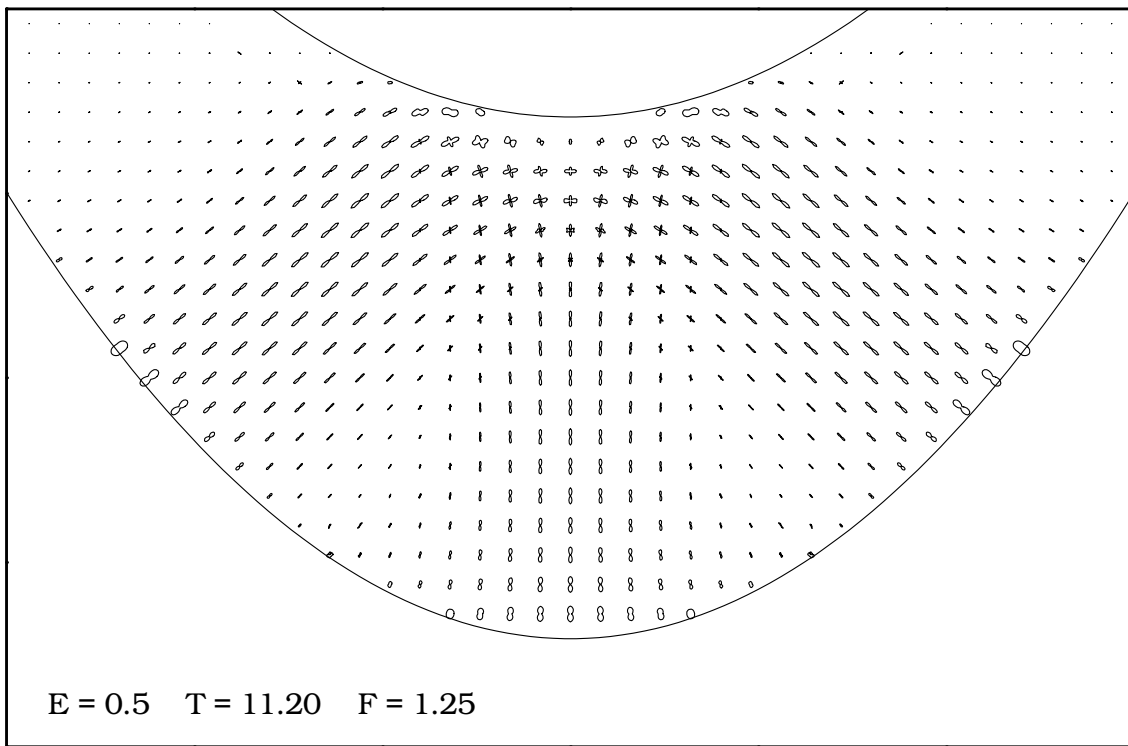
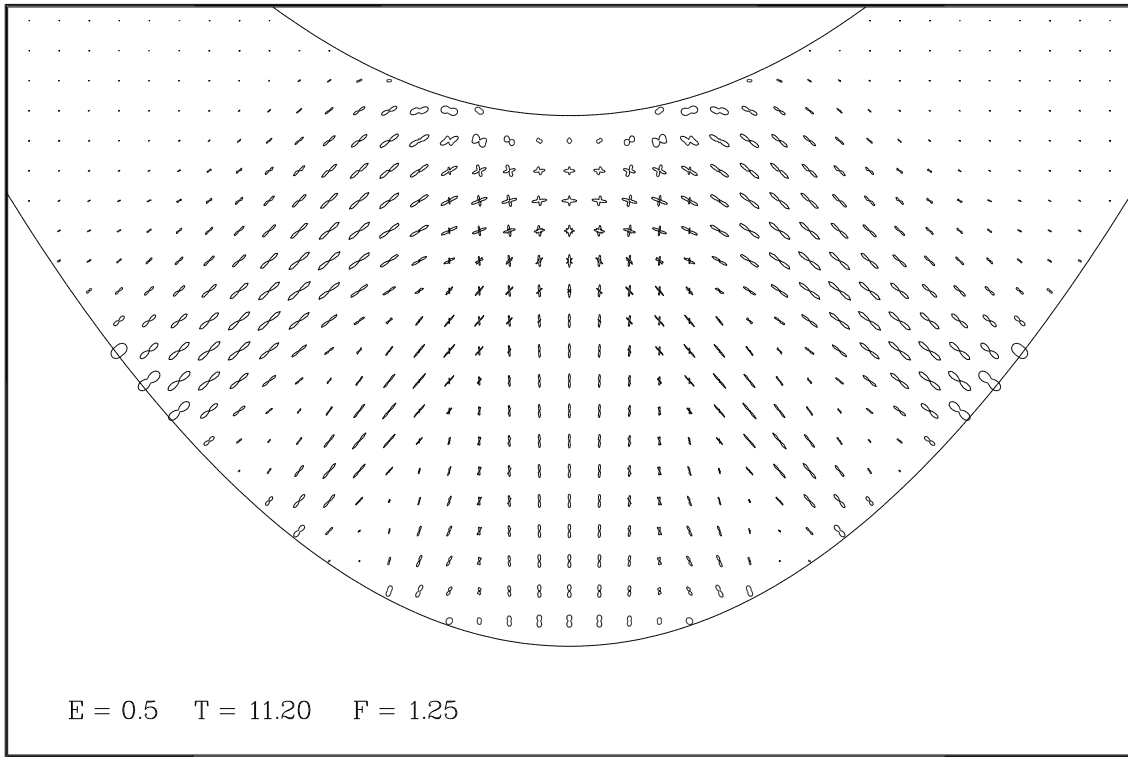


Figura 5.55: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclassica (em baixo), para $T = 11,20$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F = 0,064$). Para o cálculo semiclassico procuramos três trajetórias complexas a partir das órbitas periódicas mostradas na figura 5.23.

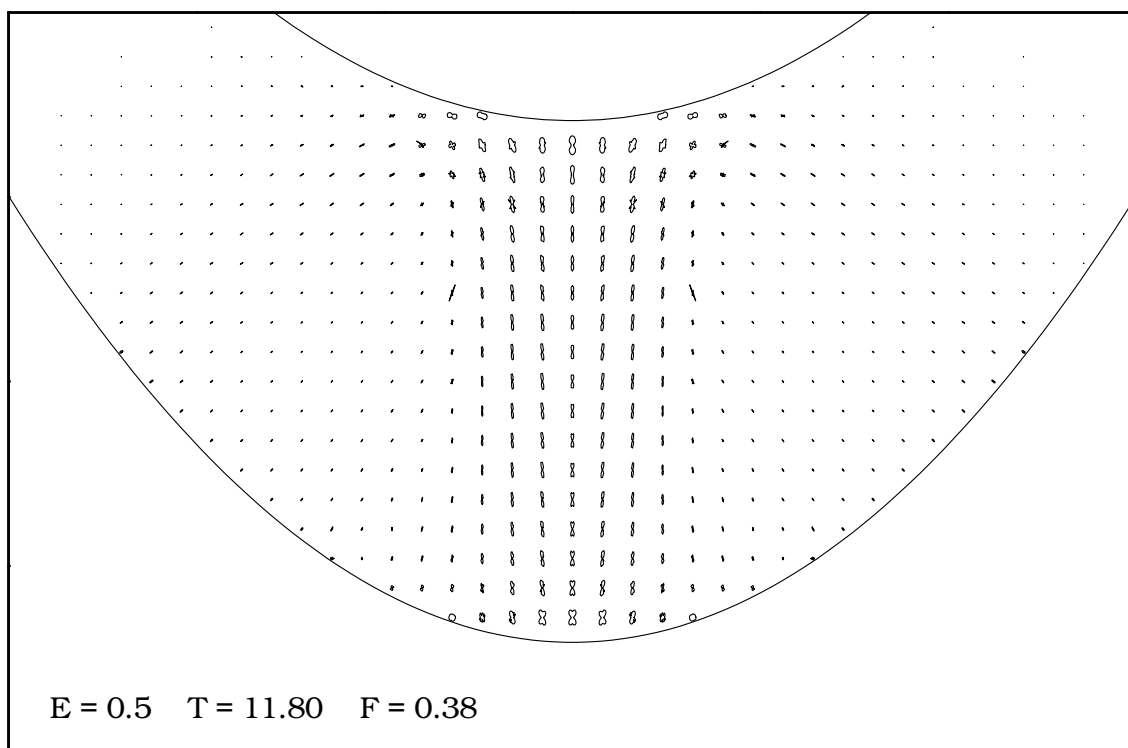
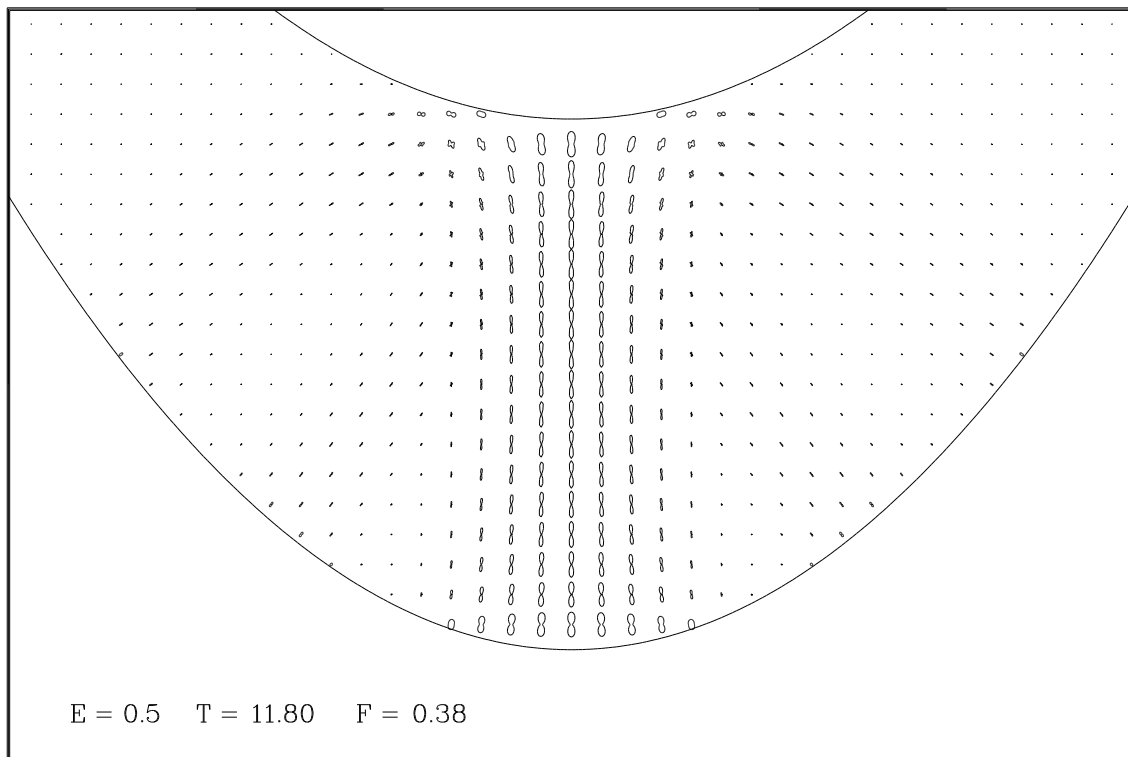


Figura 5.56: Probabilidade de retorno exata (em cima) e semiclássica (em baixo), para $T = 11,80$ ($R_{\text{ref}} = 0,08/F \approx 0,21$). Para o cálculo semiclássico procuramos três trajetórias complexas a partir das órbitas periódicas mostradas na figura 5.23.

