

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Física Gleb Wataghin

Integrais de Trajetória  
na Representação de Estados Coerentes

TESE DE DOUTORAMENTO

Luís Coelho dos Santos

Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Banca Examinadora

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Prof. Dr. Cesar Rogério de Oliveira

Prof. Dr. Rogério Rosenfeld

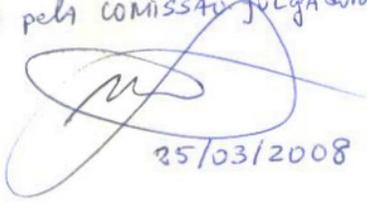
Profa. Dra. Kyoko Furuya

Prof. Dr. Marcos Cesar de Oliveira

Este exemplar corresponde à  
redação final da tese de  
doutorado defendida pelo aluno  
Luís Coelho dos Santos e  
APROVADA pela COMISSÃO JULGADORA.

Campinas, SP, Brasil

Fevereiro 2008



25/03/2008

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

Sa59i

Santos, Luis Coelho dos  
Integrais de trajetória na representação de estados coerentes /  
Luis Coelho dos Santos. -- Campinas, SP : [s.n.], 2008.

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

1. Integrais de trajetórias. 2. Estados coerentes. 3. Weyl,  
Símbolo de. 4. Limite semiclássico. I. Aguiar, Marcus Aloizio  
Martinez de. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de  
Física "Gleb Wataghin". III. Título.

(vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Path integrals in the coherent state representation
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Path integrals
  2. Coherent states
  3. Weyl symbol
  4. Semiclassical limit
- **Área de concentração:** Física Clássica e Física Quântica ; Mecânica e Campos
- **Titulação:** Doutor em Ciências
- **Banca examinadora:**

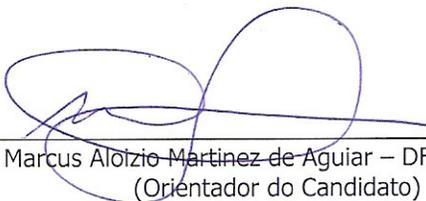
Prof. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar  
Prof. Cesar Rogério de Oliveira  
Prof. Rogério Rosenfeld  
Prof<sup>a</sup> . Kyoko Furuya  
Prof. Marcos César de Oliveira
- **Data da defesa:** 28-02-2008
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física



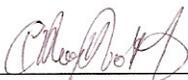
Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3521-5305 FAX: (19) 3521-4142

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **LUÍS COELHO DOS SANTOS**  
- RA 014715, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA  
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 28/02/2008.

**COMISSÃO JULGADORA:**



Prof. Dr. Marcus Aolizio Martinez de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP  
(Orientador do Candidato)



Prof. Dr. César Rogério de Oliveira – DM/USFCAR



Prof. Dr. Rogério Rosenfeld – IFT/UNESP



Prof. Dr. Kyoko Furuya – DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Marcos César de Oliveira – DFMC/IFGW/UNICAMP

# AGRADECIMENTOS

O trabalho descrito nesta tese não teria sido possível sem o apoio constante, dedicado e eficiente do meu orientador, Marcus. Ele esteve presente em todos os momentos, nos difíceis e nos mais difíceis também.

Agradeço aos colegas de pesquisa do grupo do Marcus: Alexandre, Bete, David, Fernando, Marcus Bonança, Paulo e Sabrina. Todos me ajudaram de uma forma ou de outra, assistindo aos meus seminários, fazendo sugestões, discutindo suas idéias, compartilhando dificuldades e soluções.

Agradeço a todos os professores e funcionários do Instituto de Física da Unicamp.

Agradeço a todos os meus colegas professores da Engenharia Mauá, da Metodista e da Fundação Santo André, que eventualmente tenham suprido um pouco da minha ausência nestes últimos meses. Em particular, agradeço a minha amiga Silvia, pelo apoio, pela ajuda e pela disposição em estar sempre próxima.

Agradeço aos meus queridos irmãos, José, Antônio e Mauro, a minha querida irmã Nena, as minhas mais que sobrinhas, Fabiana e Juliana e ao meu pequeno sobrinho Caio, por terem conseguido ainda que com o meu pouco tempo, me dado todo o carinho e apoio de que eu precisava.

Agradeço ainda à duas mulheres de forma especial. A primeira, Terezinha, minha amada mãe, pela vida, pelo exemplo de coragem, dignidade e solidariedade com os filhos e com os mais necessitados. A segunda, Marlene, minha esposa, pelo carinho, pelo companheirismo, pelas correções, pelo cuidado e pela inspiração para que me fosse possível enfrentar todos os meus obstáculos.

Agradeço ao meu pai, por tudo que me ensinou, embora já falecido, vivo está em tudo

o que eu faço.

Finalmente agradeço, do fundo do meu coração, ao amigo da faculdade, que vez por outra me comprava algum livro, me financiava alguma viagem e que tem sempre dividido comigo um pouco da sua sabedoria, rapidez e profundidade de pensamento sobre a vida, sobre a política e sobre a Física.

*“A última coisa que se descobre ao realizar uma obra é que coisa deve ser posta em primeiro lugar.”*

***Blaise PASCAL, Pensamentos***

*“Este artigo descreverá o que é essencialmente uma terceira formulação da teoria quântica não relativística. Esta formulação foi sugerida por algumas observações de Dirac a respeito da relação da ação clássica com a Mecânica Quântica. Uma amplitude de probabilidade é associada com o movimento inteiro de uma partícula como função do tempo, ao invés de simplesmente com a posição de uma partícula em um instante particular de tempo.”*

***R. P. Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics***

## Resumo

A supercompleteza da base de estados coerentes gera uma multiplicidade de representações da integral de trajetória de Feynman. Estas diferentes representações, embora equivalentes quanticamente, levam a diferentes limites semiclássicos. Baranger et al calcularam o limite semiclássico de duas formas para a integral de trajetória, sugeridas por Klauder e Skagerstam. Cada uma destas fórmulas envolve trajetórias governadas por uma diferente representação clássica do operador Hamiltoniano: a representação P em um caso e a representação Q no outro. Nesta tese, nós construímos outras duas representações da integral de trajetória, cujos limites semiclássicos envolvem diretamente a representação de Weyl do operador Hamiltoniano, isto é, a própria Hamiltoniana clássica. Mostramos que, no limite semiclássico, a dinâmica na representação de Weyl é independente da largura dos estados coerentes e o propagador é também livre das correções de fase encontradas em todos os outros casos. Além disto, fornecemos uma conexão explícita entre as representações quânticas de Weyl e de Husimi no espaço de fases.

## Abstract

The overcompleteness of the coherent states basis gives rise to a multiplicity of representations of Feynman's path integral. These different representations, although equivalent quantum mechanically, lead to different semiclassical limits. Baranger et al derived the semiclassical limit of two path integral forms suggested by Klauder and Skagerstam. Each of these formulas involve trajectories governed by a different classical representation of the Hamiltonian operator: the P representation in one case and the Q representation in the other one. In this thesis we construct two other representations of the path integral whose semiclassical limit involves directly the Weyl representation of the Hamiltonian operator, i.e., the classical Hamiltonian itself. We show that, in the semiclassical limit, the dynamics in the Weyl representation is independent of the coherent states width and that the propagator is also free from the phase corrections found in all the other cases. Besides, we obtain an explicit connection between the Weyl and the Husimi phase space representations of quantum mechanics.

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>1 Conceitos Básicos</b>	<b>7</b>
1.1 O propagador . . . . .	7
1.2 Estados Coerentes . . . . .	9
1.3 Ambigüidades na construção de Operadores . . . . .	12
<b>2 Obtenção aproximada do propagador com a Hamiltoniana de Weyl</b>	<b>18</b>
2.1 O Propagador de estado coerente e a sua aproximação semiclássica nas versões de Klauder e Skagerstam . . . . .	18
2.1.1 O propagador . . . . .	19
2.1.2 Integrais de Trajetória básicas e suas Aproximações Semiclássicas . . . . .	20
2.1.3 A aproximação de Weyl conjecturada . . . . .	25
2.2 Uma forma Mista para a Integral de Trajetória . . . . .	26
2.2.1 A Aproximação de Expoente Estacionário . . . . .	27
2.2.2 A Hamiltoniana Efetiva . . . . .	29
2.2.3 A Fase Efetiva . . . . .	32
2.3 A Aproximação de Weyl . . . . .	33
<b>3 Integrais de Trajetória com estados coerentes na representação de Weyl</b>	<b>35</b>
3.1 Cálculo com o símbolo de Weyl . . . . .	36
3.1.1 Operadores de Translação e Operadores de Reflexão . . . . .	36
3.1.2 A Integral de Trajetória . . . . .	38

3.1.3	Forma Alternativa e o Limite do Contínuo . . . . .	39
3.2	Limite Semiclássico . . . . .	41
3.2.1	A Condição de Expoente Estacionário . . . . .	41
3.2.2	Expansão ao redor da Trajetória Estacionária . . . . .	43
3.3	Uma Comparação Entre as Três Formas de Integral de Trajetória . . . . .	44
3.4	Relacionando os Propagadores de Weyl e de Husimi . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Discussões Finais e Conclusão</b>	<b>49</b>
<b>A</b>	<b>Expansão em termos dos Operadores de Reflexão e de Translação</b>	<b>52</b>
<b>B</b>	<b>Demonstração da Eq.(3.17)</b>	<b>54</b>
<b>C</b>	<b>Cálculo do Determinante</b>	<b>56</b>
	<b>Referências</b>	<b>60</b>

# Introdução

O estudo das aproximações semiclássicas da mecânica quântica começou pouco tempo depois da descoberta da própria teoria quântica, primeiramente com a aproximação que ficou conhecida como WKB, que se mostrou muito útil na resolução de problemas envolvendo potenciais muito complicados, cujas soluções exatas via equação de Schrödinger eram ou impossíveis ou desconhecidas ou muito complicadas. Além disto por volta desta época aconteceram os famosos debates entre Einstein e Bohr sobre os fundamentos da Mecânica Quântica, muito bem relatados no livro de Andrew Whitaker [58]. Um dos problemas mais importantes para Bohr era o delineamento dos limites de validade e das relações de dependência entre as duas teorias.

Em 1933, Dirac publicou um trabalho fundamental para a história da física [15], onde expôs a seguinte indagação: O que corresponde na teoria Quântica à formulação Lagrangiana da Mecânica Clássica? Neste artigo Dirac descobre uma correspondência não totalmente detalhada que responde parcialmente a sua pergunta utilizando o limite semiclássico  $\hbar \mapsto 0$ . O trabalho de Dirac influenciou Feynman que trabalhou neste problema na sua tese de doutorado de 1942 e seis anos depois publicou um artigo fundamental [19] onde apresentou a sua formulação da Mecânica Quântica em termos de Integrais de Trajetória.

De acordo com a revisão histórica da formulação de Feynman apresentada por Grosche e Steiner [24], houve muitas reações negativas a este trabalho, reações estas advindas em geral dos físicos que haviam criado a Mecânica Quântica, incluindo Niels Bohr. Uma notável exceção se deve a Pauli, que propôs ao seu aluno de doutorado Choquard que estudasse os termos de ordem superior da expansão semiclássica do Propagador de Feynman para intervalos de tempo pequenos e finitos [11].

Nas últimas décadas houve muito interesse na aplicação da aproximação semiclássica de Integrais de Trajetória no entendimento das propriedades quânticas de sistemas classicamente não integráveis. Um resultado muito importante neste campo, foi a obtenção da fórmula do traço por Gutzwiller [25], [26], [27], [28], com a qual se obtém uma relação entre o espectro quântico de energias e as órbitas clássicas periódicas. Na maior parte destas aplicações o ponto de partida é a Integral de Trajetória que no limite semiclássico  $\hbar \mapsto 0$ , apresenta como termos principais aqueles relacionados com as órbitas clássicas.

Além da formulação tradicional da Mecânica Quântica, baseada na utilização de operadores em um espaço de Hilbert, da formulação de Feynman em termos de integrais de trajetória, existe uma terceira formulação quântica, a Mecânica Quântica no espaço de fases. Esta é edificada tendo como elementos básicos a função de quase distribuição de Wigner [59] e a regra de correspondência de Weyl [56], [57] entre operadores quânticos e funções no espaço de fases. Esta formulação, segundo Zachos [60], é muito útil na descrição de processos quânticos de transporte, nas aplicações da óptica quântica, na física nuclear, na física da matéria condensada, no estudo da transição para a Mecânica Estatística Clássica e no estudo do limite semiclássico de sistemas mesoscópicos. É o formalismo mais adequado para o estudo do caos quântico e da descoerência. Além da função de distribuição de Wigner e da regra de correspondência de Weyl, existem outras funções de distribuição e outras regras de correspondência associadas.

Nos últimos anos ressurgiu o interesse no estudo das aproximações semiclássicas com estados coerentes, as quais tem alcançado grande sucesso em aplicações em várias áreas da física e da química. O instrumento fundamental para a obtenção destas aproximações é o propagador semiclássico em termos de estados coerentes, que é obtido partindo da sua expressão em termos de integrais de trajetória na representação de estados coerentes e do cálculo do limite semiclássico utilizando-se a aproximação de fase estacionária. Em virtude dos estados coerentes formarem uma base supercompleta, existem várias maneiras de se escrever o propagador em termos de integrais de trajetória, conforme já havia sido apontado por Klauder em [33], [34], [36], [35] e revisto por Baranger e outros [7]. Klauder e Skagerstam em 1985 [35], sugeriram duas formas específicas para o cálculo do propagador com integrais

de trajetória na representação de estados coerentes, cada uma delas relacionada com um determinado ordenamento do hamiltoniano.

Em 2001 Baranger, Aguiar e outros [7] analisaram as possibilidades sugeridas por Klauder e Skagerstam e calcularam os seus correspondentes limites semiclássicos. Esse cálculo mostrou que a dinâmica clássica subjacente não era regida pela hamiltoniana clássica, mas em um caso pela representação  $Q$  do hamiltoniano (associada ao operador hamiltoniano ordenado normalmente) e no outro caso pela sua representação  $P$  (associada ao operador hamiltoniano ordenado antinormalmente). As fórmulas semiclássicas obtidas, embora distintas, diferiam por termos proporcionais à  $\hbar$ .

Esse resultado é, de certa forma, frustrante, pois não esperamos que no limite semiclássico a dinâmica do sistema não seja governada pela hamiltoniana clássica. Note que estamos usando a base mais *clássica* possível, que é a dos estados coerentes. É exatamente neste ponto que surge o principal desafio desta tese: construir uma terceira forma para o cálculo do propagador com integrais de trajetória na representação de estados coerentes que possua, no limite semiclássico, a dinâmica governada pela representação de Weyl do hamiltoniano, ou seja, pela hamiltoniana clássica.

Ao longo desta tese apresentaremos duas novas formas de integral de trajetória para o propagador em estados coerentes. A primeira forma, discutida no capítulo 2, não leva diretamente ao limite semiclássico desejado, mas é uma boa aproximação para ele. A segunda forma, apresentada no capítulo 3, é realmente nova e tem o limite semiclássico governado exatamente pela hamiltoniana clássica.

A tese está organizada da seguinte forma: no capítulo 1 desta tese, apresentaremos uma revisão dos conceitos básicos sobre o cálculo do propagador, sobre estados coerentes, bem como uma discussão a respeito das diversas tentativas de se obter uma regra única para a transformação de funções clássicas em operadores quânticos, o conhecido problema de ordenamento e a conexão deste com os diversos tipos de função distribuição.

No capítulo 2 vamos rever como é obtido o propagador de estado coerente e a sua aproximação semiclássica nas versões de Klauder e Skagerstam [35], isto é, nas representações  $Q$  e  $P$ . Em seguida obteremos uma primeira solução do problema principal desta tese, que

consiste em uma nova versão para o propagador, utilizando uma combinação mista das duas versões anteriores bem como a obtenção do seu correspondente limite semiclássico, onde será verificado que a dinâmica clássica será dominada aproximadamente pela hamiltoniana de Weyl.

