



WENDELL PEREIRA BARRETO

CONTRIBUIÇÕES DE TRAJETÓRIAS COMPLEXAS AO PROPAGADOR
SEMICLÁSSICO PARA ESTADOS COERENTES

Campinas
2014



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Instituto de Física "Gleb Wataghin"

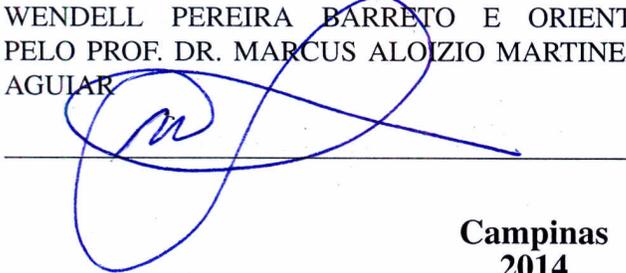
WENDELL PEREIRA BARRETO

CONTRIBUIÇÕES DE TRAJETÓRIAS COMPLEXAS AO PROPAGADOR
SEMICLÁSSICO PARA ESTADOS COERENTES

Dissertação apresentada ao Instituto de Física
"Gleb Wataghin" da Unicamp para obtenção do
título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez
de Aguiar

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FI-
NAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO
WENDELL PEREIRA BARRETO E ORIENTADA
PELO PROF. DR. MARCUS ALOIZIO MARTINEZ DE
AGUIAR



Campinas
2014

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Valkíria Succi Vicente - CRB 8/5398

B275c Barreto, Wendell Pereira, 1987-
Contribuições de trajetórias complexas ao propagador semiclássico para estados coerentes / Wendell Pereira Barreto. – Campinas, SP : [s.n.], 2014.

Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Trajetórias complexas. 2. Propagador. 3. Limite semiclássico. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez de, 1960-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Contributions of complex trajectories to semiclassical propagator for coherent states

Palavras-chave em inglês:

Complex trajectories

Propagator

Semiclassical limit

Área de concentração: Física

Titulação: Mestre em Física

Banca examinadora:

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar [Orientador]

Fernando Roberto de Luna Parísio Filho

Maurice de Koning

Data de defesa: 07-01-2014

Programa de Pós-Graduação: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **WENDELL PEREIRA BARRETO - RA 080302** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 07/01/2014.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar - Orientador do Candidato
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Fernando Roberto de Luna Parisio Filho – DF/UFPe

Prof. Dr. Maurice de Koning – DFMC/IFGW/UNICAMP

Abstract

The time evolution of quantum states is studied in the semiclassical limit using the semiclassical propagator in the coherent-state representation. In the semiclassical limit the quantum propagator can be calculated with complex solutions of Hamilton's equations satisfying appropriate boundary conditions. However, not all these solutions can be used in the expression for the propagator. Some trajectories, called *non contributing trajectories*, give incorrect contributions to the propagator and should be excluded. In this work the issue of non-contributing trajectories, which is one of the most serious problems in the systematic application of semiclassical expression involving complex orbits, is studied. We explore a class of nonlinear one-dimensional problems for which classical and quantum solutions can be analytically obtained. For these problems, the semiclassical propagator can be written explicitly allowing a detailed analysis of the contribution of each trajectory. In this work we will focus on the "squared harmonic oscillator", it can be solved analytically and it is present in problems of nonlinear optics.

Resumo

A evolução temporal de estados quânticos é estudada do ponto de vista semiclássico usando o propagador na representação de estados coerentes. No limite semiclássico o propagador pode ser calculado em termos de soluções complexas das equações de Hamilton que devem satisfazer condições de contorno apropriadas. No entanto, nem todas as soluções podem ser utilizadas no cálculo do propagador. Certas trajetórias, denominadas *não contribuintes* devem ser descartadas, pois dão contribuições incorretas ao propagador. Aqui, exploramos a questão das trajetórias não contribuintes, que é um dos problemas mais sérios na aplicação sistemática das expressões semiclássicas envolvendo órbitas complexas. Para isso consideramos uma classe de problemas unidimensionais não-lineares onde as soluções clássicas e quânticas poder ser obtidas analiticamente. Dessa forma, o propagador semiclássico pode ser escrito de forma explícita, o que permite uma análise detalhada da contribuição de cada trajetória. Definimos então um critério mais preciso para a exclusão de soluções espúrias e, enfim, melhorar o cálculo semiclássico. O sistema foco neste estudo foi o *oscilador harmônico ao quadrado*, cuja dinâmica tem solução analítica e está presente em problemas de óptica não linear.

Sumário

1	Introdução	1
2	Estados coerentes e trajetórias complexas	5
2.1	Estados coerentes	5
2.1.1	Representação no espaço de Fock	6
2.1.2	Representação no espaço de coordenadas	7
2.1.3	Produto escalar e completeza	7
2.2	Duplicação do espaço de fase	8
2.2.1	Partícula livre	9
2.2.2	Oscilador harmônico	9
2.2.3	Oscilador harmônico “ao quadrado”	10
2.2.4	Hamiltoniano de Kerr: um análogo quântico	11
3	Evolução temporal semiclássica	14
3.1	A função de onda semiclássica	14
3.2	O propagador semiclássico	16
3.2.1	Intervalo de tempo finito	17
3.2.2	Aproximação para a fase estacionária	19
3.3	Métodos semiclássicos IVR	20
3.4	Representação de estados coerentes	22
3.4.1	Trajetoórias Complexas	24
3.5	Representação de valores iniciais complexa	25
4	Aplicações e resultados	27
4.1	Fidelidade ao cálculo exato	27
4.2	Função de onda semiclássica para o termo de Kerr	28
4.3	Crítério de corte das soluções	31
4.4	Resultados	32
5	Considerações Finais	53
A	A evolução temporal	57
B	Variáveis adimensionais e reescala do sistema	59

Dedico esta dissertação a minha rosa dos ventos: Aspesca, Ístaro, Fabola e Patuca; e ao asè da Nação do Maracatu Porto Rico sob o qual este texto foi concebido.

Agradecimentos

Agradeço ao Universo, logo a todos, a mim e a você, por me ensinarem a ser quem eu sou e a quem não ser.

~ A VIDA DE PSI ~

I

Peço a todos licença física,
Pois é de nascença a poética,
Para contar-lhes um caso
Meio capengando na métrica
Porém com motes aqui e ali
Da ordem do verso de de Broglie
Se passa esta estória épica.

II

Era uma vez uma função de onda
Cuja vida, operador divino,
Media-lhe sempre que podia
Para ver qual seria seu destino
Seu nome quase me esqueci,
Mas me lembrei, é Psi
Seu sonho era o contínuo.

III

O coração, operador mimado
Hábil gerador de emoções,
Que não comuta co'a razão é fato,
Geradora das desilusões,
Mas é sempre bom lembrar
Que ele é quem nos faz sonhar
Uma completeza de abstrações.

IV

O coração aplicado a Psi
Deu numa improvável medida:
Fruto do ato de medir
Razão, coração e vida,
Fez-se de si sua dona
Ao colapsar numa zona
Classicamente proibida.

V

Em tal fase cheia de cáusticas
Psi, vinda de lugar simplético,
Foi normalizada via integrações
Presa em um espaço métrico
Módulo quadrado igual a um
Sem sentido físico algum
Apenas um artifício poético.

VI

Um santo gato me contou
E eu só fiquei de lhes dizer
Newton da cova me excomungou
Desculpe, o que posso fazer?
Eu todavia afirmo que Feynman,
Leve amante d'um batuque de Iansã,
Leu, gostou e não vai se esquecer.

~ Bigato ~

Capítulo 1

Introdução

Quando a luz se comporta como raios podemos adotar a óptica geométrica para descrever certos fenômenos. O domínio da óptica geométrica é aquele em que o comprimento de onda λ (que para a luz visível é da ordem de $10^{-7}m$) é muito menor que as dimensões L do aparato de medida. Em um experimento com tais dimensões, ao observarmos um raio de luz que muda de um meio para outro, vemos que há uma mudança na direção do raio de luz no ponto em que ele muda de meio. O caminho realizado pela luz na mudança de meios pode ser determinado pelo princípio de Fermat que basicamente diz que o caminho percorrido pela luz em qualquer combinação de meios, com quaisquer índices de refração, é aquele cujo tempo de percurso é um extremo, mínimo ou máximo. A *Lei de Snell* é a aplicação deste princípio variacional à refração da luz. Um raio de luz, saindo da fonte até um anteparo, percorre um primeiro meio e encontra a superfície, que separa o primeiro meio de um segundo meio. Nesta passagem o raio de luz é defletido com um ângulo onde seu seno é proporcional ao seno do ângulo de entrada na superfície que separa os meios e a constante de proporcionalidade é dada pela razão dos índices de refração. A escolha deste caminho pode também ser entendida através do caráter ondulatório da luz. A luz não é composta por raios e sim por ondas (ou por fótons). Estas se espalham por todo o meio e sofrem interferências que são construtivas, ao longo do caminho onde vemos o raio de luz, e destrutivas nos caminhos fora dele. O raio de luz passa a ser uma consequência de tais interferências.

Na mecânica quântica, o estado de uma partícula é descrito por uma função de onda, um artifício matemático que guarda informação sobre os estados que ela pode assumir. Na mecânica clássica este estado é determinado unicamente por uma condição inicial dando origem a uma trajetória. Tal trajetória pode ser vista como um análogo do raio de luz na óptica de geométrica e tem sua causalidade explicada pelas características ondulatórias das partículas apresentadas pela mecânica quântica. A priori, qualquer sistema pode ser olhado do ponto de vista quântico, porém certos aspectos podem ser desprezados dada a proporção deste sistema, podendo ser olhado de um ponto de vista clássico. A teoria WKB ¹ apresenta uma direção em relação a isto. Nela, a função de onda é obtida como solução da equação de Schrödinger na qual os termos de ordem \hbar^2 são desprezados. Produto entre uma amplitude real e uma exponencial complexa, a função de onda semiclassical apresenta problemas de divergência nos pontos de retorno, regiões onde surgem as cústicas. Este problema ocorre também com a primeira derivação de um propagador semiclassical, o propagador de *van Vleck* [2], que será deduzido no capítulo 3 como uma função do tempo de propagação τ e

¹iniciais dos físicos Wentzel, Kramers e Brillouin que desenvolveram a aproximação em 1926 [1].

das posições inicial e final e será denotado como $K_{SC}(q_f, q_i; \tau)$.

A função de onda é obtida convoluindo o propagador com o estado inicial,

$$\psi(q_f, \tau) = \int K(q_f, q_i; \tau) \psi(q_i, 0) dq_i.$$

Feynmann mostrou que o propagador exato pode ser escrito como uma soma sobre todos os caminhos conectando q_i e q_f no tempo τ (veja a eq. 3.16 adiante):

$$K(q_f, q_i, \tau) = \int D[q(t)] e^{iS[q(t)]/\hbar}$$

onde

$$S[q(t)] = \int L[q, \dot{q}, t] dt$$

ao longo do caminho $q(t)$. Se a razão S/\hbar é muito grande então qualquer variação δq entre dois caminhos vizinhos, pequena do ponto de vista clássico, faz com que S tenha uma variação ainda muito grande em relação a \hbar . Devido a tais variações, que implicam em mudanças bruscas de fase, os cossenos (parte real) e senos (parte imaginária), das amplitudes de probabilidade oscilarão muito rápido entre valores positivos e negativos [3, 4, 5], fazendo com que a contribuição total nessas trajetórias se anulem. Podemos ver isso em um exemplo simples mostrado na figura 1.1 onde vemos que a integral de $e^{ix^2/\hbar}$ recebe sua maior contribuição ao passar pelo ponto estacionário $x_0 = 0$ e essa contribuição fica mais efetiva à medida que a razão x^2/\hbar aumenta. A fase do propagador é um funcional, uma função de trajetórias, e para o caso em que S/\hbar é muito grande temos trajetórias estacionárias que fazem a primeira variação da fase se anular, $\delta S = 0$, sendo estas trajetórias regidas pela dinâmica clássica e pelas equações de Hamilton.

Uma dificuldade surge quando queremos saber quais são as trajetórias que satisfazem a condição de contorno $q(\tau) = q_f$ e $q(0) = q_0$. Para sistemas caóticos e tempos longos a tarefa de buscar as trajetórias que satisfazem esta condição fica muito complicada. Motivados por esta dificuldade, aproximações semiclássicas surgiram com a ideia de calcular o propagador apenas em termos das condições iniciais. Tais aproximações são chamadas de IVR's, sigla para *Initial Value Representation* [6, 7, 8].

Nesta dissertação trabalhamos na representação de estados coerentes devido a seu apelo clássico. Como consequência desta escolha, a aproximação semiclássica leva à trajetórias complexas, trajetórias onde a posição e o momento possuem parte real e imaginária, cujas ações serão da forma $S = S_r + iS_i$. Se a parte imaginária de S , S_i , for negativa, tais trajetórias poderão causar divergências no propagador que levam a resultados não físicos mesmo obedecendo aos critérios da aproximação de fase estacionária e, portanto, são ditas *mal comportadas*. Geralmente elas escapam para o infinito no espaço de fase levando a $|S_i| \gg \hbar$. Tais trajetórias podem ser excluídas do cálculo através de filtros heurísticos [6, 9, 10]. Tais filtros funcionam monitorando o propagador para cada trajetória sendo que a ultrapassagem de certo valor aceitável implica na exclusão desta trajetória *divergente* [6, 9]. Como consequência temos um desperdício computacional neste procedimento pois várias trajetórias são calculadas para depois serem descartadas do cálculo final.

Nosso objetivo neste trabalho é entender o papel das trajetórias divergentes em um sistema não linear para o qual temos as soluções analíticas e com isso definir um critério de corte destas

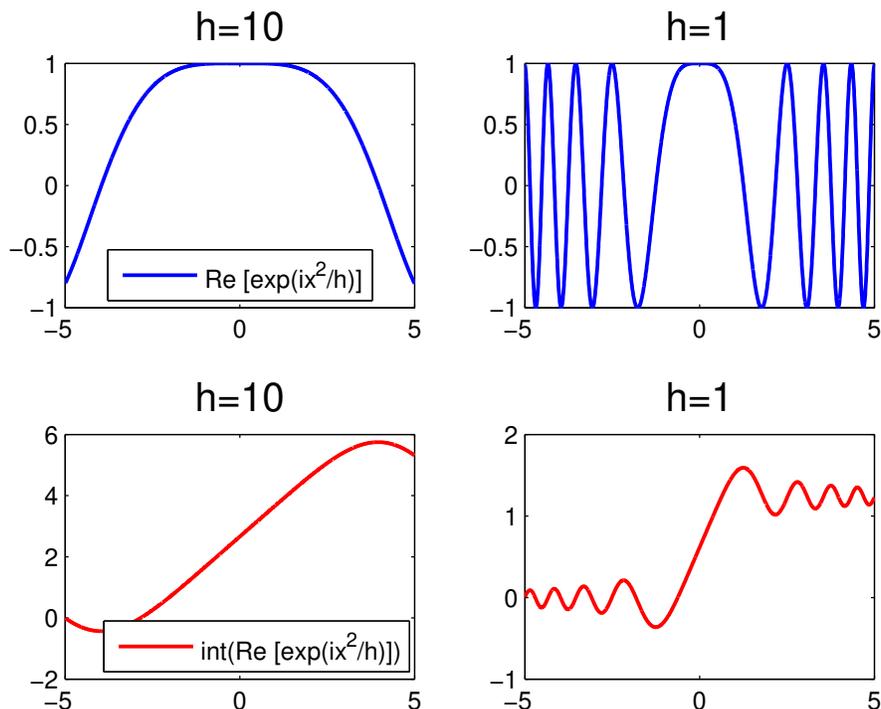


Figura 1.1: vemos que a integral de e^{ix^2} recebe sua maior contribuição ao passar pelo ponto estacionário $x_0 = 0$ e essa contribuição fica mais efetiva à medida que a razão S/\hbar aumenta.

trajetórias. Para isso, o sistema escolhido foi o oscilador harmônico “ao quadrado” que é um sistema não linear, mas com solução exata.

Iniciaremos com uma discussão sobre as propriedades dos estados coerentes, representação esta usada por diversas vantagens. Entre elas podemos citar o fato que $\psi(z) = \langle z | \psi \rangle$, com

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i\hbar \frac{p}{b} \right) \quad \text{onde} \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

guarda a informação de $\psi(q)$ e $\psi(p)$ ao mesmo tempo para uma partícula de massa m submetida a um potencial harmônico cuja frequência de oscilação é ω . Os estados coerentes são pacotes gaussianos que se tornam mais finos no limite clássico e passam a ter o centro do pacote guiado por uma trajetória clássica, ou seja, a posição e o momento médios obedecem aproximadamente a equações clássicas [8, 11]. Estas são determinadas unicamente por suas condições iniciais. Porém, na mecânica quântica há estados iniciais especificados por valores médios de posição e momento inicial ($q(0) = q_i, p(0) = p_i$) que podem evoluir em um tempo t para um outro estado diferente daquele previsto pela trajetória clássica ($q_f \neq q(t), p_f \neq p(t)$). Faz-se então uso de coordenadas complexas, duplicando o espaço de fase, onde as condições de contorno impostas pelo problema

semiclássico são satisfeitas. Em seguida, apresentaremos uma discussão sobre a evolução temporal no domínio semiclássico e com ela as dificuldades de convergência dos resultados. E, para concluir, definiremos um critério de corte das trajetórias divergentes para, finalmente, exibirmos os resultados que impressionaram pela queda brutal no custo computacional entre o cálculo com o critério aplicado e o cálculo sem restrições na escolha de condições iniciais.

Capítulo 2

Estados coerentes e trajetórias complexas

Neste capítulo apresentamos alguns tópicos relacionados aos estados coerentes do oscilador harmônico e algumas de suas propriedades. Veremos como esta representação pode se conectar com o espaço de fase clássico e como, no regime semiclassico, o uso de um espaço de fase complexo pode ser usado como um artifício matemático para agregar ao cálculo do propagador certas trajetórias ditas classicamente proibidas. Aplicaremos a complexificação ao oscilador harmônico ao quadrado que é um sistema não-linear, mas com solução exata, revelando-nos uma dinâmica bastante interessante. Finalmente ilustraremos como um sistema optomecânico pode servir de aplicação para tal dinâmica.

2.1 Estados coerentes

O estados coerentes são estados quânticos muito usados em vários campos da *Física* e da *Química* e possuem este nome por sua especial utilidade em descrever o campo eletromagnético coerente produzido por um laser [12]. Eles são definidos como os auto-estados do operador de aniquilação bosônico:

$$\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle$$

onde

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}}{b} + i \frac{\hat{p}}{c} \right) \quad \text{e} \quad z \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right)$$

e

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}}{b} - i \frac{\hat{p}}{c} \right) \quad \text{e} \quad z^* \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} - i \frac{p}{c} \right),$$

cujos parâmetros b e c estão definidos no Apêndice B.

Uma das características que tornam o uso destes estados atrativo é a sua analogia imediata com o espaço de fase clássico. Por exemplo, vê-se que estes estados na representação de posição e momento,

$$\langle Q | z \rangle = (\pi b^2)^{-1/4} \exp -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{Q}{b} - \sqrt{2}z \right)^2 - z(z - z^*) \right]$$

e

$$\langle P | z \rangle = (\pi c^2)^{-1/4} \exp -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{P}{c} - \sqrt{2}z \right)^2 + z(z+z^*) \right].$$

A largura desses pacotes é dada por

$$\Delta Q = \sqrt{\langle z | \hat{Q}^2 | z \rangle - \langle z | \hat{Q} | z \rangle^2} = \frac{b}{\sqrt{2}}$$

e

$$\Delta P = \sqrt{\langle z | \hat{P}^2 | z \rangle - \langle z | \hat{P} | z \rangle^2} = \frac{c}{\sqrt{2}}.$$

onde $bc = \hbar$ e, portanto, $\Delta Q \Delta P = \hbar/2$. Vamos listar em seguida algumas propriedades dos estados coerentes que serão úteis durante este texto.

2.1.1 Representação no espaço de Fock

Em segunda quantização, um estado do espaço de *Fock* nos dá o número de partículas contido nele e é um autoestado do operador de número $\hat{N} | n \rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = n | n \rangle$. Um estado coerente $| z \rangle$ é gerado através do vácuo, onde $\hat{a} | 0 \rangle = 0$, pelo operador de deslocamento $\hat{\mathcal{D}}(z) \equiv e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}} = e^{-|z|^2/2} e^{z\hat{a}^\dagger} e^{z^*\hat{a}}$,¹ de modo que

$$| z \rangle = \hat{\mathcal{D}}(z) | 0 \rangle.$$

No presente contexto de uma partícula, $| n \rangle$ se refere ao estado de energia

$$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

do oscilador harmônico.

Vale a pena citar algumas de suas propriedades do operador de descolamento:

1. $\hat{\mathcal{D}}^\dagger(z) = \hat{\mathcal{D}}^{-1}(z) = \hat{\mathcal{D}}(-z)$ (unitário).
2. $\hat{\mathcal{D}}^\dagger \hat{a} \hat{\mathcal{D}} = \hat{a} + z$ e $\hat{\mathcal{D}} \hat{a} \hat{\mathcal{D}}^\dagger = \hat{a} + z^*$
3. $\hat{\mathcal{D}}^\dagger(z'' + z') = \hat{\mathcal{D}}^\dagger(z'') \hat{\mathcal{D}}^\dagger(z') e^{-i\Im(z''z'^*)}$.