Capítulo 6

Considerações Finais

O nosso trabalho de Mestrado, finalizado em Março de 2.000, consistiu em realizar o cálculo do propagador diagonal semiclássico, equação (1.34), para o potencial Nelson, na vizinhança da órbita vertical. Alguns dos resultados daquela época foram aproveitados na seção 5.3. Portanto, quando iniciamos o Doutorado, sabíamos que a fórmula semiclássica do propagador diagonal produzia ótimos resultados para aquela região. Pretendíamos, então, incrementar o estudo: estudar a probabilidade de retorno semiclássica em regiões habitadas por mais de uma órbita periódica, e entender melhor o problema das trajetórias não-contribuintes, já encontradas no trabalho de Mestrado. Dentre essas duas tarefas, a primeira seria de grande importância, pois serviria para mostrar o resultado da interferência de duas contribuições de trajetórias complexas, caso as encontrássemos, mostrando a eficiência da fórmula semiclássica para esse tipo de ocorrência. Com relação às trajetórias não-contribuintes, pretendíamos simplesmente nos aprofundar no assunto, uma vez que já admitíamos que sua exclusão só seria possível *a posteriori*, ou seja, depois do cálculo da função F . Até aquela época, não havíamos nos deparados com o problema das cáusticas, nem com trajetórias não-contribuintes com parte imaginária de F positiva.

A implementação numérica da fórmula semiclássica do propagador para o potencial Nelson, na região onde existe mais de uma trajetória, produziu, por exemplo, o resultado apresentado na figura 5.8b, excluindo as trajetórias cuja parte imaginária de F era negativa. Um estudo detalhado dessa figura mostrou que o grande causador desses resultados espúrios era o comportamento de divergência do pré-fator. Passamos, então, a relacioná-lo com os conceitos de cáustica e bifurcação de trajetórias. Também compreendemos que essas trajetórias não poderiam ser classificadas como não-contribuintes. O problema estava na aproximação realizada, que não contemplava certa topologia da função F , associada a trajetórias críticas muito semelhantes, que é o caso da região da bifurcação.

Compreendendo melhor o problema da divergência do pré-fator, fomos capazes de reproduzir satisfatoriamente todos os gráficos polares quânticos, até valores de T inferiores à 7,7. No entanto, para este valor de T , o ponto de bifurcação já se encontrava suficientemente distante, de modo que não havia qualquer indício da divergência do pré-fator. Porém, os resultados semiclássicos já não eram tão fiéis aos exatos, principalmente em determinada região, como mostramos na figura 5.17. Passamos, então, a investigar o que poderia estar ocorrendo naquela região de parâmetros. A primeira idéia foi calcular a probabilidade de retorno para a região comprometida, em função do tempo, de modo que pudéssemos ter uma visão mais geral do entorno do ponto de bifurcação. Obtemos, desta maneira, os gráficos da figura 5.18. Tendo em vista esses gráficos, e através do conhecimento teórico que diz respeito ao Fenômeno de Stokes, pudemos concluir que, após a bifurcação, somente uma trajetória poderia contribuir na fórmula semiclássica do propagador. Assim, reproduzimos satisfatoriamente os resultados exatos suficientemente longe de um ponto de bifurcação. Finalmente, para valores de T próximos de 11, conseguimos encontrar a situação onde duas trajetórias complexas contribuíam significativamente para o valor do propagador, verificando que as interferências eram bem reproduzidas pela fórmula semiclássica.

Com relação aos gráficos polares apresentados na tese, gostaríamos de realçar a sua eficiência para visualizar toda a superfície de energia, para determinado valor de T . Note como temos uma noção do valor da probabilidade de retorno em todo o espaço de fase q'_x, q'_y, p'_x, p'_y . Apesar dessa visível qualidade, esse tipo de representação gráfica também expõem, com facilidade, os problemas que podem aparecer na fórmula semiclássica, como observamos no decorrer do capítulo 5. Para tratar cada problema, não podemos nos limitar a observar somente os gráficos polares, pois ele não é capaz de fornecer detalhes de um cálculo. No entanto, estudando os detalhes e tomando as devidas precauções, os gráficos polares voltam a ser importantes na tarefa de testá-las.

A dificuldade de encontrar as trajetórias complexas envolvidas no cálculo da probabilidade de retorno é contornada, pelo menos na vizinhança das órbitas periódicas, quando utilizamos o método numérico da matriz de monodromia. Isso porque o método converge bem quando trajetórias tentativas são próximas das convergidas. A limitação do método à vizinhança de órbitas periódicas não representa um grande viés no limite semiclássico, pois sabemos que a contribuição relevante à probabilidade de retorno tem origem nas órbitas periódicas. Caso seja necessária a inclusão de trajetórias distantes de órbitas periódicas, podemos utilizar o método descrito na seção 2.3, pois, mesmo sendo de difícil aplicação a sistemas com mais de uma dimensão, não há nada que impeça a sua utilização.

Com relação a divergência do pré-fator, acreditamos ter feito grandes avanços em seu estudo. Para a sua explicação, a interpretação de cáustica já existia, quando se tratava de sistemas unidimensionais. A divergência também já tinha sido relacionada com a proximidade de duas trajetórias

contribuintes. No entanto, a idéia de bifurcação de trajetórias ainda não tinha sido citada. No nosso trabalho, a compreendemos teoricamente, e a ilustramos na aplicação numérica realizada. Além disso, propomos uma representação dual para o propagador que promete resolver o problema da cáustica.

A respeito da inclusão ou exclusão de trajetórias complexas, estudamos intensamente o Fenômeno de Stokes, que justifica tal arbitrariedade. Concluimos que os critérios físicos são suficientes para classificar trajetórias como contribuintes ou não-contribuintes. Inclusive, para valores de T depois da bifurcação, devemos necessariamente excluir uma das trajetórias, para evitar uma descontinuidade no valor do propagador. No caso estudado na seção 5.5, note como uma trajetória não muito complexa foi eliminada, derrubando qualquer idéia que diria que trajetórias quase reais não devem ser eliminadas.

É importante comentar que os gráficos exatos da probabilidade de retorno foram construídos a mais de 10 anos [41] e, finalmente, foram reproduzidos através de um método semiclássico. De fato, já havia sido feita uma tentativa de reproduzi-los semiclassicamente. A idéia utilizada foi fazer uma expansão gaussiana das funções envolvidas na fórmula semiclássica do propagador, em torno das órbitas periódicas reais, mas os resultados não foram satisfatórios [41]. Com isso, podemos também concluir que as trajetórias complexas são realmente necessárias para a construção de métodos semiclássicos, na representação de estados coerentes.

Daqui em diante, ainda pretendemos realizar algumas tarefas. A primeira é a implementação numérica da teoria desenvolvida para lidar com a cáustica (seção 3.3), a fim de testá-la. Também gostaríamos de investir na questão da bifurcação de trajetórias complexas. Como as órbitas periódicas do potencial Nelson já foram estudadas, pretendemos estabelecer alguma conexão entre a bifurcação das órbitas periódicas e bifurcação das trajetórias clássicas complexas. Além disso, sabemos que o potencial Nelson apresenta uma transição de um regime regular (baixas energias) para um regime caótico (altas energias). Seria interessante fazer um estudo da probabilidade de retorno para essa transição.

Apêndice A

Cálculo do Determinante da Matriz Q (equação (1.27))

Como vimos na equação (1.28), o cálculo do propagador envolve o conhecimento do determinante de Q (1.27). Para resolver esse determinante, seguiremos a referência [41]. Quando começamos a resolvê-lo pelo lado esquerdo superior desta matriz, notamos que ele se relaciona recursivamente com outros cinco determinantes da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\Delta^{(N-1)} - \Delta^{(N-2)} &= -\mathcal{B}_{xx}^{N-1} \Delta_{22}^{(N-1)} - \mathcal{B}_{xy}^{N-1} \Delta_{12}^{(N-1)} - \mathcal{B}_{yx}^{N-1} \Delta_{21}^{(N-1)} - \\ &- \mathcal{B}_{yy}^{N-1} \Delta_{11}^{(N-1)} + \theta(\epsilon^2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{11}^{(N-1)} - \Delta_{11}^{(N-2)} &= \mathcal{A}_{yy}^{N-1} \Delta^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2} \Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2} \Delta_{12}^{(N-2)} - \\ &- \mathcal{B}_{xx}^{N-1} \Delta_0^{(N-2)} - 2\mathcal{C}_{yy}^{N-3/2} \Delta_{11}^{(N-2)} + \theta(\epsilon^2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{22}^{(N-1)} - \Delta_{22}^{(N-2)} &= \mathcal{A}_{xx}^{N-1} \Delta^{(N-2)} - 2\mathcal{C}_{xx}^{N-3/2} \Delta_{22}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2} \Delta_{12}^{(N-2)} - \\ &- \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2} \Delta_{21}^{(N-2)} - \mathcal{B}_{yy}^{N-1} \Delta_0^{(N-2)} + \theta(\epsilon^2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{12}^{(N-1)} - \Delta_{12}^{(N-2)} &= \mathcal{A}_{yx}^{N-1} \Delta^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2} \Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2} \Delta_{22}^{(N-2)} - \\ &- \left(\mathcal{C}_{yy}^{N-3/2} + \mathcal{C}_{xx}^{N-3/2} \right) \Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{B}_{yx}^{N-1} \Delta_0^{(N-2)} + \theta(\epsilon^2),\end{aligned}$$