No capítulo 3 construiremos uma nova forma de cálculo para o propagador em termos dos operadores de reflexão e de translação, calcularemos o seu limite semiclássico e mostraremos que a dinâmica clássica será regida exatamente pela hamiltoniana de Weyl, resolvendo assim a questão principal desta tese. Finalmente no capítulo 4 apresentaremos as discussões finais e a conclusão desta tese.

# Capítulo 1

## Conceitos Básicos

Neste capítulo apresentaremos uma rápida revisão sobre o cálculo do propagador, sobre os estados coerentes e sobre o problema de ordenamento de operadores na Mecânica Quântica. Esta revisão está longe de ser completa e algumas referências serão oportunamente indicadas para um estudo mais profundo destes conceitos.

### 1.1 O propagador

O propagador é definido por:

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle \equiv \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)} | x_i \rangle. \quad (1.1)$$

Ele recebe este nome porque a partir dele determinamos como a função de onda se propaga no tempo, por exemplo:

$$\psi(x_f, t_f) = \langle x_f, t_f | \psi \rangle = \int \langle x_f, t_f | x_i, t_i \rangle dx_i \langle x_i, t_i | \psi \rangle = \int K(x_f, t_f; x_i, t_i) \psi(x_i, t_i) dx_i. \quad (1.2)$$

O principal problema aqui é como calcular esse propagador. O procedimento mais utilizado é o que Feynman apresentou em [19], que segue resumidamente os seguintes passos:

- I) dividimos o intervalo de tempo  $(t_f - t_i)$  em  $N$  intervalos de largura  $\epsilon$ ;
- II) escrevemos  $x_0 = x_i$ ,  $x_N = x_f$ ,  $t_0 = t_i$ ,  $t_N = t_f$  e introduzimos na  $j$ -ésima fatia de

tempo uma identidade do tipo:

$$\mathbb{1} = \int |x_j\rangle \langle dx_j | x_j\rangle; \quad (1.3)$$

III) introduzimos ainda, em cada intervalo intermediário, um elemento identidade em termos do momento;

IV) calculamos as integrais nos momentos, que são integrais de Fresnel. Para Hamiltonianos unidimensionais da forma  $p^2/2m + V(x)$  esse procedimento leva à expressão

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} A^{-N} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} (dx_j) \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon \left[ \frac{m}{2\epsilon^2} (x_{j+1} - x_j)^2 - V(x_j) \right] \right\} \quad (1.4)$$

onde  $A = (2\pi i \hbar \epsilon / m)^{1/2}$  é um fator de normalização. Cada termo dessa integral múltipla representa um caminho,  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_N$ , que pode ser pensado como uma trajetória seguida pela partícula. O termo no expoente é claramente uma versão discretizada da ação sobre essa trajetória. Podemos formalmente escrever o resultado acima como:

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int d_F x e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (1.5)$$

onde  $d_F x$  é a medida de Feynman e  $S[x(t)]$  é a ação calculada ao longo da trajetória  $x(t)$ . Este procedimento de fatiamento do intervalo para obter a soma sobre todas as trajetórias não está livre de problemas, os quais não discutiremos aqui e aparecem detalhados em [54] e em [24].

É importante destacar que na última fórmula o termo exponencial oscila intensamente para  $\hbar \mapsto 0$  e neste caso a contribuição mais relevante vem da trajetória estacionária que é a trajetória clássica.

## 1.2 Estados Coerentes

O Hamiltoniano de um oscilador harmônico quântico unidimensional pode ser escrito na forma padrão como:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{q}^2). \quad (1.6)$$

Os operadores de criação e de destruição são definidos como:

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{b} - i \frac{\hat{p}}{c} \right), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{b} + i \frac{\hat{p}}{c} \right). \quad (1.7)$$

Nas fórmulas acima  $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  são operadores. Os parâmetros:

$$b = (\hbar/m\omega)^{\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad c = (\hbar m\omega)^{\frac{1}{2}} \quad (1.8)$$

definem as escalas de comprimento e de momento, respectivamente, e o seu produto é igual a  $\hbar$ .

Em termos dos operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  o operador hamiltoniano do oscilador harmônico quântico fica:

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}). \quad (1.9)$$

O estado coerente  $|z\rangle$  é definido como um auto-estado do operador de aniquilação com autovalor  $z$ , isto é:

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle. \quad (1.10)$$

Pode-se mostrar que

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle \quad (1.11)$$

onde  $|0\rangle$  é o estado fundamental do oscilador harmônico e  $z$  é o número complexo que caracteriza o estado coerente, definido por:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right). \quad (1.12)$$

É importante destacarmos que os estados coerentes, para quaisquer valores de  $z$ , correspondem a pacotes de onda gaussianos tanto na representação de posição:

$$\langle x|z\rangle = \pi^{-1/4}b^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2b^2}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}p(x-q/2)\right\} \quad (1.13)$$

quanto na representação de momento:

$$\langle p_x|z\rangle = \pi^{-1/4}c^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2c^2}(p_x-p)^2 - \frac{i}{\hbar}q(p_x-p/2)\right\}. \quad (1.14)$$

Os números  $q$  e  $p$  são os valores médios dos operadores correspondentes calculados no estado coerente  $|z\rangle$ :

$$q = \langle z|\hat{q}|z\rangle \quad (1.15)$$

e

$$p = \langle z|\hat{p}|z\rangle. \quad (1.16)$$

Dados dois diferentes estados coerentes  $|z\rangle$  e  $|z'\rangle$  eles satisfazem a seguinte relação, que demonstra que eles não são ortogonais

$$\langle z|z'\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2}|z'|^2 + z^*z' - \frac{1}{2}|z|^2\right\}. \quad (1.17)$$

Outra propriedade importante de estados coerentes é que, embora não sejam ortogonais, ainda assim satisfazem a relação de completeza

$$\mathbb{1} = \int |z\rangle \frac{d^2z}{\pi} \langle z| \quad (1.18)$$

onde devemos lembrar que  $d^2z/\pi = dqdp/2\pi\hbar$ .

A partir da relação acima podemos mostrar que os estados coerentes formam um conjunto supercompleto, isto é, eles não são linearmente independentes visto que

$$|z'\rangle = \mathbb{1}|z'\rangle = \int \langle z|z'\rangle \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle. \quad (1.19)$$

Em outras palavras, podemos expressar o estado coerente  $|z'\rangle$  como uma superposição de estados coerentes  $|z\rangle$  e isto significa que qualquer estado pode ser expandido na base, mas não de forma única.

Esta propriedade de supercompleteza possibilita o aparecimento de algumas alternativas nas aplicações que utilizam a expansão de operadores em termos de estados coerentes e isto será fundamental para os desenvolvimentos que serão descritos nos capítulos posteriores.

Há vários motivos para que os estados coerentes sejam considerados os estados quânticos com comportamento mais próximo do clássico entre todos os estados puros e também para a sua utilização em um número muito grande de aplicações. Em particular, devemos lembrar que os estados coerentes são correspondentes a pacotes de ondas gaussianos nas representações da posição e do momento.

Algumas características dos estados coerentes: a) minimizam a relação de incerteza de Heisenberg; b) mantêm a sua forma sem se dispersar no caso do potencial do oscilador harmônico; c) podem ser utilizados em uma descrição formalmente equivalente de partículas e fótons; d) são definidos para várias áreas da física o que possibilita extensões e ou aplicações de resultados de uma área em outra completamente diferente; e) são as representações quânticas mais próximas de pontos no espaço de fases.

Os estados coerentes do oscilador harmônico quântico foram propostos pela primeira vez por Schrödinger em [51]. Ele queria encontrar estados que se comportassem de forma clássica, ainda que estes estados não tivessem esta denominação na época. O termo estado coerente foi criado por Glauber em [22] onde mostrou que estados coerentes são produzidos quando uma corrente clássica interage com um campo de radiação. Aliás Glauber em [22], [21] e Sudarshan em [53], criaram todo um novo campo de aplicações dos estados coerentes. Quase que imediatamente depois, Klauder em [31], [32], desenvolveu um conjunto de estados contínuos onde aplicou as idéias básicas de estados coerentes aplicados em grupos de Lie, o que teve seguimento nos trabalhos de Perelomov em [47] e de Gilmore em [20]. A idéia geral aqui se apóia no fato de todos os problemas formulados na teoria quântica envolvem algum grupo dinâmico, para o qual construímos uma base de estados coerentes, que assim não ficam mais restritos ao oscilador harmônico e podem ser aplicados em uma grande

variedade de problemas físicos, conforme detalhado por Klauder e Skagerstam em [35] e também por Zhang, Feng e Gilmore em [61].

Os motivos listados acima mais a extensão de aplicabilidade dos estados coerentes justificam a nossa escolha em trabalhar com integrais de trajetória na representação de estados coerentes para expressar o propagador, já que posteriormente efetuaremos o cálculo de seu limite semiclássico e isto abre a possibilidade de efetuarmos cálculos semelhantes em outras áreas da Física.

### 1.3 Ambigüidades na construção de Operadores

Desde o início da Mecânica Quântica até os dias atuais, vários autores tentaram resolver, sem sucesso definitivo até agora, um problema ligado com a quantização de um dado sistema clássico, o problema do ordenamento dos operadores. Dada uma hamiltoniana clássica,  $H(q, p) = T(p) + V(q)$ , a construção do operador hamiltoniano quântico correspondente é livre de ambigüidades. No entanto, se a hamiltoniana clássica,  $H(q, p)$ , for dada por uma soma de monômios do tipo  $p^i q^j$ , com  $i, j > 0$ , há um número infinito de formas possíveis para o operador quântico correspondente, cada uma relacionada com uma determinada regra de ordenamento, ver [50], [12], [2], [29], [37],[55], [14], [52]. O problema do ordenamento consiste em determinar se há uma regra definitiva para fazer a escolha do ordenamento correto em todos os problemas de quantização. Este problema ainda não foi resolvido e não parece que terá solução em um futuro próximo.

Por exemplo, à variável dinâmica clássica  $q^2 p$  podem corresponder as variáveis quânticas  $\hat{q}^2 \hat{p}$ ,  $\hat{q} \hat{p} \hat{q}$ ,  $\hat{p} \hat{q}^2$  ou qualquer combinação linear destas expressões. É claro que estas expressões não são equivalentes já que o comutador de  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  não é nulo.

O problema em si envolve questões matemáticas ligadas à convergência e regularidade de expansões de funções destes operadores, isto tanto em representações diretas quanto em representações integrais destas funções, bem como a conveniência da escolha de um certo tipo de ordenamento particularmente útil para descrever certo conjunto de medidas, conforme discutido por Cahill e Glauber em [9]. Dada uma hamiltoniana clássica  $H_C(q, p)$ ,

há vários operadores  $\hat{H}$ 's correspondentes, visto que  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$  não comutam e a ordem em que são considerados em cada monômio altera o operador hamiltoniano total. Isto significa que temos então vários problemas quânticos diferentes com muitos resultados diferentes correspondentes, sendo que as diferenças entre eles se tornam cada vez menores a medida que  $\hbar$  se torna menor. Entre as infinitas possibilidades de ordenamento há algumas mais conhecidas e mais utilizadas e entre elas, três são as mais importantes, o ordenamento normal, o ordenamento antinormal e ordenamento de Weyl. O ordenamento normal é obtido se reescrevermos  $H_C$  em termos de  $z$  e  $z^*$ , ordenando os termos de forma que, em cada monômio, os  $z^*$  fiquem todos à esquerda dos  $z$  e substituindo  $z$  por  $\hat{a}$  e  $z^*$  por  $\hat{a}^\dagger$ , fazendo com que cada monômio apareça na forma  $c_{mn}(\hat{a}^\dagger)^m(\hat{a})^n$ . O *ordenamento antinormal* é construído inicialmente da mesma forma, mas com os  $z^*$  à direita dos  $z$ , de modo a se obter os monômios correspondentes na forma  $c_{mn}(\hat{a})^n(\hat{a}^\dagger)^m$ . O terceiro tipo, conhecido como ordenamento de Weyl, é descrito a partir de várias definições equivalentes. Em uma delas, primeiro devemos escrever todos os possíveis ordenamentos de cada monômio e depois tomarmos a média entre todos eles. Uma outra definição do operador de Weyl,  $\hat{A}_W$ , correspondente a uma função clássica  $A(q, p)$  pode ser obtido da seguinte maneira: primeiro escrevemos  $A(q, p)$  como a transformada dupla de Fourier

$$A(q, p) = \iint d\alpha d\beta B(\alpha, \beta) e^{i(\alpha q + \beta p)} \quad (1.20)$$

onde  $B(\alpha, \beta)$  é a transformada inversa de  $A(q, p)$  e então o operador de Weyl é obtido pela substituição de  $q$  e  $p$  por operadores nesta fórmula:

$$\hat{A}_W = \iint d\alpha d\beta B(\alpha, \beta) e^{i(\alpha \hat{q} + \beta \hat{p})} . \quad (1.21)$$

A regra estabelecida pela fórmula anterior é conhecida como regra de correspondência de Weyl. A sua aplicação forneceria o seguinte operador associado à variável dinâmica clássica  $q^2 p$  anteriormente citada:

$$q^2 p \mapsto \frac{1}{3}(\hat{q}^2 \hat{p} + \hat{q} \hat{p} \hat{q} + \hat{p} \hat{q}^2). \quad (1.22)$$

De forma geral podemos dizer que a regra de Weyl faz corresponder ao produto  $q^n p^m$  uma combinação linear totalmente simetrizada de termos, cada um deles com  $n$  fatores  $\hat{q}$ 's e  $m$  fatores  $\hat{p}$ 's, com a expressão final dividida pelo número total de termos na expansão.

Desta forma, temos entre as infinitas possibilidades, três diferentes maneiras de se associar um operador com uma função no espaço de fase clássico, levando-se em conta os três ordenamentos descritos acima. Utilizaremos então as seguintes notações para estes operadores  $\hat{A}_N$ ,  $\hat{A}_A$ , e  $\hat{A}_W$ . Dos três,  $\hat{A}_W$  é o mais conveniente para o cálculo do limite clássico. Por outro lado, também há três modos de associar uma função clássica com um dado operador  $\hat{A}$ , as quais são as transformadas inversas das transformações acima citadas. A mais interessante (veja [29]) é a transformação de Weyl-Wigner, que é dada por:

$$A_W(q, p) = \int ds e^{\frac{i}{\hbar}ps} \left\langle q - \frac{s}{2} \left| \hat{A} \right| q + \frac{s}{2} \right\rangle . \quad (1.23)$$

$A_W(q, p)$  é denominado símbolo de Weyl do operador  $\hat{A}$ . As outras duas transformações inversas também têm denominações próprias, as quais são apresentadas de maneiras diferentes de acordo com a referência. Adotaremos aqui uma das possibilidades encontradas na literatura. No caso da transformação que associa um operador normalmente ordenado a uma função clássica, a sua correspondente transformação inversa é denominada transformação  $Q$  e a função clássica é chamada de símbolo  $Q$  do operador

$$\begin{aligned} A(q, p) &\implies \text{ordenamento normal} \implies \hat{A}_N \\ A_Q(q, p) &\longleftarrow \text{transformação } Q \longleftarrow \hat{A} . \end{aligned} \quad (1.24)$$

Analogamente, o inverso do ordenamento antinormal é denominado como transformação  $P$  e a função clássica é o símbolo  $P$  do operador

$$\begin{aligned} A(q, p) &\implies \text{ordenamento antinormal} \implies \hat{A}_A \\ A_P(q, p) &\longleftarrow \text{transformação } P \longleftarrow \hat{A} . \end{aligned} \quad (1.25)$$

Há uma expressão explícita muito simples para o símbolo  $Q$

$$A_Q(q, p) = \langle z | \hat{A} | z \rangle . \quad (1.26)$$

Para o símbolo  $P$  não há nada tão fácil, mas ele é dado implicitamente pela exigência:

$$\hat{A} = \int |z\rangle A_P(q, p) \frac{d^2 z}{\pi} \langle z| . \quad (1.27)$$

De todos os três símbolos, o símbolo  $Q$ , que é analítico tanto em  $z$  como em  $z^*$ , é o mais suave de todos. O símbolo  $P$  é provavelmente o mais singular entre os três. O símbolo de Weyl fica numa posição intermediária em termos de singularidade. De acordo com o que é discutido por Cahill e Glauber em [9], virtualmente todo operador de interesse possui uma expansão em séries de potências convergente em termos dos produtos normalmente ordenados dos operadores de criação e de destruição, enquanto que expansões em séries de potências em termos de produtos antinormalmente ordenados apresentam uma generalidade bem menor, além de que mesmo para muitos operadores bem comportados, os respectivos coeficientes tornam-se infinitos.