A expansão de um estado coerente na base $\{| n \rangle\}$ é

$$| z \rangle = \sum_n | n \rangle \langle n | z \rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} | n \rangle. \quad (2.1)$$

A distribuição de probabilidade do estado coerente é, então, uma distribuição de *Poisson*

$$P(n) = |\langle n | z \rangle|^2 = \frac{|z|^{2n}}{n!} e^{-|z|^2}$$

com

$$\langle n \rangle = \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a} | z \rangle = |z|^2.$$

¹Sejam dois operadores A e B onde $[[A, B], A] = [[A, B], B] = 0$, então: $e^{A+B} = e^{-[A, B]/2} e^A e^B$ e neste caso $[z\hat{a}^\dagger, z^*\hat{a}] = -|z|^2$

2.1.2 Representação no espaço de coordenadas

A função de onda $\langle x | z \rangle$ em termos do operador de descolamento $\hat{\mathcal{D}}(z)$ é

$$\langle x | z \rangle = \langle x | \hat{\mathcal{D}}(z) | 0 \rangle = \langle x | e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}} | 0 \rangle$$

onde os operadores escada, nesta representação, são escritos como

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}}{b} + b \frac{d}{dq} \right), \quad \text{e} \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}}{b} - b \frac{d}{dq} \right).$$

Com isso, o problema de autovalor $\langle x | \hat{a} | z \rangle = z \langle x | z \rangle$ pode ser resolvido através da equação

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{q}}{b} + b \frac{d}{dq} \right) \langle x | z \rangle = z \langle x | z \rangle$$

cuja solução normalizada é

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

2.1.3 Produto escalar e completeza

O operador \hat{a} é não-hermitiano e como consequência a ortogonalidade dos estados coerentes não é garantida. O produto escalar entre dois estados $|z\rangle$ e $|z'\rangle$ é

$$\begin{aligned} \langle z' | z \rangle &= \langle 0 | \hat{\mathcal{D}}^\dagger(z') \hat{\mathcal{D}}(z) | 0 \rangle = \langle 0 | e^{-z'\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}} | 0 \rangle e^{-\frac{1}{2}(|z'|^2 + |z|^2)} \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|z-z'|^2 - zz'^* + z^*z')}. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Portanto, a superposição entre dois estados,

$$|\langle z' | z \rangle|^2 = e^{-|z-z'|^2},$$

diminui quando a diferença entre os rótulos z e z' aumenta.

Apesar da não ortogonalidade, é possível expandir na base dos estados coerentes, cuja relação de completeza é

$$\hat{1} = \frac{1}{\pi} \int d^2z |z\rangle \langle z|.$$

Esse conjunto possui uma base supercompleta, ou seja, mesmo removendo alguns elementos da base, ela ainda continua completa e é possível representar qualquer elemento deste espaço através da combinação linear dos elementos desta base. Desta forma, um vetor deste conjunto pode ser representado como

$$|z\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2z' |z'\rangle \langle z' | z \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2z' |z'\rangle e^{-\frac{1}{2}(|z-z'|^2 - zz'^* + z^*z')}$$

2.2 Duplicação do espaço de fase

O propagador semiclássico na representação de estados coerentes será calculado usando a aproximação de fase estacionária (cap. 3). A condição de fase estacionária leva a equações de movimento para duas variáveis complexas u e v , onde posição e momento são complexos, que substituem z e z^* , onde posição e momento são reais, que satisfazem às equações de Hamilton:

$$\dot{u} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial v} \quad \dot{v} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial u}, \quad (2.3)$$

onde

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

com $bc = \hbar$.

A transformação de (q, p) para (u, v) pode ser obtida via uma função geratriz $F(q, v)$ com

$$p = \frac{\partial F}{\partial q} \quad \text{e} \quad i\hbar u = \frac{\partial F}{\partial v}.$$

Calculando $F(q, v)$ chega-se a

$$F(q, v) = -\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{q^2}{b^2} + v^2 \right) + \frac{\sqrt{2}i\hbar}{b} vq \quad (2.4)$$

sendo $F(q, v)$ determinada para todo v e q . Porém, do ponto de vista da mecânica clássica estamos diante da restrição

$$\Re(v) = q/(\sqrt{2}b) \quad (2.5)$$

que faz com que tais variáveis mantenham uma dependência entre si. Uma das maneiras, então, de determinar 2.4 seria admitir que q é complexo e ignorar o vínculo 2.5 para, desta forma, agregar trajetórias classicamente proibidas ao cálculo quântico [13]. Veremos no capítulo 3 que as soluções que precisamos das equações 2.3 são de fato complexas.

Podemos ilustrar como a duplicação do espaço de fase pode conectar trajetórias classicamente proibidas usamos a transformação [14]

$$q = q_1 + ip_2, \quad p = p_1 + iq_2 \quad (2.6)$$

onde q_1, q_2, p_1 e p_2 são reais.

Nessas coordenadas, uma hamiltoniana $H(q, p)$ assume a forma complexa

$$H(q, p) = H_1(q_1, p_1, q_2, p_2) + iH_2(q_1, p_1, q_2, p_2) \quad (2.7)$$

onde H_1 e H_2 são funções reais das variáveis reais q_1, p_1, q_2, p_2 . Para $H(q, p)$ analítica pode-se usar as condições de Cauchy-Riemann e recuperar as equações canônicas de Hamilton para as novas variáveis. Sendo assim, as equações de movimento para estas coordenadas são:

$$\dot{q}_1 = \frac{\partial H_1}{\partial p_1}, \quad \dot{p}_1 = -\frac{\partial H_1}{\partial q_1}, \quad \dot{q}_2 = \frac{\partial H_1}{\partial p_2}, \quad \dot{p}_2 = -\frac{\partial H_1}{\partial q_2}. \quad (2.8)$$

As equações (2.8) são as equações usuais de Hamilton para um sistema de dois graus de liberdade, governadas apenas pela parte real H_1 . Uma consequência interessante que decorre deste resultado é que H_1 e H_2 são constantes do movimento e, portanto, um sistema unidimensional integrável se mantém integrável no *espaço de fase duplo*.

Partindo destas premissas, calcularemos as trajetórias complexas de alguns sistemas Hamiltonianos simples. Começaremos com o problema trivial de uma partícula livre, seguindo para a Hamiltoniana do oscilador harmônico e logo em seguida para a Hamiltoniana do oscilador harmônico ao quadrado.

2.2.1 Partícula livre

A Hamiltoniana da partícula livre é:

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (2.9)$$

Substituindo na equação 2.9 as coordenadas dadas pela equação 2.6, temos:

$$H = \frac{p_1^2 - q_2^2}{2m} + \frac{ip_1q_2}{2m} \quad (2.10)$$

Tomando a parte real, ou seja, H_1 , podemos escrever as equações de Hamilton:

$$\dot{q}_1 = \frac{p_1}{m}, \quad \dot{p}_1 = 0, \quad \dot{q}_2 = 0, \quad \dot{p}_2 = \frac{q_2}{m}. \quad (2.11)$$

Obtemos as seguintes soluções:

$$\begin{aligned} q_1(t) &= q_{10} + \frac{p_{10}t}{m} \\ p_1(t) &= p_{10} \\ q_2(t) &= q_{20} \\ p_2(t) &= p_{20} + \frac{q_{20}t}{m}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.2.2 Oscilador harmônico

Como alicerce para o próximo exemplo vamos apresentar aqui as soluções para o oscilador harmônico nas coordenadas 2.6. A Hamiltoniana do oscilador harmônico é:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}. \quad (2.13)$$

Substituindo as coordenadas dadas pelas equações 2.6, obteremos H_1 e H_2 :

$$H_1 = \frac{p_1^2 - q_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2(q_1^2 - p_2^2)}{2} \quad (2.14)$$

$$H_2 = \frac{p_1q_2}{m} + m\omega^2 q_1p_2 \quad (2.15)$$

Usando H_1 , escrevemos as equações de Hamilton, chegando ao sistema de equações diferenciais abaixo:

$$\dot{q}_1 = \frac{p_1}{m}, \quad \dot{p}_1 = -m\omega^2 q_1, \quad \dot{q}_2 = -m\omega^2 p_2, \quad \dot{p}_2 = \frac{q_2}{m}. \quad (2.16)$$

As soluções são dadas por:

$$\begin{aligned} q_1(t) &= q_{10} \cos \omega t + \frac{p_{10}}{m\omega} \sin \omega t \\ p_1(t) &= p_{10} \cos \omega t - m\omega q_{10} \sin \omega t \\ q_2(t) &= q_{20} \cos \omega t - m\omega p_{20} \sin \omega t \\ p_2(t) &= p_{20} \cos \omega t + \frac{q_{20}}{m\omega} \sin \omega t \end{aligned} \quad (2.17)$$

e são sempre periódicas, com o mesmo período das soluções reais.

2.2.3 Oscilador harmônico “ao quadrado”

O oscilador harmônico ao quadrado representa um sistema interessante, pois suas equações são não lineares, mas com solução exata no caso real. Vamos ver que esta propriedade se repete mesmo com a nossa mudança de coordenadas da equação 2.6, porém uma dinâmica não trivial surge e, com ela, as diferenças com o caso real.

A Hamiltoniana do oscilador harmônico ao quadrado, como o próprio nome já diz, é:

$$\mathcal{H} = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right)^2 = H^2. \quad (2.18)$$

Desta forma, temos que $\mathcal{H} = H_1^2 - H_2^2 + 2iH_1H_2$, ou seja, $\mathcal{H}_1 = H_1^2 - H_2^2$. Pode-se demonstrar que H_1 e H_2 são constantes do movimento em relação a \mathcal{H}_1 levando ao sistema de equações diferenciais de primeira ordem

$$\begin{bmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{p}_2 \\ \dot{p}_1 \\ \dot{q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2H_1/m & -2H_2/m \\ 0 & 0 & 2H_2/m & 2H_1/m \\ -2H_1m\omega^2 & 2H_2m\omega^2 & 0 & 0 \\ -2H_2m\omega^2 & -2H_1m\omega^2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ p_2 \\ p_1 \\ q_2 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Os autovalores da matriz à direita são $2\omega(H_2 \pm iH_1)$ e $-2\omega(H_2 \pm iH_1)$, Expandindo as soluções em termos dos autovetores correspondentes e resolvendo o problema de valor inicial, chegamos às

seguintes soluções:

$$\begin{aligned}
q_1(t) &= q_{10} \cos(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) + \frac{p_{10}}{\omega m} \sin(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) \\
&+ \frac{q_{20}}{\omega m} \cos(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t) - p_{20} \sin(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t) \\
p_1(t) &= p_{10} \cos(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) - \omega m q_{10} \sin(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) \\
&- \omega m p_{20} \cos(\Omega_1 t) \sin(\Omega_2 t) - q_{20} \sin(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t) \\
q_2(t) &= q_{20} \cos(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) - \omega m p_{20} \sin(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) \\
&+ \omega m q_{10} \cos(\Omega_1 t) \sin(\Omega_2 t) + p_{10} \sin(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t) \\
p_2(t) &= p_{20} \cos(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) + \frac{q_{20}}{\omega m} \sin(\Omega_1 t) \cosh(\Omega_2 t) \\
&- \frac{p_{10}}{\omega m} \cos(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t) + q_{10} \sin(\Omega_1 t) \sinh(\Omega_2 t)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

onde $\Omega_1 = 2\omega H_1$ e $\Omega_2 = 2\omega H_2$. Podemos notar, a princípio, que escolhendo condições iniciais tais que $\Omega_2 = 2\omega H_2 = 0$, obteremos trajetórias fechadas no espaço de fase duplo ao passo que para termos trajetórias abertas é suficiente que $H_2 \neq 0$. Portanto, mostramos também que as soluções apresentam um comportamento mais rico ao entrarmos com esta dinâmica complexa.

Isso mostra que as soluções do problema clássico podem ser obtidas explicitamente. As soluções quânticas também podem ser construídas de forma simples, pois os auto-estados de \hat{H} são os mesmos do oscilador harmônico e as energias $[\hbar\omega(n + 1/2)]^2$. O propagador quântico, no entanto, é não trivial, assim como não será o cálculo semiclassico posteriormente.

Características notáveis do oscilador ao quadrado:

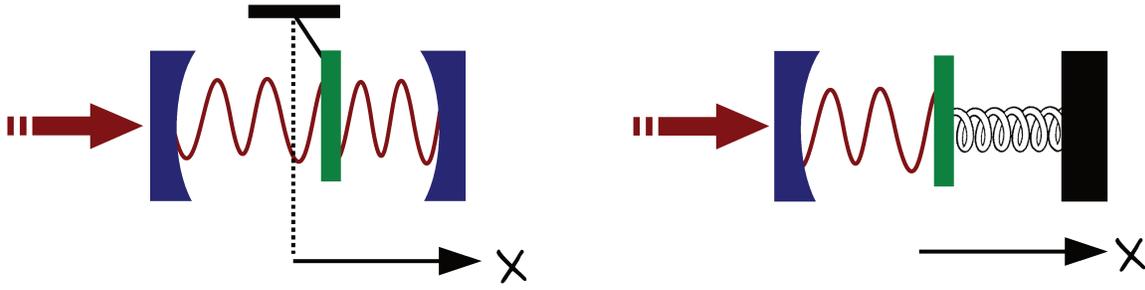
1. Sistema não linear porém com solução exata.
2. Frequência de oscilação dependente das condições iniciais.
3. Trajetórias fechadas e periódicas para coordenadas reais, mas existem trajetórias complexas periódicas também e é nelas que estamos interessados, pois ficam limitadas no espaço de fase e não divergem.

2.2.4 Hamiltoniano de Kerr: um análogo quântico

Uma aplicação interessante para o oscilador harmônico “ao quadrado” aparece no sistema optomecânico cujo esquema está ilustrado nas figuras 2.1(a) e 2.1(b) [15]. Observando tal sistema encontramos um espelho acoplado mecanicamente a uma mola interagindo com o campo eletromagnético de uma cavidade óptica a sua esquerda, a cavidade então interage com o campo de um laser a esquerda. Tal sistema visa mimetizar o da figura 2.1(a) onde duas cavidades ópticas dividem o mesmo espelho.

O operador Hamiltoniano total deste sistema pode ser dividido em três partes. A primeira,

$$H_e = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2,$$



(a) Duas cavidades de Fabry-Perot compartilhando um espelho oscilante.

(b) Uma cavidade de Fabry-Perot com um espelho oscilante mimetizando a segunda cavidade

descreve o espelho acoplado mecanicamente ao oscilador onde m , Ω , x e p são a massa do espelho, a frequência de oscilação do espelho, sua posição e seu momento respectivamente. A segunda,

$$H_c = \hbar\omega_0 a^\dagger a - \hbar \frac{\omega_0}{L} a^\dagger a x,$$

descreve os fótons da cavidade, de frequência natural ω_0 , através dos operadores bosônicos a e a^\dagger e o acoplamento entre a cavidade e o espelho presente no segundo termo do lado direito onde L é o comprimento da cavidade. E, por último,

$$H_l = i\hbar\lambda \left(a^\dagger e^{-i\omega_l t} - a e^{i\omega_l t} \right)$$

onde ω_l é a frequência do campo emitido pelo laser e λ é uma constante de interação entre a cavidade e o campo emitido pelo laser que é proporcional a raiz da potência do laser e à constante de decaimento dos fótons da cavidade. O Hamiltoniano total é então a soma dos três acima: $H_T = H_e + H_c + H_l$. O termo de Kerr aparece ao realizarmos uma rotação com o operador $W(t) = \exp(-i\omega_l a^\dagger a t)$ no Hamiltoniano total [15]

$$H_T^R = W^\dagger(t) H_T W(t) - iW^\dagger(t) \frac{\partial W(t)}{\partial t} = H_{slow} + H_{fast}$$

com

$$H_{slow} = \hbar\Delta a^\dagger a + i\hbar\lambda (a^\dagger - a)$$

$$H_{fast} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2 - \hbar g a^\dagger a x,$$

onde fizemos $g = \omega_0/L$ que pode ser entendida como a constante de interação entre a cavidade e o espelho. A frequência efetiva da cavidade, $\Delta = \omega_0 - \omega_l$, é calibrada para ser muito pequena e muito menor que a frequência do ressonador mecânico (“variáveis rápidas”).

Portanto, transformamos

$$H_{fast} = \hbar\Omega \left(A^\dagger A + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 g^2}{2m\Omega^2} (a^\dagger a)^2,$$

com

$$A^\dagger = \sqrt{\frac{m\Omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\Omega} + \frac{\hbar g}{m\Omega^2} a^\dagger a \right)$$

e daí obtemos o termo de Kerr para um meio físico

$$H_{kerr} = \frac{\hbar^2 g^2}{2m\Omega^2} (a^\dagger a)^2 \tag{2.21}$$

Por ser um bom análogo quântico do oscilador harmônico “ao quadrado”, o termo para um meio físico do tipo *Kerr* é uma motivação física para o problema foco desta dissertação.

Capítulo 3

Evolução temporal semiclássica

Nesta capítulo falaremos sobre a evolução temporal semiclássica iniciando com uma explanação da função de onda semiclássica e suas implicações dinâmicas. Seguiremos com uma discussão sobre o propagador de Van Vleck e suas limitações usando a representação de posição. A seção sobre o IVR visará esclarecer a ideia por trás do método. Deduziremos o propagador semiclássico na representação de estados coerentes para uma melhor visibilidade de sua estrutura e da dinâmica hamiltoniana que surge no limite semiclássico nestas coordenadas. Finalmente apresentamos uma IVR para o propagador em estados coerentes.

3.1 A função de onda semiclássica

Vamos começar procurando uma solução da equação de Schrödinger, dado um potencial $V(q)$, válida no limite $\hbar \rightarrow 0$ para um sistema unidimensional. Neste limite, o comprimento de onda de De Broglie ($\lambda \sim \hbar/p$) é bem menor que a escala de variação do potencial $V(q)$ [16]. Desta forma, localmente a partícula se comporta como uma partícula livre. Por isso, supõe-se uma função de onda na forma

$$\psi(q, t) = A(q, t)e^{i\frac{S(q, t)}{\hbar}}, \quad (3.1)$$

com $A(q, t)$ sendo uma amplitude real e que varia lentamente em relação a fase real $S(q, t)$. Como conhecido da *Teoria WKB* [17], ao se substituir a função de onda 3.1 na equação de Schrödinger, para um potencial $V(q)$,

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - V(q) \right) \psi(q, t) = 0, \quad (3.2)$$

e excluindo os termos quadráticos em \hbar , obtém-se duas equações: a primeira rege evolução temporal da fase

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) = 0, \quad (3.3)$$

sendo esta a equação clássica de *Hamilton-Jacobi*, melhor representada na forma:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \partial_q S, t) = 0, \quad \text{onde} \quad \partial_q S = \frac{\partial S}{\partial q}. \quad (3.4)$$

A solução formal da equação 3.4 é simplesmente a ação[16]

$$S(q, t) = S(q', 0) + S(q, t; q', 0)$$

onde

$$S(q, t; q', 0) = \int_0^t d\tau [\dot{q}(\tau)p(\tau) - H(q, p; \tau)]$$

satisfazendo as relações

$$p' = -\frac{\partial}{\partial q'} S(q, t; q', 0) \quad \text{e} \quad p = \frac{\partial}{\partial q} S(q, t; q', 0)$$

para, assim, determinar uma trajetória específica que parte de q' e $p' = -\partial_{q'} S(q', 0)$ e vai até q e $p = \partial_q S$ no tempo t .

A segunda equação rege a a evolução temporal da amplitude

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial q} \frac{\partial A}{\partial q} + \frac{1}{2m} A \frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = 0 \quad (3.5)$$

da qual decorre a equação de continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} (\rho v) = 0 \quad (3.6)$$

onde $\rho \equiv |\psi|^2 = A^2$ e $v = \partial_q S/m$.