$$\Delta_{21}^{(N-1)} - \Delta_{21}^{(N-2)} = \mathcal{A}_{xy}^{N-1} \Delta^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2} \Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2} \Delta_{22}^{(N-2)} -$$

$$\begin{aligned}
& - \left(\mathcal{C}_{xx}^{N-3/2} + \mathcal{C}_{yy}^{N-3/2} \right) \Delta_{21}^{(N-2)} + \mathcal{B}_{xy}^{N-1} \Delta_0^{(N-2)} + \theta(\epsilon^2), \\
\Delta_0^{(N-1)} - \Delta_0^{(N-2)} & = \mathcal{A}_{xx}^{N-1} \Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{A}_{yy}^{N-1} \Delta_{22}^{(N-2)} - \mathcal{A}_{xy}^{N-1} \Delta_{12}^{(N-2)} - \\
& - \mathcal{A}_{yx}^{N-1} \Delta_{21}^{(N-2)} - 2 \left(\mathcal{C}_{xx}^{N-3/2} + \mathcal{C}_{yy}^{N-3/2} \right) \Delta_0^{(N-2)} + \theta(\epsilon^2),
\end{aligned} \tag{A.1}$$

onde Δ_0 é o determinante de $\mathbf{Q}$ sem as primeiras e segundas, linhas e colunas, e Δ_{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 (tamanho da matriz). Por exemplo, para $(N-1)$, a matriz $\mathbf{Q}$ está completa, ou seja, formada por todos os elementos para o tempo indo de 0 a T , conforme está representada em (1.25). Para $(N-2)$, $\mathbf{Q}$ tem o último passo de tempo a menos, ou seja, não tem as quatro primeiras linhas e colunas. E assim por diante.

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

$$\begin{array}{ll}
u_x \rightarrow \chi_1 & \delta u_x \rightarrow \xi_1 \\
u_y \rightarrow \chi_2 & \delta u_y \rightarrow \xi_2 \\
v_x \rightarrow \chi_3 & \delta v_x \rightarrow \xi_3 \\
v_y \rightarrow \chi_4 & \delta v_y \rightarrow \xi_4
\end{array} \quad \text{e} \quad \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}_{lm} = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{xx} & \mathcal{B}_{xy} & \mathcal{C}_{xx} & \mathcal{C}_{yx} \\ \mathcal{B}_{yx} & \mathcal{B}_{yy} & \mathcal{C}_{xy} & \mathcal{C}_{yy} \\ \mathcal{C}_{xx} & \mathcal{C}_{xy} & \mathcal{A}_{xx} & \mathcal{A}_{xy} \\ \mathcal{C}_{yx} & \mathcal{C}_{yy} & \mathcal{A}_{yx} & \mathcal{A}_{yy} \end{pmatrix}, \tag{A.2}$$

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 ($\epsilon \rightarrow 0$), as relações de recorrência (A.1) podem ser representadas de forma mais compacta. Omitindo a dependência temporal escrevemos:

$$-i\hbar \dot{\mathbf{D}} = \mathbf{H} \mathbf{D}, \tag{A.3}$$

onde:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \Delta \\ \Delta_{11} \\ \Delta_{22} \\ \Delta_{12} \\ \Delta_{21} \\ \Delta_0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{H}_{22} & -\mathcal{H}_{11} & -\mathcal{H}_{12} & -\mathcal{H}_{12} & 0 \\ \mathcal{H}_{44} & -2\mathcal{H}_{24} & 0 & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{11} \\ \mathcal{H}_{33} & 0 & -2\mathcal{H}_{13} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{22} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_+ & 0 & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & 0 & -\mathcal{H}_+ & \mathcal{H}_{12} \\ 0 & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{44} & -\mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{34} & -2\mathcal{H}_+ \end{pmatrix},$$

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

A intenção agora é associar o determinante Δ a alguma quantidade física do sistema. Para ficar mais fácil a associação, vamos transformar o objeto D (A.3) da seguinte maneira:

$$D' = D e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_+ dt}, \quad (\text{A.4})$$

de modo que a equação (A.3) seja escrita como:

$$-i\hbar \dot{D}' = H' D', \text{ onde } H' = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_+ & -\mathcal{H}_{22} & -\mathcal{H}_{11} & -\mathcal{H}_{12} & -\mathcal{H}_{12} & 0 \\ \mathcal{H}_{44} & \mathcal{H}_- & 0 & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{11} \\ \mathcal{H}_{33} & 0 & -\mathcal{H}_- & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{22} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & 0 & 0 & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & 0 & 0 & \mathcal{H}_{12} \\ 0 & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{44} & -\mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_+ \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

A Matriz Q para $T = 0$

Avaliaremos agora o valor dos determinantes definidos pelas relações (A.1) 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 ϵ , é escrita como:

$$Q(\epsilon) = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{xx}^1 & \mathcal{B}_{xy}^1 & 1 & 0 \\ \mathcal{B}_{yx}^1 & \mathcal{B}_{yy}^1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \mathcal{A}_{xx}^1 & \mathcal{A}_{xy}^1 \\ 0 & 1 & \mathcal{A}_{yx}^1 & \mathcal{A}_{yy}^1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

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

$$\Delta(0) = 1 \text{ e } \Delta_m(0) = 0, \text{ para } m = 0, 11, 12, 22 \text{ e } 21. \quad (\text{A.7})$$

Matriz Assimétrica T e o Determinante de Q

Para continuarmos a resolução do propagador, introduziremos a chamada matriz assimétrica T, cujos elementos são definidos por $T_{ij} = \xi_i \xi'_j - \xi'_i \xi_j$, onde ξ_k e ξ'_k são pequenos deslocamentos definidos pelas equações (A.2). Ressaltamos que o símbolo “linha” ($'$), na definição de T_{ij} , não tem qualquer relação com a definição (A.4); estamos somente representando a idéia de ξ_k e ξ'_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 (1.20) na nova notação dada pelas equações (A.2):

$$\dot{\chi}_1 = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_3}, \quad \dot{\chi}_3 = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_1}, \quad \dot{\chi}_2 = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_4} \quad \text{e} \quad \dot{\chi}_4 = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_2}. \quad (\text{A.8})$$

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

$$i\hbar \dot{\xi}_1 = \sum_j \mathcal{H}_{3j} \xi_j, \quad i\hbar \dot{\xi}_3 = -\sum_j \mathcal{H}_{1j} \xi_j, \quad i\hbar \dot{\xi}_2 = \sum_j \mathcal{H}_{4j} \xi_j \quad \text{e} \quad i\hbar \dot{\xi}_4 = -\sum_j \mathcal{H}_{2j} \xi_j. \quad (\text{A.9})$$

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 (A.5), de forma que se relacionam:

$$\begin{aligned} T_{12} &\longleftrightarrow \Delta'_0, & T_{34} &\longleftrightarrow \Delta', & T_{23} &\longleftrightarrow \Delta'_{11}, \\ T_{14} &\longleftrightarrow -\Delta'_{22}, & T_{13} &\longleftrightarrow \Delta'_{12}, & T_{24} &\longleftrightarrow -\Delta'_{21}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Para atestar este resultado, veja, por exemplo, o que ocorre com o componente $\dot{T}_{12} = \dot{\xi}_1 \xi'_2 - \dot{\xi}'_1 \xi_2 + \xi_1 \dot{\xi}'_2 - \xi'_1 \dot{\xi}_2$. Utilizando as equações (A.9), podemos reescrevê-lo como:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{T}_{12} &= (\xi_1 \xi'_2 - \xi'_1 \xi_2) (\mathcal{H}_{31} + \mathcal{H}_{42}) + (\xi_2 \xi'_3 - \xi'_2 \xi_3) (-\mathcal{H}_{33}) \\ &+ (\xi_1 \xi'_4 - \xi'_1 \xi_4) (\mathcal{H}_{44}) + (\xi_1 \xi'_3 - \xi'_1 \xi_3) (\mathcal{H}_{43}) + (\xi_2 \xi'_4 - \xi'_2 \xi_4) (-\mathcal{H}_{34}) \\ &= T_{12} (\mathcal{H}_{31} + \mathcal{H}_{42}) - T_{23} \mathcal{H}_{33} + T_{14} \mathcal{H}_{44} + T_{13} \mathcal{H}_{43} - T_{24} \mathcal{H}_{34}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

que é uma equação equivalente à última das (A.5), ao fazermos a substituição definida por (A.10).

De fato, o determinante que procuramos Δ está relacionado com a componente T_{34} do tensor. Explicitando agora a dependência temporal, podemos escrever esta relação como:

$$\Delta(t) = [\xi_3(t) \xi'_4(t) - \xi'_3(t) \xi_4(t)] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_+ dt' \right). \quad (\text{A.12})$$

Podemos agora definir de forma coerente uma matriz M que propaga, até o tempo T , estes pequenos deslocamentos: $\xi_i(T) = \sum_{j=1}^4 M_{ij} \xi_j(0)$. Aplicando-a diretamente à equação (A.12) obtemos:

$$\Delta(T) = (M_{3j} \xi_j(0) M_{4j'} \xi_{j'}'(0) - M_{3j} \xi_j'(0) M_{4j'} \xi_{j'}(0)) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^T H_+ dt' \right\}, \quad (\text{A.13})$$

onde foi usado a convenção de Einstein $M_{ij} \xi_j(0) = \sum_{j=1}^4 M_{ij} \xi_j(0)$, para $i = 1, \dots, 4$. Levando em conta as relações (A.10), percebemos que a maneira de respeitarmos as condições iniciais (A.7) é fazendo $\xi_j(0) = \delta_{3j}$ e $\xi_j'(0) = \delta_{4j}$. De posse destes valores, basta substituí-los na equação (A.13) para obtermos $\Delta(T)$ em termos dos componentes da matriz M_{ij} :

$$\Delta(T) = (M_{33} M_{44} - M_{34} M_{43}) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \mathcal{H}_+ dt \right\}, \quad (\text{A.14})$$

que é a quantidade desejada, $\det Q$, a ser inserida na equação (1.28).