Nos próximos capítulos trabalharemos com três versões clássicas do hamiltoniano quântico. A primeira será dada por  $H_Q$  que é o símbolo  $Q$  associado com o operador  $\hat{H}$ , a segunda,  $H_P$ , que é o símbolo  $P$  e finalmente com o símbolo de Weyl  $H_W$ .

Em resumo, de acordo com o que foi dito a respeito das três representações, dado que teremos três hamiltonianas clássicas associadas com o hamiltoniano quântico  $\hat{H}$ , o grau de suavidade entre eles decresce na ordem  $H_Q, H_W, H_P$ . Isto fica evidente a partir das relações:

$$\begin{aligned} H_Q(q, p) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d^2 z' e^{-2|z-z'|^2} H_W(q', p') \\ H_W(q, p) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d^2 z' e^{-2|z-z'|^2} H_P(q', p') . \end{aligned} \quad (1.28)$$

Indo no sentido oposto, as relações são:

$$\begin{aligned} H_P(q, p) &= \left( \exp -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right) H_W(q, p) \\ H_W(q, p) &= \left( \exp -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^* \partial z} \right) H_Q(q, p) . \end{aligned} \tag{1.29}$$

As relações acima são deduzidas e discutidas de maneira mais detalhada por Agarwal e Wolf em [2], onde os autores também apresentam alguns exemplos relacionados com os diversos tipos de ordenamento.

É importante destacarmos que desde que Wigner em [59] introduziu a sua função de distribuição com a qual ele mostrou que os valores esperados quânticos de certas grandezas podem ser escritos em uma forma matemática semelhante as médias da mecânica estatística clássica, observou-se que a associação da função de distribuição de Wigner com o estado do sistema, envolve implicitamente uma certa regra de ordenamento, no caso o ordenamento de Weyl, apresentado primeiramente em [56]. Isto significa que a partir do momento que foram considerados outros tipos de ordenamento surgiram associadamente novas funções de distribuição, a partir das quais os problemas quânticos podem ser expressos de uma maneira quase clássica. Devemos notar que a escolha do ordenamento está intimamente relacionada com a escolha da função de distribuição correspondente ou como também se denomina, a representação correspondente. Outras funções de distribuição incluem a P de Glauber-Sudarshan, a Q de Husimi e a de Kirkwood, para mais detalhes ver [39], [29]. De acordo com Lee em [39] a escolha de uma dada função de distribuição não é tanto uma questão de gosto e sim mais uma questão de necessidade. Por exemplo, na teoria quântica da coerência óptica, vários dos cálculos essenciais envolvem valores esperados de produtos antinormalmente ordenados, o que justifica a utilização da função de distribuição P de Glauber-Sudarshan, enquanto que em problemas que envolvem a descrição de processos de colisão no espaço de fase, utiliza-se freqüentemente a função distribuição de Wigner e na descrição no espaço de fase de sistemas classicamente caóticos, utiliza-se a função de distribuição Q de Husimi.

É importante lembrar que, durante um certo tempo, acreditou-se que a formulação

da Mecânica Quântica em termos de integrais de trajetória estaria livre do problema de ordenamento, o que gerou muitos trabalhos interessantes com opiniões controversas, o que mostra que ainda há problemas com os ordenamentos, isto pode ser visto com mais detalhes em [30], [41], [13], [18], [42], [43], [38] e [23].

## Capítulo 2

# Obtenção aproximada do propagador com a Hamiltoniana de Weyl

Neste capítulo veremos as construções da integral de trajetória de Klauder e Skagerstan [35] e suas aproximações semiclássicas [7]. Em seguida construiremos uma nova representação quântica e obteremos o seu limite semiclássico, expresso na equação (2.19). Finalmente, mostraremos que, dentro do limite de validade das aproximações, esta equação coincide com a sugerida em [7], conforme publicado em Santos e Aguiar [16].

### 2.1 O Propagador de estado coerente e a sua aproximação semiclássica nas versões de Klauder e Skagerstam

Como já vimos no capítulo 1 o conjunto dos estados coerentes forma uma base supercompleta e não ortogonal, já que cada estado do conjunto pode ser escrito como uma combinação linear dos demais estados. Esta supercompleteza tem, por outro lado, importantes conseqüências na formulação do propagador em termos de integrais de trajetórias. Em particular, isto implica na existência de várias formas para as integrais de trajetórias, todas equivalentes quanticamente, mas cada qual com um limite semiclássico ligeiramente diferente. Klauder

e Skagerstam [35] propuseram duas formas básicas da integral de trajetória de estados coerentes, cada uma delas tendo suas correspondentes vantagens e problemas [35]. O limite semiclássico destes dois propagadores básicos foi considerado em [7], onde foi mostrado que ambos os propagadores podem ser escritos em termos de trajetórias clássicas complexas, cada uma governada por uma diferente representação clássica do operador hamiltoniano  $\hat{H}$ : a representação P em um caso e a representação Q no outro. Vamos rever brevemente estas representações nesta seção.

### 2.1.1 O propagador

Dado um operador Hamiltoniano independente do tempo  $\hat{H}$ , o propagador correspondente na representação de estados coerentes é o elemento de matriz do operador de evolução temporal entre os estados coerentes  $|z'\rangle$  e  $|z''\rangle$ :

$$K(z'', T; z', 0) = \langle z'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} | z' \rangle. \quad (2.1)$$

Vamos nos restringir aos Hamiltonianos que podem ser expandidos em séries de potências dos operadores de criação e de destruição  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$ .

Na obtenção do limite semiclássico do propagador, o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  é substituído por uma função Hamiltoniana clássica  $H(q, p)$ . Esta substituição todavia, não é univocamente definida, e as ambigüidades que existem na relação entre o operador  $\hat{H}$  e a função  $H(q, p)$  também surgem em conexão com a supercompleteza da base de estados coerentes, como será mostrado nas próximas subseções.

Como já dissemos no capítulo 2 trabalharemos com as três possibilidades citadas, ordenamento normal, antinormal e de Weyl, que estão associados respectivamente com  $H_Q$ ,  $H_P$  e  $H_W$ . Como ilustração vejamos como ficam estas três diferentes representações clássicas para o seguinte operador hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 + x^4$$

( $m = \hbar = 1$ ) para o qual obtemos:

$$\begin{aligned} H_Q &= \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + x^4 + \frac{1}{4}(b^2 + b^{-2}) + 3b^2x^2 + 3b^4/4 \\ H_P &= \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + x^4 - \frac{1}{4}(b^2 + b^{-2}) - 3b^2x^2 + 3b^4/4 \\ H_W &= \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + x^4 \end{aligned}$$

onde  $b$  é a largura do estado coerente. Observemos que o termo proporcional a  $x^2$ , que aparece com sinais opostos em  $H_Q$  e  $H_P$ , realmente modifica a dinâmica clássica com respeito a  $H_W$ .

Por outro lado é fácil percebermos que neste exemplo temos:

$$(H_Q + H_P)/2 = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + x^4 + 3b^4/4 = H_W + O(\hbar)^2.$$

O resultado acima sugere a idéia de combinar de algum modo a ação dos dois procedimentos sugeridos por Klauder e Skagerstam, fazendo com que no limite semiclássico a dinâmica clássica seja determinada por uma média entre  $H_Q$  e  $H_P$ , o que daria aproximadamente uma dinâmica governada pela hamiltoniana de Weyl,  $H_W$ .

Nas próximas subseções ficará claro como estas diferentes representações aparecem naturalmente no limite semiclássico do propagador de estados coerentes.

### 2.1.2 Integrais de Trajetória básicas e suas Aproximações Semiclássicas

O cálculo do propagador semiclássico na representação de estados coerentes a partir de integrais de trajetória está discutido em detalhes em [7]. Nesta seção resumiremos estes resultados prévios enfatizando a não unicidade do limite semiclássico como consequência da supercompleteza da representação de estados coerentes.

Para conseguirmos escrever uma integral de trajetória para  $K(z'', T; z', 0)$ , temos que dividir o intervalo de tempo em um grande número de fatias e, para cada fatia, um propagador infinitesimal tem de ser calculado. Conforme apontado por Klauder and Skagerstam [35], há no mínimo dois diferentes modos de se fazer isto. Cada um deles dá origem a uma diferente representação da integral de trajetória. Embora eles correspondam a quantidades

quânticas idênticas, suas aproximações semiclássicas são diferentes. A construção destas duas representações será revista abaixo. Cumpre esclarecer que, no que segue, utilizaremos o índice 1 para representar os cálculos feitos na representação Q e o índice 2 para representar os cálculos feitos na representação P.

A primeira forma da integral de trajetória é construída pelo fracionamento do intervalo de tempo  $T$  em  $N$  partes ou fatias de tamanho  $\tau$  e inserindo o operador unidade

$$\mathbb{1} = \int |z\rangle \frac{d^2z}{\pi} \langle z| \quad (2.2)$$

entre todos os intervalos seguidos da propagação, isto é, em cada fatia. A parte real e a parte imaginária de  $z$  serão denotadas por  $x$  e  $y$ , respectivamente. Em todas as integrações,  $d^2z/\pi$  significa  $dx dy/\pi$ . Depois de todas as inserções o propagador fica expresso como uma integral em  $2(N-1)$  dimensões sobre todo o espaço de fase.

$$K(z'', t; z', 0) = \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2z_j}{\pi} \right\} \prod_{j=0}^{N-1} \left\{ \langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_j) \tau} | z_j \rangle \right\} \quad (2.3)$$

com  $z_N = z''$  e  $z_0 = z'$ . Usando a fórmula de superposição de estados coerentes:

$$\langle z_{j+1} | z_j \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} |z_{j+1}|^2 + z_{j+1}^* z_j - \frac{1}{2} |z_j|^2 \right\} \quad (2.4)$$

e expandindo  $e^{-iH\tau/\hbar} \approx 1 - iH\tau/\hbar$  podemos escrever:

$$\langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_j) \tau} | z_j \rangle = \exp \left\{ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} \mathcal{H}_{j+1,j} \right\} \quad (2.5)$$

onde

$$\mathcal{H}_{j+1,j} \equiv \frac{\langle z_{j+1} | \hat{H}(t_j) | z_j \rangle}{\langle z_{j+1} | z_j \rangle} \equiv \mathcal{H}(z_{j+1}^*, z_j; t_j) \quad (2.6)$$

e  $(1 - i\mathcal{H}_{j+1,j}\tau/\hbar)$  foi aproximado de novo por  $e^{-i\mathcal{H}_{j+1,j}\tau/\hbar}$ . Com estas manipulações a

primeira forma do propagador, que será representada por  $K_1$ , resulta em:

$$K_1(z'', t; z', 0) = \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 z_j}{\pi} \right\} \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} \mathcal{H}_{j+1,j} \right] \right\}. \quad (2.7)$$

Quando o limite  $N \rightarrow \infty$  (respectivamente  $\tau \rightarrow 0$ ) é tomado, as somas acima se transformam em integrais, e a expressão em (2.7) pode ser considerada exata, a não ser pelos bem conhecidos problemas relacionados com os significados de tais integrais funcionais. Também,  $\mathcal{H}_{j+1,j}$  se reduz à função hamiltoniana suavizada  $\mathcal{H}(z, z^*) \equiv H_1(z, z^*) \equiv \langle z | \hat{H} | z \rangle$ . Usando as propriedades  $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$  e  $\langle z | \hat{a}^\dagger = \langle z | z^*$ , vê-se que  $\mathcal{H}$  pode ser facilmente calculado se  $\hat{H}$  for escrito em termos dos operadores de criação e de destruição com todos  $\hat{a}^\dagger$ 's à esquerda dos  $\hat{a}$ 's. Portanto,  $\mathcal{H}$  é exatamente o símbolo Q do operador Hamiltoniano [29].

A segunda forma da integral de trajetória começa a partir da representação diagonal do operador hamiltoniano, isto é:

$$\hat{H} = \int |z\rangle H_2(z^*, z) \frac{d^2 z}{\pi} \langle z|. \quad (2.8)$$

Supondo que  $\hat{H}$  seja polinomial em  $p$  e  $q$  ou uma seqüência convergente de tais polinômios, esta representação diagonal sempre existe. O cálculo de  $H_2$  não é tão direto quanto àquele feito para  $H_1$ , mas como vimos [29],  $H_2(z^*, z)$  é exatamente o símbolo P de  $\hat{H}$ . Esta segunda forma será comparada com a primeira forma da função hamiltoniana  $H_1(z^*, z)$ . Para facilitar a comparação da segunda forma do propagador, que representaremos como  $K_2$ , com a primeira forma  $K_1$ , é conveniente dividir o intervalo de tempo  $T$  em  $N - 1$  fatias, ao invés de  $N$ . Escrevemos então:

$$K_2(z'', T; z', 0) = \langle z'' | \prod_{j=1}^{N-1} e^{-\frac{i\tau}{\hbar} \hat{H}} | z' \rangle \quad (2.9)$$

e, seguindo Klauder e Skagerstam, podemos escrever os propagadores infinitesimais como:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} \approx \int |z_j\rangle \left( 1 - \frac{i\tau}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j) \right) \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_j| \approx \int |z_j\rangle e^{-\frac{i\tau}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j)} \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_j|. \quad (2.10)$$

O propagador completo  $K_2$  se torna igual a :

$$\begin{aligned}
K_2(z_N, T; z_0, 0) &= \int \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_{j+1} | z_j \rangle \exp \left\{ -\frac{i\tau}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j) \right\} \\
&= \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 z_j}{\pi} \right\} \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Aqui é importante dizer que os cálculos dos limites semiclássicos dos propagadores apresentados nas expressões acima envolvem vários procedimentos que incluem: obter os pontos de fase estacionária, efetuar uma mudança de variáveis de tal modo que as novas variáveis sejam os deslocamentos em relação aos pontos de fase estacionária, expandir o expoente até segunda ordem em torno dos pontos estacionários, calcular as integrais gaussianas por algum método de recorrência e fazer o limite do contínuo. Além disto, devemos lembrar que durante estes procedimentos, as variáveis  $z$  e  $z^*$  são totalmente independentes, por isto é usual fazermos  $u = z$  e  $v = z^*$ .