Da equação de continuidade 3.6 temos a garantia de que a densidade de pontos em um volume dq se conservará no tempo, figura 3.1,

$$\rho(q, t) dq = \rho(q', 0) dq',$$

e, portanto,

$$A(q, t) = \left| \frac{\partial q'}{\partial q} \right|^{1/2} A(q', 0).$$

Juntando estes ingredientes, dadas as condições iniciais $A_0 = A(q', 0)$ e $S_0 = S(q', 0)$, obtém-se a função de onda semiclássica

$$\psi(q, t) = \left| \frac{\partial q'}{\partial q} \right|^{1/2} A(q', 0) e^{\frac{i}{\hbar} (S(q', 0) + S(q, t; q', 0))} = \left| \frac{\partial q'}{\partial q} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(q, t; q', 0)} \psi(q', 0). \quad (3.7)$$

É interessante olhar para a curva $S(q, t)$ no espaço de fase, ilustrada na figura 3.1, e perceber que diferentes posições iniciais $q'(0)$ podem levar a mesma posição final $q_2(t_2)$. Neste caso, é necessário somar tais contribuições à função de onda. Portanto:

$$\psi(q, t) = \sum_j \left| \frac{\partial q'_j}{\partial q} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S(q, t; q'_j, 0)} \psi(q'_j, 0). \quad (3.8)$$

Também é ilustrado na figura 3.1 o início da formação de uma *cáustica*, também denominada como *ponto focal*, em $q_1(t_1)$ que pode ser entendida como um ponto do espaço de fase onde $\partial q' / \partial q \rightarrow \infty$ [17]. Tais pontos focais podem ser visualizados na figura 3.2 para o oscilador harmônico onde temos um ponto focal a cada $t = (n + 1/2)\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) para $q(t)$, indicando onde há as divergências do pré-fator da equação 3.8. Para a mesma função de onda escrita na representação de momento, tais divergências ocorreriam para $t = n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), onde se encontram os pontos focais de $p(t)$. A cada passagem por estes pontos, acrescenta-se uma fase, chamada *índice de Maslov* [17, 18] (seu sentido ficará mais claro na seção 3.2), computando a mudança de sinal de $\partial q' / \partial q$. A forma final da função de onda semiclássica é então escrita como [19]:

$$\psi(q, t) = \sum_j \left| \frac{\partial q'_j}{\partial q} \right|^{1/2} e^{i \frac{1}{\hbar} S(q, t; q'_j, 0) - i\pi m(q, q'_j, t)} \psi(q'_j, 0). \quad (3.9)$$

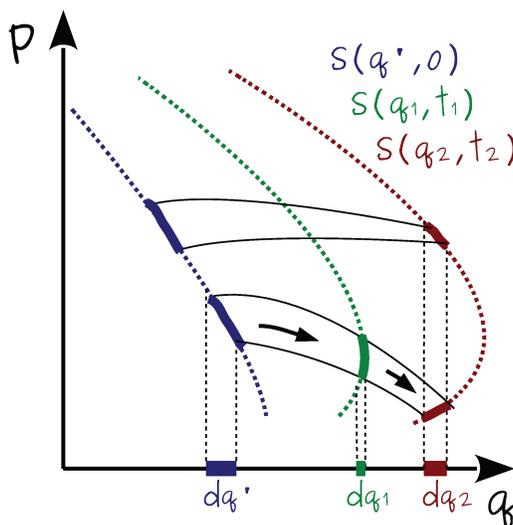


Figura 3.1: Curva $S(q, t)$ e nela vemos a formação de uma cáustica em dq_1 . Algo importante a se notar nessa figura é que a densidade de pontos em um volume do espaço de fase se conservará no tempo.

3.2 O propagador semiclássico

Agora partiremos na busca do propagador semiclássico

$$K(q_f, q_0; \tau) = \langle q_f | U(\tau) | q_0 \rangle$$

onde $U(\tau)$ é o operador de evolução temporal e

$$\psi(q_f, \tau) = \int K(q_f, q_0; \tau) \psi(q_0, 0) dq_0$$

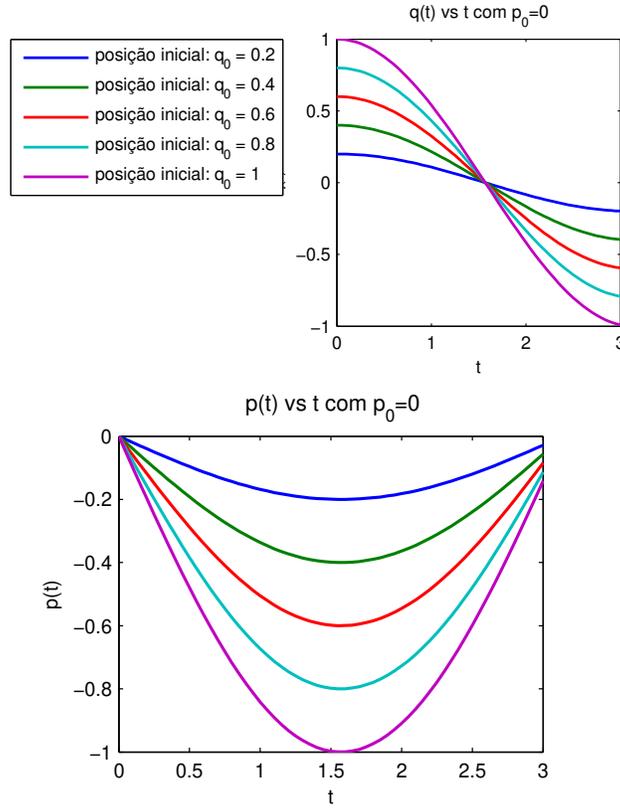


Figura 3.2: Pontos focais do oscilador harmônico.

a função de onda evoluída no tempo.

Esta busca será feita partindo da ideia apresentada na seção anterior: escrevendo o propagador para tempos curtos e logo após buscando este resultado para tempos longos através das propriedades do operador de evolução temporal discutidas no apêndice A.

3.2.1 Intervalo de tempo finito

O propagador pode ser expresso como uma composição de propagadores infinitesimais para um intervalo de tempo finito. Então, podemos usar a forma do propagador infinitesimal

$$\begin{aligned} K(q_{k+1}, q_k, \varepsilon) &= \langle q_{k+1} | \hat{U}(\varepsilon) | q_k \rangle = \int \langle q_{k+1} | p_k \rangle \langle p_k | e^{-i\frac{\hat{H}\varepsilon}{\hbar}} | q_k \rangle dp_k \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{ip_k}{\hbar}(q_{k+1}-q_k) - \frac{iH_k\varepsilon}{\hbar}} dp_k + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

para um intervalo de tempo $\varepsilon = t_{k+1} - t_k$, com tempo $\tau = N\varepsilon$, onde

$$\langle p_k | e^{-i\frac{\hat{H}\varepsilon}{\hbar}} | q_k \rangle \approx \langle p_k | \hat{1} - \frac{i\hat{H}\varepsilon}{\hbar} | q_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p_k q_k}{\hbar} - i\frac{H_k\varepsilon}{\hbar}}. \quad (3.11)$$

e

$$H_k = \frac{\langle p_k | H | q_k \rangle}{\langle p_k | q_k \rangle}. \quad (3.12)$$

É válido notar que um dos requisitos a se cumprir como propriedade básica da evolução temporal é que $K(q_{k+1}, q_k, \varepsilon) = \delta(q_{k+1} - q_k)$ seja satisfeita no limite $\varepsilon \rightarrow 0$. A equação 3.10 pode ser escrita como

$$K(q_{k+1}, q_k, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{ip_k^2}{2m\hbar}\varepsilon + \frac{ip_k}{\hbar}(q_{k+1}-q_k) - \frac{iv_k}{\hbar}\varepsilon} dp_k + \vartheta(\varepsilon^2) \quad (3.13)$$

onde V_k é o potencial que aqui pode ser dito constante para um intervalo ε curto. Nestas condições, ao efetuarmos a integral usando a integral de Fresnel,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(ax^2 + bx)] = \sqrt{\frac{i\pi}{a}} \exp\left(-i\frac{b^2}{4a}\right), \quad (3.14)$$

chegamos a

$$K(q_{k+1}, q_k, \varepsilon) \approx \frac{m}{2i\pi\varepsilon\hbar} e^{iS(q_{k+1}, q_k, \varepsilon)/\hbar} \quad (3.15)$$

onde

$$S(q_{k+1}, q_k, \varepsilon) = \varepsilon \left[m \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\varepsilon} \right)^2 - V(q_k) \right].$$

Usando a definição da função delta

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2}$$

vemos de fato que 3.15 satisfaz a propriedade de tender a um delta para intervalos de tempos curtos.

A partir disso, pode-se realizar N propagações usufruindo da propriedade A.4, do apêndice A, e “sanduichando” N integrais entre estas propagações, ou seja,

$$K(q_f, q_0; \tau) = \int \dots \int \prod_{k=0}^N dq_k K(q_k, q_{k-1}, \varepsilon)$$

Desta forma, fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$ e $N \rightarrow \infty$, o propagador de um ponto $q(0) = q_0$ a um ponto $q_N = q_f$ ficará

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0; \tau) &= \lim_{(\varepsilon, N) \rightarrow (0, \infty)} \int \dots \int \frac{dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar)^N} \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \varepsilon \left\{ m \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\varepsilon} \right)^2 - V(q_k) \right\} \right] \equiv \int D[q(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[q(\tau)]} \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde

$$S[q(\tau)] = \lim_{(\varepsilon, N) \rightarrow (0, \infty)} \sum_{k=0}^{N-1} \varepsilon \left\{ m \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\varepsilon} \right)^2 - V(q_k) \right\} = \int_0^\tau L[q(t), \dot{q}(t)] dt \quad (3.17)$$

é a ação sobre o caminho $q(\tau)$. É válido notar que, neste caso, necessariamente não será usada apenas uma trajetória clássica pois devemos *considerar todos os caminhos possíveis* [17] e para que este limite seja correto é necessário considerar também que todos os caminhos que ligam $q(0) = q_0$ a $q_N = q_f$ sejam contínuos [20].

3.2.2 Aproximação para a fase estacionária

Percebemos que todas as trajetórias contribuem de alguma forma para o propagador. Porém, na equação 3.16, vemos que no limite clássico, onde a ação $S(\tau)$ passa a ter um valor muito maior que \hbar , a relação S/\hbar se torna muito grande. Qualquer variação δq entre dois caminhos vizinhos, pequena em termos do ponto de vista clássico, implicam em mudanças bruscas de fase do expoente do integrando na equação 3.16, fazendo com que contribuição total dessas trajetórias se anule ao calcularmos a integral, ou seja, se uma trajetória faz uma contribuição positiva, outra muito próxima a ela faz uma contribuição igualmente negativa. As únicas trajetórias que realmente contribuirão são as trajetórias clássicas onde a variação da ação é nula em uma vizinhança δq de acordo com o Princípio de Hamilton. Isto faz com que, na vizinhança das trajetórias clássicas, a fase S/\hbar se mantenha estacionária e as contribuições à integral 3.16 sejam válidas. Além disso, contribuirão ainda as trajetórias contidas na região próxima à $\bar{q}(t)$ onde a variação da ação ainda é da ordem de \hbar . Seja, então, a trajetória clássica $\bar{q}(\tau)$ onde

$$\delta S[\bar{q}(\tau), q_f, q_0; t] = \delta \int_0^t L d\tau = 0. \quad (3.18)$$

Dizemos, neste caso, que a ação clássica é estacionária para pequenas variações $\delta q(\tau)$ e a equação 3.18 é o *princípio da mínima ação de Hamilton*. Como sugerido no início deste capítulo, a contribuição dominante deve vir da vizinhança da trajetória $\bar{q}(\tau)$ cuja ação clássica é estacionária. Introduzindo a notação $\xi = (q_{N-1}, q_{N-2}, \dots, q_1)$, onde q_0 e q_N são fixos, em que $\bar{\xi}$ é o conjunto de pontos para qual a ação é um extremo, vemos, então, que uma expansão do funcional S , em uma série de Taylor *funcional* em torno da função $\bar{\xi}$, que é a trajetória clássica para a mínima ação, é:

$$S = S_{cl} + \frac{1}{2} \delta^2 S(\bar{\xi}) + \dots, \quad (3.19)$$

onde $\delta S = 0$ e $\delta^2 S$ é um funcional quadrático, dado por

$$\delta^2 S = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \right]_{\bar{\xi}} \delta \xi_i \delta \xi_j = \delta \xi^T \Lambda \delta \xi, \quad (3.20)$$

sendo que $\delta \xi^T$ é $\delta \xi$ transporte e Λ a matriz cujos coeficientes são $[\partial^2 S / \partial \xi_i \partial \xi_j]_{\bar{\xi}}$.

Substituindo a equação 3.19 na equação 3.16, temos

$$K_{SC}(q_f, q_0; \tau) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[\bar{\xi}(\tau)] \right] \int \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \right]_{\bar{\xi}} \delta \xi_i \delta \xi_j \right] D[\xi] \quad (3.21)$$

Vemos que Λ é simétrica e, portanto, diagonalizável. Podemos transformar a integral da equação 3.21 em um produto de integrais diagonalizando Λ a partir de uma transformação ortogonal na base $\{\omega\}$, de modo que:

$$O\xi = \omega \quad \text{e} \quad O\Lambda O^{-1} = \Lambda_{diagonal}. \quad (3.22)$$

Então, a equação 3.21 fica

$$K_{SC}(q_f, q_0; \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{2\hbar} S[\bar{\xi}(\tau)] \right] \int \prod_{i=1}^{N-1} \left[\frac{d\omega_i}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i (\delta \omega_i)^2 \right], \quad (3.23)$$

passando a ser um produto de integrais desacopladas e gaussianas. Sendo assim, usamos a integral de Fresnel 3.14 chegamos a

$$K_{SC}(q_f, q_0; \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} e^{\frac{i}{2\hbar} S[\bar{\xi}(\tau)]} \frac{e^{i\frac{\pi}{4}\gamma}}{\sqrt{|\lambda_1| \cdot |\lambda_2| \cdot \dots \cdot |\lambda_{N-1}|}}. \quad (3.24)$$

Podemos escrever a equação 3.24 em uma forma mais geral:

$$K_{SC}(q_f, q_0; \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar |\det(\Lambda)|}} e^{(i\frac{1}{2\hbar} S[\bar{\xi}(\tau)] + i\frac{\pi}{4}\gamma)}, \quad (3.25)$$

onde γ é a diferença entre o número de autovalores positivos e negativos. Pode-se interpretar a amplitude do propagador como o jacobiano da transformação entre a posição final q e o momento inicial p' [19]. Em meio a esta trajetória, poderá haver a presença de cáusticas que fazem com que o jacobiano divirja como demonstrado no teorema de Morse, disponível na bibliografia [16] [17]. Neste caso, γ desempenha um papel análogo ao que os *índices de Maslov* desempenham na função de onda semiclássica, equação 3.9, ficando assim mais claro o seu sentido. Além do mais, como decorrência do Teorema de Morse

$$\det(\Lambda) = \left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q_f \partial q_0} \right)^{-1},$$

e, desta forma, o propagador fica

$$K_{SC}(q_f, q_0; \tau) = \sum_j \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial q_f \partial q_0} \right|_j^{1/2} e^{(i\frac{1}{2\hbar} S[\bar{\xi}(\tau)] + i\frac{\pi}{4}\gamma)}, \quad (3.26)$$

onde $S[\bar{\xi}(\tau)] = \int^\tau L[\bar{\xi}(t)] dt$. A soma em j significa somar as trajetórias cuja condição inicial (q_0, p_0) leva ao estado $(q_f, \partial_{q_f} S)$.

Mas ainda resta a pergunta: quais são as trajetórias cuja condição inicial (q_0^j, p_0^j) leva ao estado $(q_f, \partial_{q_f} S)$? Entra em questão aqui pela primeira vez o problema conhecido na literatura como “*root search*”, ou seja, encontrar trajetórias que conectam os pontos $q(0)$ a $q(t)$, trajetórias estas que satisfaçam as condições de contorno

$$q(0) = q_0^j, \quad p(0) = p_0^j \quad e \quad q(\tau) = q_f, \quad p(\tau) = \partial_{q_f} S(q_f, q_0^j, t).$$

3.3 Métodos semiclássicos IVR

O uso direto do propagador de *Van Vleck*, como mostrado na seção anterior, leva a alguns problemas [21, 22, 23]:

1. Busca de raízes como discutido, ou seja, todas as trajetórias clássicas que passam por $q(0)$ e vão até $q(\tau)$ durante o tempo τ . Tal tarefa fica cada vez mais complicada para tempos longos e para sistemas caóticos pois o número de trajetórias que conectam os dois pontos pode ser muito grande.

2. Na presença de cáusticas (pontos focais ou conjugados), o propagador de *Van Vleck* diverge. Para contornar este problema, deve-se buscar uma expressão uniformemente assintótica nestes pontos, ou seja, suavizações do propagador semelhante às funções de *Airy* usadas na *Teoria WKB* [17].

Os métodos IVR's, sigla para *Initial Value Representation*, visam contornar tais problemas primeiramente com a ideia de especificar as trajetórias somente em termos das condições iniciais. Como exemplo, considere a expressão

$$K(q_f, q_0, \tau) = \int \langle q_f | p_f \rangle \langle p_f | U(t) | q_0 \rangle dp_f.$$

O propagador no integrando pode ser calculado no limite semiclássico de forma análoga ao que fizemos anteriormente e resulta

$$\langle p_f | U(t) | q_0 \rangle \approx \sum \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left| -\frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial p_f \partial q_0} \right|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{S} + \frac{i\pi}{4} \gamma}$$

onde $\bar{S} = \int (L - pq) dt$,

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial p_f} = -q_f, \quad \text{e} \quad \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_0} = -p_0$$

As trajetórias que procuramos satisfazem $q(0) = q_0$ e $p(t) = p_f$. O momento inicial $p(0) = p_0$ é função de q_0, p_f e t : $p_0 = f(q_0, p_f, t)$. Ao invés de integrar em p_f podemos fazer uma mudança de variáveis para p_0 :

$$dp_f = \frac{\partial p_f}{\partial p_0} dp_0 = \left(\frac{\partial p_0}{\partial p_f} \right)^{-1} dp_0 = \left(\frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial p_f \partial q_0} \right)^{-1} dp_0$$

Assim, precisamos das trajetórias com

$$q(0) = q_0, \quad \text{e} \quad p(0) = p_0 \quad \text{para todo} \quad p_0$$

e

$$K(q_f, q_0, \tau) = \int dp_0 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q_f p_f}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left| -\frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial p_f \partial q_0} \right|^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{S} + \frac{i\pi}{4} \gamma}$$

Veja que:

- só precisamos determinar trajetórias com condições iniciais;
- o pré-fator foi invertido devido ao jacobiano;
- o preço a pagar foi calcular uma integral.

A seguir calculamos o propagador na representação de estados coerentes e usamos esse mesmo truque para gerar uma IVR.

3.4 Representação de estados coerentes

A partir daqui, usaremos a representação de estados coerentes para o propagador:

$$K(z_f, t; z_i, 0) = \langle z_f | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | z_i \rangle. \quad (3.27)$$

Para que possamos escrever esse propagador como uma integral de trajetória [20, 3], dividimo-lo em propagações infinitesimais usando as propriedades de *composição* e de *evolução infinitesimal* do *operador de evolução temporal* sendo isso feito em N intervalos temporais infinitesimais de comprimento $\varepsilon = \tau/N$ de modo que

$$\hat{U}(\tau, 0) = \prod_{k=0}^{N-1} \hat{U}(t_{k+1}, t_k) = \prod_{k=0}^{N-1} \left(\hat{1} - \frac{i\hat{H}\varepsilon}{\hbar} \right) \quad (3.28)$$

onde $t_k = k\varepsilon$. Empregando a identidade

$$\hat{1} = \int |z\rangle \frac{d^2z}{\pi} \langle z| \equiv \int |z\rangle \frac{dz^* dz}{2\pi i} \langle z| \quad (3.29)$$

$N-1$ vezes entre cada elemento infinitesimal obtemos

$$K(z_f, t; z_i, 0) = \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} \frac{dz_k^* dz_k}{2\pi i} \right) \times \left[\prod_{k=0}^{N-1} \langle z_{k+1} | \left(\hat{1} - \frac{i\hat{H}\varepsilon}{\hbar} \right) | z_k \rangle \right] \quad (3.30)$$

com $|z_N\rangle \equiv |z_f\rangle$ e $|z_0\rangle \equiv |z_i\rangle$ e condições de contorno

$$z_0 = z_i \quad \text{e} \quad z_N^* = z_f^*. \quad (3.31)$$

O último termo da equação pode ser trabalhado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle z_{k+1} | \left(\hat{1} - \frac{i\hat{H}\varepsilon}{\hbar} \right) | z_k \rangle &= \langle z_{k+1} | z_k \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle \\ &= \langle z_{k+1} | z_k \rangle \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \frac{\langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle}{\langle z_{k+1} | z_k \rangle} \right) \end{aligned} \quad (3.32)$$

o qual pode ser abreviado com a notação

$$H_{k+1,k} \equiv H(z_{k+1}^*, z_k; t_k) := \frac{\langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle}{\langle z_{k+1} | z_k \rangle} \quad (3.33)$$

e também com uso da fórmula do *overlap* entre dois estados coerentes

$$\langle z_{k+1} | z_k \rangle = \exp \left[-\frac{1}{2}|z_{k+1}|^2 + z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2}|z_k|^2 \right]. \quad (3.34)$$

Voltando ao produtório, é possível deixá-lo na forma

$$\begin{aligned}
 & \prod_{k=0}^{N-1} \left[\langle z_{k+1} | z_k \rangle \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \frac{\langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle}{\langle z_{k+1} | z_k \rangle} \right) \right] \\
 &= \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[-\frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 + z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2} |z_k|^2 \right] \right\} \times \prod_{k=0}^{N-1} \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H_{j+1,j} \right) \\
 &\approx \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[-\frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 + z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2} |z_k|^2 \right] \right\} \times \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \frac{i\varepsilon}{\hbar} H_{k+1,j} \right\} \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

Esta aproximação será justificada quando fizermos, devido às variáveis contínuas, o limite $N \rightarrow \infty$, ou seja, $\varepsilon \rightarrow 0$ na seção seguinte. Enfim, escrevemos

$$\begin{aligned}
 e^{f(z^*, z)} &\equiv \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[-\frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 + z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2} |z_k|^2 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H_{k+1,j} \right] \right\} \\
 &= \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[-\frac{1}{2} (z_{k+1}^* - z_k^*) z_k - \frac{1}{2} z_{k+1}^* (z_{k+1} - z_k) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H_{k+1,j} \right] \right\} \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

onde f é função das variáveis $z := (z_1, \dots, z_N)$ e $z^* := (z_0^*, \dots, z_{N-1}^*)$ que são variáveis independentes pelas quais será feita a integração [7]. Note que $z_0 = z_i$ e $z_N^* = z_f^*$ estão fixas. Os conjuntos, z_1, \dots, z_N e z_0^*, \dots, z_{N-1}^* , dão origem a vários caminhos que são somadas com as integrações.