Apêndice B

O Método do Ponto de Sela Revisado

Neste apêndice, pretendemos estudar a seguinte integral:

$$I = \int_{\gamma} dz_x dz_y g(z_x, z_y) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} f(z_x, z_y) \right\}, \quad (\text{B.1})$$

no limite assintótico $\hbar \rightarrow 0$. O caminho de integração γ é suposto ser tal que a integral convirja. As variáveis de integração z_x e z_y são complexas, sendo que $z_x = \Re z_x + i \Im z_x$ e $z_y = \Re z_y + i \Im z_y$.

Como queremos avaliar a integral I no limite assintótico $\hbar \rightarrow 0$, é conveniente utilizar o método de ponto de sela [51, 52, 68]. Para isso, o primeiro passo é identificar os pontos críticos, que, neste caso, são somente os pontos de sela, que, portanto, satisfazem a equação:

$$\delta f = \frac{\partial f}{\partial z_x} \delta z_x + \frac{\partial f}{\partial z_y} \delta z_y = 0. \quad (\text{B.2})$$

Localizados estes pontos (pode ser que exista mais de um par (z_x, z_y)), o método de ponto de sela nos garante que apenas a contribuição de uma pequena vizinhança deles merece ser considerada. Para facilitar, considere que existe somente um ponto de sela, de modo que expandimos as funções que aparecem na integral (B.1) em torno dele, que chamaremos $\bar{\mathbf{p}} = (\bar{z}_x, \bar{z}_y)$:

$$\begin{aligned} q(z_x, z_y) &= q(\bar{z}_x, \bar{z}_y) + \frac{\partial q}{\partial z_x} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x + \frac{\partial q}{\partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_y \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 q}{\partial z_x^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x^2 + 2 \frac{\partial^2 q}{\partial z_x \partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x \delta z_y + \frac{\partial^2 q}{\partial z_y^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_y^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 q}{\partial z_x^3} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x^3 + 3 \frac{\partial^3 q}{\partial z_x^2 \partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x^2 \delta z_y + 3 \frac{\partial^3 q}{\partial z_x \partial z_y^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_x \delta z_y^2 + \frac{\partial^3 q}{\partial z_y^3} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}} \delta z_y^3 \right) \\
& + \mathcal{O}(\delta z_x^n \delta z_y^m),
\end{aligned} \tag{B.3}$$

onde $q(z_x, z_y)$ pode ser tanto $g(z_x, z_y)$ quanto $f(z_x, z_y)$ e $n + m \geq 4$. Porém, consideraremos que $q(z_x, z_y)$ varia mais lentamente que $g(z_x, z_y)$. Então, expandiremos q até primeira ordem, enquanto que g será expandida até terceira ordem. Devemos agora substituir estas aproximações em (B.1) para começar a calcular a integral. Lembrando que a primeira derivada de $f(z_x, z_y)$ calculada no ponto de sela é nula, a equação (B.1) fica:

$$I \approx G_I \left[g(\bar{z}_x, \bar{z}_y) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} f(\bar{z}_x, \bar{z}_y) \right\} \right], \tag{B.4}$$

onde G_I é a integral:

$$\begin{aligned}
G_I &= \int dz_x dz_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2 + Dz_x^3 + Ez_x^2 z_y + Fz_x z_y^2 + Gz_y^3] \right\} \\
&+ \frac{H}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int dz_x dz_y z_x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2] \right\} \\
&+ \frac{I}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int dz_x dz_y z_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2] \right\}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

e:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial z_x^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & B &= \frac{\partial^2 f}{\partial z_x \partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & C &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial z_y^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \\
D &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial z_x^3} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & E &= \frac{1}{2} \frac{\partial^3 f}{\partial z_x^2 \partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & F &= \frac{1}{2} \frac{\partial^3 f}{\partial z_x \partial z_y^2} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & G &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial z_y^3} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, \\
H &= \frac{\partial g}{\partial z_x} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}, & I &= \frac{\partial g}{\partial z_y} \Big|_{\bar{\mathbf{p}}}.
\end{aligned} \tag{B.6}$$

onde assumimos que o contorno γ pode ser deformado de forma a passar por $\bar{\mathbf{p}}$. No caso de *eliminarmos* as correções em terceira ordem de (B.5), podemos reescrever G_I como:

$$G_I^{(2)} = \int dz_x dz_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2] \right\}. \tag{B.7}$$

A resolução desta integral é bastante simples e pode ser diretamente calculada ao notar que o argumento da exponencial pode ser escrito como:

$$Az_x^2 + Bz_xz_y + Cz_y^2 = \begin{bmatrix} z_x & z_y \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} A & B/2 \\ B/2 & C \end{bmatrix}}_{\mathbf{L}} \begin{bmatrix} z_x \\ z_y \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

Agora, nós podemos fazer uma transformação na matriz $\mathbf{L}$ de tal forma que a matriz final $\mathbf{L}'$ seja diagonal. Para isto, vamos calcular os autovalores da matriz $\mathbf{L}$:

$$\lambda_{\pm} = \frac{\text{tr } \mathbf{L}}{2} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{\det \mathbf{L}}{(\text{tr } \mathbf{L})^2}} \right\}, \quad (\text{B.9})$$

onde $\text{tr } \mathbf{L}$ é o traço de $\mathbf{L}$, e $\det \mathbf{L}$ o seu determinante. A partir de (B.9), podemos construir os seguintes autovetores:

$$u_+ = \frac{1}{N_+} \begin{bmatrix} -B/2 \\ A - \lambda_+ \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_- = \frac{1}{N_-} \begin{bmatrix} -B/2 \\ A - \lambda_- \end{bmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

onde:

$$N_+ = \sqrt{(B/2)^2 + (A - \lambda_+)^2} \quad \text{e} \quad N_- = \sqrt{(B/2)^2 + (A - \lambda_-)^2}. \quad (\text{B.11})$$

Pode-se verificar que, sendo λ_+ e λ_- distintos, os vetores u_+ e u_- formam uma base ortonormal. Assim, podemos definir a seguinte transformação, que leva as coordenadas de um vetor descrito na base $\{z_x, z_y\}$ para suas coordenadas na base $\{u_+, u_-\}$:

$$\begin{bmatrix} u_+ \\ u_- \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -N_+^{-1} B/2 & N_+^{-1}(A - \lambda_+) \\ -N_-^{-1} B/2 & N_-^{-1}(A - \lambda_-) \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}_u^z} \begin{bmatrix} z_x \\ z_y \end{bmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

cuja transformação inversa é:

$$\begin{bmatrix} z_x \\ z_y \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{B/2(\lambda_- - \lambda_+)} \begin{bmatrix} N_+(A - \lambda_-) & -N_-(A - \lambda_+) \\ N_+ B/2 & -N_- B/2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}_z^u} \begin{bmatrix} u_+ \\ u_- \end{bmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

Aplicando estas transformações à equação (B.8) temos:

$$\begin{aligned}
Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2 &= \begin{bmatrix} z_x & z_y \end{bmatrix} \underbrace{A_u^{zT} \left(A_u^{zT} \right)^{-1}}_1 \underbrace{L \left(A_u^z \right)^{-1} A_u^z}_1 \begin{bmatrix} z_x \\ z_y \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} u_+ & u_- \end{bmatrix} \underbrace{A_z^{uT} L \left(A_u^z \right)^{-1}}_{L'} \begin{bmatrix} u_+ \\ u_- \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

de modo que podemos escrever:

$$Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2 = \begin{bmatrix} u_+ & u_- \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix}}_{L'} \begin{bmatrix} u_+ \\ u_- \end{bmatrix}. \tag{B.15}$$

Como o Jacobiano da transformação A_u^z , equação (B.12), vale 1:

$$J \left(\frac{\partial u_+, \partial u_-}{\partial z_x, \partial z_y} \right) = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial u_+}{\partial z_x} & \frac{\partial u_+}{\partial z_y} \\ \frac{\partial u_-}{\partial z_x} & \frac{\partial u_-}{\partial z_y} \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} -N_+^{-1} B/2 & N_+^{-1} (A - \lambda_+) \\ -N_-^{-1} B/2 & N_-^{-1} (A - \lambda_-) \end{bmatrix} = 1. \tag{B.16}$$

a equação (B.7) pode ser escrita como:

$$G_I^{(2)} = \int du_+ du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2 + \lambda_- u_-^2] \right\} = \sqrt{\frac{-\hbar^2 \pi^2}{\lambda_+ \lambda_-}} = \frac{i\hbar\pi}{\sqrt{\det L}}. \tag{B.17}$$

O caminho de integração nos planos complexos u_+ e u_- devem satisfazer $-\frac{\alpha_+}{2} < \theta_x < \frac{\pi - \alpha_+}{2}$ e $\pi - \frac{\alpha_+}{2} < \theta_x < \frac{3\pi}{2} - \frac{\alpha_+}{2}$, onde α_+ é a fase de λ_+ e α_- é a fase de λ_- .

Podemos notar, através de (B.17), que a aproximação de (B.5), até segunda ordem, diverge quando λ_+ e/ou λ_- vai a zero, ou seja, quando $\det L$ se anula. Isto é muito fácil de entender, pois no caso em que $\lambda_- = 0$, a equação (B.7) fica:

$$G_I^{(2)} = \int du_+ du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2 + \lambda_- u_-^2] \right\} = \underbrace{\int du_-}_{\infty} \underbrace{\int du_+ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2] \right\}}_{\sqrt{i\hbar\pi/\lambda_+}} = \infty. \tag{B.18}$$

Para resolver este problema, que é análogo à divergência do pré fator (capítulo 3), devemos considerar as correções em terceira ordem, afinal, o problema se deve ao fato da derivada segunda de $f(z_x, z_y)$ se anular, o que faz com que a topologia nos arredores do ponto de sela não possa mais ser aproximada por uma função quadrática, e sim por um polinômio de ordem cúbica.