As diferenças entre  $K_1$  e  $K_2$  são sutis, mas importantes . Enquanto que os dois argumentos de  $H_1$  em  $K_1$  pertencem a dois tempos adjacentes no reticulado de pontos, os dois argumentos de  $H_2$  em  $K_2$  pertencem ao mesmo tempo. Embora ambas as formas forneçam resultados idênticos quando computados exatamente, as diferenças entre os dois são importantes para a aproximação de fase estacionária, resultando em diferentes propagadores semiclássicos. Os cálculos semiclássicos de  $K_1$  e  $K_2$  foram apresentados em detalhe em [7]. Aqui apenas resumiremos os resultados:

$$K_1(z'', t; z', 0) = \sum_{\nu} \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_{1\nu}}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S_{1\nu} + I_{1\nu}) - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right\}, \tag{2.12}$$

$$K_2(z'', t; z', 0) = \sum_{\nu} \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_{2\nu}}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S_{2\nu} - I_{2\nu}) - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right\}, \tag{2.13}$$

onde

$$S_{i\nu} = S_{i\nu}(v'', u', t) = \int_0^t dt' \left[ \frac{i\hbar}{2}(\dot{u}v - \dot{v}u) - H_i(u, v, t') \right] - \frac{i\hbar}{2}(u''v'' + u'v') \quad (2.14)$$

é a ação e

$$I_i = \frac{1}{2} \int_0^T \frac{\partial^2 H_i}{\partial u \partial v} dt \quad (2.15)$$

é uma correção para a ação. A soma sobre  $\nu$  representa a soma sobre todas as trajetórias clássicas (complexas) que satisfazem as equações de Hamilton:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{u} &= +\frac{\partial H_i}{\partial v} \\ i\hbar\dot{v} &= -\frac{\partial H_i}{\partial u} \end{aligned} \quad (2.16)$$

com  $H(u, v) \equiv \langle v | \hat{H} | u \rangle$  e com as condições de contorno:

$$u(0) = z' \equiv u' , \quad v(t) = z''^* \equiv v'' . \quad (2.17)$$

É importante frisarmos que as duas fórmulas semiclássicas aqui obtidas não contêm apenas a ação correspondente da trajetória clássica complexa, mas também contêm um termo de correção,  $I$ , que aparece com diferentes sinais em cada uma delas (ver Eqs.(2.12) e (2.13)). Os fatores  $I_i$ 's representam uma parte importante das fórmulas acima e são absolutamente necessários para recuperar o propagador exato para hamiltonianos quadráticos. Sem eles, mesmo os cálculos para o oscilador harmônico ficam errados. Uma complicação técnica que aparece aqui é que as trajetórias que satisfazem as equações (2.16) e as condições de contorno (2.17) são em geral trajetórias complexas e, além disso, nem todas devem ser incluídas no cálculo semiclássico. Uma discussão sobre trajetórias não contribuintes pode ser encontrada nas referências [49, 1].

### 2.1.3 A aproximação de Weyl conjecturada

Conforme já dissemos, existe um terceiro tipo de função Hamiltoniana, que pode ser obtida a partir de  $\hat{H}$  utilizando-se a transformação de Wigner:

$$H_W(q, p) = \int ds e^{\frac{i}{\hbar}ps} \left\langle q - \frac{s}{2} \left| \hat{H} \right| q + \frac{s}{2} \right\rangle. \quad (2.18)$$

Este é a Hamiltoniana de Weyl. Como  $H_W$  é obtida de  $\hat{H}$  pela completa simetrização dos operadores de criação e de destruição, isto faz com que  $H_W$  seja uma média exata entre  $H_1$  e  $H_2$  caso  $\hat{H}$  só contenha até monômios cúbicos em  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$  e apenas uma média aproximada para os outros casos. A fórmula semiclássica com  $H_1$  vem com uma correção  $+I_1$  para a ação e aquela com  $H_2$  vem com uma correção de  $-I_2$ . Isto sugere a possibilidade de existir um terceiro tipo de aproximação semiclássica para o propagador, onde se usa a Hamiltoniana de Weyl com nenhum termo de correção, visto que a média de  $+I_1$  e  $-I_2$  deve ser aproximadamente igual a zero. Esta é a aproximação de Weyl, que foi conjecturada em [7]:

$$K_W(z'', t; z', 0) = \sum_\nu \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_W}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_W - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right\} \quad (2.19)$$

com  $S_W$  dado pela Eq.(2.14) com  $H_i$  substituído por  $H_W$  e a soma indicada deve ser feita sobre todas as trajetórias clássicas.

Das três aproximações semiclássicas apresentadas, a aproximação de Weyl parece ser a mais natural, visto que envolve o hamiltoniano clássico diretamente sem nenhuma correção para a ação. Entretanto, esta fórmula não decorre das duas formas mais naturais da integral de trajetória propostas por Klauder e usadas nesta seção. Na próxima seção vamos propor uma terceira forma de integral de trajetória cujo limite semiclássico coincide com a aproximação de Weyl até primeira ordem em  $\hbar$ .

## 2.2 Uma forma Mista para a Integral de Trajetória

Neste capítulo a fórmula dada na Eq.(2.19) será obtida por meio da construção de uma nova representação da integral de trajetória quântica, Eq.(2.23), seu limite semiclássico, Eq.(2.48), será então relacionado com a Eq.(2.19), conjecturada em [7]. Nós mostraremos que as trajetórias clássicas envolvidas nesta fórmula são governadas pela média entre as representações P e Q do operador Hamiltoniano. O termo de correção na fase, por outro lado, será igual à metade da diferença entre os termos correspondentes nas formulações anteriores. Mostraremos então que esta Hamiltoniana média pode ser substituída pela Hamiltoniana clássica se for descartado o termo de correção, o erro sendo da ordem de  $\hbar^2$ . O nosso resultado final será a fórmula conjecturada, Eq.(2.54).

A nova forma de integral de trajetória que descreveremos foi inspirada no fato de  $H_W$  ser quase a média de  $H_1$  e  $H_2$ . A idéia é forçar o aparecimento desta média, combinando a primeira e a segunda formas de integrais de trajetória de forma alternada em cada subintervalo ou fatia do intervalo total considerado. Primeiramente escrevemos

$$K(z'', t; z', 0) = \langle z_N | \prod_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau_j} | z_0 \rangle \quad (2.20)$$

onde  $z_N = z''$ ,  $z_0 = z'$ ,  $\tau_j$  é o intervalo no tempo e consideraremos  $N$  par por conveniência. Mesmo que mais tarde todos os intervalos de tempo  $\tau_j$  sejam considerados iguais, o índice  $j$  será mantido para controlar a seqüência dos intervalos de tempo.

Para  $j$  ímpar podemos aproximar:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau_j} \approx \int |z_j\rangle \left( 1 - \frac{i\tau_j}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j) \right) \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_j | \approx \int |z_j\rangle e^{-\frac{i\tau_j}{\hbar} H_2(z_j^*, z_j)} \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_j | . \quad (2.21)$$

Para  $j > 0$  par inserimos simplesmente um operador identidade à direita do propagador infinitesimal:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau_j} = \int e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau_j} |z_j\rangle \frac{d^2 z_j}{\pi} \langle z_j | . \quad (2.22)$$

Multiplicando este operador à esquerda pelo bra  $\langle z_{j+1} |$  que advém do termo ímpar  $j + 1$  e usando a aproximação empregada na primeira forma de integral de trajetória, Eq.(2.5),

obteremos a seguinte forma mista para o propagador:

$$\begin{aligned}
K(z_N, T; z_0, 0) &= \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 z_j}{\pi} \right\} \exp \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{i\tau}{\hbar} a_j H_{2,j} - \frac{i\tau}{\hbar} b_j H_{1,j} \right] \right\} \\
&\equiv \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dz_j^* dz_j}{2\pi i} \right\} e^{f(z^*, z)} \tag{2.23}
\end{aligned}$$

onde  $a_j$  é zero para  $j$  par e um para  $j$  ímpar,  $b_j$  é zero para  $j$  ímpar e um se  $j$  for par. Neste ponto foi suprimido o índice nos intervalos de tempo e foi colocado  $\tau_j = \tau$ . O expoente  $f$  é dado por:

$$f(z^*, z) = \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} (z_{j+1}^* - z_j^*) z_j - \frac{1}{2} z_{j+1}^* (z_{j+1} - z_j) - \frac{i\tau}{\hbar} a_j H_{2,j} - \frac{i\tau}{\hbar} b_j H_{1,j} \right\} \tag{2.24}$$

onde introduzimos a notação abreviada  $H_{2,j} \equiv H_2(z_j^*, z_j)$  and  $H_{1,j} \equiv \mathcal{H}(z_{j+1}^*, z_j)$ .

### 2.2.1 A Aproximação de Expoente Estacionário

No limite semiclássico  $\hbar \rightarrow 0$ , podemos calcular as integrais da Eq.(2.23) utilizando a aproximação de fase estacionária. Podemos dizer que as contribuições mais significativas para estas integrais acontecem nos pontos de fase estacionária, que são encontrados exigindo-se que sejam nulas as derivadas de  $f$  com relação a  $z$  e  $z^*$  separadamente. Obtemos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial z_j} &= z_{j+1}^* - z_j^* - \frac{ia_j\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{2,j}}{\partial z_j} - \frac{ib_j\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{1,j}}{\partial z_j} = 0; \quad j = 1, \dots, N-1 \\
\frac{\partial f}{\partial z_{j+1}^*} &= -z_{j+1} + z_j - \frac{ia_{j+1}\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{2,j}}{\partial z_{j+1}^*} - \frac{ib_j\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{1,j}}{\partial z_{j+1}^*} = 0; \quad j = 0, \dots, N-2. \tag{2.25}
\end{aligned}$$

Agora definimos novas variáveis de integração  $\eta$  e  $\eta^*$ , as quais descrevem os desvios de  $z$  e  $z^*$  em relação aos pontos de fase estacionária,  $z \rightarrow z + \eta$ ,  $z^* \rightarrow z^* + \eta^*$ , com as condições de contorno:

$$\eta_0 = \eta_0^* = \eta_N = \eta_N^* = 0. \tag{2.26}$$

Expandindo-se o expoente em uma s rie de Taylor em  $(\eta^*, \eta)$  pr ximo aos pontos de fase estacion ria  $(z^*, z)$  at  segunda ordem e reinserindo o resultado na Eq.(2.23) temos que:

$$K(z'', t; z', 0) = e^{f(z^*, z)} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d\eta_j^* d\eta_j}{2\pi i} \right\} \exp \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ -\frac{i\tau}{2\hbar} \left[ b_j \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_j^2} + a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^2} \right] \eta_j^2 \right. \\ \left. - \frac{i}{2\hbar} \left[ b_j \tau \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_{j+1}^2} + a_{j+1} \tau \frac{\partial^2 H_{2,j+1}}{\partial z_{j+1}^2} \right] \eta_{j+1}^2 \right. \\ \left. - \left( 1 + \frac{i\tau a_j}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} \right) \eta_j^* \eta_j + \left( 1 - \frac{i\tau b_j}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_{j+1}^* \partial z_j} \right) \eta_{j+1}^* \eta_j \right\}. \quad (2.27)$$

As integrais na Eq.(2.27) podem ser efetuadas usando as mesmas t cnicas apresentadas em [7]. A id ia   integrar primeiro sobre  $\eta_1^*$  e  $\eta_1$ , e ent o sobre  $\eta_2^*$  e  $\eta_2$ , etc. Uma f rmula de recorr ncia pode ser prontamente estabelecida e, uma vez feitas todas as integra es, obtemos:

$$K(z_N, t; z_0, 0) = e^{f(z^*, z)} \prod_{j=1}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{\left( 1 + \frac{i\tau a_j}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} \right)^2 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \left( a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^2} + b_j \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_j^2} \right) X_j}} \quad (2.28)$$

onde  $X_j$  satisfaz:

$$X_j = -\frac{i\tau a_j}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} - \frac{i\tau b_{j-1}}{2\hbar} \frac{\partial^2 H_{1,j-1}}{\partial z_j^* \partial z_j} \quad (2.29)$$

$$+ \frac{\left( 1 - \frac{i\tau b_{j-1}}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{1,j-1}}{\partial z_j^* \partial z_{j-1}} \right)^2}{\left( 1 + \frac{i\tau a_{j-1}}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j-1}}{\partial z_{j-1}^* \partial z_{j-1}} \right)^2 + 2 \frac{i\tau}{\hbar} \left( a_{j-1} \frac{\partial^2 H_{2,j-1}}{\partial z_{j-1}^2} + b_{j-1} \frac{\partial^2 H_{1,j-1}}{\partial z_{j-1}^2} \right) X_{j-1}} X_{j-1} \quad (2.30)$$

para  $j = 1, \dots, N-1$  com  $X_0 = 0$ .

### 2.2.2 A Hamiltoniana Efetiva

Para obtermos o limite do contínuo das equações discretizadas do movimento, Eq. (2.25), primeiro devemos notar que, visto que  $a_j$  é zero para  $j$  par e um para  $j$  ímpar e que  $b_j$  é zero para  $j$  ímpar e um se  $j$  for par, a segunda das equações em (2.25) dá:

$$-z_{j+1} + z_j = 0 \quad (2.31)$$

para  $j$  par.

Este resultado motiva a escolha de um novo passo para cada subintervalo de tempo,  $\epsilon = 2\tau$ , de tal modo que a evolução temporal discretizada vá de  $z_j$  diretamente para  $z_{j+2}$  para  $j$  par e de  $z_j^*$  diretamente para  $z_{j+2}^*$  para  $j$  ímpar. Esta escolha de um novo passo de subintervalo de tempo só é possível caso se encontre uma Hamiltoniana efetiva capaz de causar a correspondente evolução para ambas as variáveis  $z$  e  $z^*$ . Realmente, as equações de movimento podem ser colocadas na forma:

$$\begin{aligned} \frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{\epsilon} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H_{ef,j}}{\partial z_j^*} & j = 1, 3, 5, \dots, N-3 \\ \frac{z_{j+1}^* - z_{j-1}^*}{\epsilon} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H_{ef,j}}{\partial z_j} & j = 2, 4, \dots, N-2. \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$\begin{aligned} H_{ef,j} &\equiv (b_j H_{1,j} + b_{j-1} H_{1,j-1} + a_{j-1} H_{2,j} + a_j H_{2,j+1}) / 2 \\ &= \begin{cases} \frac{H_{1,j} + H_{2,j}}{2} & \text{para } j \text{ par} \\ \frac{H_{1,j-1} + H_{2,j+1}}{2} & \text{para } j \text{ ímpar.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Observemos que, como os saltos nos pontos são feitos agora com o passo no tempo  $\epsilon = 2\tau$ , perde-se o ponto  $z_N^*$  na Eq.(2.32). Isto, todavia, não afeta o limite do contínuo, se no final tomarmos  $z_{N-1}^* = z_N^*$  para assegurar a condição de contorno adequada.

No limite onde  $2\tau = \epsilon$  tende a zero, a Hamiltoniana efetiva se reduz a:

$$\mathcal{H}_C(z^*, z) \equiv \frac{H_1(z^*, z) + H_2(z^*, z)}{2}. \quad (2.34)$$

Como no caso das fórmulas semiclássicas Eqs.(2.12) e (2.13) para  $K_1$  e  $K_2$ , a trajetória estacionária é usualmente complexa. É então conveniente seguirmos a notação apresentada em [7] e fazer as substituições:

$$\begin{aligned} z &\rightarrow u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right) \\ z^* &\rightarrow v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} - i \frac{p}{c} \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde  $q$  e  $p$  são váriaveis complexas e  $u \neq v^*$ .

Em termos de  $u$  e  $v$ , as condições de fase estacionária (2.25) se tornam as equações de Hamilton com  $\mathcal{H}_C$ :

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{u} &= + \frac{\partial \mathcal{H}_C}{\partial v} \\ i\hbar\dot{v} &= - \frac{\partial \mathcal{H}_C}{\partial u} \end{aligned} \quad (2.36)$$

com condições de contorno idênticas à Eq.(2.17). A função  $f$  pode ser simplificada para:

$$f = \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{2}(\dot{v}u - \dot{u}v) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_C(u, v, t') \right] + \frac{1}{2}(v''u'' + v'u') - \frac{1}{2}(|z''|^2 + |z'|^2) \quad (2.37)$$

onde  $u(0) = u' = z'$ ,  $v(0) = v'$ ,  $u(T) = u''$  e  $v(T) = v'' = z''^*$ .