No limite $\hbar \rightarrow 0$, as trajetórias que mais contribuem para a integral do *Propagador* são as que mantêm o expoente da equação 3.36 estacionário. Tais trajetórias devem satisfazer $\delta f = 0$ sendo os pontos neste domínio chamados de *pontos estacionários* no caso de f ser uma função real e *pontos de sela* quando f é uma função complexa que vem a ser o caso na representação de estados coerentes. Portanto, fazendo a expansão até segunda ordem ao longo da trajetória que satisfaz $\delta f = 0$, a trajetória crítica, temos:

$$f \approx \bar{f} + \frac{1}{2} \delta^2 \bar{f} \quad (3.37)$$

sendo que

$$\delta f = \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ \frac{\partial f}{\partial z_k} \delta z_k + \frac{\delta f}{\partial z_{k+1}^*} \delta z_{k+1}^* \right\} = 0. \quad (3.38)$$

Para que esta igualdade seja satisfeita, precisamos fazer:

$$\frac{\partial f}{\partial z_k} = -\frac{(z_{k+1}^* - z_k^*)}{\varepsilon} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H_{k+1,k}}{\partial z_k} = 0 \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial f}{\partial z_{k+1}} = \frac{(z_{k+1} - z_k)}{\varepsilon} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H_{k+1,k}}{\partial z_{k+1}} = 0 \quad (3.40)$$

sendo esta a condição dos pontos de sela. Com esta aproximação, o *Propagador Semiclássico* é dado por:

$$K_\tau^{SC} [z_N^*, \tau; z_0, 0] = e^{i\bar{f}/\hbar} \int \left(\prod_{k=1}^{N-1} \frac{dz_k^* dz_k}{2\pi i} \right) \times e^{i(\delta^2 \bar{f}/2)} \quad (3.41)$$

3.4.1 Trajetórias Complexas

Desta vez, vamos tomar o limite em que o número de passos entre o estado inicial e o final passe a ser contínuo, ou seja, $N \rightarrow \infty$. Neste limite, um ponto de sela passa a ser uma trajetória, $(z^*(t), z(t))$. Como consequência desse limite $\varepsilon \rightarrow 0$, as equações 3.40 se tornam

$$\begin{aligned}\dot{z} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z^*} \\ \dot{z}^* &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z},\end{aligned}\tag{3.42}$$

ou seja, para efetuarmos a integral 3.41 devemos encontrar as trajetórias que satisfazem as condições de contorno 3.31 e as equações de movimento 3.42. Porém, ao olharmos as condições de contorno $z^*(\tau) = z_f^*$ e $z(0) = z_i$ em termos de (q, p) (como visto no capítulo 1)

$$\begin{aligned}\frac{q(0)}{b} + i\frac{p(0)}{c} &= \frac{q_i}{b} + i\frac{p_i}{c} \\ \frac{q(\tau)}{b} - i\frac{p(\tau)}{c} &= \frac{q_f}{b} - i\frac{p_f}{c}\end{aligned}\tag{3.43}$$

logo percebemos a limitação clássica ao ver que a dinâmica Hamiltoniana levará as condições iniciais $(q(0), p(0))$ ao ponto $(q(\tau), p(\tau))$ determinado por ela ao invés de levar ao ponto (q_f, p_f) que seria o nosso estado de interesse. A consequência de manter (q, p) reais é que a amplitude de probabilidade $K_\tau^{SC}[z_f^*, \tau; z_i, 0]$ seja zero para (q_f, p_f) . Para contornar esta situação é necessário fazer uso de um truque matemático: a complexificação das trajetórias, ou seja, fazendo (q, p) complexos temos que

$$\frac{q^*}{b} - i\frac{p^*}{c} \neq \frac{q}{b} - i\frac{p}{c}\tag{3.44}$$

neste caso, simplesmente $(z)^* \neq z^*$ e para aliviar um pouco a notação introduzimos agora aquela vigente na literatura [7]

$$u \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i\frac{p}{c} \right) \quad v \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} - i\frac{p}{c} \right).\tag{3.45}$$

sendo u e v variáveis independentes cujas equações do movimento são:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial v} \\ \dot{v} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial u},\end{aligned}\tag{3.46}$$

As condições de contorno nesta nova notação ficam:

$$u(0) = u_0 = z_i \quad \text{e} \quad v(\tau) = v_\tau = z_f^*.\tag{3.47}$$

Agora, aplicando o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ em \bar{f} , temos

$$\bar{f}(u, v) = \int_0^\tau dt \left[\frac{1}{2}(\dot{v}u - u\dot{v}) - \frac{i}{\hbar} H(u, v) \right] + \frac{1}{2}(v_\tau u_\tau + v_0 u_0) - \frac{1}{2}(|z_f|^2 + |z_i|^2).\tag{3.48}$$

onde identificamos

$$S = \int_0^\tau dt \left[\frac{1}{2}(\dot{v}u - \dot{u}v) - \frac{i}{\hbar}H(u, v) \right] + \frac{1}{2}(v_\tau u_\tau + v_0 u_0).$$

como sendo a *Ação Complexa* que possui as mesmas propriedades que uma ação clássica:

$$u_\tau = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S(v_\tau, u_0, \tau)}{\partial v_\tau}, \quad v_0 = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S(v_\tau, u_0, \tau)}{\partial u_0} \quad \text{e} \quad H = -\frac{\partial S(v_\tau, u_0, \tau)}{\partial \tau}$$

E, enfim, a integral

$$\int \left(\prod_{k=1}^{N-1} \frac{dudv}{2\pi i} \right) \times e^{i(\delta^2 \bar{f}/2)} = |M_{vv}(\tau)|^{-1/2} \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \int_0^\tau dt \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} - \frac{i\sigma}{2} \right],$$

foi resolvida da mesma forma que a expressão 3.26. Nessa expressão $M_{vv}(\tau) = \partial v_\tau / \partial v_0$ é um elemento da matriz tangente,

$$M(\tau) \equiv \begin{bmatrix} M_{uu} & M_{vu} \\ M_{uv} & M_{vv} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial u_\tau / \partial u_0 & \partial v_\tau / \partial u_0 \\ \partial u_\tau / \partial v_0 & \partial v_\tau / \partial v_0 \end{bmatrix}, \quad (3.49)$$

que é responsável pela evolução temporal de uma vizinhança de um ponto de uma trajetória clássica de tempo inicial, $t = 0$, a um tempo final, $t = \tau$ [7]. E, finalmente, σ a fase associada ao módulo $|M_{vv}(\tau)|^{-1/2}$. Portanto, a expressão do propagador semiclássico é dada por

$$K_\tau^{SC}[v, \tau; u, 0] = \sum_{c.c.} |M_{vv}(\tau)|^{-1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \{S(v_\tau, u_0, \tau) + I\} - \frac{i\sigma}{2} - \frac{1}{2}(|z_f|^2 + |z_i|^2) \right] \quad (3.50)$$

com

$$I = \frac{1}{2} \int_0^\tau dt \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v}.$$

onde o somatório está definido sobre as trajetórias que satisfazem as condições de contorno 3.47.

3.5 Representação de valores iniciais complexa

A representação de valores iniciais visa contornar a busca de soluções que satisfazem condições de contorno. O propagador 3.50 requer todas as trajetórias críticas que satisfazem as condições de contorno 3.47. Tais trajetórias são difíceis de calcular e podem se aproximar de cústicas, ou seja, os pontos em que $M_{vv}(\tau) = 0$ causando aumentos nas amplitudes do *Propagador*(equação 3.50). Vamos, nesta seção, visualizar como converter o problema de busca de raízes em uma integral calculada em termos de condições iniciais. Vamos começar calculando o propagador em sua representação mista

$$K(x, z_i, \tau) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | z_i \rangle = \int \frac{d^2 v_\tau}{\pi} \langle x | v_\tau^* \rangle \langle v_\tau | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | z_i \rangle.$$

Com a aproximação semiclássica feita na seção anterior, o *Propagador* no integrando passa a ser calculado sobre uma trajetória clássica determinada pelas condições de contorno 3.47 [5]. Portanto, na notação usual [7] o *Propagador* fica

$$K(x, z_i, \tau) = \int \frac{d^2 v_\tau}{\pi} \langle x | v_\tau^* \rangle K_\tau^{SC}(v_\tau, z_i) \quad (3.51)$$

onde o overlap entre a posição final e o estado coerente é dado por:

$$\langle x | v_\tau^* \rangle = (\pi b^2)^{-1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{b} - \sqrt{2} v_\tau^* \right)^2 + \frac{1}{2} v_\tau^* (v_\tau^* - v_\tau) \right].$$

A trajetória $(u(t), v(t))$ que entra em K_τ^{SC} é determinada por $u(0) = z_i$ e $v(\tau) = v_\tau$ e no seu ponto inicial tem $v(0) = f(z_i, v_\tau, \tau)$, ou seja, com a ajuda de um jacobiano podemos mudar as variáveis de integração de (v_τ, v_τ^*) para (v_0, v_0^*) e deixar o propagador 3.51 especificado em termos das coordenadas iniciais. A relação entre os elementos de volume é [10, 6]:

$$d^2 v_\tau = \begin{vmatrix} (\partial v_\tau / \partial v_0) & (\partial v_\tau / \partial v_0^*) \\ (\partial v_\tau^* / \partial v_0) & (\partial v_\tau^* / \partial v_0^*) \end{vmatrix} d^2 v_0.$$

Para a função $v_\tau = v(v_0, \tau)$ analítica então:

$$\frac{\partial v_\tau}{\partial v_0^*} = \left(\frac{\partial v_\tau^*}{\partial v_0} \right)^* = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial v_\tau^*}{\partial v_0^*} = \left(\frac{\partial v_\tau}{\partial v_0} \right)^*.$$

Com isso, a transformação final é:

$$d^2 v_\tau = \begin{vmatrix} (\partial v_\tau / \partial v_0) & 0 \\ 0 & (\partial v_\tau / \partial v_0)^* \end{vmatrix} d^2 v_0 = \left| \frac{\partial v_\tau}{\partial v_0} \right|^2 d^2 v_0 = |M_{vv}(\tau)|^2 d^2 v_0 \quad (3.52)$$

o que nos leva a

$$K(x, z_i, \tau) = \int \frac{d^2 v_0}{\pi} |M_{vv}(\tau)|^2 \langle x | v_\tau^* \rangle K_\tau^{SC}(v_\tau, z_i).$$

Substituindo 3.50, chega-se à forma final

$$K(x, z_i, \tau) = \int \frac{d^2 v_0}{\pi} |M_{vv}(\tau)|^{3/2} \langle x | v_\tau^* \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \{S(v_\tau, z_i, \tau) + I\} - \frac{i\sigma}{2} - \frac{1}{2} (|v_\tau|^2 + |z_i|^2) \right]. \quad (3.53)$$

Nesta dissertação vamos ainda considerar a expressão alternativa

$$K(x, z_i, \tau) = \int \frac{d^2 v_0}{\pi \alpha^2} |M_{vv}(\tau)|^{3/2} e^{-|z_f^* - v_\tau|^2 / \alpha^2} \langle x | v_\tau^* \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \{S(v_\tau, z_i, \tau) + I\} - \frac{i\sigma}{2} - \frac{1}{2} (|v_\tau|^2 + |z_i|^2) \right]. \quad (3.54)$$

onde introduzimos artificialmente uma suavização gaussiana. O expoente $-|z_f^* - v_\tau|^2 / \alpha^2$ confere um peso maior às trajetórias próximas à trajetória real, onde $v_\tau = z_f^*$ e este peso pode ser controlado pelo parâmetro ajustável α que pode ser também uma função suave do tempo e de v_0 ($\alpha = \alpha(v_0, \tau)$). Daqui em diante chamaremos o propagador sem suavização 3.53 de IVR-1 e o propagador com a suavização de IVR-2, eq. 3.54.

Capítulo 4

Aplicações e resultados

O nosso objetivo aqui será calcular a quantidade:

$$\psi(x, \tau) = \langle x | \psi(\tau) \rangle = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | \psi(0) \rangle$$

para um estado inicial

$$| \psi_0 \rangle = | z_i \rangle, \quad \text{onde} \quad z_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_i}{b} + i \frac{p_i}{c} \right)$$

com q_i e p_i sendo as médias dos operadores de posição em momento no instante inicial e $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$ junto com $c = \sqrt{\hbar m \omega}$ as suas respectivas incertezas. É importante também uma ressalva quanto a discretização das integrais 3.53 e 3.54 para a realização dos cálculos numéricos. Aqui as integrais serão discretizadas da seguinte forma [10]

$$\int d^2 v_0 f(v_0, v_0^*) \rightarrow \sum_k \frac{\Delta q_0 \Delta p_0}{2\pi\hbar} f(v_{0k}, v_{0k}^*)$$

onde $v_0 = 1/\sqrt{2}(q_0/b - ip_0/c)$ e $\Delta q_0 \Delta p_0$ é o elemento de área do espaço de fase discretizado.

4.1 Fidelidade ao cálculo exato

O cálculo exato usado para compararmos com os resultados dos IVR's 3.53 e 3.54 será feito expandindo o estado inicial $| \psi_0 \rangle$ na base de auto-estados do operador de número $N = a^\dagger a$ do oscilador harmônico, cuja notação é $\{ | n \rangle \}$, base esta escolhida por ser também de auto-estados de $(a^\dagger a)^2$. Portanto, o estado inicial nessa base é:

$$| \psi_0 \rangle = \sum_n^\infty | n \rangle \langle n | \psi_0 \rangle$$

e o estado no tempo t é

$$| \psi(t) \rangle_{\text{exa}} = e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle = \sum_n^\infty e^{-iE_n t/\hbar} | n \rangle \langle n | \psi_0 \rangle.$$

onde $E_n = \hbar\omega n^2$. Calcularemos algo semelhante a uma correlação entre $|\psi(t)\rangle_{\text{exa}}$ e $|\psi(t)\rangle_{\text{IVR}}$, grandeza esta chamada de *fidelidade* e é definida como:

$$F(t) \equiv |\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle_{\text{IVR}}| \quad (4.1)$$

4.2 Função de onda semiclássica para o termo de Kerr

Partimos do operador hamiltoniano:

$$\hat{H} = (\hbar\omega)^2 (a^\dagger a)^2$$

cuja hamiltoniana clássica nas variáveis independentes (u, v) é

$$H(u, v) = (\hbar\omega)^2 uv (uv + 1).$$

De acordo com as equações de movimento (eq. 3.46),

$$\dot{u} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial v} = -i\hbar\omega^2 (2v + 1)u$$

e

$$\dot{v} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H(u, v)}{\partial u} = i\hbar\omega^2 (2u + 1)v,$$

as soluções são dadas por

$$u(t) = u_0 e^{-i\Omega t} \quad \text{e} \quad v(t) = v_0 e^{i\Omega t} \quad (4.2)$$

com a frequência $\Omega = \hbar\omega^2(2v_0u_0 + 1)$ pois o produto $u(t)v(t)$ é constante no tempo. Assim como as soluções do oscilador “ao quadrado”, eq. 2.20, a maior parte das condições iniciais dá origem a soluções não limitadas, fig. 4.1(a), enquanto uma pequena parcela é de soluções limitadas 4.1(b). A condição *sine qua non* para que as trajetórias sejam fechadas e periódicas como em 4.1(b) é

$$\Im\{v_0u_0\} = 0. \quad (4.3)$$

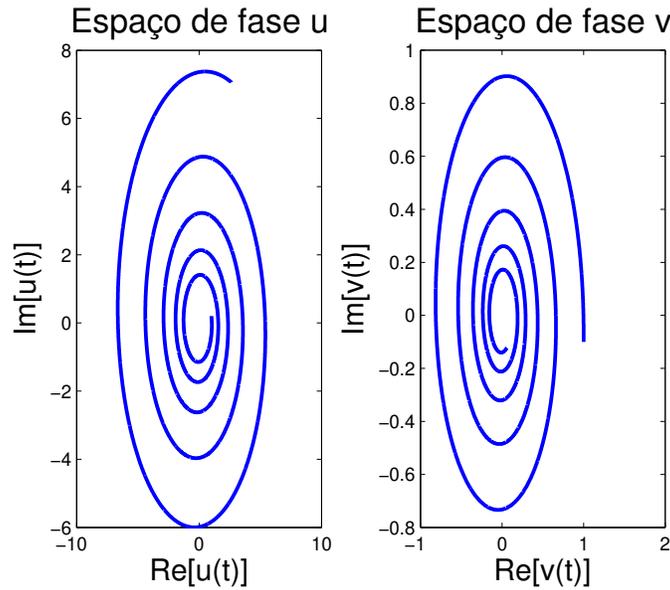
Tal condição faz com que o fator exponencial $e^{i\Omega t}$ das soluções 4.2 se mantenha unitário para todo tempo. Denotando

$$u_0 := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_i}{b} + i \frac{p_i}{c} \right) \quad \text{e} \quad v_0 := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{v_0}}{b} - i \frac{p_{v_0}}{c} \right),$$

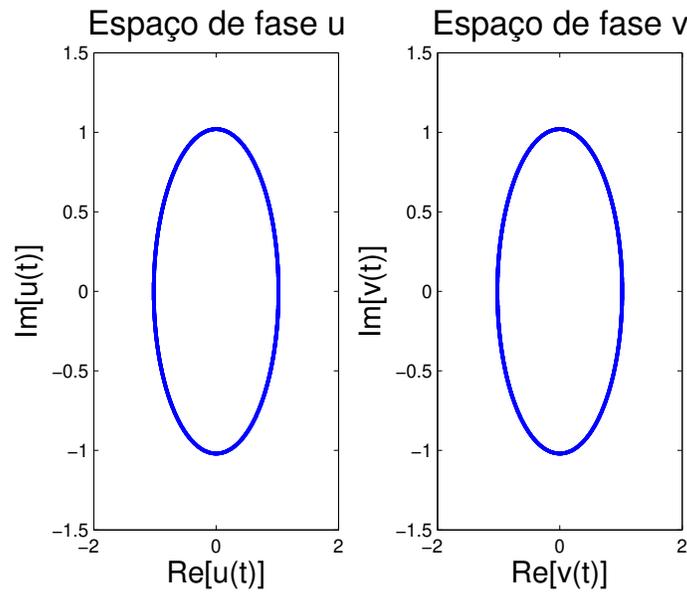
dado um u_0 , para que as trajetórias sejam fechadas e periódicas, devemos escolher condições no plano v_0 de modo que

$$p_{v_0} = \frac{p_i}{q_i} q_{v_0} \quad (4.4)$$

É fácil ver que a trajetória real é obtida escolhendo $q_{v_0} = q_i$. Trajetórias periódicas não vão para o infinito e devem se manter bem comportadas.



(a) Espaço de fase u (direita) e v (esquerda) onde podemos observar trajetórias abertas cujas condições iniciais são $u_0 = 1 + 0.2i$ e $v_0 = 1 - 0.1i$.



(b) Espaço de fase u (direita) e v (esquerda) onde podemos observar trajetórias fechadas cujas condições iniciais são $u_0 = 1 + 0.2i$ e $v_0 = 1 + 0.2i$

Figura 4.1: Trajetórias abertas e fechadas nos espaços de fase u e v .