Ao considerar as correções em terceira ordem, a equação (B.5) fica:

$$\begin{aligned}
G_I^{(3)} &= \int dz_x dz_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2 + Dz_x^3 + Ez_x^2 z_y + Fz_x z_y^2 + Gz_y^3] \right\} \\
&+ \frac{H}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int dz_x dz_y z_x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2] \right\} \\
&+ \frac{I}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int dz_x dz_y z_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [Az_x^2 + Bz_x z_y + Cz_y^2] \right\}, \tag{B.19}
\end{aligned}$$

sendo que podemos utilizar a mesma transformação (B.12) e (B.13), para transformar esta equação em:

$$\begin{aligned}
G_I^{(3)} &= \int du_+ du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2 + \lambda_- u_-^2 + D' u_+^3 + E' u_+^2 u_- + F' u_+ u_-^2 + G' u_-^3] \right\} \\
&+ \frac{H'}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int du_+ du_- u_+ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2 + \lambda_- u_-^2] \right\} \\
&+ \frac{I'}{g(\bar{z}_x, \bar{z}_y)} \int du_+ du_- u_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\lambda_+ u_+^2 + \lambda_- u_-^2] \right\}, \tag{B.20}
\end{aligned}$$

onde λ_+ e λ_- são dados pela expressão (B.9) e:

$$\begin{aligned}
D' &= \frac{N_+^3}{\delta \lambda^3} \left\{ \left(\frac{A_-}{B/2} \right)^3 D + \left(\frac{A_-}{B/2} \right)^2 E + \frac{A_-}{B/2} F + G \right\} \\
E' &= -\frac{N_+^2 N_-}{\delta \lambda^3} \left\{ 3 \frac{A_+}{B/2} \left(\frac{A_-}{B/2} \right)^2 D + \frac{A_-}{B/2} \left[\frac{A_-}{B/2} + 2 \frac{A_+}{B/2} \right] E + \left[\frac{A_+}{B/2} + 2 \frac{A_-}{B/2} \right] F + 3G \right\} \\
F' &= \frac{N_-^2 N_+}{\delta \lambda^3} \left\{ 3 \frac{A_-}{B/2} \left(\frac{A_+}{B/2} \right)^2 D + \frac{A_+}{B/2} \left[\frac{A_+}{B/2} + 2 \frac{A_-}{B/2} \right] E + \left[\frac{A_-}{B/2} + 2 \frac{A_+}{B/2} \right] F + 3G \right\} \\
G' &= -\frac{N_-^3}{\delta \lambda^3} \left\{ \left(\frac{A_+}{B/2} \right)^3 D + \left(\frac{A_+}{B/2} \right)^2 E + \frac{A_+}{B/2} F + G \right\} \\
H' &= +\frac{N_+}{\delta \lambda} \left\{ \frac{A_-}{B/2} H + I \right\} \\
I' &= -\frac{N_-}{\delta \lambda} \left\{ \frac{A_+}{B/2} H + I \right\} \tag{B.21}
\end{aligned}$$

sendo que, em (B.21), por praticidade, definimos $A_{\pm} = A - \lambda_{\pm}$ e $\delta \lambda = \lambda_- - \lambda_+$.

Devemos agora nos restringir ao caso onde a solução (B.17) não vale, ou seja, quando λ_+ e/ou λ_- se anula. Em primeiro lugar, devemos perceber que a maneira mais provável do $\det L$ se anular é com somente um dos autovalores se anulando. No caso dos dois autovalores serem nulos, tanto o

$\det L$ quanto o $\text{tr } L$ devem ser nulos, o que é muito difícil. Suponha então que $\det L \rightarrow 0$, mas $\text{tr } L$ não. Neste caso, podemos escrever (B.9) como:

$$\lambda_{\pm} = \frac{\text{tr } L}{2} \left\{ 1 \pm \left(1 - 2 \frac{\det L}{(\text{tr } L)^2} \right) \right\}.$$

Portanto temos:

$$\lambda_+ \approx \text{tr } L - \epsilon \quad \text{e} \quad \lambda_- \approx \frac{\det L}{\text{tr } L} \equiv \epsilon. \quad (\text{B.22})$$

Aplicando este último resultado à equação (B.20) e excluindo as duas últimas linhas desta, o que significa assumir que g varia muito lentamente em relação à f , temos:

$$\begin{aligned} G_I^{(3)} = & \int du_+ du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(A + C - \epsilon)u_+^2 + \epsilon u_-^2] \right. \\ & \left. + [(D'_1 + \epsilon D'_2)u_+^3 + (E'_1 + \epsilon E'_2)u_+^2 u_- + (F'_1 + \epsilon F'_2)u_+ u_-^2 + (G'_1 + \epsilon F'_2)u_-^3] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

que pode ser rearranjada da seguinte maneira:

$$G_I^{(3)} = \int du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\epsilon u_-^2 + (G'_1 + \epsilon F'_2)u_-^3] \right\} r(u_-), \quad (\text{B.24})$$

onde:

$$\begin{aligned} r(u_-) = & \int du_+ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(A + C - \epsilon)u_+^2 \right. \\ & \left. + (D'_1 + \epsilon D'_2)u_+^3 + (E'_1 + \epsilon E'_2)u_+^2 u_- + (F'_1 + \epsilon F'_2)u_+ u_-^2] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Note que, para esta integral, podemos considerar o termo mais importante da exponencial como sendo aquele que vai até ordem quadrática em u_+ . Não precisamos ir até os termos de ordem cúbica pois estes são desprezíveis em relação aquele de ordem quadrática; lembre-se que $\lambda_+ = A + C - \epsilon$ não se anula. Desta forma, escrevemos:

$$r(u_-) \approx \int du_+ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(A + C - \epsilon)u_+^2] \right\} = \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A + C - \epsilon}}. \quad (\text{B.26})$$

Portanto, a equação (B.24) fica:

$$\begin{aligned} G_I^{(3)} &= \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A+C-\epsilon}} \int du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\epsilon u_-^2 + (G'_1 + \epsilon F'_2) u_-^3] \right\} \\ &\approx \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A+C-\epsilon}} \int du_- \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\epsilon u_-^2 + G'_1 u_-^3] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

onde:

$$G'_1 = - \left(\frac{\sqrt{1 + \beta^2 + 2\beta\epsilon'}}{2\epsilon' - \alpha + \beta} \right)^3 [\beta^3 D + \beta^2 E + \beta F + G], \quad (\text{B.28})$$

com a nova notação:

$$\alpha = \frac{A}{B/2}, \quad \beta = \frac{-C}{B/2}, \quad \epsilon' = \frac{\epsilon}{B/2}. \quad (\text{B.29})$$

A partir deste ponto, mostraremos que a equação (B.27) pode ser comparada à equação de Airy:

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{2\pi} \int \exp \left\{ i \left(zt + \frac{1}{3}t^3 \right) \right\} dt, \quad (\text{B.30})$$

cuj solução numérica assintótica $z \rightarrow \infty$ é conhecida. Para fazer a comparação precisaremos fazer a seguinte transformação:

$$\eta = u_- + \frac{\epsilon}{3G'_1} \implies \frac{1}{\hbar} [\epsilon u_-^2 + G'_1 u_-^3] = \frac{1}{\hbar} \left[G'_1 \eta^3 - \frac{\epsilon^2}{3G'_1} \eta + \frac{2\epsilon^3}{27G_1'^2} \right]. \quad (\text{B.31})$$

Portanto, a equação (B.27) fica:

$$G_I^{(3)} = \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A+C-\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{2\epsilon^3}{27G_1'^2} \right\} \int d\eta \exp \left\{ i \left[\frac{G'_1}{\hbar} \eta^3 - \frac{\epsilon^2}{3\hbar G_1'} \eta \right] \right\}. \quad (\text{B.32})$$

Para compararmos esta última integral à de Airy, o último passo é fazer a transformação $t = \left(\frac{\hbar}{3G'_1} \right)^{1/3} \eta$. Assim, temos:

$$G_I^{(3)} = \left(\frac{\hbar}{3G'_1} \right)^{-1/3} \sqrt{\frac{i\hbar\pi}{A+C-\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{2\epsilon^3}{27G_1'^2} \right\} \text{Ai} \left(z = - \left(\frac{\epsilon^6}{81G_1'^4 \hbar^2} \right)^{1/3} \right). \quad (\text{B.33})$$

Portanto, quando $\det L$ tende a zero, a integral (B.1) pode ser escrita em termos da função de Airy, que pode ser calculada numericamente. O tamanho da região de singularidade pode ser estimado fazendo $|z| = 1$ no argumento da função de Airy. Isso leva à $\epsilon \approx \hbar^{1/3}$, que vai a zero lentamente quando $\hbar \rightarrow 0$.

Apêndice C

Segundas e Terceiras Derivadas da Ação Complexa

Neste apêndice, desenvolveremos uma maneira de calcular numericamente as segundas e terceiras derivadas da ação complexa $\tilde{S}$, *para uma dada trajetória*. A idéia básica deste procedimento é comparar duas expressões, tal como fizemos quando derivamos a equação (3.7). Note que esta expressão mostra como calcular as segundas derivadas de $\mathcal{S}$ numericamente, pois existe uma correspondência entre elas e a matriz de estabilidade M , a qual, no capítulo 2, mostramos como resolver (equação (2.14)). Assim, podemos dizer que a expressão (3.7) foi obtida da comparação entre a equação (2.13) e a expansão (3.6).

Para calcular as segundas derivadas de $\tilde{S}$, o procedimento é exatamente o mesmo, com a diferença que envolve a equação (2.13) e a expansão de (3.16). Por outro lado, para calcular as terceiras derivadas, precisamos desenvolver uma expressão análoga à (2.13), mas que leve em consideração correções de ordem quadrática, e precisamos expandir a equação (3.16) até segunda ordem.

Sendo assim, no primeiro tópico deste apêndice, desenvolveremos a expressão equivalente à (2.13), estendendo-a até a ordem quadrática. Em seguida, faremos a expansão da expressão (3.16) também até segunda ordem, e a deixaremos num formato conveniente para a pretendida comparação. Finalmente, no terceiro tópico, mostraremos como calcular as derivadas de $\tilde{S}$.