Em seguida calculamos o produto que aparece em (2.28). Efetuando o limite  $N \rightarrow \infty$  e

usando a expansão  $\ln(1+x) = x + O(x^2)$  obtemos:

$$\begin{aligned}
\Gamma &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left\{ \left( 1 + \frac{i\tau a_j}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} \right)^2 + 2i \frac{\tau}{\hbar} \left( a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^2} + b_j \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_j^2} \right) X_j \right\}^{-\frac{1}{2}} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \ln \left[ 1 + \frac{2i\tau a_j}{\hbar} \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} + 2i \frac{\tau}{\hbar} \left( a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^2} + b_j \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_j^2} \right) X_j + O(\tau^2) \right] \right\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N-1} \tau \left[ a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^* \partial z_j} + \left( a_j \frac{\partial^2 H_{2,j}}{\partial z_j^2} + b_j \frac{\partial^2 H_{1,j}}{\partial z_j^2} \right) X_j \right] \right\}. \tag{2.38}
\end{aligned}$$

A fim de transformar estas somas em integrais devemos notar que:

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{j=1}^{N-1} \tau (a_j F(t_j)) \right\} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \tau (F(t_1) + F(t_3) + F(t_5) + \dots) \\
&= \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \tau (F(t_1) + F(t_1) + F(t_3) + F(t_3) + F(t_5) + \dots) \\
&= \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \tau (F(t_1) + F(t_2) + F(t_3) + F(t_4) + F(t_5) + \dots) \\
&= \frac{1}{2} \int_0^t dt' F(t') \tag{2.39}
\end{aligned}$$

visto que para funções suaves,  $F(t_j) \rightarrow F(t_{j+1})$  para  $\tau \rightarrow 0$ . As integrais com os coeficientes  $b_j$  também adquirem o fator  $1/2$ . Usando estes resultados obtemos:

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_2}{\partial u \partial v}(t') + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 H_1}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 H_2}{\partial u^2} \right) X(t') \right) \right\} \\
&= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_2}{\partial u \partial v}(t') + \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2}(t') X(t') \right] \right\}. \tag{2.40}
\end{aligned}$$

### 2.2.3 A Fase Efetiva

Substituindo  $\Gamma$  e  $f$  na Eq.(2.28) obtemos:

$$K(z'', t; z', 0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_2}{\partial u \partial v}(t') + \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2}(t') X(t')\right]\right\} \\ \exp\left\{\int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} (\dot{v}u - \dot{u}v) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_C\right] + \frac{1}{2} (v'u' + v''u'') - \frac{1}{2} (|z'|^2 + |z''|^2)\right\}. \quad (2.41)$$

Ainda devemos escrever a forma contínua da fórmula de recorrência (2.29) para  $X(t)$ .

No limite  $N \rightarrow \infty$  obtemos a equação diferencial não linear:

$$\dot{X}(t) = -\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial v^2} - 2\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u \partial v} X(t) - 2\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2} X^2(t) \quad (2.42)$$

com a condição inicial  $X(0) = 0$ .

Esta equação foi resolvida em [7] e o resultado é:  $X = \frac{1}{2} \frac{\delta u}{\delta v}$  onde  $\delta u$  e  $\delta v$  são soluções das equações de Hamilton linearizadas:

$$\delta \dot{u} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u \partial v} \delta u - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial v^2} \delta v \\ \delta \dot{v} = +\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2} \delta u + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u \partial v} \delta v \quad (2.43)$$

onde as derivadas são calculadas na trajetória estacionária e as condições iniciais são  $\delta u(0) = 0$  e  $\delta v(0)$  arbitrária. O segundo termo na primeira exponencial de (2.41) pode agora ser transformado com a ajuda de (2.43)

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2} X = \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2} \frac{\delta u}{\delta v} = \frac{1}{2} \frac{\delta \dot{v}}{\delta v} - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u \partial v} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \delta v - \frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u \partial v} \quad (2.44)$$

de modo que o primeiro expoente de (2.41) torna-se:

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H_2}{\partial u \partial v}(t') + \frac{\partial^2 \mathcal{H}_C}{\partial u^2}(t') X(t') \right] \right\} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} &= \exp \left\{ +\frac{i}{4\hbar} \int_0^t dt' \left[ \frac{\partial^2 \mathcal{H}_1}{\partial u \partial v}(t') - \frac{\partial^2 \mathcal{H}_2}{\partial u \partial v}(t') \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t dt' \left[ \frac{d}{dt'} (\ln \delta v) \right] \right\} \\ &= \sqrt{\frac{\delta v'}{\delta v''}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \frac{I_1 - I_2}{2} \right) \right] \equiv \sqrt{\frac{\delta v'}{\delta v''}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} I_C \right]. \end{aligned} \quad (2.46)$$

O préfator  $\delta v'/\delta v''$  pode ser escrito também em termos da Ação usando  $\partial S_C/\partial u' = -i\hbar v'$ , onde:

$$S_C(v'', u', t) = \int_0^t dt' \left[ \frac{i\hbar}{2} (\dot{u}v - v\dot{u}) - H_C(u, v, t') \right] - \frac{i\hbar}{2} (u''v'' + u'v') \quad (2.47)$$

é a Ação Efetiva. No final obtemos:

$$K(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_C}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S_C + I_C) - \frac{1}{2} (|z'|^2 + |z''|^2) \right\} \quad (2.48)$$

onde

$$I_C = \frac{1}{2} (I_1 - I_2) \quad (2.49)$$

é a fase efetiva.

## 2.3 A Aproximação de Weyl

A equação (2.48) é o principal resultado deste capítulo. Ele representa uma terceira aproximação semiclássica para o propagador de estados coerentes, envolvendo a Hamiltoniana Efetiva  $H_C = (H_1 + H_2)/2$  e a fase efetiva  $I_C = (I_1 - I_2)/2$ .

Para o oscilador harmônico  $I_1$  e  $I_2$  são exatamente iguais e  $I_C = 0$ . Neste caso  $H_C$  coincide com a Hamiltoniana Clássica ou de Weyl  $H_W$ , e a aproximação conjecturada em (2.19) é obtida. De fato  $I_1 = I_2$  e  $H_C = H_W$  para todas Hamiltonianas polinomiais envolvendo até

no máximo potências cúbicas de  $q$  ou  $p$  [7]. Isto pode ser visto a partir das fórmulas [7, 35]

$$H_1(z^*, z) = \exp\left(\frac{1}{2}\hat{\delta}\right)H_W(z^*, z) \quad (2.50)$$

$$H_2(z^*, z) = \exp\left(-\frac{1}{2}\hat{\delta}\right)H_W(z^*, z) \quad (2.51)$$

onde  $\hat{\delta} = \partial^2/\partial z^* \partial z$ . Isto dá:

$$H_C = \cosh\left(\frac{1}{2}\hat{\delta}\right)H_W = H_W - \frac{1}{8}\frac{\partial^4}{\partial z^2 \partial z^{*2}}H_W + \dots \quad (2.52)$$

o que mostra explicitamente que  $H_C = H_W$  para até polinômios cúbicos. Além do mais, usando as relações:

$$q = (z + z^*)\left(\frac{b}{\sqrt{2}}\right) \quad p = (z - z^*)\left(\frac{-i\hbar}{b\sqrt{2}}\right) \quad (2.53)$$

com  $b \sim c \sim O(\hbar^{1/2})$ , vê-se que termos quárticos ou de ordem superior contribuem para  $H_C$  ou  $I_C$  apenas como termos da ordem de  $\hbar^2$ . Estes termos podem em princípio ser desprezados, visto que eles estão além do escopo da aproximação. Levando-se em conta estas considerações, conforme publicado em [16], podemos reescrever o propagador como:

$$K(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_W}{\partial u' \partial v''}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_W - \frac{1}{2}(|z'|^2 + |z''|^2)\right\} \quad (2.54)$$

onde  $S_W$  é dado pela Eq. (2.47) com  $H_C$  substituído por  $H_W$ . Esta é a fórmula de Weyl conjecturada em [7].

Como observação final deste capítulo devemos destacar que as diferenças entre as três fórmulas semiclássicas apresentadas neste capítulo são da ordem de  $\hbar$ , e tendem para zero no limite semiclássico. Entretanto, estas diferenças são sempre relevantes em baixas energias, e podem se tornar explícitas ao se considerar a transformada de Fourier destas fórmulas dependentes do tempo. Uma discussão da representação de energia destes propagadores semiclássicos foi apresentada na seção 6 de [7], incluindo a dedução das regras de quantização.

## Capítulo 3

# Integrais de Trajetória com estados coerentes na representação de Weyl

Neste capítulo construiremos uma integral de trajetória com estados coerentes utilizando o símbolo de Weyl para o operador Hamiltoniano. Seguiremos de forma muito próxima o nosso trabalho apresentado em [17]. A representação que construiremos será muito diferente das duas formas de integral de trajetória sugeridas por Klauder e Skagerstan em [35] e da forma mista que propusemos, que foram discutidas no capítulo 2. Mostraremos que o limite semiclássico do propagador na representação de estados coerentes utilizando a regra de ordenamento de Weyl é baseado em trajetórias clássicas que são independentes da largura dos estados coerentes. Este propagador também não apresenta as correções de fase encontradas em [7] para as duas possibilidades de integrais de trajetória sugeridas por Klauder ou a correção média que obtivemos para a forma mista. A nova integral de trajetória obtida fornece também uma conexão direta entre a representação de Wigner e a representação de Husimi para o operador de evolução. Mostraremos que o limite semiclássico do propagador em termos de estados coerentes na representação de Weyl é realmente dado pela expressão que havia sido conjecturada em [7].

No capítulo anterior apresentamos uma primeira tentativa de se obter uma representação semiclássica envolvendo diretamente a representação de Weyl de  $\hat{H}$ , conforme publicado em [16]. Neste capítulo vamos construir uma nova representação da integral de trajetória

quântica na representação de estados coerentes que contêm precisamente  $H_W$  e deduziremos o seu limite semiclássico. A nova construção é baseada nas propriedades dos operadores de translação e de reflexão [6, 45], os quais formam uma base para a expressão de operadores gerais. Enquanto que nas integrais de trajetória apresentadas anteriormente cada trajetória contribui com um termo da forma  $\exp iS/\hbar$ , onde  $S$  é a ação ao longo da trajetória (calculada com  $H_Q$ ,  $H_P$  ou  $H_C$ ), o expoente na nova forma é um tanto diferente e não se assemelha imediatamente com uma ação.

### 3.1 Cálculo com o símbolo de Weyl

A nova forma de integral de trajetória que descreveremos nesta seção é baseada em uma expansão do Hamiltoniano numa base contínua de operadores de reflexão,  $\hat{R}$ , cujo coeficiente de expansão,  $H$ , é exatamente o símbolo de Weyl de  $\hat{H}$ . Vamos rever primeiramente as regras básicas da álgebra dos operadores de reflexão e de translação na mecânica quântica [6], seguindo de maneira muito próxima o desenvolvimento apresentado na referência [45]. Em seguida usaremos estes resultados para construir a integral de trajetória.

#### 3.1.1 Operadores de Translação e Operadores de Reflexão

Considere a família de operadores de translação:

$$\hat{T}_\xi = e^{\frac{i}{\hbar}(p\hat{q}-q\hat{p})} = e^{ip\hat{q}/\hbar} e^{-iq\hat{p}/\hbar} e^{-iqp/2\hbar} = e^{-iq\hat{p}/\hbar} e^{ip\hat{q}/\hbar} e^{+iqp/2\hbar} \quad (3.1)$$

onde  $\xi = (q, p)$  é um ponto no espaço de fase. Pode-se mostrar que  $\hat{T}_\xi$  forma uma base completa, isto é, qualquer operador  $\hat{A}$  pode ser expresso como:

$$\hat{A} = \int \frac{d\xi}{2\pi\hbar} A(\xi) \hat{T}_\xi \quad (3.2)$$

onde  $d\xi = dqdp$ .

A transformada de Fourier dos operadores  $\hat{T}_\xi$  forma uma família complementar de *operadores de reflexão*,  $\hat{R}_x$ , conhecidos como operadores de paridade P, os quais também formam

uma base:

$$\hat{R}_x \equiv \frac{1}{4\pi\hbar} \int d\xi e^{\frac{i}{\hbar}(x\wedge\xi)} \hat{T}_\xi \quad (3.3)$$

onde  $x = (Q, P)$  e  $x \wedge \xi = Pq - Qp$ . Em termos destes operadores nós podemos escrever:

$$\hat{A} = \int \frac{dx}{\pi\hbar} A(x) \hat{R}_x = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int d\xi dx A(x) e^{\frac{i}{\hbar}(x\wedge\xi)} \hat{T}_\xi \quad (3.4)$$

onde  $dx = dQdP$ . Quando esta expressão é invertida para escrever  $A(x)$  em termos de  $\hat{A}$ , nós encontramos precisamente a representação de Weyl. Isto é apresentado no apêndice A. É conveniente escrever algumas destas expressões em termos de  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$ ,  $z$  e  $z^*$  ao invés de  $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$ ,  $q$  e  $p$ . Nós encontramos que:

$$\hat{T}_\xi = e^{(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a})} = e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}} e^{-|z|^2/2}, \quad (3.5)$$

o qual reconhecemos como o *operador de deslocamento* [22, 47, 44] freqüentemente utilizado na óptica quântica. Também:

$$\langle z_k | \hat{T}_\xi | z_{k-1} \rangle = e^{zz_k^* - z^*z_{k-1} - |z|^2/2} \langle z_k | z_{k-1} \rangle \quad (3.6)$$

e

$$\langle z_k | \hat{A} | z_{k-1} \rangle = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int dx A(x) \langle z_k | z_{k-1} \rangle \int d\xi e^{\frac{i}{\hbar}(x\wedge\xi)} e^{zz_k^* - z^*z_{k-1} - |z|^2/2}. \quad (3.7)$$

Visto que a integral sobre  $\xi = (q, p)$  é quadrática, ela pode ser feita imediatamente (note que  $(q, p)$  aparece em  $\xi$ ,  $z$  e  $z^*$ ). Definindo:

$$w_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{Q}{b} + i \frac{P}{c} \right) \quad (3.8)$$

onde o índice  $k$  é adicionado por uma conveniência futura e encontramos:

$$\langle z_k | \hat{A} | z_{k-1} \rangle = 2 \int \frac{dw_k dw_k^*}{\pi} A(w_k, w_k^*) e^{-2|w_k|^2 + 2z_k^* w_k + 2z_{k-1} w_k^* - |z_k|^2/2 - |z_{k-1}|^2/2 - z_k^* z_{k-1}} \quad (3.9)$$

onde

$$\frac{dw_k dw_k^*}{\pi} = \frac{dQdP}{2\pi\hbar}. \quad (3.10)$$

Como a notação sugere, esta expressão será nosso ponto de partida para construir a integral de trajetória. Quando  $\hat{A}$  for substituído pelo propagador infinitesimal  $e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} \approx 1 - i\hat{H}\tau/\hbar$  e uma seqüência destes elementos matriciais forem multiplicados, descobriremos que todos os  $z_k$ 's e  $z_k^*$ 's aparecem somente em formas quadráticas que são também integrados. A integral resultante será escrita nas novas variáveis  $w_k$  e  $w_k^*$ .