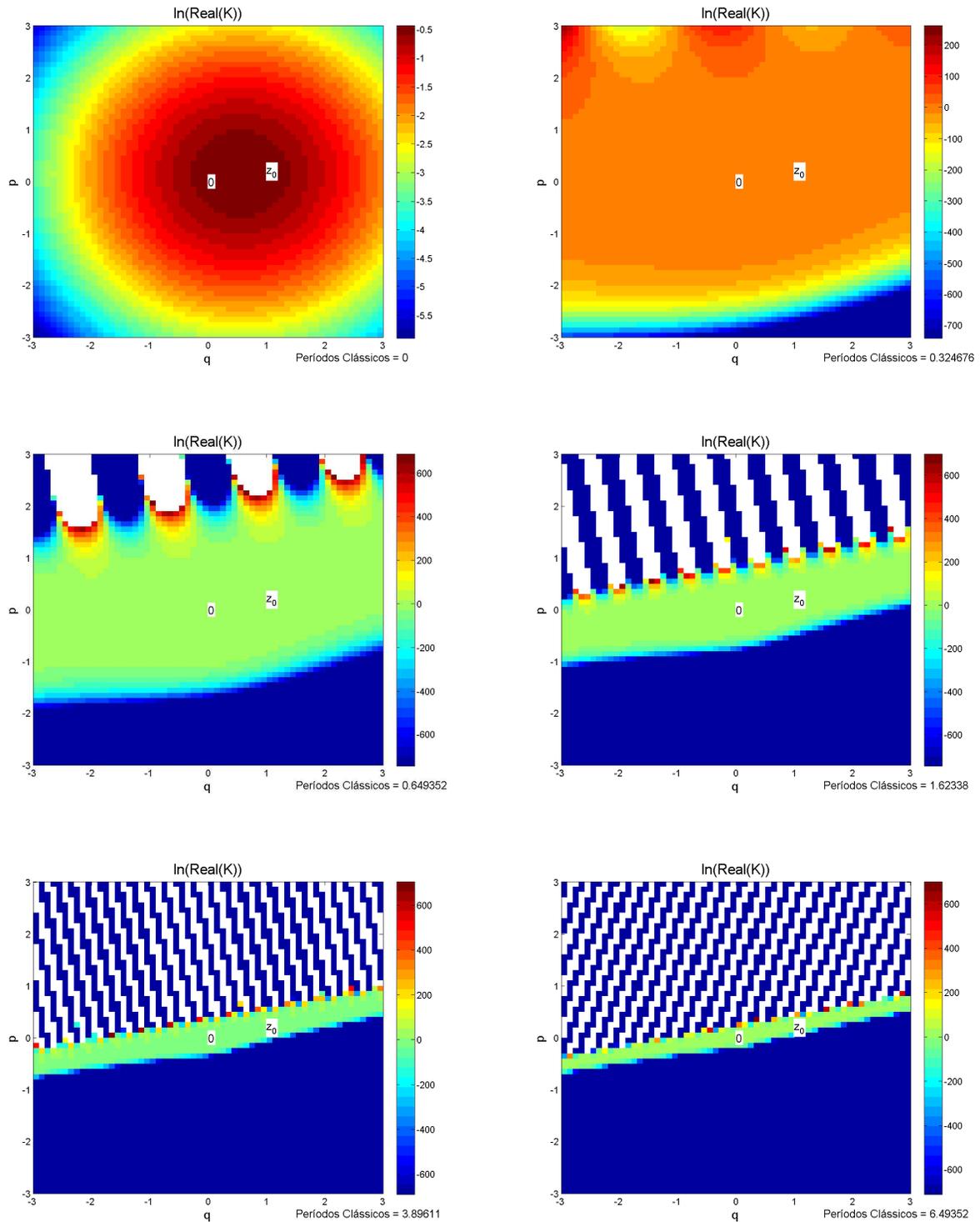


Figura 4.2: Mapa de intensidade do expoente $\Re\{\ln[K(\tau)]\}$. Aqui $q_i = 1$ e $p_i = 0.2$, ($b = 1, c = 1$), posição e momento médios respectivamente do estado inicial rotulado por $u_0 = z_i$. Surgem duas regiões: a superior à reta indica as condições iniciais onde o expoente $\Re\{\ln[K(\tau)]\}$ ficou muito grande e consequentemente faria com que $K(\tau)$ divergisse, já a inferior à reta indica as condições iniciais em que o mesmo expoente ficou muito pequeno amortecendo $K(\tau)$.

4.3 Critério de corte das soluções

Ao fazer uso da complexificação, ganhamos em graus de liberdade, mas agora enfrentamos este problema: nesta nova dinâmica surgem trajetórias que causam divergências no *Propagador*. Portanto, no cálculo do propagador devemos ter em mente que:

1. Todas as trajetórias cujas condições iniciais são escolhidas no plano v_0 contribuem inicialmente.
2. Algumas dessas trajetórias divergem ou são amortecidas.
3. Temos então que somar apenas as trajetórias que contribuem sem divergir o propagador.

Estas trajetórias serão usadas como *input* no IVR's do propagador semiclássico (eqs. 3.53 e 3.54), que para o *Hamiltoniano de Kerr* é

$$K_{\tau}^{SC}(z_f, z_i; \tau) = (1 + 2i\omega v_0 u_0 \tau)^{-1/2} \exp\left(if(\tau) + \frac{v_{\tau}}{2}(u_{\tau} - z_f) + \frac{u_0}{2}(v_0 - z_i^*) \right)$$

onde

$$f(\tau) = \omega\tau(u_0^2 v_0^2 + 2v_0 u_0 - 1/2)$$

A função de onda semiclássica propagada sob o Hamiltoniano *de Kerr* dado um pacote gaussiano inicial centrado em $z_i = u_0$ é:

$$\begin{aligned} \langle x | z(\tau) \rangle &= \int d^2 v_0 |M_{vv}|^2 \frac{e^{if}}{(1 + 2i\omega v_0 u_0 \tau)^{-1/2}} \times \\ &\exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{b} - \sqrt{2}v_{\tau}^* \right)^2 + \frac{v_{\tau}^*}{2}(v_{\tau}^* - v_{\tau}) + \frac{v_{\tau}}{2}(u_{\tau} - v_{\tau}^*) + \frac{u_0}{2}(v_0 - z_i^*) \right] \end{aligned}$$

onde as outras quantidades envolvidas no cálculo, reescritas aqui, são:

$$u(\tau) = u_{\tau} = u_0 e^{-i\Omega\tau}, \quad v(\tau) = v_{\tau} = v_0 e^{i\Omega\tau}, \quad M_{vv}(\tau) = 1 + 2i\omega v_0 u_0 \tau$$

Verificando o comportamento do $\Re\{\ln[K(\tau)]\}$ ao longo do tempo para condições iniciais escolhidas no plano v_0 construímos um mapa de intensidade apresentado na figura 4.2 para $q_i = 1$ e $p_i = 0.2$, ($b = 1, c = 1$), posição e momento médios respectivamente do estado inicial rotulado por $u_0 = z_i$. Percebe-se que o espaço de fase é dividido por uma superfície cujo o valor de $\Re\{\ln[K(\tau)]\}$ ainda é próximo a zero de modo que a sua exponencial ainda possui uma ordem de grandeza calculável. Nos primeiros instantes, esta região engloba todas as condições iniciais do plano mostrando que para tempos curtos todas as condições iniciais contribuem sem fazer com que o propagador divirja. Porém, com o passar do tempo a superfície vai se afinando até chegar bem perto da reta 4.4. Esta reta divide o plano v_0 em dois: na parte superior da figura 4.2 estão as condições iniciais que resultaram em um expoente muito grande para o propagador significando que condições nesta região fariam o propagador assumir valores altos até divergir e na parte abaixo da reta estão as

condições iniciais que resultaram em um expoente muito pequeno e não contribuinte para o propagador. As rajadas brancas na figura (parte superior) significam que no instante de tempo referido o valor já não é considerado um número, ou seja, divergiu numericamente.

Espera-se que as trajetórias que se matêm bem comportadas serão as que mais contribuirão para o propagador. É importante que dentro destas trajetórias complexas esteja contida a trajetória real que é quando $v_0 = z_i^*$.

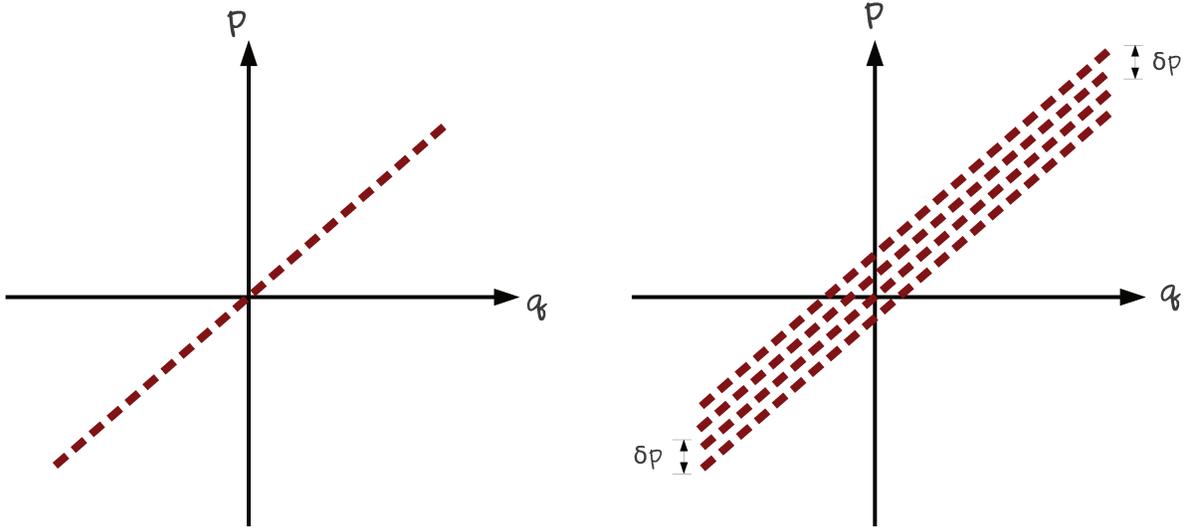
4.4 Resultados

Apresentamos, inicialmente nas figuras 4.4, no gráfico IVR-1, as fidelidades para a evolução temporal de um pacote gaussiano inicialmente centrado em $q_i = 1$ e $p_i = 0.2$. As condições iniciais foram escolhidas variando o intervalo de integração $[q_i - \delta q, q_i + \delta q]$. Para $\delta q = 1$ usamos 40 trajetórias, para $\delta q = 2.5$ um total de 100 trajetórias e para $\delta q = 5$ um total de 200 trajetórias.

É fácil notar pelas curvas da figura 4.4, (IVR-1), que no instante inicial a função de onda do IVR-1 não atinge a fidelidade igual a 1. Isso ocorre devido ao fato de somarmos as trajetórias numa reta ao invés de somarmos na completeza de todo plano v_0 , ou seja, como na figura 4.3(a). Este problema vai aumentando ao incluímos trajetórias cada vez mais distantes da trajetória real. Em seguida usamos condições iniciais em um retângulo encizalhado centrado na reta 4.4 sendo as condições iniciais escolhidas até uma distância de δp dela, como na figura 4.3(b). Podemos averiguar nas figuras 4.6 e 4.7 que ao estendermos as condições iniciais no plano v_0 para um retângulo ao redor da reta, o pacote inicial começa a ficar melhor em relação às curvas de fidelidade apenas na reta. Vemos esta melhoria até o retângulo virar um grid quadrado, figura 4.3(c), e daí já ter a quantidade de elementos suficiente para compor uma base aproximadamente completa para que o pacote inicial do IVR seja mais fiel ao pacote exato.

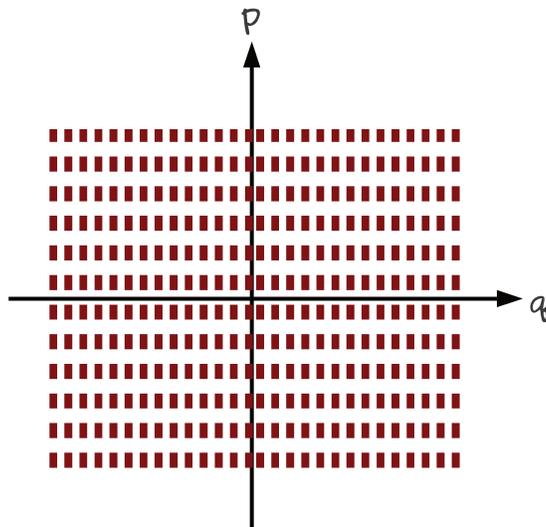
Outro fato a se notar é o crescimento rápido das normas (curva no lado superior esquerdo da figura 4.4. A rapidez deste crescimento é proporcional ao número de trajetórias somadas junto com aquelas que divergem no espaço de fase. Isto pode ser contornado usando a suavização do IVR-2 (eq. 3.54) escolhendo o parâmetro $\alpha = \mu |M_{vv}(\tau)|$, onde μ é uma constante que nos dará o desvio padrão inicial da suavização pois $|M_{vv}(0)| = 1$. Com a escolha do parâmetro α desta maneira ganhamos na suavização da norma e numa composição mais fiel do pacote de onda inicial como podemos ver nas figuras 4.4 (inferior) e 4.5 na qual plotamos as mesmas condições iniciais e a mesma quantidade de trajetórias. A melhor fidelidade foi obtida com $\alpha = 2.5^{1/2} |M_{vv}(\tau)|$ somando 100 trajetórias no intervalo $[1.5, 3.5]$ e condições iniciais $q_i = 1$ e $p_i = 0.2$.

Juntando as fidelidades dos melhores resultados entre as figuras 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 na figura 4.8, vemos que o cálculo na reta foi mais eficiente que nas demais regiões devido ao número reduzido de trajetórias somadas (na reta foi 100 e no grid 10000) apesar da dificuldade de se compor uma identidade no instante inicial. O critério de corte exclue trajetórias que contribuem inicialmente, mas que divergem para tempos longos. Na figura 4.9 estão graficadas as fidelidades para várias condições iniciais, sendo elas selecionadas usando o critério de corte 4.4 de maneira que a energia seja crescente, que neste caso cresce quadraticamente em relação a energia do oscilador canônico, algo já esperado como visto na discussão feita na seção 3.3. Na parte superior vemos a norma aumentando bastante no cálculo com o IVR-1, porém na parte inferior, calculada com o IVR-2, ela está mais suavizada, mostrando assim que o IVR-2 tem uma boa eficiência com a suavização



(a) Condições iniciais escolhidas em um grid ao longo da reta 4.4

(b) Condições iniciais discretizadas escolhidas em grid retangular ao redor da reta 4.4



(c) Condições iniciais discretizadas escolhidas em um grid quadrado ao redor da condição inicial q_i e p_i .

Figura 4.3

gaussiana.

Plotamos na figuras 4.10, 4.11, 4.14, 4.15, 4.18 e 4.19 a evolução temporal destes pacotes de melhor resultado na representação de coordenadas. Nas figuras 4.12, 4.13, 4.13, 4.16, 4.17, 4.20 e 4.21 estão plotadas as mesmas evoluções temporais só que na representação $\{|n\rangle\}$.

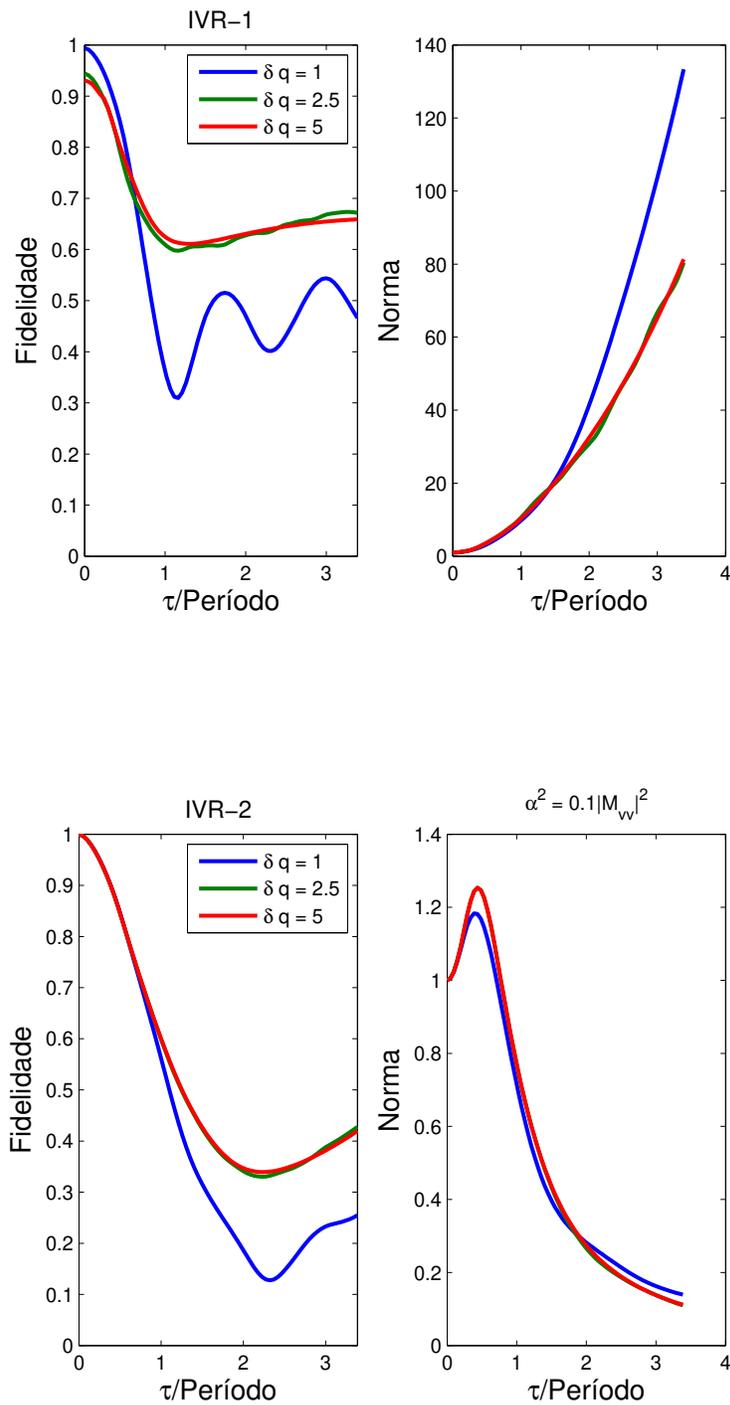


Figura 4.4: Trajetórias somadas em uma reta no intervalo $[q_i - \delta q, q_i + \delta q]$ espaçadas entre si por um $\Delta q = 0.05$. Do lado esquerdo está plotada a fidelidade e do lado direito a norma, ambas em função do tempo. Na parte superior temos o resultado calculado com o IVR-1 e na parte inferior o resultado proveniente do IVR-2 com uma parâmetro de suavização $\alpha^2 = 0.1|M_{vv}(\tau)|^2$.

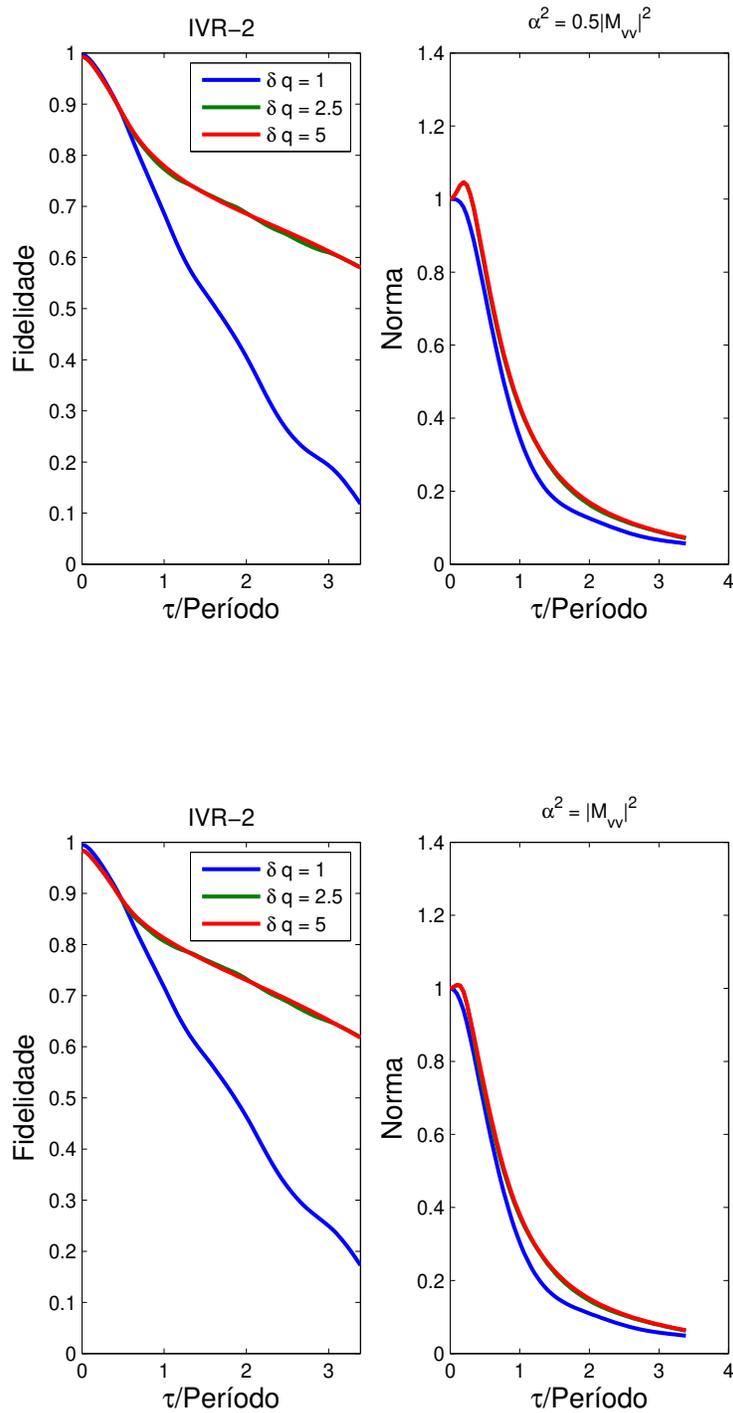


Figura 4.5: Trajetórias somadas em uma reta no intervalo $[q_i - \delta q, q_i + \delta q]$ espaçadas entre si por um $\Delta q = 0.05$. Do lado esquerdo está plotada a fidelidade e do lado direito a norma, ambas em função do tempo. Na parte superior e na parte inferior estão os resultados provenientes do IVR-2 com uma parâmetro de suavização $\alpha^2 = 0.5|M_{VV}(\tau)|^2$ e $\alpha^2 = |M_{VV}(\tau)|^2$ respectivamente.