1) Equações de Movimento - Expansão até Segunda Ordem

As equações de movimento (1.36) são escritas como:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \dot{u}_x \\ \dot{u}_y \\ \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \end{pmatrix}}_{\dot{\mathbf{r}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i/\hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i/\hbar \\ i/\hbar & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i/\hbar & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{J}} \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{H}_{u_x} \\ \tilde{H}_{u_y} \\ \tilde{H}_{v_x} \\ \tilde{H}_{v_y} \end{pmatrix}}_{\mathbf{h}'} , \text{ com } \mathbf{h}' \equiv \begin{pmatrix} \partial \tilde{H} / \partial u_x \\ \partial \tilde{H} / \partial u_y \\ \partial \tilde{H} / \partial v_x \\ \partial \tilde{H} / \partial v_y \end{pmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Como o nosso propósito é estudar a vizinhança de uma dada trajetória $\bar{\mathbf{r}}(t)$, definiremos uma trajetória vizinha $\mathbf{r} = \bar{\mathbf{r}} + \delta\mathbf{r}$, e realizaremos a expansão da equação de movimento em torno de $\bar{\mathbf{r}}(t)$:

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{u}_x \\ \delta \dot{u}_y \\ \delta \dot{v}_x \\ \delta \dot{v}_y \end{pmatrix} = \underbrace{\mathbf{J} \begin{pmatrix} \tilde{H}_{u_x u_x} & \tilde{H}_{u_x u_y} & \tilde{H}_{u_x v_x} & \tilde{H}_{u_x v_y} \\ \tilde{H}_{u_y u_x} & \tilde{H}_{u_y u_y} & \tilde{H}_{u_y v_x} & \tilde{H}_{u_y v_y} \\ \tilde{H}_{v_x u_x} & \tilde{H}_{v_x u_y} & \tilde{H}_{v_x v_x} & \tilde{H}_{v_x v_y} \\ \tilde{H}_{v_y u_x} & \tilde{H}_{v_y u_y} & \tilde{H}_{v_y v_x} & \tilde{H}_{v_y v_y} \end{pmatrix}}_{\mathbf{H}''} \begin{pmatrix} \delta u_x \\ \delta u_y \\ \delta v_x \\ \delta v_y \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_y}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_y}'' \delta \mathbf{r} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2})$$

sendo que:

$$\mathbf{H}_{\alpha}'' = \begin{pmatrix} \tilde{H}_{\alpha u_x u_x} & \tilde{H}_{\alpha u_x u_y} & \tilde{H}_{\alpha u_x v_x} & \tilde{H}_{\alpha u_x v_y} \\ \tilde{H}_{\alpha u_y u_x} & \tilde{H}_{\alpha u_y u_y} & \tilde{H}_{\alpha u_y v_x} & \tilde{H}_{\alpha u_y v_y} \\ \tilde{H}_{\alpha v_x u_x} & \tilde{H}_{\alpha v_x u_y} & \tilde{H}_{\alpha v_x v_x} & \tilde{H}_{\alpha v_x v_y} \\ \tilde{H}_{\alpha v_y u_x} & \tilde{H}_{\alpha v_y u_y} & \tilde{H}_{\alpha v_y v_x} & \tilde{H}_{\alpha v_y v_y} \end{pmatrix}, \text{ para } \alpha = u_x, u_y, v_x, \text{ ou } v_y. \quad (\text{C.3})$$

Definimos também:

$$\tilde{H}_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial \beta \partial \alpha} \right|_{\bar{\mathbf{r}}} \text{ e } \tilde{H}_{\alpha\beta\gamma} = \left. \frac{\partial^3 \tilde{H}}{\partial \gamma \partial \beta \partial \alpha} \right|_{\bar{\mathbf{r}}}, \text{ para } \alpha, \beta, \gamma = u_x, u_y, v_x, \text{ ou } v_y. \quad (\text{C.4})$$

No capítulo 2, quando não incluímos correções de ordem quadrática, mostramos que a evolução temporal de um deslocamento, em torno do ponto inicial de uma trajetória, era dado pela expressão (2.13). Como agora consideramos correções superiores, escreveremos o deslocamento final $\delta\mathbf{r}(t)$ em função do inicial $\delta\mathbf{r}(0)$ da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \delta u_x(t) \\ \delta u_y(t) \\ \delta v_x(t) \\ \delta v_y(t) \end{pmatrix} = \mathbf{M}(t) \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_x}(t) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_y}(t) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_x}(t) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_y}(t) \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.5})$$

Nesta expressão, se conseguirmos uma expressão, em função da trajetória dada, para as matrizes $\mathbf{M}$ e $\mathbf{U}_\alpha$, para $\alpha = u_x, u_y, v_x, v_y$, nossa primeira tarefa estará cumprida. Portanto, para atingir este objetivo, derivamos a última equação:

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{u}_x \\ \delta \dot{u}_y \\ \delta \dot{v}_x \\ \delta \dot{v}_y \end{pmatrix} = \dot{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_y} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_y} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

e a substituiremos na equação (C.2):

$$\dot{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_y} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_y} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix} = \mathbf{J} \mathbf{H}'' \begin{pmatrix} \delta u_x \\ \delta u_y \\ \delta v_x \\ \delta v_y \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_y}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_y}'' \delta \mathbf{r} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.7})$$

Usaremos, então, a equação (C.5) para eliminarmos $\delta \mathbf{r}$ desta última equação. O primeiro termo do segundo membro da equação (C.7) fica:

$$\mathbf{J} \mathbf{H}'' \begin{pmatrix} \delta u_x \\ \delta u_y \\ \delta v_x \\ \delta v_y \end{pmatrix} = \mathbf{J} \mathbf{H}'' \left\{ \underbrace{\mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{r}(0)} + \underbrace{\begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_y} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_y} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{z}} \right\}, \quad (\text{C.8})$$

E o segundo termo do segundo membro da equação (C.7) fica:

$$\frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{u_y}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_x}'' \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \mathbf{H}_{v_y}'' \delta \mathbf{r} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \left[\delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T + \delta \mathbf{z}^T \right] \mathbf{H}_{u_x}'' \left[\mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) + \delta \mathbf{z} \right] \\ \left[\delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T + \delta \mathbf{z}^T \right] \mathbf{H}_{u_y}'' \left[\mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) + \delta \mathbf{z} \right] \\ \left[\delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T + \delta \mathbf{z}^T \right] \mathbf{H}_{v_x}'' \left[\mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) + \delta \mathbf{z} \right] \\ \left[\delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T + \delta \mathbf{z}^T \right] \mathbf{H}_{v_y}'' \left[\mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) + \delta \mathbf{z} \right] \end{pmatrix}. \quad (\text{C.9})$$

Desprezando as ordens superiores a segunda em $\delta \mathbf{r}$, reduzimos a equação (C.7) à:

$$\begin{aligned}
& \dot{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{u_y} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \dot{\mathbf{U}}_{v_y} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix} = \mathbf{J} \mathbf{H}'' \mathbf{M} \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix} \\
& + \mathbf{J} \mathbf{H}'' \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{u_y} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_x} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{U}_{v_y} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{u_x} \mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{u_y} \mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{v_x} \mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) \mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{v_y} \mathbf{M} \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix}. \tag{C.10}
\end{aligned}$$

Igualando as ordens, podemos obter:

$$\dot{\mathbf{M}} = \mathbf{J} \mathbf{H}'' \mathbf{M}, \tag{C.11}$$

$$\begin{pmatrix} \left[\dot{\mathbf{U}}_{u_x} \right]_{ij} \\ \left[\dot{\mathbf{U}}_{u_y} \right]_{ij} \\ \left[\dot{\mathbf{U}}_{v_x} \right]_{ij} \\ \left[\dot{\mathbf{U}}_{v_y} \right]_{ij} \end{pmatrix} = \mathbf{J} \mathbf{H}'' \begin{pmatrix} \left[\mathbf{U}_{u_x} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{U}_{u_y} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{U}_{v_x} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{U}_{v_y} \right]_{ij} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \mathbf{J} \begin{pmatrix} \left[\mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{u_x} \mathbf{M} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{u_y} \mathbf{M} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{v_x} \mathbf{M} \right]_{ij} \\ \left[\mathbf{M}^T \mathbf{H}''_{v_y} \mathbf{M} \right]_{ij} \end{pmatrix}, \tag{C.12}$$

o que resolve completamente $\mathbf{U}_\alpha$ e $\mathbf{M}$ e, conseqüentemente, a equação (C.5), dadas as condições de contorno $\mathbf{M}(0) = \mathbf{1}_{4 \times 4}$ e $\mathbf{U}_\alpha(0) = 0$, obtidas diretamente da equação (C.5). A expressão (C.11) é a expressão não discretizada da equação (2.13).

2) Obtendo a Expressão para as Derivadas da Ação

Agora vamos deduzir uma expressão para as derivadas da ação $\tilde{\mathcal{S}}$, que possa ser comparada à equação (C.5), uma vez que mostramos que $\mathbf{U}_\alpha$ e $\mathbf{M}$ podem ser calculados numericamente. Partiremos da relação (3.16), que será escrita como:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v''_x \\ v''_y \end{pmatrix}}_{\mathbf{v}} = \underbrace{\begin{pmatrix} i/\hbar & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i/\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i/\hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i/\hbar \end{pmatrix}}_{\mathbf{K}} \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{S}_{u'_x} \\ \tilde{S}_{u'_y} \\ \tilde{S}_{u''_x} \\ \tilde{S}_{u''_y} \end{pmatrix}}_{\mathbf{s}'} , \text{ com } \mathbf{s}' \equiv \begin{pmatrix} \partial \tilde{\mathcal{S}} / \partial u'_x \\ \partial \tilde{\mathcal{S}} / \partial u'_y \\ \partial \tilde{\mathcal{S}} / \partial u''_x \\ \partial \tilde{\mathcal{S}} / \partial u''_y \end{pmatrix}. \tag{C.13}$$