### 3.1.2 A Integral de Trajetória

Nós partimos de:

$$K(z'', t; z', 0) = \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dz_j dz_j^*}{2\pi i} \right\} \prod_{j=1}^N \left\{ \langle z_j | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_j)\tau} | z_{j-1} \rangle \right\} \quad (3.11)$$

onde  $z_N = z''$ ,  $z_0 = z'$ ,  $\tau$  é o espaçamento no tempo,  $N\tau = T$  e tomaremos  $N$  par por conveniência. Os propagadores infinitesimais podem ser calculados com Eq.(3.9) simplesmente trocando  $A(x_k)$  por  $e^{-iH(x_k)\tau/\hbar}$  onde  $H(x_k)$  é o símbolo de Weyl de  $\hat{H}$  calculado em  $(Q_k, P_k)$ . Nós obtemos:

$$K(z'', t; z', 0) = 2^N \int \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{dw_j dw_j^*}{2\pi i} \right\} \int \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \frac{dz_j dz_j^*}{2\pi i} \right\} \times \quad (3.12)$$

$$\exp \left\{ \sum_{k=1}^N \left[ -\frac{i}{\hbar} H_k \tau - 2|w_k|^2 + 2z_k^* w_k + 2z_{k-1} w_k^* - \frac{|z_k|^2}{2} - \frac{|z_{k-1}|^2}{2} - z_k^* z_{k-1} \right] \right\}$$

onde  $H_k = H(w_k, w_k^*)$ . As integrais sobre os  $z_j$ 's e sobre os  $z_j^*$ 's são quadráticas e podem ser calculadas exatamente. Quando isto é feito obtemos:

$$K(z'', t; z', 0) = \int \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{dw_j dw_j^*}{\pi i} \right\} e^{\phi_N - \frac{|z'|^2}{2} - \frac{|z''|^2}{2}} \quad (3.13)$$

$$= \int \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{dw_j dw_j^*}{\pi i} \right\} e^{\psi_N + 2C_N z''^* - 2C_N^* z' - \frac{|z'|^2}{2} - \frac{|z''|^2}{2} + z' z''^*}$$

onde

$$\begin{aligned} \phi_N = & \sum_{k=1}^N [-i\tau H_k/\hbar - 2|w_k|^2 + 2z''^* w_{N+1-k}(-1)^{k+1} + 2z' w_k^*(-1)^{k+1}] \\ & + 4 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^k w_{k+1}^* w_{k+1-j}(-1)^{j+1} + z' z''^*. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Na segunda linha de (3.36) nós escrevemos a dependência do propagador em  $z'$  e  $z''^*$  explicitamente e definimos:

$$\begin{aligned} \psi_N = & \sum_{k=1}^N [-i\tau H_k/\hbar - 2|w_k|^2] + 4 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^k w_{k+1}^* w_{k+1-j}(-1)^{j+1}, \\ C_N = & \sum_{k=1}^N w_{N+1-k}(-1)^{k+1}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

No limite do contínuo podemos escrever ainda

$$K(z'', t; z', 0) = \int \mathcal{D}[w, w^*] e^{\psi[w, w^*] + 2C[w, w^*]z''^* - 2C^*[w, w^*]z' - \frac{|z'|^2}{2} - \frac{|z''|^2}{2} + z' z''^*}. \quad (3.16)$$

### 3.1.3 Forma Alternativa e o Limite do Contínuo

As equações (3.36) e (3.16) correspondem à integral de trajetória de estados coerentes na representação de Weyl. Essa forma é muito diferente das apresentadas por Klauder e Skagerstan em dois aspectos: a medida contém um fator 2 no denominador e, mais importante ainda, o expoente não se parece nada com uma ação. Embora estas expressões pareçam ser mais práticas para cálculos reais (veja seção C adiante), nós podemos manipular os termos em  $\phi_N$  para torná-lo mais familiar e parecido com uma função ação. Entretanto, só depois de efetuarmos o limite do contínuo que realmente podemos reconhecer a ação como parte do expoente. Nós faremos estas manipulações agora, mas insistimos que as equações (3.36) e (3.16) são os análogos diretos das equações (2.7), (2.11) e (2.23) para as representações Q, P e mista respectivamente. Embora não usuais, e talvez mais complicadas, veremos que no limite semiclassico, a forma de Weyl se torna a mais simples de todas. Mostramos no

apêndice B que os termos quadráticos em  $\phi_N$  podem ser escritos como:

$$\begin{aligned}
& -\sum_{k=1}^N 2|w_k|^2 + 4\sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^k w_{k+1}^* w_{k+1-j} (-1)^{j+1} \\
& = 2\sum_{k=1,3}^{N-1} [w_k(w_{k+1}^* - w_k^*) - w_{k+1}^*(w_{k+1} - w_k)] \\
& -4\sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1} - w_k) \sum_{l=k+1, k+3}^{N-2} (w_{l+2}^* - w_{l+1}^*)
\end{aligned} \tag{3.17}$$

onde as somas do lado direito são feitas em passo duplo, de dois em dois. Os termos proporcionais a  $z'$  e  $z''^*$  podem ser reescritos como:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^N w_k^* (-1)^{k+1} & = -\sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1}^* - w_k^*) \\
\sum_{k=1}^N w_{N+1-k} (-1)^{k+1} & = \sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1} - w_k).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Quando estes termos são recolocados no expoente nós obtemos:

$$\begin{aligned}
\phi_N & = 2\sum_{k=1,3}^{N-1} [w_k(w_{k+1}^* - w_k^*) - w_{k+1}^*(w_{k+1} - w_k)] - \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=1}^N H_k \\
& -4\sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1} - w_k) \sum_{l=k+1, k+3}^{N-2} (w_{l+2}^* - w_{l+1}^*) \\
& -2z' \sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1}^* - w_k^*) + 2z''^* \sum_{k=1,3}^{N-1} (w_{k+1} - w_k) + z' z''^*.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Esta é a versão discreta alternativa de  $\phi_N$ . Embora não muito mais esclarecedora do que a forma original, Eq.(3.37), a primeira linha mostra uma semelhança próxima com a função ação. O mais importante aqui é que esta expressão está pronta para o limite do contínuo. Tomando  $N \rightarrow \infty$ ,  $\tau \rightarrow 0$  com  $N\tau = T$  nós obtemos:

$$\begin{aligned}
\phi & = -\frac{i\tau}{\hbar} \int_0^T H dt + \int_0^T (w\dot{w}^* - w^*\dot{w}) dt - \int_0^T \dot{w}(t) \int_t^T \dot{w}^*(t') dt' dt \\
& -z' \int_0^T \dot{w}^* dt + z''^* \int_0^T \dot{w} dt + z' z''^*.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Observe que os fatores 2 e 4 são compensados pelas somas feitas em passos duplos.

As integrais no último termo da primeira linha podem ser reescritas como:

$$\int_0^T \dot{w}(t)[w^*(T) - w^*(t)] dt = w^*(T)[w(T) - w(0)] - \int_0^T \dot{w}(t)w^*(t) dt. \tag{3.21}$$

O último termo acima se cancela com um dos termos na equação (3.20). Depois de efetuar as integrais na segunda linha da Eq.(3.20), fazer alguns simples rearranjos e uma integração

por partes, nós podemos escrever o expoente na forma:

$$\phi = \frac{i}{\hbar} S + (z' - w(0)) \left[ w^*(0) + \frac{z''^* - w^*(T)}{2} \right] + (z''^* - w^*(T)) \left[ w(T) + \frac{z' - w(0)}{2} \right] \quad (3.22)$$

onde  $S$  é a ação (complexa) [7]:

$$S = \int_0^T \left[ \frac{i\hbar}{2} (w^* \dot{w} - w \dot{w}^*) - H \right] dt - \frac{i\hbar}{2} (w^*(T)w(T) + w^*(0)w(0)). \quad (3.23)$$

Deve-se notar que a ação na representação dos estados coerentes não é apenas a integral correspondente a  $p\dot{q} - H$ , mas inclui importantes termos de contorno. Além disto o expoente  $\phi$  da integral de trajetória não é apenas a ação e também inclui termos de contorno adicionais. Nós veremos, contudo, que os termos extras na Eq.(3.22) se anulam no limite semiclássico.

## 3.2 Limite Semiclássico

O Limite semiclássico do propagador é obtido efetuando-se as integrais sobre  $w_k$  e  $w_k^*$  com a aproximação da fase estacionária. Como o expoente  $\phi_N$  não é uma fase, mas uma quantidade complexa, usaremos a denominação ‘aproximação do expoente estacionário’.

### 3.2.1 A Condição de Expoente Estacionário

Usando a equação (3.37) para  $N$  e  $l$  pares nós obtemos:

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_l^*} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_l}{\partial w_l^*} - 2w_l - 2z' + 4[w_{l-1} - w_{l-2} + \dots - w_2 + w_1] \equiv 0$$

e

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_{l+1}^*} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{l+1}}{\partial w_{l+1}^*} - 2w_{l+1} + 2z' + 4[w_l - w_{l-1} + \dots + w_2 - w_1] \equiv 0.$$

Somando estas duas equações, obtemos simplesmente:

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial H_l}{\partial w_l^*} + \frac{\partial H_{l+1}}{\partial w_{l+1}^*} \right] = \frac{w_{l+1} - w_l}{\tau}. \quad (3.24)$$

Para  $l = 1$  nós obtemos:

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_1^*} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_1}{\partial w_1^*} - 2w_1 + 2z' \equiv 0. \quad (3.25)$$

Para as derivadas com relação a  $w_l$  nós procedemos da mesma maneira. Para  $l$  ímpar obtemos:

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_l} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_l}{\partial w_l} - 2w_l^* - 2z''^* + 4[w_{l+1}^* - w_{l+2}^* + \cdots - w_{N-1}^* + w_N^*] \equiv 0$$

e

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_{l+1}} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_{l+1}}{\partial w_{l+1}} - 2w_{l+1}^* + 2z''^* + 4[w_{l+2}^* - w_{l+1}^* + \cdots + w_{N-1}^* - w_N^*] \equiv 0.$$

Somando as duas equações, obtemos:

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial H_l}{\partial w_l} + \frac{\partial H_{l+1}}{\partial w_{l+1}} \right] = -\frac{w_{l+1}^* - w_l^*}{\tau}. \quad (3.26)$$

Finalmente para  $l = N$  nós obtemos:

$$\frac{\partial \phi_N}{\partial w_N} = -\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\partial H_1}{\partial w_N} - 2w_N^* + 2z''^* \equiv 0. \quad (3.27)$$

Tomando o limite do contínuo e usando as variáveis  $u$  e  $v$  no lugar de  $w$  e  $w^*$ , as equações (3.24), (3.26), (3.25) e (3.27) tornam-se:

$$i\hbar \dot{u} = +\frac{\partial H_W}{\partial v}, \quad i\hbar \dot{v} = -\frac{\partial H_W}{\partial u} \quad (3.28)$$

com condições de contorno:

$$u(0) = w(0) = z', \quad v(T) = w^*(T) = z''^*. \quad (3.29)$$

A média das derivadas em passos consecutivos que aparecem no lado esquerdo das equações (3.24) e (3.26) se parece com as condições estacionárias obtidas no capítulo anterior. Naquele caso, entretanto, uma das derivadas envolvia  $H_P$  e a outra  $H_Q$ .

### 3.2.2 Expansão ao redor da Trajetória Estacionária

Considerando que  $w_k^0$  e  $w_k^{*0}$  representam a trajetória estacionária e  $w_k^0 + \xi_k$  e  $w_k^{*0} + \xi_k^*$  uma trajetória próxima, podemos expandir o expoente até segunda ordem ao redor da trajetória estacionária. Nós obtemos:

$$\phi_N = \phi_N^0 + \delta^2 \phi_N + O(3) \quad (3.30)$$

(o termo de primeira ordem é nulo) com

$$\begin{aligned} \delta^2 \phi_N &= \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{i\tau}{2\hbar} [A_k \xi_k^2 + 2C_k \xi_k \xi_k^* + B_k \xi_k^{*2}] - 2\xi_k \xi_k^* \right\} + 4 \sum_{k=1}^{N-1} \xi_{k+1}^* \sum_{j=1}^k \xi_{k+1-j} (-1)^{j+1} \\ &\equiv -\frac{1}{2} X^T \tilde{\Delta}_N X \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde  $X^T = (\xi_N, \xi_N^*, \xi_{N-1}, \dots, \xi_1, \xi_1^*)$  e

$$A_k = \frac{\partial^2 H_k}{\partial w_k^2}, \quad B_k = \frac{\partial^2 H_k}{\partial w_k^{*2}}, \quad C_k = \frac{\partial^2 H_k}{\partial w_k \partial w_k^*} \quad (3.32)$$

são calculados na trajetória estacionária.

Quando o limite do contínuo é tomado, as condições de contorno Eq.(3.29) cancelam os termos extras no expoente  $\phi$ , Eq.(3.22), o qual se torna simplesmente a ação da trajetória complexa. Portanto o propagador semiclássico torna-se:

$$K_W(z', z'', T) = e^{\frac{i}{\hbar} S_W - \frac{1}{2}(|z'|^2 + |z''|^2)} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2^N}{\sqrt{(-1)^N \det(\tilde{\Delta}_N)}}. \quad (3.33)$$

Como é usual, o cálculo do determinante da forma quadrática é o passo mais longo do cálculo semiclássico. Neste caso o cálculo é particularmente complicado, por causa da soma dupla no último termo da primeira linha da Eq.(3.31). A fim de não fugirmos do foco principal deste capítulo com estes cálculos algébricos, eles estão detalhados no apêndice C.

O resultado final é realmente a fórmula conjecturada, Eq.(2.19) que repetimos aqui:

$$K_W(z'', t; z', 0) = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_W}{\partial u' \partial v''}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_W - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right\}. \quad (3.34)$$

É claro que se houver mais de uma trajetória estacionária, devemos somar sobre todas elas no cálculo final.

### 3.3 Uma Comparação Entre as Três Formas de Integral de Trajetória

Em princípio, todas as formas discretas de integrais de trajetória dadas pelas Eqs.(2.7), (2.11) e (3.36) são quanticamente equivalentes. No entanto para  $N$  fixo, elas não são idênticas e no limite  $N \rightarrow \infty$  há problemas bem conhecidos de convergência, tornando difícil a comparação. A fim de ilustrar as diferenças entre as três formas estudaremos os propagadores discretos para o oscilador harmônico simples. O operador Hamiltoniano é:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right).$$

O propagador pode ser calculado exatamente e o seu resultado é:

$$K_{OH}(z'', z', T) = e^{-iT\omega/2} e^{-iT\omega z' z''^* - |z'|^2/2 - |z''|^2/2}. \quad (3.35)$$

Escolhendo a largura do estado coerente como  $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , os símbolos clássicos nas variáveis  $u$  e  $v$  são:

$$H_Q = \hbar\omega \left( uv + \frac{1}{2} \right) \quad H_P = \hbar\omega \left( uv - \frac{1}{2} \right) \quad H_W = \hbar\omega uv.$$

Apresentaremos aqui apenas os cálculos com alguns detalhes para o caso envolvendo  $H_W$ , os cálculos para os outros dois casos são semelhantes e mais diretos.