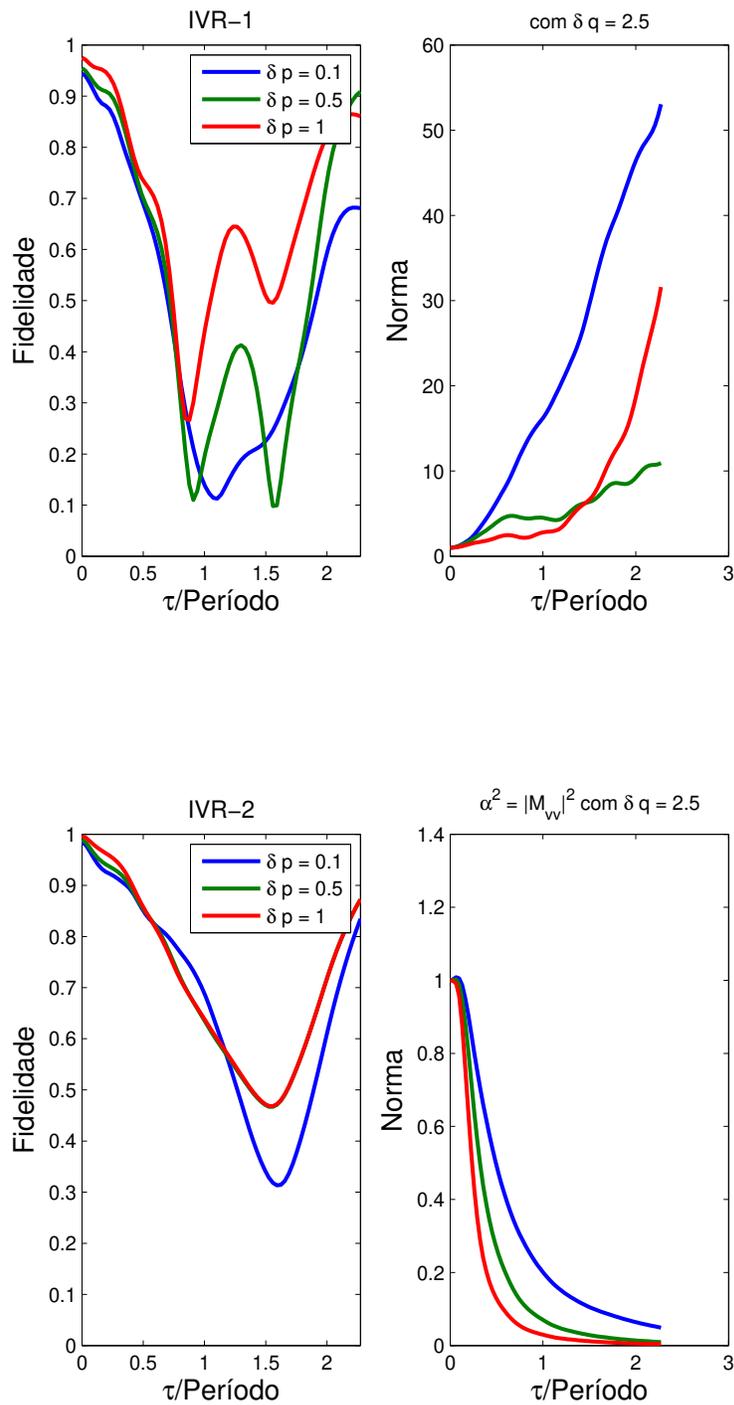


Figura 4.6: Trajetórias somadas em um retângulo ao redor da reta com meia largura δp . Aqui $\Delta q = 0.05$ e $\Delta p = 0.05$. Do lado esquerdo está plotada a fidelidade e do lado direito a norma. Na parte superior temos o resultado calculado com o IVR-1 e na parte inferior o resultado proveniente do IVR-2 com uma parâmetro de suavização $\alpha^2 = |M_{VV}(\tau)|^2$.

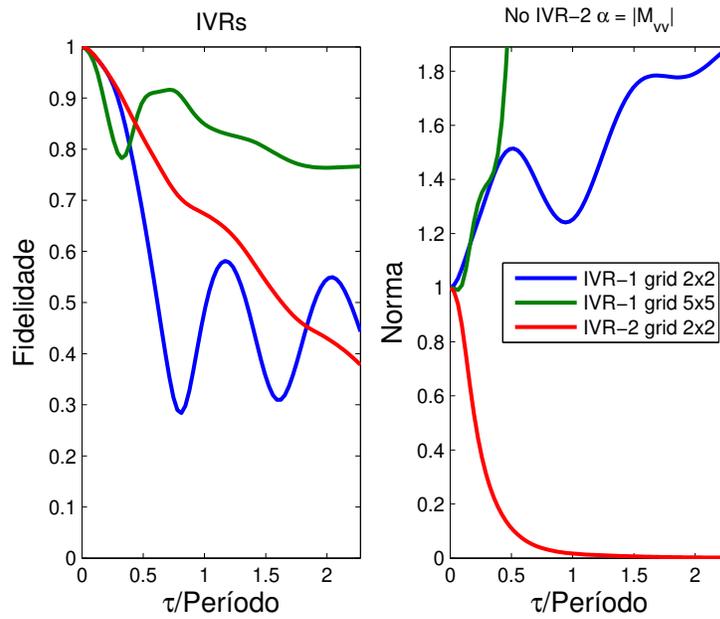


Figura 4.7: Trajetórias somadas em um grid quadrado ao redor da condição inicial $q_i = 1$ e $p_i = 0.2$. Aqui $\Delta q = 0.05$ e $\Delta p = 0.05$. Do lado esquerdo está plotada a fidelidade e do lado direito a norma para dois grids com o IVR-1 e um grid 1x1 com o IVR-2 $\alpha^2 = |M_{vv}(\tau)|^2$.

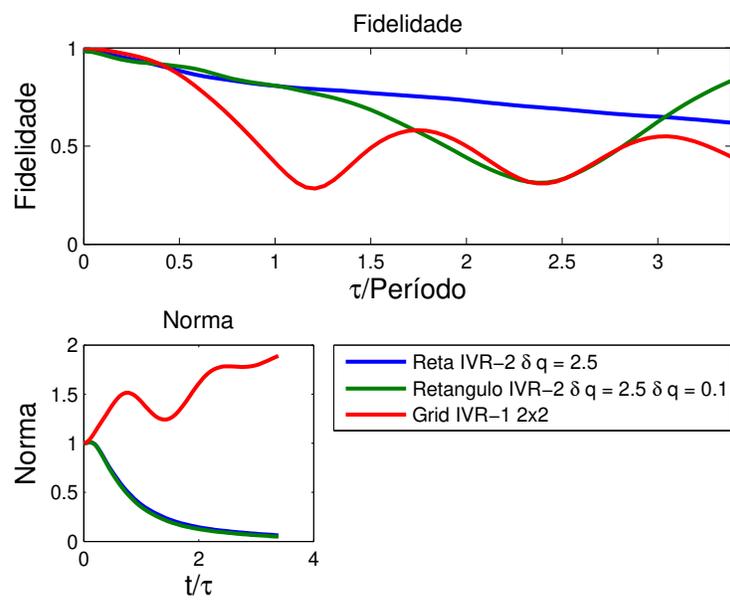


Figura 4.8: Plotamos aqui as fidelidades e normas para os melhores resultados das figuras 4.4, 4.5, 4.6, 4.7.

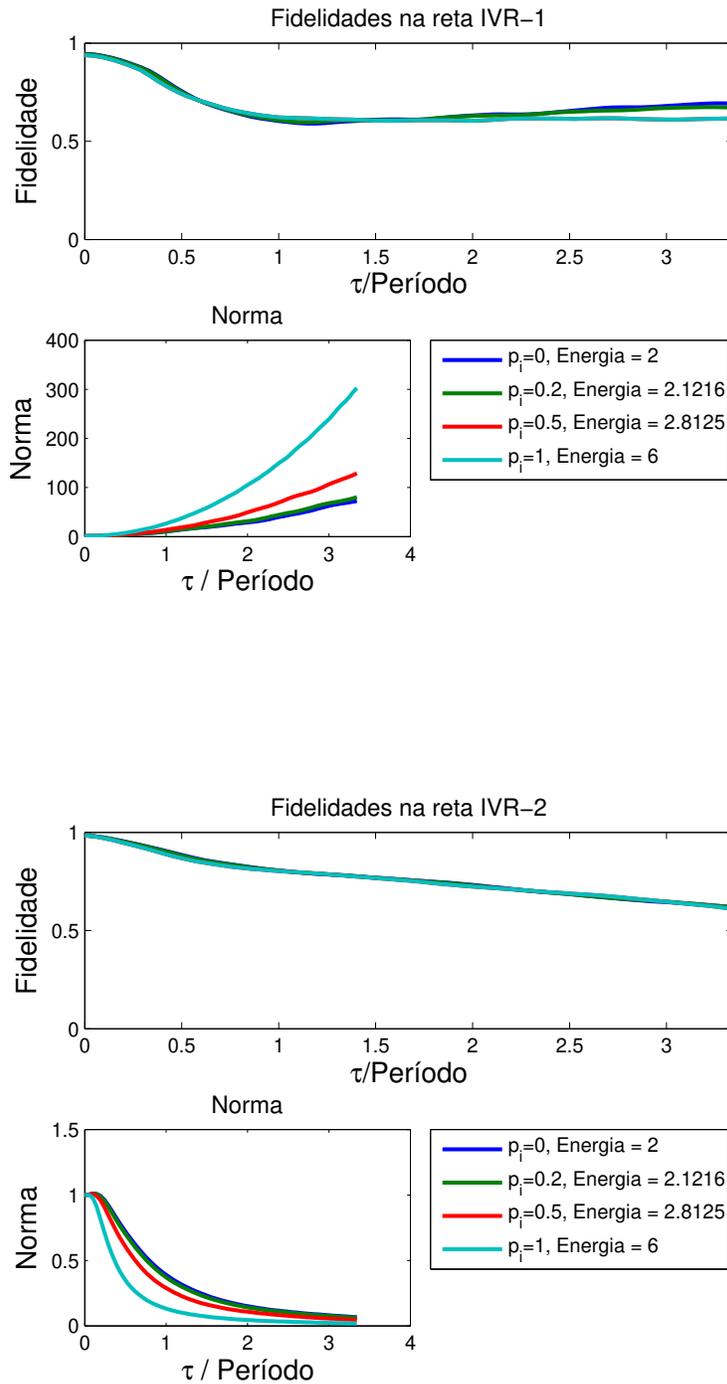


Figura 4.9: Trajetórias somadas em uma reta no intervalo $[q_i - \delta q, q_i + \delta q]$ espaçadas entre si por um $\Delta q = 0.05$. Na parte superior temos o resultado calculado com o IVR-1 e na parte inferior o resultado proveniente do IVR-2 com uma parâmetro de suavização $\alpha^2 = 0.1 |M_{vv}(\tau)|^2$ para valores em ordem crescente.

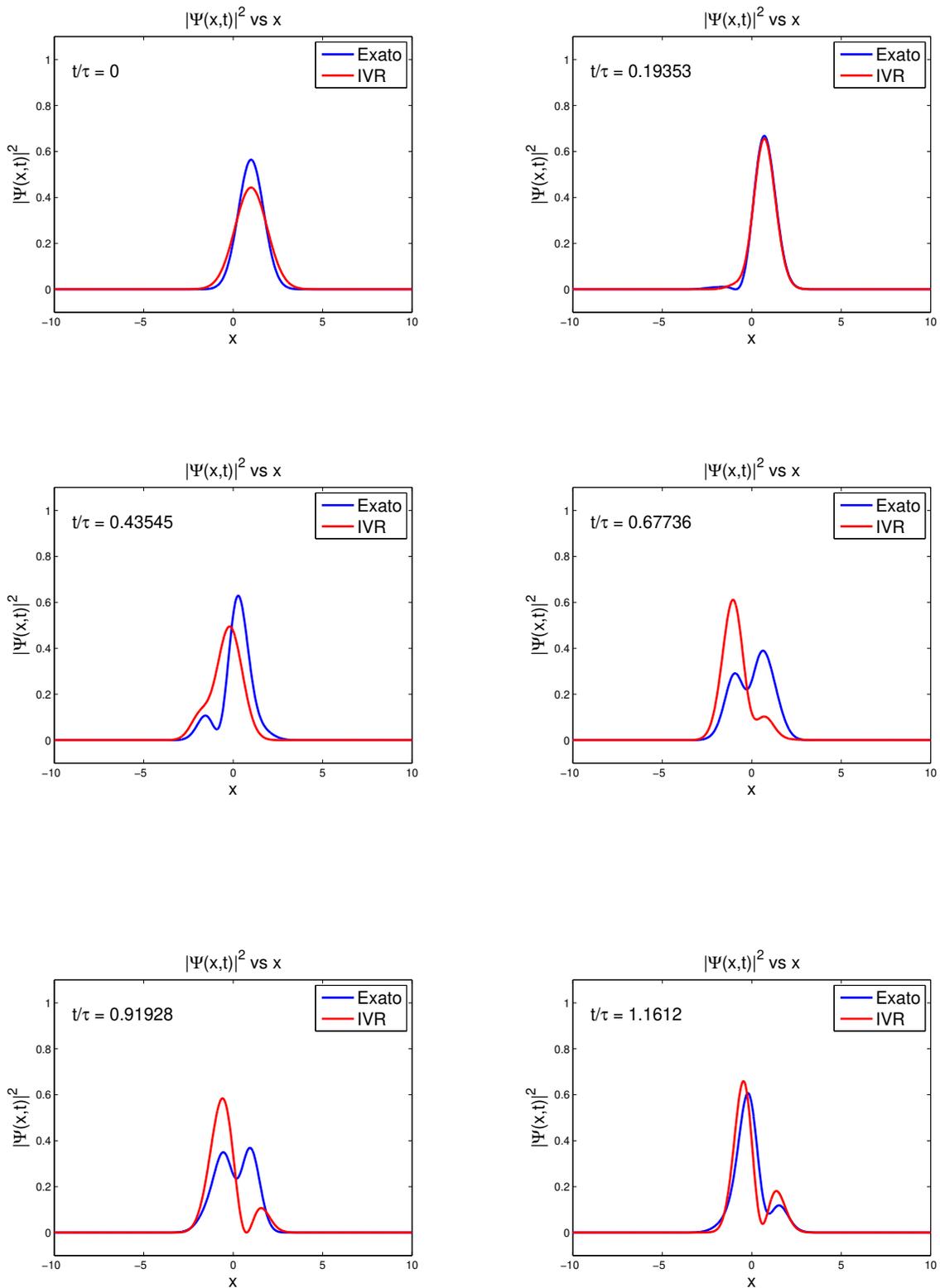


Figura 4.10: integração é feita usando 100 trajetórias escolhidas no intervalo $[q_{v_0}^{min}, q_{v_0}^{max}] = [-1.1, 3.1]$ ao longo da reta 4.4. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

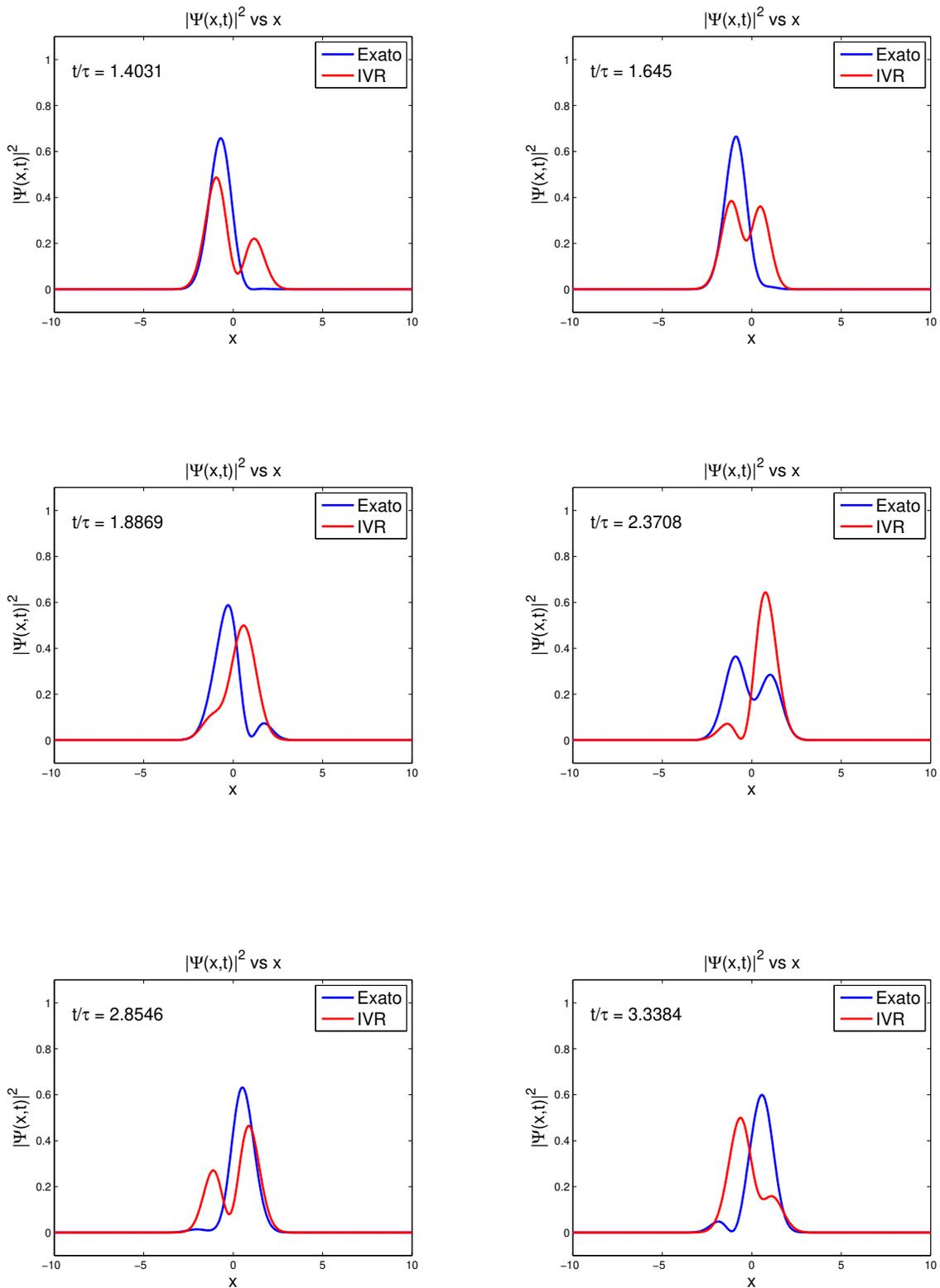


Figura 4.11: integração é feita usando 100 trajetórias escolhidas no intervalo $[q_{v_0}^{min}, q_{v_0}^{max}] = [-1.1, 3.1]$ ao longo da reta 4.4. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