Expandindo $\tilde{S}$ até segunda ordem obtemos:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \delta v'_x \\ \delta v'_y \\ \delta v''_x \\ \delta v''_y \end{pmatrix}}_{\delta \tilde{\mathbf{v}}} = \mathbf{K} \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{S}_{u'_x u'_x} & \tilde{S}_{u'_x u'_y} & \tilde{S}_{u'_x u''_x} & \tilde{S}_{u'_x u''_y} \\ \tilde{S}_{u'_y u'_x} & \tilde{S}_{u'_y u'_y} & \tilde{S}_{u'_y u''_x} & \tilde{S}_{u'_y u''_y} \\ \tilde{S}_{u''_x u'_x} & \tilde{S}_{u''_x u'_y} & \tilde{S}_{u''_x u''_x} & \tilde{S}_{u''_x u''_y} \\ \tilde{S}_{u''_y u'_x} & \tilde{S}_{u''_y u'_y} & \tilde{S}_{u''_y u''_x} & \tilde{S}_{u''_y u''_y} \end{pmatrix}}_{\tilde{S}''} \underbrace{\begin{pmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta u''_x \\ \delta u''_y \end{pmatrix}}_{\delta \tilde{\mathbf{u}}} + \frac{1}{2} \mathbf{K} \begin{pmatrix} \delta \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{S}''_{u'_x} \delta \tilde{\mathbf{u}} \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{S}''_{u'_y} \delta \tilde{\mathbf{u}} \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{S}''_{u''_x} \delta \tilde{\mathbf{u}} \\ \delta \tilde{\mathbf{u}}^T \tilde{S}''_{u''_y} \delta \tilde{\mathbf{u}} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.14})$$

com:

$$\tilde{S}''_{\alpha} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{\alpha u'_x u'_x} & \tilde{S}_{\alpha u'_x u'_y} & \tilde{S}_{\alpha u'_x u''_x} & \tilde{S}_{\alpha u'_x u''_y} \\ \tilde{S}_{\alpha u'_y u'_x} & \tilde{S}_{\alpha u'_y u'_y} & \tilde{S}_{\alpha u'_y u''_x} & \tilde{S}_{\alpha u'_y u''_y} \\ \tilde{S}_{\alpha u''_x u'_x} & \tilde{S}_{\alpha u''_x u'_y} & \tilde{S}_{\alpha u''_x u''_x} & \tilde{S}_{\alpha u''_x u''_y} \\ \tilde{S}_{\alpha u''_y u'_x} & \tilde{S}_{\alpha u''_y u'_y} & \tilde{S}_{\alpha u''_y u''_x} & \tilde{S}_{\alpha u''_y u''_y} \end{pmatrix}, \text{ para } \alpha = u_x, u_y, v_x, \text{ ou } v_y. \quad (\text{C.15})$$

Definimos também:

$$\tilde{S}_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial \beta \partial \alpha} \right|_{\tilde{\mathbf{r}}} \quad \text{e} \quad \tilde{S}_{\alpha\beta\gamma} = \left. \frac{\partial^3 \tilde{S}}{\partial \gamma \partial \beta \partial \alpha} \right|_{\tilde{\mathbf{r}}}, \text{ para } \alpha, \beta, \gamma = u_x, u_y, v_x, \text{ ou } v_y. \quad (\text{C.16})$$

A idéia agora é simplesmente manipular a equação (C.14) de forma que os deslocamentos finais fiquem escritos em função dos iniciais. Para auxiliar esta tarefa, definiremos:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta u''_x \\ \delta u''_y \end{pmatrix}}_{\delta \tilde{\mathbf{u}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta v'_x \\ \delta v'_y \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{r}(0)} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \underbrace{\begin{pmatrix} \delta u''_x \\ \delta u''_y \\ \delta v''_x \\ \delta v''_y \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{r}(T)}, \quad (\text{C.17})$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \delta v'_x \\ \delta v'_y \\ \delta v''_x \\ \delta v''_y \end{pmatrix}}_{\delta \tilde{\mathbf{v}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}} \underbrace{\begin{pmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta v'_x \\ \delta v'_y \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{r}(0)} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{D}} \underbrace{\begin{pmatrix} \delta u''_x \\ \delta u''_y \\ \delta v''_x \\ \delta v''_y \end{pmatrix}}_{\delta \mathbf{r}(T)}. \quad (\text{C.18})$$

Desta forma, temos:

$$\begin{aligned}
C \delta \mathbf{r}(0) + D \delta \mathbf{r}(T) &= K \tilde{S}'' [A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T)] + \frac{1}{2} K \mathbf{w} \\
\implies (D - K \tilde{S}'' B) \delta \mathbf{r}(T) &= (K \tilde{S}'' A - C) \delta \mathbf{r}(0) + \frac{1}{2} K \mathbf{w} \\
\implies \delta \mathbf{r}(T) &= (D - K \tilde{S}'' B)^{-1} (K \tilde{S}'' A - C) \delta \mathbf{r}(0) + \frac{1}{2} (D - K \tilde{S}'' B)^{-1} K \mathbf{w}.
\end{aligned} \tag{C.19}$$

Esta expressão é aquela que pretendemos comparar à equação (C.5). Só resta fazer algumas considerações com relação ao vetor $\mathbf{w}$:

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \end{bmatrix}^T \tilde{S}_{u'_x}'' \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \end{bmatrix}^T \tilde{S}_{u'_y}'' \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B \delta \mathbf{r}(T) \end{bmatrix} \end{pmatrix}. \tag{C.20}$$

Nesta última equação, precisamos escrever $\delta \mathbf{r}(T)$ em função de $\delta \mathbf{r}(0)$. Para isso, usaremos a equação (C.5) até a primeira ordem:

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \end{bmatrix}^T \tilde{S}_{u'_x}'' \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \end{bmatrix}^T \tilde{S}_{u'_y}'' \begin{bmatrix} A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \\ A \delta \mathbf{r}(0) + B M \delta \mathbf{r}(0) \end{bmatrix} \end{pmatrix}. \tag{C.21}$$

De modo que obtemos:

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T(0) (A + BM)^T \tilde{S}_{u'_x}'' (A + BM) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) (A + BM)^T \tilde{S}_{u'_y}'' (A + BM) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) (A + BM)^T \tilde{S}_{u''_x}'' (A + BM) \delta \mathbf{r}(0) \\ \delta \mathbf{r}^T(0) (A + BM)^T \tilde{S}_{u''_y}'' (A + BM) \delta \mathbf{r}(0) \end{pmatrix}. \tag{C.22}$$

3) Comparando as Equações (C.5) e (C.19)

Em primeiro lugar, desprezaremos $\mathbf{w}$ para calcular as derivadas segundas de $\tilde{S}$. Neste caso, é conveniente definir:

$$\delta \mathbf{r}(T) = \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}'' \\ \delta \mathbf{v}'' \end{pmatrix}, \quad \delta \mathbf{r}(0) = \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} i/\hbar & 0 \\ 0 & -i/\hbar \end{pmatrix}, \tag{C.23}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (C.24)$$

$$\tilde{S}'' = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} & \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''} \\ \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} & \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''} \end{pmatrix}. \quad (C.25)$$

Desta forma, temos:

$$(D - K \tilde{S}'' B) = \begin{pmatrix} -(i/\hbar) \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''} & 0 \\ (i/\hbar) \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''} & 1 \end{pmatrix}, \quad (C.26)$$

$$(D - K \tilde{S}'' B)^{-1} = \begin{pmatrix} i\hbar \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} & 0 \\ \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} & \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (C.27)$$

$$(K \tilde{S}'' A - C) = \begin{pmatrix} (i/\hbar) \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} & -1 \\ -(i/\hbar) \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} & 0 \end{pmatrix}, \quad (C.28)$$

o que reduz a equação (C.19) a:

$$\begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}'' \\ \delta \mathbf{v}'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} & -i\hbar \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \\ (i/\hbar) [\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} - \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'}] & -\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{pmatrix}. \quad (C.29)$$

Comparando a equação (C.29) com a (C.5) podemos escrever as segundas derivadas de $\tilde{S}$ em função dos elementos da matriz M (equação (1.30)). A relação que nos interessa é:

$$\tilde{S}'' = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} & \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''} \\ \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} & \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\hbar M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{-1} M_{\mathbf{u}\mathbf{u}} & -i\hbar M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{-1} \\ -i\hbar (M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{-1} M_{\mathbf{u}\mathbf{u}} + M_{\mathbf{v}\mathbf{u}}) & i\hbar M_{\mathbf{v}\mathbf{v}} M_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (C.30)$$

Agora consideraremos o vetor w para calcular as terceiras derivadas de $\tilde{S}$. Podemos escrever o termo $(D - K \tilde{S}'' B)^{-1} K w$ da equação (C.19) como:

$$\frac{i}{\hbar} \left[\begin{array}{c} i\hbar \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u'_x}'' L \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u'_y}'' L \delta \mathbf{r} \end{pmatrix} \\ \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u'_x}'' L \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u'_y}'' L \delta \mathbf{r} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u''_x}'' L \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T L^T S_{u''_y}'' L \delta \mathbf{r} \end{pmatrix} \end{array} \right]. \quad (C.31)$$

Sendo que definimos $(A + BM) \equiv L$ e foi omitida a dependência temporal em $\delta \mathbf{r}(0) (\rightarrow \delta \mathbf{r})$. Reescrevemos (C.31) como:

$$\frac{i}{\hbar} \begin{bmatrix} i\hbar \delta \mathbf{r}^T \left\{ \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{11} L^T S''_{u'_x} L + \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{12} L^T S''_{u'_y} L \right\} \delta \mathbf{r} \\ i\hbar \delta \mathbf{r}^T \left\{ \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{21} L^T S''_{u'_x} L + \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{22} L^T S''_{u'_y} L \right\} \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \left\{ \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{11} L^T S''_{u'_x} L + \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{12} L^T S''_{u'_y} L - L^T S''_{u'_x} L \right\} \delta \mathbf{r} \\ \delta \mathbf{r}^T \left\{ \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{21} L^T S''_{u'_x} L + \left(\tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''}^{-1} \right)_{22} L^T S''_{u'_y} L - L^T S''_{u'_y} L \right\} \delta \mathbf{r} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.32})$$

Desta forma, é só utilizar a equação (C.5) para estabelecer as relações:

$$-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left[S''_{u'_x} \right]_{ij} \\ \left[S''_{u'_y} \right]_{ij} \end{pmatrix} = \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''} \begin{pmatrix} \left[(L^T)^{-1} U_{u_x} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{u_y} L^{-1} \right]_{ij} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.33})$$

$$-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left[S''_{u'_x} \right]_{ij} \\ \left[S''_{u'_y} \right]_{ij} \end{pmatrix} = \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} \begin{pmatrix} \left[(L^T)^{-1} U_{u_x} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{u_y} L^{-1} \right]_{ij} \end{pmatrix} - i\hbar \begin{pmatrix} \left[(L^T)^{-1} U_{v_x} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{v_y} L^{-1} \right]_{ij} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.34})$$

Ou, de modo equivalente:

$$-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left[S''_{u'_x} \right]_{ij} \\ \left[S''_{u'_y} \right]_{ij} \\ \left[S''_{u'_x} \right]_{ij} \\ \left[S''_{u'_y} \right]_{ij} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{\mathbf{u}'\mathbf{u}''} & 0 \\ \tilde{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'} & -i\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left[(L^T)^{-1} U_{u_x} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{u_y} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{v_x} L^{-1} \right]_{ij} \\ \left[(L^T)^{-1} U_{v_y} L^{-1} \right]_{ij} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.35})$$

Como vemos, as expressões (C.30) e (C.35) contém o resultado procurado.