Relembrando que o propagador é escrito como:

$$K(z'', t; z', 0) = \int \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{dw_j dw_j^*}{\pi i} \right\} e^{\phi_N - \frac{|z'|^2}{2} - \frac{|z''|^2}{2}} \quad (3.36)$$

onde

$$\begin{aligned} \phi_N = & \sum_{k=1}^N [-i\tau H_k / \hbar - 2|w_k|^2 + 2z''^* w_{N+1-k} (-1)^{k+1} + 2z' w_k^* (-1)^{k+1}] \\ & + 4 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^k w_{k+1}^* w_{k+1-j} (-1)^{j+1} + z' z''^*. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Lembrando que para o caso do oscilador harmônico temos:

$$H_k = \hbar\omega w_k^* w_k \quad (3.38)$$

e usando as equações estacionárias (3.24) e (3.26) obtemos:

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar\omega}{2} [w_{l+1} - w_l] = \frac{w_{l+1} - w_l}{\tau}. \quad (3.39)$$

e

$$-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar\omega}{2} [w_l^* + w_{l+1}^*] = \frac{-w_{l+1}^* + w_l^*}{\tau}. \quad (3.40)$$

Utilizando as equações (3.25) e (3.27) encontramos:

$$w_1 = \frac{z'}{1 + i\tau\omega/2} \quad (3.41)$$

e

$$w_N^* = \frac{z''^*}{1 + i\tau\omega/2} \quad (3.42)$$

Utilizando as equações anteriores obtemos as seguintes relações de recorrência que nos dão a trajetória estacionária:

$$w_k = \frac{\alpha^{*k-1}}{\alpha^k} z' \quad w_k^* = \frac{\alpha^{*N-k}}{\alpha^{N-k+1}} z''^*$$

onde

$$\alpha \equiv 1 + i\tau\omega/2.$$

O cálculo da fase  $\phi_N^0$  na trajetória estacionária é longo mas envolve apenas somas geométricas simples. Várias simplificações ocorrem quando todos os termos em  $\phi_N^0$  são adicionados e o resultado é:

$$\phi_N^0 = \left(\frac{\alpha^*}{\alpha}\right)^N z' z''^* - \frac{1}{2} (|z'|^2 + |z''|^2).$$

O determinante da forma quadrática é calculado no apêndice C e o resultado é (ver Eqs.(C.1) e (C.6))

$$\det \tilde{\Delta}_N = 2^{2N} i^{2N} \alpha^{2N}. \quad (3.43)$$

Colocando tudo junto obtemos:

$$K_W(z'', z', T) = (1 + i\tau\omega/2)^{-N} e^{\left(\frac{1-i\tau\omega/2}{1+i\tau\omega/2}\right)^N z' z''^* - |z'|^2/2 - |z''|^2/2} \quad (3.44)$$

o que claramente converge para o propagador exato quando  $\tau \rightarrow 0$ . Fazendo cálculos similares para os propagadores Q e P encontramos:

$$K_Q(z'', z', T) = e^{-i\omega T/2 + (1-i\tau\omega)^N z' z''^* - |z'|^2/2 - |z''|^2/2} \quad (3.45)$$

e

$$K_P(z'', z', T) = (1 + i\tau\omega)^{-N} e^{i\omega T/2 + \frac{z' z''^*}{(1+i\tau\omega)^N} - |z'|^2/2 - |z''|^2/2} \quad (3.46)$$

os quais também convergem para o resultado exato. Observemos que a fase total  $-i\omega T/2$  resulta exata para  $K_Q$  mesmo na forma discreta. Entretanto, o termo que multiplica  $z' z''^*$ , o qual tende a  $e^{-i\omega T}$  quando  $N \rightarrow \infty$ , converge muito mais rápido para  $K_W$  do que nos

termos correspondentes em  $K_Q$  ou  $K_P$ . Além do mais, para qualquer valor finito de  $N$ , este termo tem módulo igual a 1 em  $K_W$ , enquanto seu módulo é maior do que 1 para  $K_Q$  e menor do que 1 em  $K_P$ . Apenas a título de comparação vamos chamar de  $\mu$  este coeficiente. Tomando  $\omega T = 2\pi$  e  $N = 100$  nós encontramos  $\mu_Q \approx 1.22 + 0.01i$ ,  $\mu_P \approx 0.82 + 0.007i$  e  $\mu_W \approx 0.999998 + 0.002i$ , que devem ser comparados com o resultado exato  $\mu = 1$ . Isto sugere que a nova representação da integral de trajetória deve ser melhor do que as duas formas de Klauder e Skagerstan para cálculos numéricos.

### 3.4 Relacionando os Propagadores de Weyl e de Husimi

Nesta seção mostraremos que a representação de Weyl do operador de evolução:

$$U(q, p, T) = \int \langle q - s/2 | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | q + s/2 \rangle e^{ips/\hbar} ds \quad (3.47)$$

pode ser diretamente relacionado com a representação de integral de trajetória obtida neste capítulo. Este é um resultado formal interessante que já havia sido obtido por Ozorio de Almeida na seção 6 de [45] partindo da direção oposta, isto é, da representação em integral de trajetória de  $U$ . O resultado propicia uma conexão explícita entre estas duas famosas representações da mecânica quântica no espaço de fases. Como veremos, a conexão é muito simples quando escrita em termos de integrais de trajetória.

Nós começamos reescrevendo a Eq.(3.47) como:

$$\begin{aligned} U(q, p, T) &= \int \langle q - s/2 | z'' \rangle \langle z'' | \hat{U} | z' \rangle \langle z' | q + s/2 \rangle e^{ips/\hbar} ds \frac{dz' dz'^*}{2\pi i} \frac{dz'' dz''^*}{2\pi i} \\ &= \int \mathcal{D}[w, w^*] e^\psi \int ds e^{ips/\hbar} \int \frac{dz' dz'^*}{2\pi i} \frac{dz'' dz''^*}{2\pi i} \langle \beta | z'' \rangle \langle z' | \alpha \rangle \times \\ &\quad \exp \left[ -\frac{|z'|^2}{2} - \frac{|z''|^2}{2} + z' z''^* + 2C z''^* - 2C^* z' \right] \end{aligned} \quad (3.48)$$

onde nós usamos Eqs.(3.36) e (3.15) e definimos  $\alpha = q + s/2$  e  $\beta = q - s/2$  na segunda linha. As integrais em  $z'$  e  $z''$  são quadráticas e podem ser efetuadas analiticamente. A integral

sobre  $z'$  é imediata e dá:

$$U(q, p, T) = \frac{1}{\pi^{1/4} b^{1/2}} \int \mathcal{D}[w, w^*] e^{\psi} \int ds e^{ips/\hbar} \int \frac{dz'' dz''^*}{2\pi i} \times \langle \beta | z'' \rangle \exp \left[ -\frac{|z''|^2}{2} + 2Cz''^* - \frac{\alpha^2}{2b^2} - \frac{z''^* - 2C^*}{2} + \frac{\alpha\sqrt{2}}{b}(z''^* - 2C^*) \right]. \quad (3.49)$$

Podemos verificar por inspeção que a exponencial na segunda linha acima pode ser escrita como:

$$\pi^{1/4} b^{1/2} \langle z'' | \alpha + A \rangle e^{-B} \quad (3.50)$$

com  $A = b\sqrt{2}(C + C^*)$  e  $B = -A^2/2b^2 - A\alpha/b^2 + 2C^{*2} + 2\sqrt{2}\alpha C^*/b$ . Quando (3.50) é substituído em (3.49) a integral em  $z''$  produz  $\langle \beta | \alpha + A \rangle = \delta(\alpha - \beta + A) = \delta(s + A)$ . A função Delta dá conta da integral sobre  $s$  e depois de algumas simplificações, nós obtemos simplesmente:

$$U(q, p, T) = \int \mathcal{D}[w, w^*] e^{\psi + 2Cz^* - 2C^*z + 2|C|^2} \quad (3.51)$$

onde  $z = (q/b + ipb/\hbar)/\sqrt{2}$ . Comparando com a Eq.(3.36) mostramos que a integral de trajetória para  $U(q, p, T)$  está diretamente relacionada com aquela para  $K(z, z, T)$ . Realmente, a integral de trajetória para o propagador de estado coerente diagonal tem um único termo extra  $+2|C|^2$  com relação a  $U$ . Este resultado também foi obtido por Ozorio de Almeida na seção 6 de [45]. O coeficiente  $C$  pode ser realmente interpretado como a corda de Wigner ligando as extremidades de um polígono no espaço de fase, cujos lados são dados pelas variáveis  $Q_k$  e  $P_k$  de  $w_k$ . Nós podemos calcular explicitamente os dois termos que envolvem  $q$  e  $p$  em (3.51). Usando a definição de  $C$  em Eq.(3.15), nós encontramos que:

$$2Cz^* - 2C^*z = \sum_{k=1}^N \frac{2i}{\hbar} (Q_k p - P_k q) \quad (3.52)$$

que é a soma das áreas simpléticas entre  $X_k = (Q_k, P_k)$  e  $x = (q, p)$  e é independente da largura  $b$ .

## Capítulo 4

# Discussões Finais e Conclusão

Lembramos neste capítulo do nosso problema ou desafio inicial: Baranger, Aguiar e outros [7] analisaram duas formas de integrais de trajetória sugeridas por Klauder e Skagerstam para o cálculo do propagador na representação de estados coerentes e calcularam os seus correspondentes limites semiclássicos. O resultado desses cálculos mostrou que a dinâmica clássica subjacente não era regida pela hamiltoniana clássica em nenhum dos dois casos, mas sim pela representação  $Q$  do hamiltoniano em um caso e no outro pela sua representação  $P$ . Aqui está a questão motivadora desta tese: os resultados citados mostravam que, mesmo utilizando a representação de estados coerentes, que é a mais clássica de todas as representações, o propagador seria regido por dinâmicas não clássicas. Logo, o desafio era construir uma terceira forma de integral de trajetória para o propagador na representação de estados coerentes que possuísse, no limite semiclássico, a dinâmica governada pela representação de Weyl do hamiltoniano, ou seja, pela hamiltoniana clássica.

A primeira resposta ao desafio apresentado foi a criação de uma terceira versão para o cálculo do propagador em termos de integrais de trajetória na representação de estados coerentes, utilizando uma combinação das duas formas sugeridas por Klauder de modo que no final, no limite semiclássico, a dinâmica resultou regida por uma hamiltoniana média que diferia da hamiltoniana de Weyl por termos negligíveis. Esta solução se mostrou interessante mas era apenas uma aproximação em relação ao resultado pretendido.

A segunda resposta ao desafio envolveu a criação de uma quarta versão para a integral de trajetória na representação de estados coerentes, utilizando agora uma expansão dos operadores em termos de uma base formada pelos operadores de reflexão. Neste caso o operador hamiltoniano já aparecia escrito diretamente em termos do seu símbolo de Weyl. No final, após o limite semiclássico, a dinâmica se mostrou regida exatamente pela hamiltoniana de Weyl, sem o aparecimento de nenhum termo de correção como acontecia nas formas anteriores. Neste caso, foi feita uma comparação com as três versões do propagador, as duas versões sugeridas por Klauder e Skagerstam e a que obtivemos nesta segunda resposta para o caso do oscilador harmônico simples. No limite do contínuo as três versões tendem ao resultado exato, só que a nossa versão com a hamiltoniana de Weyl se aproxima mais rapidamente. Isto nos leva a acreditar que esta versão se mostre muito útil em cálculos numéricos.

É importante destacar que uma das principais conquistas da teoria das aproximações semiclássicas foi a formulação de representações de valor inicial para o propagador semiclássico, conhecidas abreviadamente como IVR, ver [5], [40]. Um pouco da história destas conquistas pode ser visto em Baranger e outros [7]. Recentemente Pollak e Shao [48] desenvolveram um processo sistemático para aumentar a precisão das representações semiclássicas de valor inicial.

É neste contexto, que as soluções apresentadas neste trabalho se mostram muito importantes, visto que há atualmente um grande interesse na comparação das diferentes versões semiclássicas porque isto pode determinar vantagens na efetivação de cálculos numéricos mais precisos se efetuados com esta ou aquela aproximação semiclássica do propagador [48]. Além disso acreditamos que este trabalho contribui para um melhor entendimento do limite semiclássico da mecânica quântica no espaço de fases.

Muito do que foi possível fazer nesta tese se deve à propriedade de supercompleteza dos estados coerentes. Uma possibilidade muito interessante consiste em utilizar expansões em termos de estados coerentes de diferentes larguras, o que foi feito por Parísio e Aguiar em [46].

Há muitos trabalhos atuais em quantização geométrica [60, 10, 3] nos quais o ordena-

mento de Weyl surge ligado com a própria geometria do espaço, o que talvez possa nos guiar na resolução do problema de ordenamento.

## Apêndice A

# Expansão em termos dos Operadores de Reflexão e de Translação

Este apêndice segue basicamente a demonstração apresentada na referência [45]. A comparação entre as Eqs.(3.2) e (3.4) mostra que

$$A(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx A(x) e^{\frac{i}{\hbar} x \wedge \xi} \quad (\text{A.1})$$

e invertendo a transformada de Fourier

$$A(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\xi A(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} x \wedge \xi}. \quad (\text{A.2})$$

Usando a Eq.(3.2) de novo na representação de coordenadas, nós obtemos:

$$\begin{aligned} \langle q_+ | \hat{A} | q_- \rangle &= \int \frac{d\xi}{2\pi\hbar} A(\xi) \langle q_+ | \hat{T}_\xi | q_- \rangle \\ &= \int \frac{dq dp}{2\pi\hbar} A(q, p) \delta(q_+ - q_- - q) e^{\frac{i}{\hbar} p (q_- + \frac{q}{2})} \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} A(p, q_+ - q_-) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q_+ + q_-}{2} p}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Esta transformada de Fourier pode ser invertida da seguinte maneira, nós definimos  $q' = q_+ - q_-$ ,  $\bar{Q} = (q_+ + q_-)/2$ , multiplicamos ambos os lados por  $e^{-ip'\bar{Q}/\hbar}$  e integramos sobre  $\bar{Q}$ . A integral sobre  $\bar{Q}$  no lado direito é uma função delta em  $p - p'$  e obtemos

$$A(\xi) = \int d\bar{Q} \langle \bar{Q} + q/2 | \hat{A} | \bar{Q} - q/2 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} p \bar{Q}} \quad (\text{A.4})$$

onde  $(q', p')$  foi alterado de volta para  $(q, p)$ . Finalmente nós usamos a Eq.(A.2) para obter  $A(x)$ :

$$\begin{aligned} A(x) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dq dp d\bar{Q} e^{\frac{i}{\hbar} p(Q-\bar{Q}) - \frac{i}{\hbar} Pq} \langle \bar{Q} + q/2 | \hat{A} | \bar{Q} - q/2 \rangle \\ &= \int dq e^{-\frac{i}{\hbar} Pq} \langle Q + q/2 | \hat{A} | Q - q/2 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

que coincide com a Eq.(1.23).

## Apêndice B

# Demonstração da Eq.(3.17)

Em primeiro lugar reescrevemos para  $N$  par

$$\begin{aligned}
& 4 \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^k w_{k+1}^* w_{k+1-j} (-1)^{j+1} = \\
& 4w_2^* w_1 + \\
& 4w_3^* [w_2 - w_1] + \\
& 4w_4^* [w_3 - (w_2 - w_1)] + \\
& 4w_5^* [(w_4 - w_3) + (w_2 - w_1)] + \\
& 4w_6^* [w_5 - (w_4 - w_3) - (w_2 - w_1)] + \\
& \quad \vdots \\
& 4w_N^* [w_{N-1} - (w_{N-2} - w_{N-3}) - \cdots - (w_2 - w_1)] = \\
& \\
& 4[w_2^* w_1 + w_4^* w_3 + w_6^* w_5 + \cdots + w_N^* w_{N-1}] - \\
& 4(w_2 - w_1)[(w_4^* - w_3^*) + (w_6^* - w_5^*) + \cdots + (w_N^* - w_{N-1}^*)] - \\
& 4(w_4 - w_3)[(w_6^* - w_5^*) + (w_8^* - w_7^*) + \cdots + (w_N^* - w_{N-1}^*)] - \\
& \quad \vdots \\
& 4(w_{N-2} - w_{N-3})[w_N^* - w_{N-1}^*] = \\
& \\
& 4 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_{k+1}^* w_k - 4 \sum_{k=1,3}^{N-3} (w_{k+1} - w_k) \sum_{l=k+1, k+3}^{N-2} (w_{l+2}^* - w_{l+1}^*).
\end{aligned} \tag{B.1}$$

O segundo termo já está na forma necessária para a Eq.(3.17). O primeiro termo é então modificado da seguinte forma: metade dele permanece inalterada e na segunda metade somamos e subtraímos termos como em

$$w_{k+1}^* w_k = w_{k+2}^* w_{k+1} - [w_{k+1}(w_{k+2}^* - w_{k+1}^*) + w_{k+1}^*(w_{k+1} - w_k^*)] \quad (\text{B.2})$$

para  $k = 1, 3, \dots, N - 3$  apenas. Nós obtemos

$$\begin{aligned} 4 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_{k+1}^* w_k &= 2 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_{k+1}^* w_k + 2 \sum_{k=1,3}^{N-3} w_{k+2}^* w_{k+1} - \\ &2 \sum_{k=1,3}^{N-3} [w_{k+1}(w_{k+2}^* - w_{k+1}^*) + w_{k+1}^*(w_{k+1} - w_k^*)] + 2w_N^* w_{N-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Nós finalmente adicionamos  $-2 \sum_{k=1}^N w_k^* w_k$ . A parte desta soma que contém os  $k$ 's ímpares se junta com a primeira soma acima. Os  $k$ 's pares até  $N - 2$  se juntam com a segunda soma.