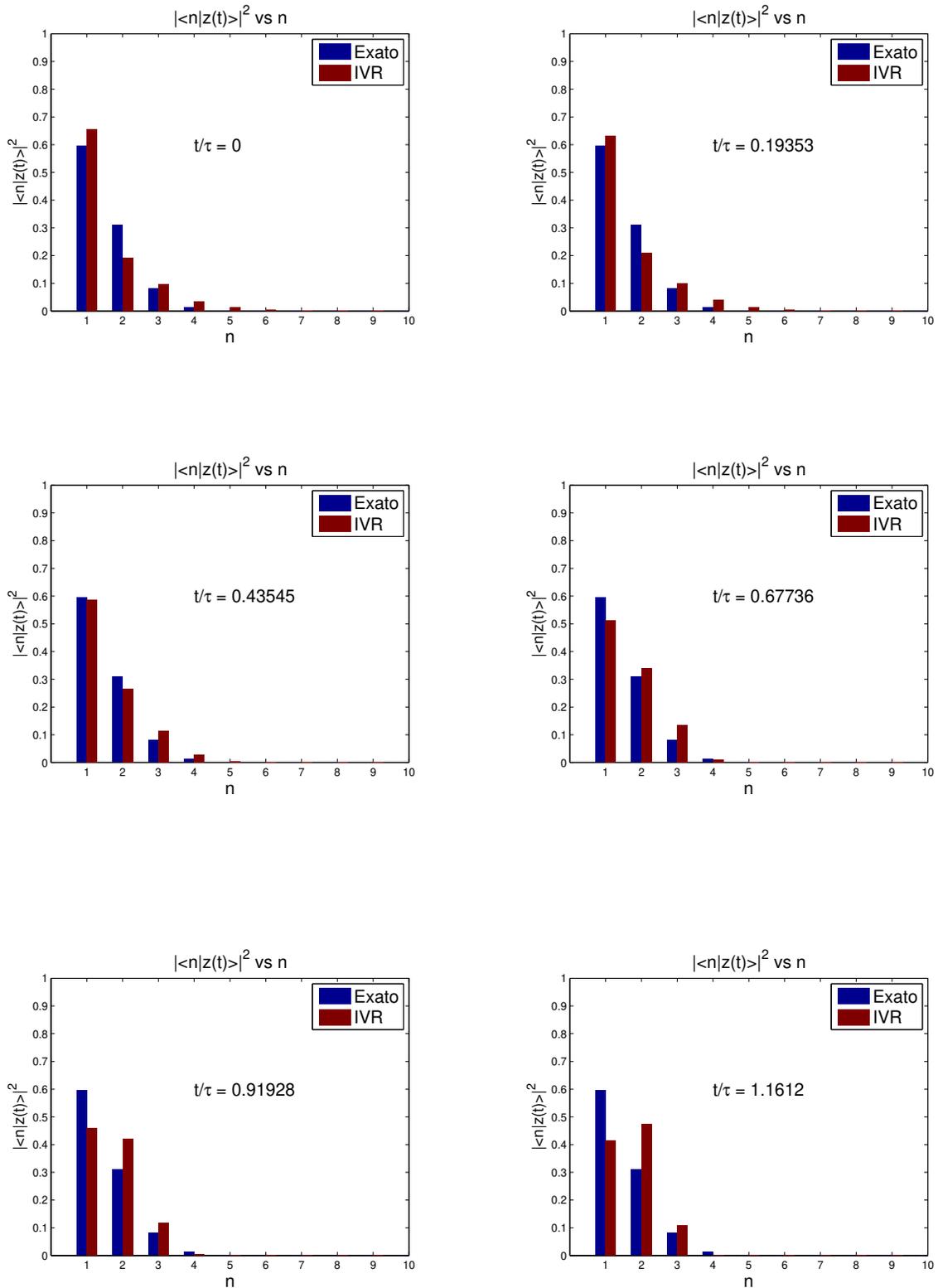


Figura 4.12: integração é feita usando 100 trajetórias escolhidas no intervalo $[q_{v_0}^{min}, q_{v_0}^{max}] = [-1.1, 3.1]$ ao longo da reta 4.4. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

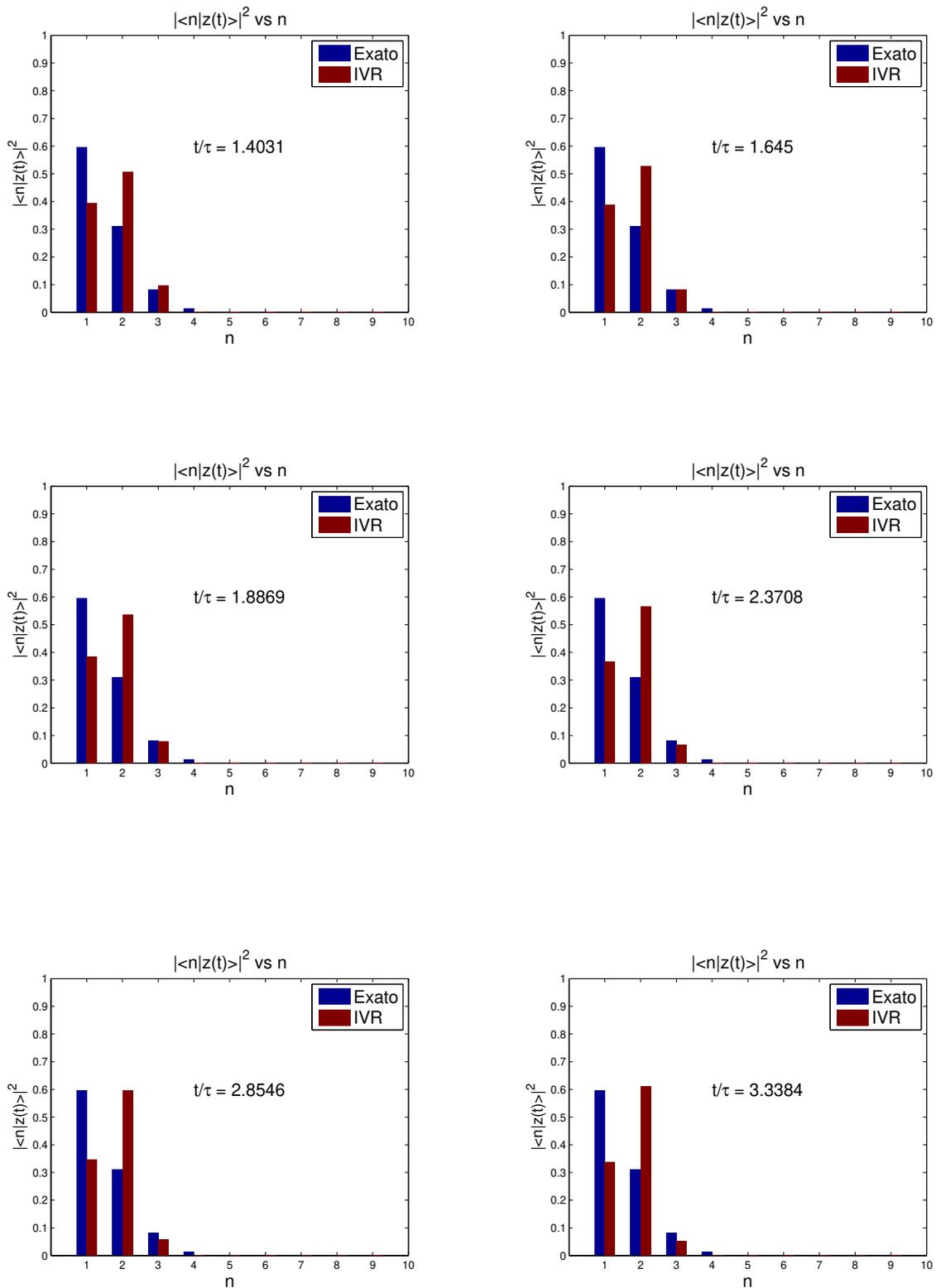


Figura 4.13: integração é feita usando 100 trajetórias escolhidas no intervalo $[q_{v_0}^{min}, q_{v_0}^{max}] = [-1.1, 3.1]$ ao longo da reta 4.4. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

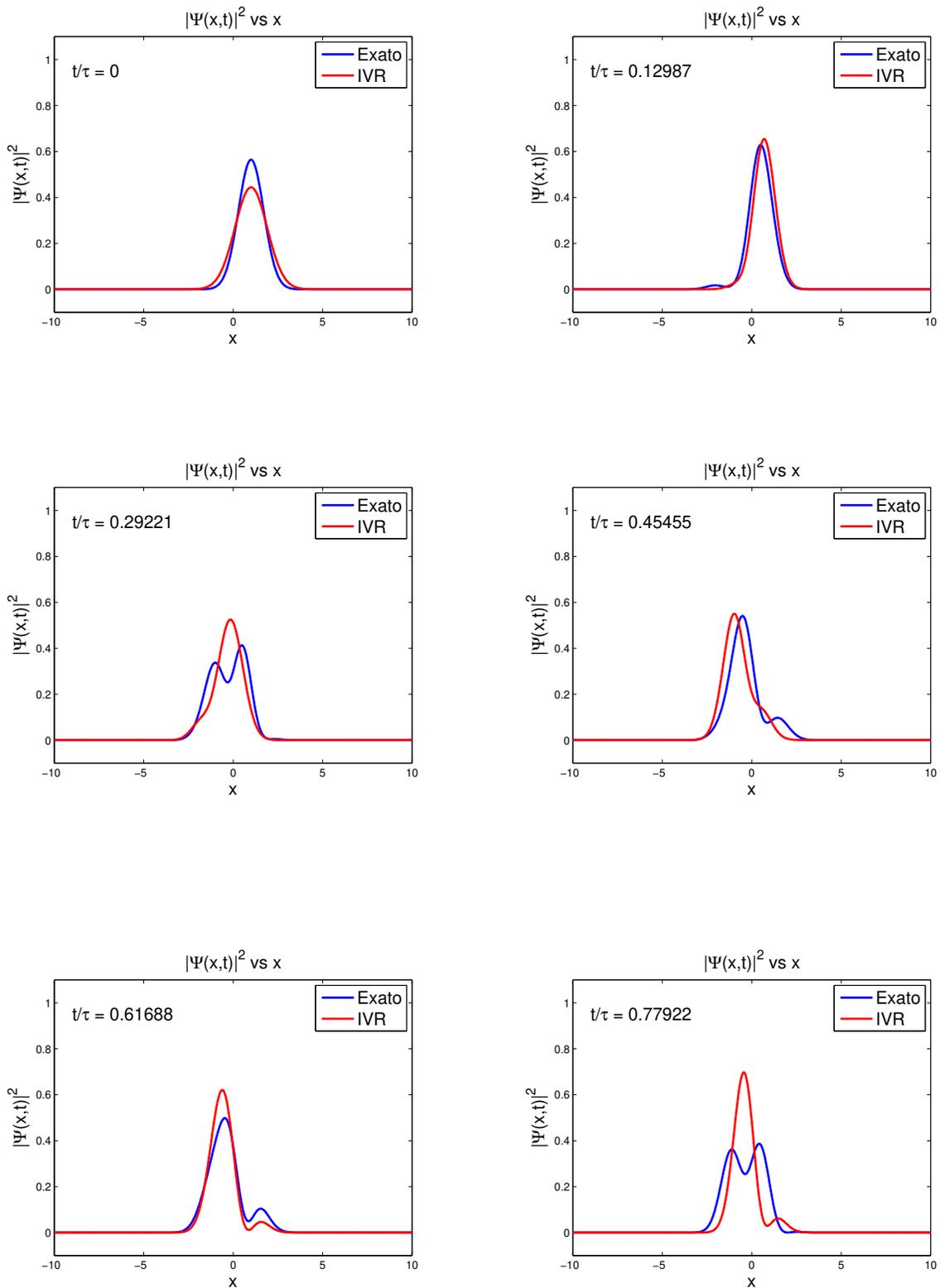


Figura 4.14: condições iniciais escolhidas até uma distância de 0.1 unidades de posição da reta 4.4 a num total de 400 trajetórias no processo de integração, formando um retângulo cisalhado. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

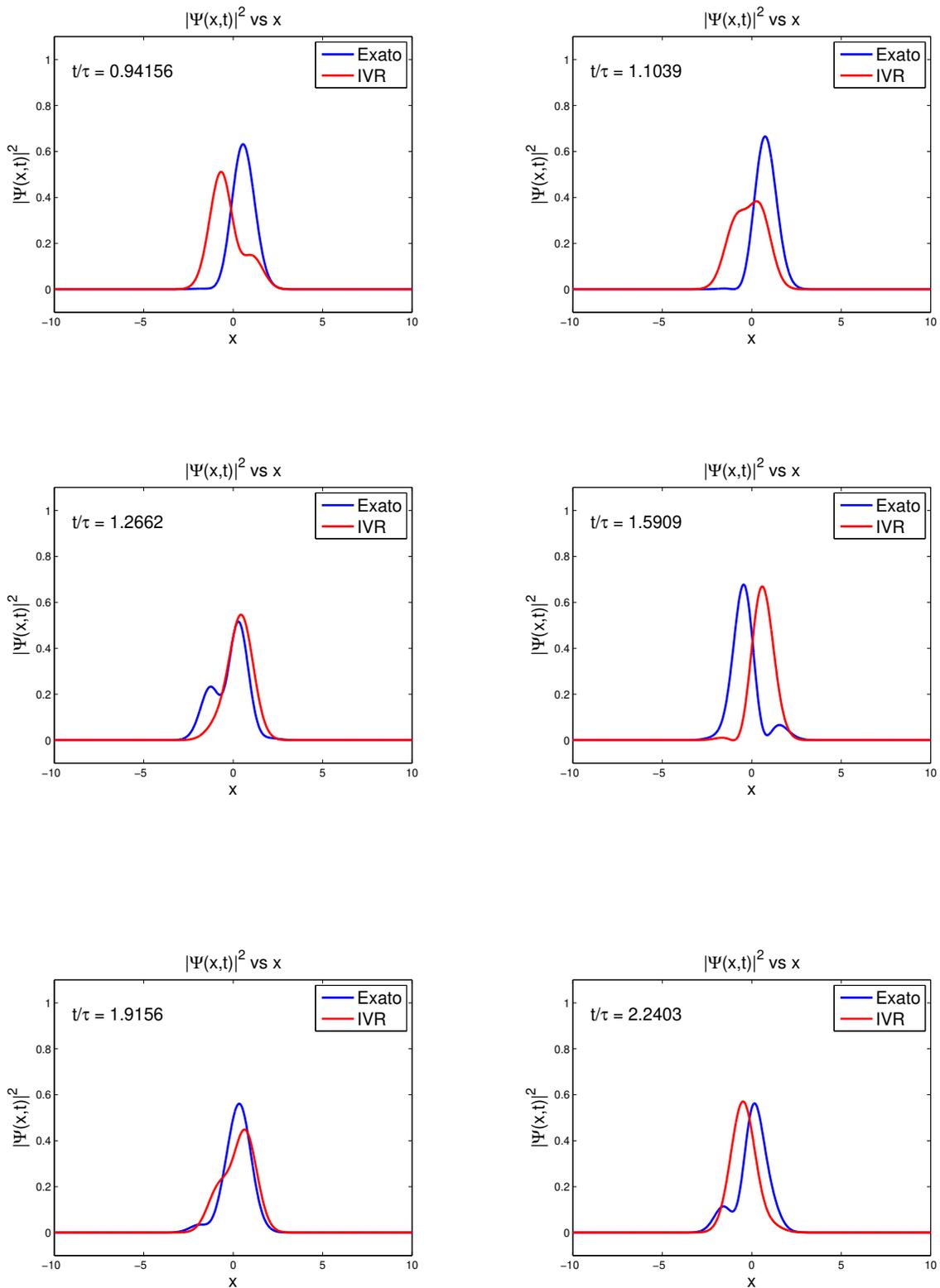


Figura 4.15: condições iniciais escolhidas até uma distância de 0.1 unidades de posição da reta 4.4 a num total de 400 trajetórias no processo de integração, formando um retângulo cisalhado. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

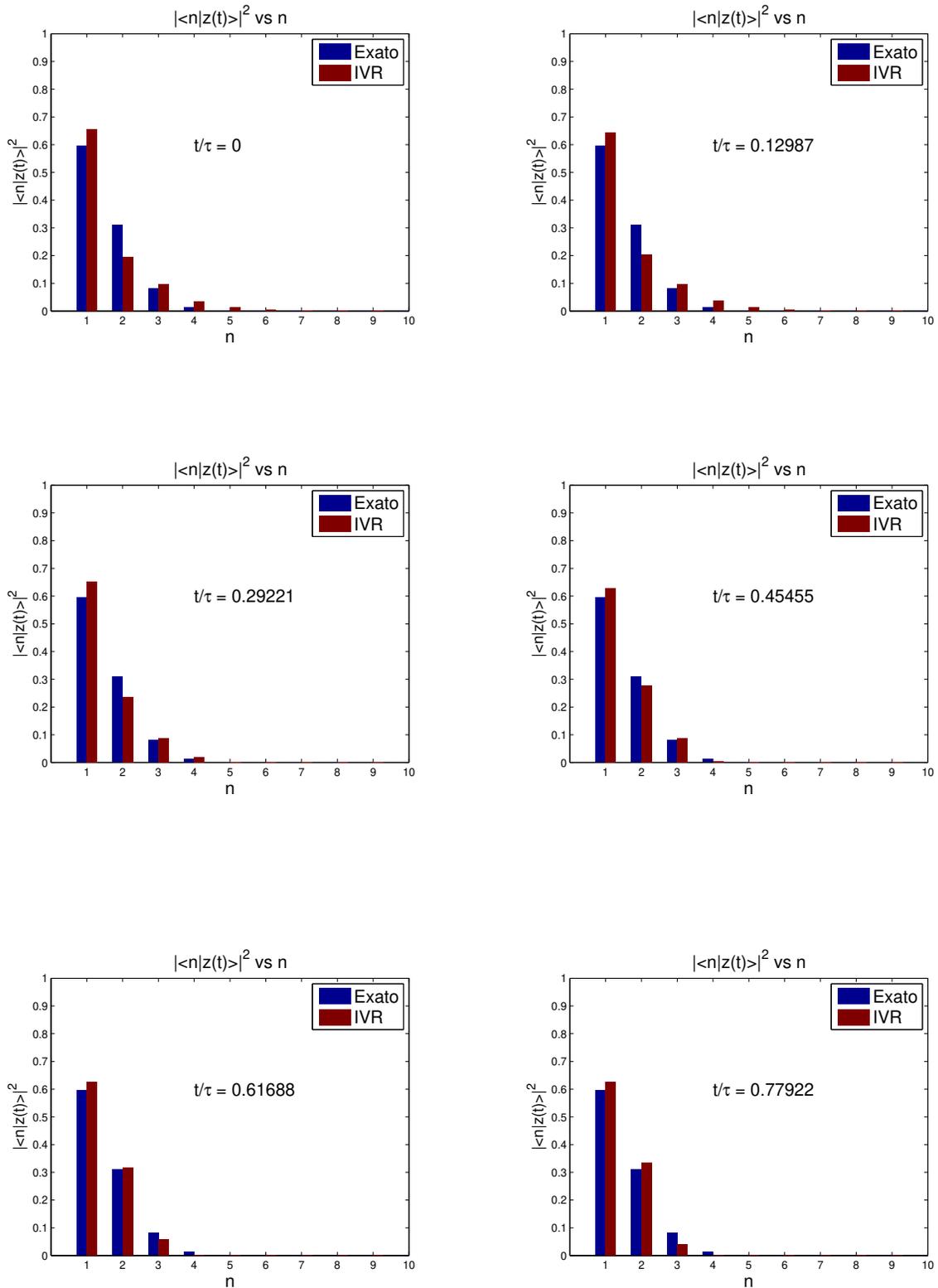


Figura 4.16: condições iniciais escolhidas até uma distância de 0.1 unidades de posição da reta 4.4 a num total de 400 trajetórias no processo de integração, formando um retângulo cisalhado. Com condições iniciais $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$

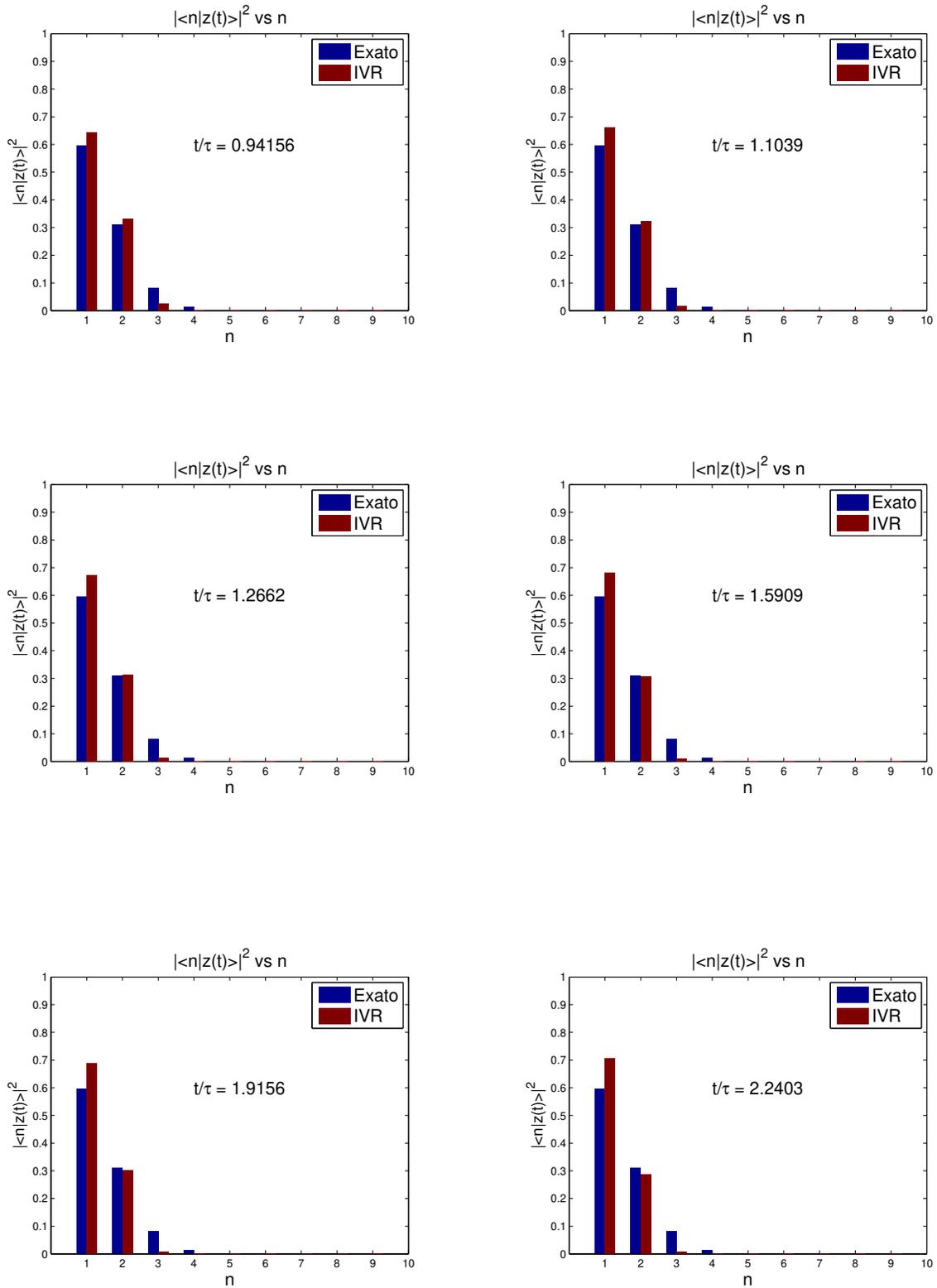


Figura 4.17: condições iniciais escolhidas até uma distância de 0.1 unidades de posição da reta 4.4 a num total de 400 trajetórias no processo de integração, formando um retângulo cisalhado.