Bibliografia

- [1] L. D. Landau e E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*. Pergamon Press, London, 1977.
- [2] A. Einstein. Zum quantensatz Von Sommerfeld und Epstein. *Verhandl Deutsch. Physik. Ges.*, 19:82, 1917.
- [3] J. B. Keller. Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems. *Annals of Physics*, 4:180, 1958.
- [4] M. C. Gutzwiller. Phase-integral approximation in momentum space and the bound states of an atom. *Journal of Mathematical Physics*, 8:1979, 1967.
- [5] M. C. Gutzwiller. Phase-integral approximation in momentum space and the bound states of an atom. ii. *Journal of Mathematical Physics*, 10:1004, 1969.
- [6] M. C. Gutzwiller. Energy spectrum according to classical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 11:1791, 1970.
- [7] M. C. Gutzwiller. Periodic orbits and classical quantization conditions. *Journal of Mathematical Physics*, 12:343, 1971.
- [8] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 1990.
- [9] Alfredo M. Ozório de Almeida. *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*. Editora da Unicamp, Universidade Estadual de Campinas, 1995.
- [10] R. P. Feynman e A. R. Ribbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGrall-Hill, New York, 1965.
- [11] J. R. Klauder. Path integrals and stationary-phase approximations. *Physical Review D*, 19:2349, 1979.

- [12] Y. Weissman. Semiclassical approximation in the coherent states representation. *Journal of Chemical Physics*, 76:4067, 1982.
- [13] Y. Weissman. On the stationary phase evaluation of path integrals in the coherent states representation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 16:2693, 1983.
- [14] D. Huber e E. J. Heller. Generalized gaussian wave packet dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 87:5302, 1987.
- [15] D. Huber, E. J. Heller e R. G. Littlejohn. Generalized gaussian wave packet dynamics, schrödinger equation, and stationary phase approximation. *Journal of Chemical Physics*, 89:2003, 1988.
- [16] S. Adachi. A numerical evaluation of the semiclassical coherent state path integral. *Annals of Physics*, 195:45, 1989.
- [17] J. Heading. *An Introduction to Phase-Integral Methods*. Methuen & CO / John Wiley & Sonsinc, London & New York, 1962.
- [18] R. B. Dingle. *Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation*. Academic Press, London, 1973.
- [19] N. Froman e P. O. Froman. *JWKB Approximation. Contributions to the Theory*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965.
- [20] J. R. Klauder. *Random Media (G. Papanicolaou, Ed), The IMA Volume in Mathematics and Its Applications. Vol 7, pp.163-182*. Springer-Verlag, New York, 1987.
- [21] A. Rubin e J. R. Klauder. The comparative roles of connected and disconnected trajectories in the evaluation of the semiclassical coherent-state propagator. *Annals of Physics*, 241:212, 1995.
- [22] A. Shudo e K. S. Ikeda. Complex classical trajectories and chaotic tunneling. *Physical Review Letters*, 74:682, 1995.
- [23] A. Shudo e K. S. Ikeda. Stokes Phenomenon in chaotic systems: Pruning trees of complex paths with principle of exponential dominance. *Physical Review Letters*, 76:4151, 1996.
- [24] S. Tomsovic e E. J. Heller. Semiclassical dynamics of chaotic motion: Unexpected long-time accuracy. *Physical Review Letters*, 67:664, 1991.
- [25] A. L. Xavier Jr. e M. A. M. de Aguiar. Semiclassical approximations to the coherent-state propagator for a particle in a box. *Physical Review A*, 54:1808, 1996.

- [26] A. L. Xavier Jr. e M. A. M. de Aguiar. Complex trajectories in the quartic oscillator and its semiclassical coherent-state propagator. *Annals of Physics*, 252:458, 1996.
- [27] A. L. Xavier Jr. e M. A. M. de Aguiar. Phase-space approach to the tunnel effect: A new semiclassical traversal time. *Physical Review Letters*, 79:3323, 1997.
- [28] F. Grossmann. Semiclassical coherent-state path integrals for scattering. *Physical Review A*, 57:3256, 1998.
- [29] A. Tanaka. Phase space caustics in multicomponent systems. *Physical Review Letters*, 80:1414, 1998.
- [30] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch e B. Schellaaß. Semiclassical approximations in phase space with coherent states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34:7227, 2001.
- [31] M. F. Herman e E. Kluk. A semiclassical justification for the use of non-spreading wavepackets in dynamics calculations. *Chemical Physics*, 91:27, 1984.
- [32] W. H. Miller. An alternate derivation of the Herman-Kluk (coherent state) semiclassical initial value representation of the evolution operator. *Molecular Physics*, 100:397, 2002.
- [33] K. Kay. Integral expressions for the semiclassical time-dependent propagator. *Journal of Chemical Physics*, 100:4377, 1994.
- [34] K. Kay. Numerical study of semiclassical initial value methods for dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 100:4432, 1994.
- [35] W. H. Miller. The semiclassical initial value representation: A potentially practical way for adding quantum effects to classical molecular dynamics simulations. *Journal of Physics Chemical*, 105:2942, 2001.
- [36] M. A. M. de Aguiar, A. D. Ribeiro, F. Parísio e M. Baranger. Semiclassical propagation of wave packets with complex trajectories (em preparação). 2004.
- [37] F. Parísio e M. A. M. de Aguiar. Semiclassical coherent-state propagator via path integrals with intermediate states of variable width. *Physical Review A*, 68:062112, 2003.
- [38] T. Van Voorhis e E. J. Heller. Nearly real trajectories in complex semiclassical dynamics. *Physical Review A*, 66:050501, 2002.
- [39] T. Van Voorhis e E. J. Heller. Similarity transformed semiclassical dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 119:12153, 2003.

- [40] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar e M. Baranger. Semiclassical approximations based on complex trajectories. *Physical Review E*, 69:066204, 2004.
- [41] M. Baranger e M. A. M. de Aguiar. *não publicado*.
- [42] M. Kus, F. Haake e D. Delande. Prebifurcation periodic ghost orbits in semiclassical quantization. *Physical Review Letters*, 71:2167, 1987.
- [43] B. Sundaram e R. Scharf. A standard perspective on ghosts. *Physica D*, 83:257, 1995.
- [44] J. P. Keating e S. D. Prado. Orbit bifurcations and the scarring of wave functions. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 457:1855, 2001.
- [45] V. P. Maslov e M. V. Feodoriuk. *Semi-Classical Approximations in Quantum Mechanics*. Reidel, Boston, 1981.
- [46] V. P. Maslov. *Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques*. Dunod, Paris, 1972.
- [47] A. M. Ozório de Almeida e J. H. Hannay. Resonant periodic orbits and the semiclassical energy spectrum. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20:5873, 1987.
- [48] J. R. Klauder. Global, uniform, semiclassical approximation to wave equations. *Physical Review Letters*, 56:897, 1986.
- [49] B. Diu, F. Lalóe e C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*, volume 1. Jonh Wiley & Sons, New York, 1977.
- [50] A. Vourdas. The growth of Bargmann Functions and the completeness of sequences of coherent states. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30:4867, 1997.
- [51] N. Bleistein e R. A. Handelsman. *Asymptotic Expansions of Integral*. Dover Publications, New York, 1986.
- [52] P. D. Miller. *Methods of Applied Mathematics II: Asymptotic Methods*. Endereço eletrônico: www.math.isa.umich.edu/~millerpd/, University of Michigan – Department of Mathematics, 2002.
- [53] Luís C. dos Santos e M. A. M. de Aguiar. *em preparação*.
- [54] M. Baranger, K. T. Davies e J. H. Mahoney. The calculation of periodic trajectories. *Annals of Physics*, 186:95, 1988.
- [55] R. S. Kaushal e H. J. Korsch. Some remarks on complex hamiltonian systems. *Physics Letters A*, 276:47, 2000.

- [56] R. S. Kaushal e S. Singh. Construction of complex invariants for classical dynamical systems. *Annals of Physics*, 288:253, 2001.
- [57] M. Baranger e K. T. R. Davies. Periodic trajectories for a two-dimensional nonintegrable hamiltonian. *Annals of Physics*, 177:330, 1987.
- [58] D. Provost. Signatures of classical periodic orbits on a smooth quantum system. *Physical Review E*, 51:5396, 1995.
- [59] G. G. Stokes. *Trans. Camb. Phil. Soc.*, 10:106,128, 1864.
- [60] Marcus A. M. de Aguiar. *Uma Introdução ao Estudo de Caos na Mecânica Quântica*. Notas de Aula – Unicamp, 1997.
- [61] Albert Messiah. *Quantum Mechanics*. North-Holland, Amsterdam – London, 1961.
- [62] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Jonh Wiley & Sons, New York, 1961.
- [63] M. V. Berry. Uniform asymptotic smoothing os Stokes’s discontinuities. *Procedings of the Royal Society of London A*, 422:7, 1989.
- [64] M. A. M. de Aguiar, C. P. Malta, M. Baranger e K. T. Davies. Bifurcations of periodic trajectories in non-integrable hamiltonian systems with two degrees of freedom: Numerical and analytical results. *Annals of Physics*, 180:167, 1987.
- [65] E. Bolgomolny. Smoothed wave functions of chaotic quantum system. *Phsica D*, 31:169, 1988.
- [66] M. Baranger, M. Hagerty, B. Lauritzen, D. C. Meredith e D. Provost. Periodic orbits of nonscaling hamiltonian system from quantum mechanics. *Chaos*, 5:261, 1995.
- [67] D. Provost e P. Brumer. Uniform semiclassical wave-packet propagation and eigenstate extraction in a smooth chaotic system. *prl*, 74:250, 1995.
- [68] J. J. Stamnes. *Waves in Focal Regions*. Adam Hilger, Bristol, 1986.
- [69] Alexandre Dias Ribeiro. *Limite Semiclássico de Sistemas Caóticos via Estados Coerentes: o Papel das Órbitas Complexas*. Tese de Mestrado orientada por Marcus A. M. de Aguiar – Unicamp, 1998.