Nós obtemos

$$\begin{aligned} 4 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_{k+1}^* w_k - 2 \sum_{k=1}^N w_k^* w_k &= \\ 2 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_k (w_{k+1}^* - w_k^*) + 2 \sum_{k=1,3}^{N-3} w_{k+1} (w_{k+2}^* - w_{k+1}^*) - & (\text{B.4}) \\ 2 \sum_{k=1,3}^{N-3} [w_{k+1}(w_{k+2}^* - w_{k+1}^*) + w_{k+1}^*(w_{k+1} - w_k)] - 2w_N^* (w_N - w_{N-1}). \end{aligned}$$

O segundo termo na segunda linha se cancela com o primeiro termo da terceira linha. Depois de incorporar o último termo na soma, nós obtemos

$$4 \sum_{k=1,3}^{N-1} w_{k+1}^* w_k - 2 \sum_{k=1}^N w_k^* w_k = 2 \sum_{k=1,3}^{N-1} [w_k (w_{k+1}^* - w_k^*) - w_{k+1}^* (w_{k+1} - w_k)]. \quad (\text{B.5})$$

## Apêndice C

# Cálculo do Determinante

A forma quadrática na Eq.(3.33) é definida pela matriz

$$\begin{pmatrix} i\tau A_N/\hbar & i\tau C_N/\hbar + 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ i\tau C_N/\hbar + 2 & i\tau B_N/\hbar & -4 & 0 & 4 & 0 & -4 & \dots \\ 0 & -4 & i\tau A_{N-1}/\hbar & i\tau C_{N-1}/\hbar + 2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & i\tau C_{N-1}/\hbar + 2 & i\tau B_{N-1}/\hbar & -4 & 0 & 4 & \dots \\ 0 & 4 & 0 & -4 & & & & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & -4 & 0 \\ & & & & & & \dots & -4 & i\tau A_1/\hbar & i\tau C_1/\hbar + 2 \\ & & & & & & \dots & 0 & i\tau C_1/\hbar + 2 & i\tau B_1/\hbar \end{pmatrix}$$

cujo determinante,  $\det \tilde{\Delta}_N$ , é o que nós queremos calcular. Para simplificar a notação vamos esquecer do símbolo  $\det$  neste apêndice e usar simplesmente  $\tilde{\Delta}_N$  para  $\det \tilde{\Delta}_N$ .

É útil colocar  $2i$  fora de cada elemento e chamar o novo determinante como  $\Delta_N$ . Certamente

$$\tilde{\Delta}_N = 2^{2N} i^{2N} \Delta_N. \quad (\text{C.1})$$

Isto cancela  $2^N$  e o sinal  $(-1)^N$  na Eq.(3.33), deixando apenas  $\Delta_N$ . A seguir fazemos a seguinte seqüência de operações que não alteram o valor do determinante :

- coluna 2  $\rightarrow$  coluna 2 + coluna 4
- coluna 4  $\rightarrow$  coluna 4 + coluna 6
- $\vdots$
- coluna N-2  $\rightarrow$  coluna N-2 + coluna N-4
- linha 2  $\rightarrow$  linha 2 + linha 4
- linha 4  $\rightarrow$  linha 4 + linha 6
- $\vdots$
- linha N-2  $\rightarrow$  linha N-2 + linha N-4.

Isto fez com que a matriz ficasse na forma de um bloco trigonal:

$$\left( \begin{array}{cccccccc} \frac{\tau A_N}{2\hbar} & \frac{\tau C_N}{2\hbar} - i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\tau C_N}{2\hbar} - i & \frac{\tau(B_N+B_{N-1})}{2\hbar} & \frac{\tau C_{N-1}}{2\hbar} + i & \frac{\tau B_{N-1}}{2\hbar} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\tau C_{N-1}}{2\hbar} + i & \frac{\tau A_{N-1}}{2\hbar} & \frac{\tau C_{N-1}}{2\hbar} - i & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\tau B_{N-1}}{2\hbar} & \frac{\tau C_{N-1}}{2\hbar} - i & \frac{\tau(B_{N-1}+B_{N-2})}{2\hbar} & \frac{\tau C_{N-2}}{2\hbar} + i & \frac{\tau B_{N-2}}{2\hbar} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\tau C_{N-2}}{2\hbar} + i & & & & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\tau B_{N-2}}{2\hbar} & & & & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ & & & & & & 0 & 0 \\ & & & & & & \frac{\tau C_1}{2\hbar} + i & \frac{\tau B_1}{2\hbar} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\tau C_1}{2\hbar} + i & \frac{\tau A_1}{2\hbar} & \frac{\tau C_1}{2\hbar} - i \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\tau B_1}{2\hbar} & \frac{\tau C_1}{2\hbar} - i & \frac{\tau B_1}{2\hbar} \end{array} \right) .$$

Nós podemos calcular o determinante pelo método de Laplace. Seja  $\Gamma_N$  o determinante obtido da matriz acima pela remoção da primeira linha e da primeira coluna. Os dois

determinantes  $\Delta_N$  e  $\Gamma_N$  satisfazem a seguinte relação de recursão:

$$\begin{aligned}\Delta_N &= \frac{\tau A_N}{2\hbar} \Gamma_N - \left( \frac{\tau C_N}{2\hbar} - i \right)^2 \Delta_{N-1} \\ \Gamma_N &= \frac{\tau(B_N + B_{N-1})}{2\hbar} \Delta_{N-1} - \left( \frac{\tau C_{N-1}}{2\hbar} + i \right)^2 \Gamma_{N-1} + \\ &\quad \left( \frac{\tau^2 C_{N-1}^2}{4\hbar^2} + 1 \right) \frac{\tau B_{N-1}}{2\hbar} \Delta_{N-2} + \frac{\tau B_{N-1}}{2\hbar} \left[ 1 + \frac{\tau^2}{4\hbar^2} (C_{N-1}^2 - A_{N-1} B_{N-1}) \right] \Delta_{N-2}.\end{aligned}\tag{C.2}$$

Mantendo apenas termos de primeira ordem em  $\tau$  e tomando o limite  $\tau \rightarrow 0$  nós encontramos

$$\begin{aligned}\frac{\Delta_N - \Delta_{N-1}}{\tau} &= \frac{A_N}{2\hbar} \Gamma_N + i \frac{C_N}{\hbar} \Delta_{N-1} + \mathcal{O}(\tau^2) \\ \frac{\Gamma_N - \Gamma_{N-1}}{\tau} &= \frac{(B_N + B_{N-1})}{2\hbar} \Delta_{N-1} - i \frac{C_{N-1}}{\hbar} \Gamma_{N-1} + \frac{B_{N-1}}{\hbar} \Delta_{N-2} + \mathcal{O}(\tau^2)\end{aligned}\tag{C.3}$$

ou

$$\begin{aligned}\dot{\Delta} &= \frac{A}{2\hbar} \Gamma + i \frac{C}{\hbar} \Delta \\ \dot{\Gamma} &= \frac{2B}{\hbar} \Delta - i \frac{C}{\hbar} \Gamma\end{aligned}\tag{C.4}$$

com condições iniciais  $\Delta(0) = 1$  e  $\Gamma(0) = 0$ .

Observe que no caso do oscilador harmônico  $H_k = \hbar\omega w_k w_k^*$  e, então  $A_k = B_k = 0$  e  $C_k = \hbar\omega$ . Neste caso as Eqs.(C.2) podem ser resolvidas exatamente, sem a necessidade de se tomar o limite do contínuo. Nós simplesmente encontramos:

$$\Delta_N = - \left( \frac{\tau C_N}{2\hbar} - i \right)^2 \Delta_{N-1} = \left( 1 + \frac{i\omega\tau}{2} \right)^2 \Delta_{N-1}\tag{C.5}$$

o qual pode ser iterado para dar

$$\Delta_N = \left( 1 + \frac{i\omega\tau}{2} \right)^{2N}.\tag{C.6}$$

Para resolver as Eqs.(C.4) no caso geral, nós precisamos de uma última mudança de variáveis  $\Omega \equiv 2i\Delta$ . Na nova variável obtemos:

$$\begin{aligned}\dot{\Omega} &= i \frac{A}{\hbar} \Gamma + i \frac{C}{\hbar} \Omega \\ \dot{\Gamma} &= -i \frac{B}{\hbar} \Omega - i \frac{C}{\hbar} \Gamma\end{aligned}\tag{C.7}$$

com  $\Omega(0) = 2i$  e  $\Gamma(0) = 0$ . Identificando  $\Gamma$  com  $u$  e  $\Omega$  com  $v$ , nós reconhecemos imediata-

mente as equações de movimento (3.28) linearizadas ao redor da trajetória estacionária. A solução que buscamos,  $\Delta(T) = \Omega(T)/2i$ , pode ser obtida com ajuda das relações

$$-i\hbar u'' = \frac{\partial S}{\partial v''} \quad -i\hbar v' = \frac{\partial S}{\partial u'} \quad (\text{C.8})$$

onde usamos uma única linha para quantidades calculadas em  $t = 0$  e duas linhas para quando  $t = T$ . A variação na segunda destas equações leva a

$$-i\hbar \delta v' = \frac{\partial^2 S}{\partial u'^2} \delta u' + \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \delta v''. \quad (\text{C.9})$$

Usando  $\delta u' = \Gamma(0) = 0$ ,  $\delta v'' = \Omega(T)$  e  $\delta v' = \Omega(0) = 2i$  nós obtemos

$$\Omega(T) = 2i(-i\hbar) \left( \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1} \quad (\text{C.10})$$

e

$$\Delta = \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1}. \quad (\text{C.11})$$

# Referências Bibliográficas

- [1] S. Adachi, *Ann. of Phys.*, **195** 45 (1989).
- [2] G. S. Agarwal and E. Wolf, *Phys. Rev. D* **2** (10), (1970)2161.
- [3] R. Aldrovandi and L. A. Saeger, *Internat. J. Theor. Phys.* **36** (2) (1997) 345.
- [4] R. Aldrovandi and L. A. Saeger, *Internat. J. Theor. Phys.* **36** (3) (1997) 573.
- [5] J. Ankerhold and M. Saltzer, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 116, No. 14 (2002) 5925.
- [6] N. L. Balazs and B.K. Jennings, *Phys. Rep.* **104** (1984) 347.
- [7] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch and B. Schellhaaß, *J. Phys. A* **34** (2001) 7227.
- [8] A. Burch, *J. Math. Phys.* **48**, (2007) 072106
- [9] K. E. Cahill and R. J. Glauber, *Ordered Expansions in Boson Amplitude Operators*, *Phys. Rev.* **177**, (1969)1857.
- [10] M. Cargo, A. Gracia-Saz, R. G. Littlejohn, M. W. Reinsch and P. de M. Rios, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** (2005) 1977.
- [11] Ph. Choquard, *Helv. Phys. Acta* **28** (1955) 89.
- [12] L. Cohen, *J. Math. Phys.*, Vol. 7, No. 5 (1966).
- [13] L. Cohen, *J. Math. Phys.*, Vol. 11, No. 11 (1970).

- [14] P. Crehan, *J. Phys. A: Math. Gen.* 22 (1989) 811.
- [15] P. A. M. Dirac, *Phys. Zeitschr. Sowjetunion* 3 (1933) 64.
- [16] L. C. dos Santos and M. A. M. de Aguiar, *Braz. J. Phys.* **35** (2005) 175.
- [17] L. C. dos Santos and M. A. M. de Aguiar, *J. Phys. A: Math. Gen.* 39, (2006) 13465.
- [18] J. S. Dowker, *J. Math. Phys.*, Vol. 17, No. 10 (1976).
- [19] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948) 367.
- [20] R. Gilmore, *Ann. Phys. (NY)* 74, 391 4, 1055 (1972).
- [21] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* 130, 2529 (1963).
- [22] R. J. Glauber, *Phys. Rev.* 131, 2766 (1963).
- [23] T. Gregory Dewey, *Phys. Rev. A*, Vol. 42, No. 1 (1990).
- [24] C. Grosche and F. Steiner, *Handbook of Feynman Path Integrals*, Springer Tracts in Modern Physics 145, (1998).
- [25] M. C. Gutzwiller, *J. Math Phys.* 8 (1967) 1979.
- [26] M. C. Gutzwiller, *J. Math Phys.* 10 (1969) 1004.
- [27] M. C. Gutzwiller, *J. Math Phys.* 11 (1970) 1791.
- [28] M. C. Gutzwiller, *J. Math Phys.* 12 (1971) 343.
- [29] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully and E. P. Wigner, *Distributions Functions in Physics: Fundamentals*, *Phys. Rep.* 106 (1984) 121.
- [30] Edward H. Kerner and William G. Sutcliffe, *J. Math. Phys.*, Vol.11, No.2 (1970).
- [31] J. R. Klauder, *J. Math. Phys.* 4, 1055 (Part I) (1963).
- [32] J. R. Klauder, *J. Math. Phys.* 4, 1055 (Part II) (1963).

- [33] J. R. Klauder, *Continuous Representations and Path Integrals, Revisited*, in G. J. Papadopoulos and J. T. Devreese, editors, *Path Integrals*, NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, page 5, New York, 1978. Plenum.
- [34] J. R. Klauder, *Phys. Rev. D* **19**(8) (1979) 2349.
- [35] J. R. Klauder and B. S. Skagerstam, *Coherent States, Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, 1985.
- [36] J. R. Klauder, *Some Recent Results on Wave Equations, Path Integrals and Semi-classical Approximations*, in G. Papanicolaou, editor, *Random Media*, Random Media. Springer, 1987.
- [37] J. Kurchan, P. Leboeuf and M. Saraceno, Semiclassical approximations in the coherent-state representation, *Phys. Rev. A* 40 (1989) 6800.
- [38] F. Langouche and D. Roekaerts, *Phys. Rev. D*, Vol.20, No. 2 (1979).
- [39] H. W. Lee, *Phys. Reports* 259, 148 (1995).
- [40] E. Martín Fierro and J. M. Gomez Llorente, *Chemical Physics*, 322 (2006) 13.
- [41] I. W. Mayes and J. S. Dowker, *J. Math. Phys.*, Vol.14, No.4 (1973).
- [42] M. M. Mizrahi, *J. Math. Phys.*, Vol.16, No. 11 (1975).
- [43] M. M. Mizrahi, *Phys. Rev. D*, Vol.22, No. 8 (1980).
- [44] M. M. Nieto and L. M. Simmons, Jr., *Phys. Rev. D* **20** (1979) 1321.
- [45] A. M. Ozorio de Almeida, *Phys. Rep.* **295** (1998) 265.
- [46] F. Parisio and M. A. M. de Aguiar, *Phys. Rev. A* **68** (2003) 62112.
- [47] A. M. Perelomov, *Commun. Math. Phys.* 26, 222 (1972).
- [48] E. Pollak and J. Shao, *J. Phys. Chem. A* **107** (2003) 7112.
- [49] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar and M. Baranger, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 66204.

- [50] J. R. Shewell, Am. J. Phys. 27, 16 (1959).
- [51] E. Schrödinger, Naturwissenschaften 14, 664 (1926).
- [52] A. de Souza Dutra and C. A. S. Almeida, Physics Letters A 275 (2000) 25.
- [53] E. C. G. Sudarshan, Phys. Rev. Lett. 10, 277 (1963).
- [54] J. Tarski, Functional Integration and its Applications, Oxford University Press, 1975.
- [55] A. Voros, Wentzel-Kramers-Brillouin method in the Bargmann representation, Phys. Rev. A 40 (12) (1989) 6814.
- [56] H. Weyl, Z. Phys. 46 (1927) 1.
- [57] H. Weyl, The Theory of Groups and Quantum Mechanics (Dover, New York, 1931).
- [58] A. Whitaker, Einstein, Bohr and the Quantum Dilemma, Cambridge University Press, New York (1996).
- [59] E. Wigner, Phys. Rev. 40 (1932) 749.
- [60] C. Zachos, Deformation Quantization: Quantum Mechanics Lives and Works in Phase-Space, ANL-HEP-PR-01-095 (2002).
- [61] W. M. Zhang, D. H. Feng e R. Gilmore, Rev. Mod. Physics 62, No.4 (1990).