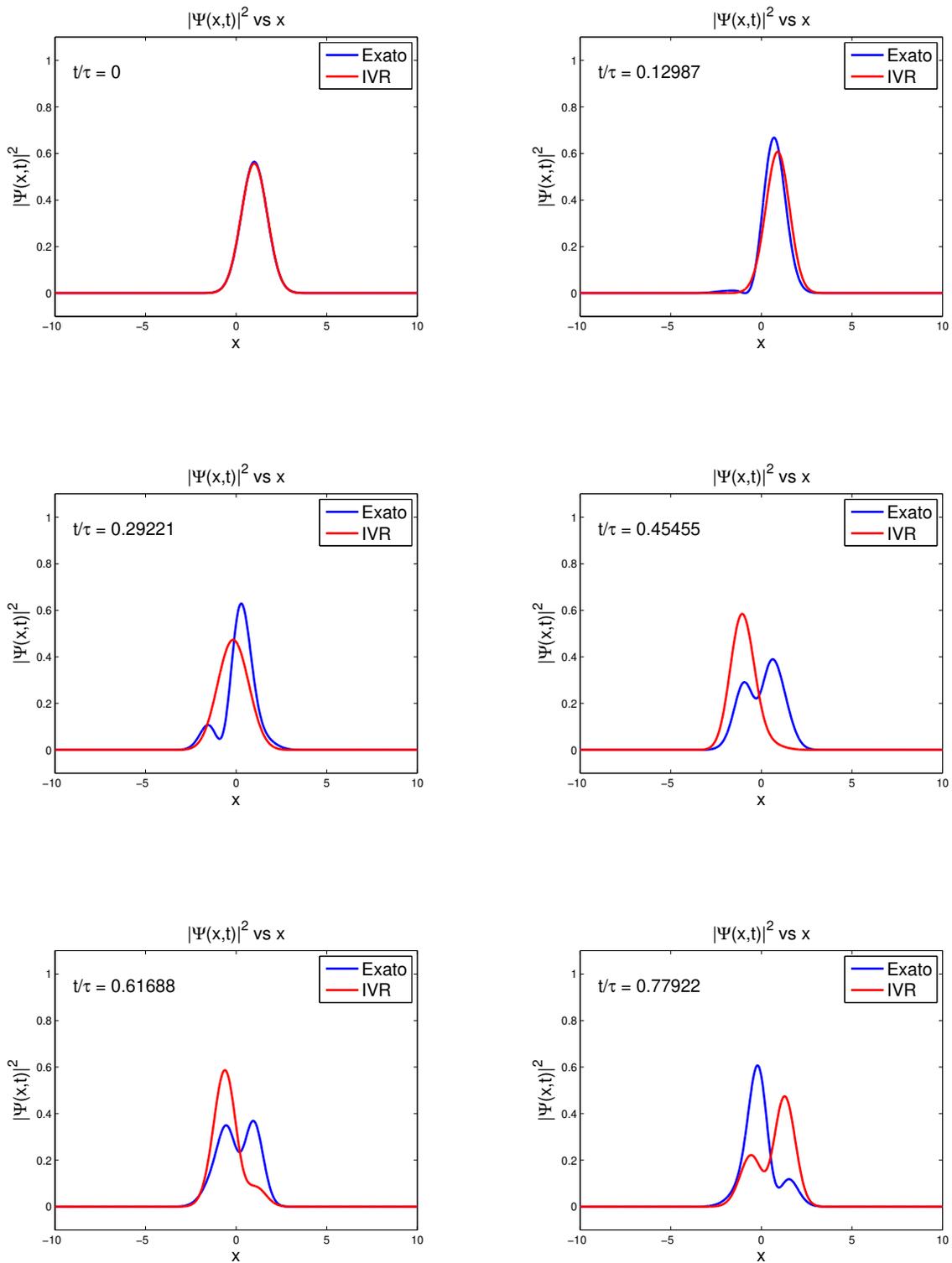


Figura 4.18: Condições iniciais foram escolhidas num quadrado centrado na condição inicial $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$, de lado 5, somando um total de 10^4 trajetórias.

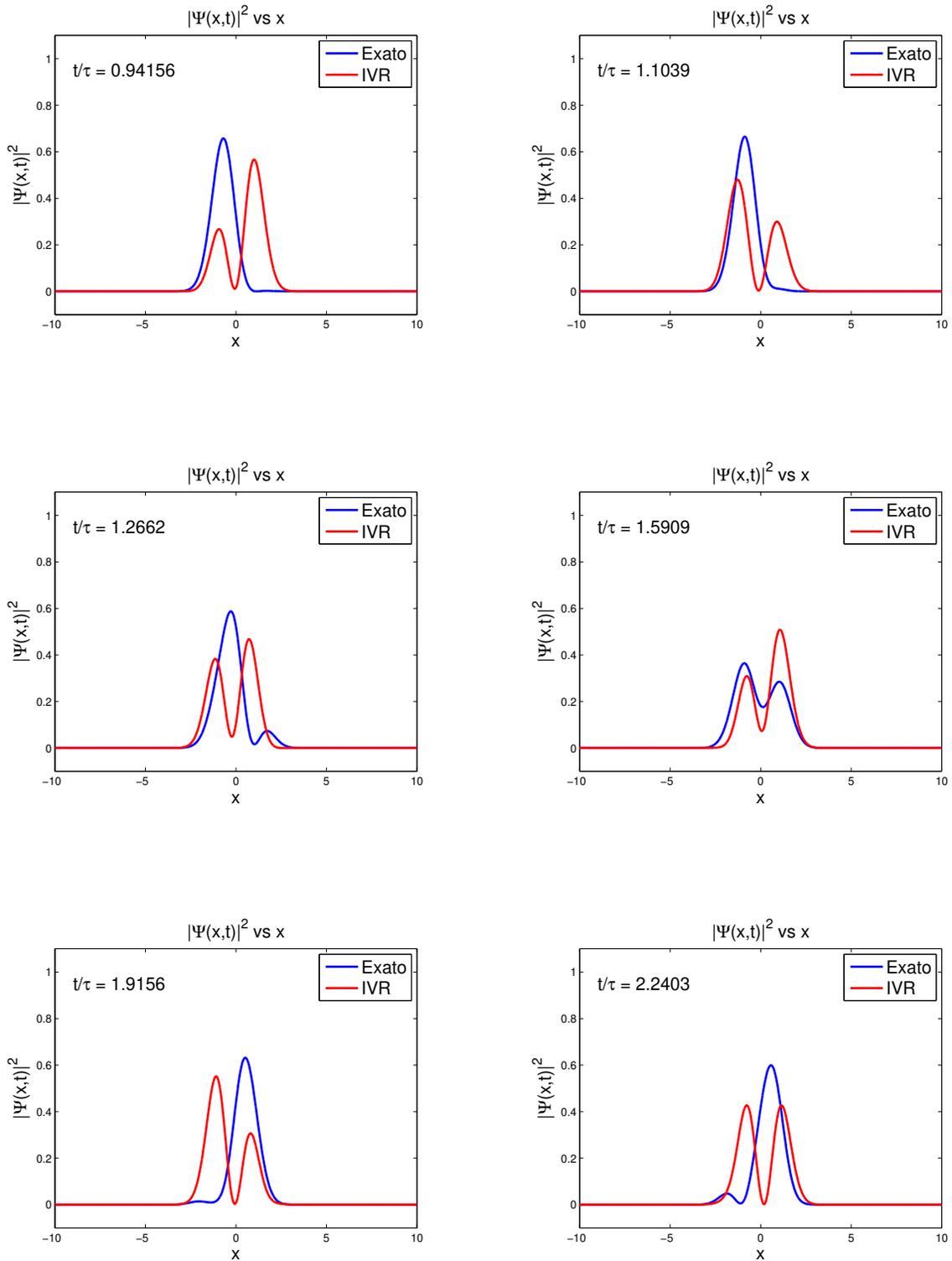


Figura 4.19: Condições iniciais foram escolhidas num quadrado centrado na condição inicial $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$, de lado 5, somando um total de 10^4 trajetórias.

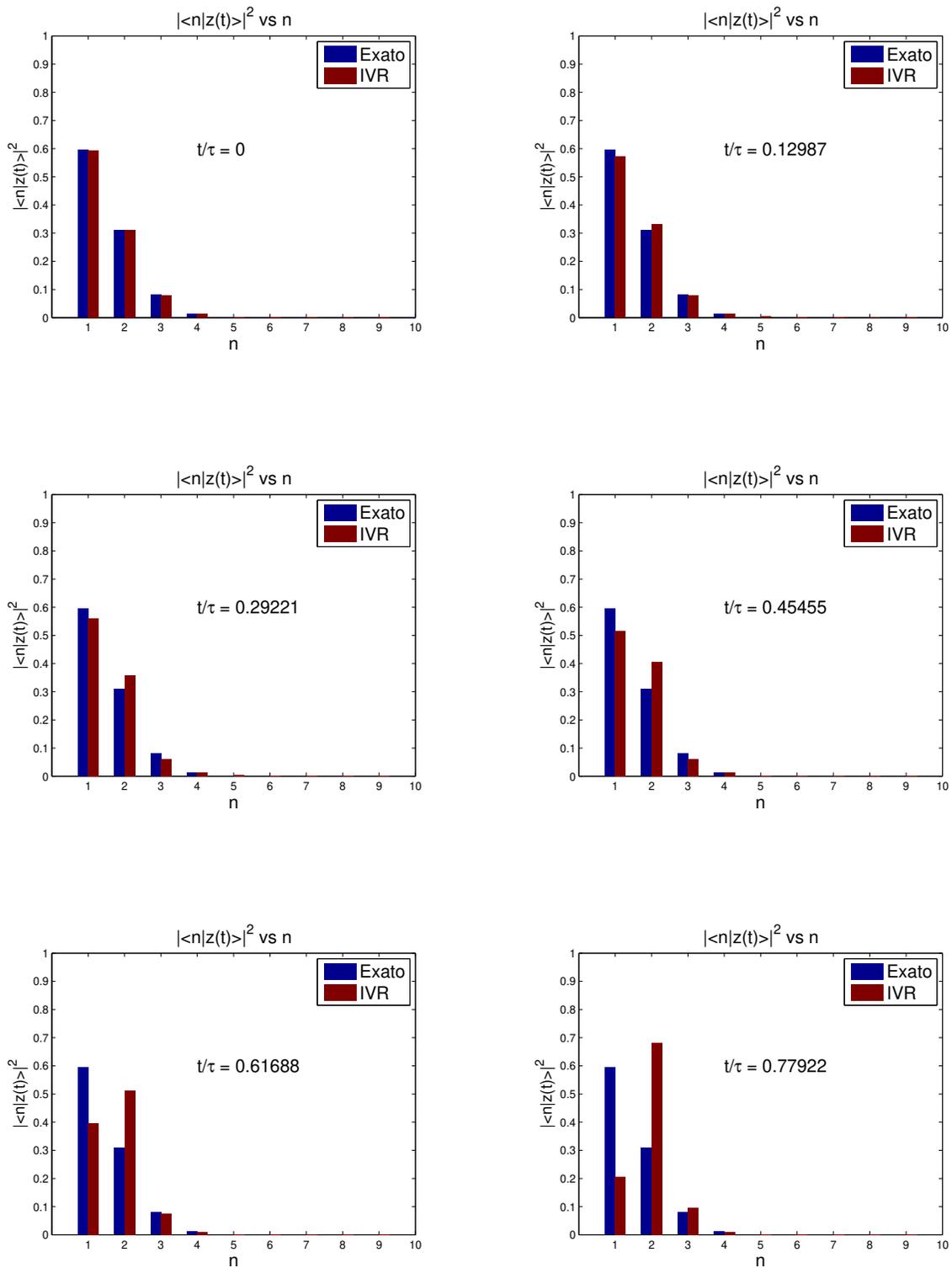


Figura 4.20: Condições iniciais foram escolhidas num quadrado centrado na condição inicial $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$, de lado 5, somando um total de 10^4 trajetórias.

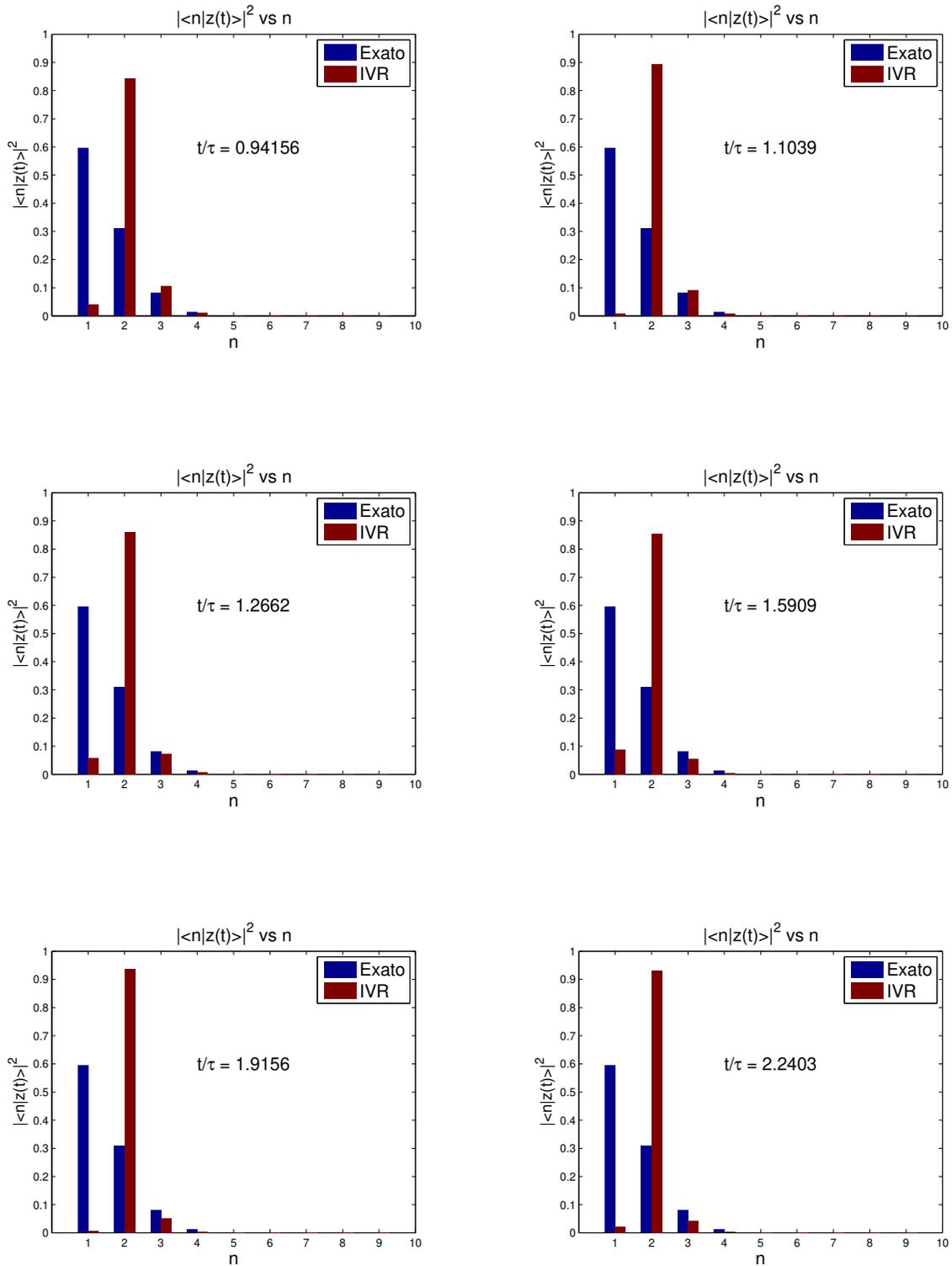


Figura 4.21: Condições iniciais foram escolhidas num quadrado centrado na condição inicial $z_i = (1/2)^{1/2}(q_i + ip_i) = (1/2)^{1/2}(1 + 0.2i)$, de lado 5, somando um total de 10^4 trajetórias.

Capítulo 5

Considerações Finais

Neste estudo, discutimos métodos semiclássicos de evolução temporal focalizando nossos cálculos e resultados na representação de estados coerentes. Nessa representação o limite semiclássico é descrito por trajetórias complexas que satisfazem condições de contorno em $t = 0$ e $t = \tau$. Na última década foram desenvolvidos métodos IVR's, que usam apenas condições iniciais como entrada de dados, pensando-se na dinâmica de trajetórias complexas [10, 6, 7, 9]. Esta dinâmica dobra o espaço de fase físico e o número de constantes de movimento nos dando mais graus de liberdade, porém agrega termos exponenciais de amortecimento ou de divergência ao propagador devido a trajetórias aqui ditas *não contribuintes*, mesmo estas trajetórias sendo provenientes das equações de Hamilton obtidas da aproximação de fase estacionária. Nos recentes trabalhos onde o propagador com trajetórias complexas tem sido abordado, as trajetórias são excluídas do cálculo através de filtros *ad hoc* inferidos ao propagador. Com isso, muito esforço computacional é feito em vão.

O papel das trajetórias não contribuintes ainda possui um caráter misterioso no cálculo do propagador, principalmente quando se trata de sistemas não lineares. Para estudar esse problema fizemos uso de um sistema simples, não linear, porém com soluções analíticas: o oscilador harmônico “ao quadrado”. O objetivo deste trabalho foi definir um critério de corte analítico para remover as trajetórias não contribuintes do cálculo do propagador para este sistema. O critério é simples: dado o estado inicial $|z_i\rangle$ fixamos $u_0 = z_i$ e escolhemos condições iniciais auxiliares proporcionais ao estado inicial do estado coerente, ou seja,

$$v_0 = \beta z_i^*.$$

onde trajetória real é obtida quando $\beta = 1$. Isto deixa evidente o uso de trajetórias complexas no cálculo. Esta relação de proporcionalidade se reflete em uma reta no plano v^* na qual estão contidas as condições iniciais que dão origem a trajetórias periódicas e fechadas no espaço de fase. Portanto, escolhendo as condições iniciais na reta

$$p_{v_0} = \frac{p_i}{q_i} q_{v_0}$$

ainda assim obtivemos uma melhor fidelidade, eq. 4.1, em relação às outras regiões, o retângulo ao redor da reta ou o grid quadrado, apesar de termos reduzido a dimensionalidade do espaço de fase. Essa redução implicou em dificuldades na composição do estado inicial levando a uma fidelidade

inicial $F(0) < 1$ como foi visto nas figuras 4.4 e 4.5. A fidelidade mesmo assim se mantém melhor no decorrer do tempo.

Uma dificuldade inerente do sistema escolhido foi o crescimento do pré-fator $|M_{vv}|^{3/2}$ no tempo que faz com que a norma cresça gerando inconsistências no resultado. Este problema foi amenizado usando uma suavização gaussiana.

Escolhendo a largura da gaussiana como $\alpha = \mu|M_{vv}|^2$ obtivemos uma suavização melhor da norma no tempo onde μ é a largura inicial que pode ser aproximadamente δq , ou seja, metade do intervalo de integração na reta.

Nos cálculos deste tipo são usadas em torno de 5 a 10 mil trajetórias. Todo este esforço computacional é brutalmente reduzido com o critério de corte onde usamos da ordem 100 condições iniciais dispostas na reta. Também é visto que o critério de corte exclui trajetórias que contribuem inicialmente, mas que divergem para tempos longos. Com isso dois problemas são amenizados ao mesmo tempo: a aproximação se mantém estável por mais tempo e o custo computacional é radicalmente menor.

Referências Bibliográficas

- [1] Sakurai, J. J.. Modern Quantum Mechanics. [S.l.]: Addison-Wesley, 1993.
- [2] J. H. Van Vleck, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 14 (1928) 178.
- [3] R. P. Feynman. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, Inc. 1965.
- [4] Ribeiro A D, de Aguiar M A M and Baranger M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066204
- [5] de Aguiar M A M, Baranger M, Jaubert L, Parisio F and Ribeiro A D 2005 *J. Phys. A* **38** 4645
- [6] Marcus A.M. de Aguiar, Silvio S. Vitiello and Adriano Grigolo, Chemical Physics 370 (2010) 42-50.
- [7] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch, and B. Schellhaaß, J. Phys. A **34** (2001) 7227.
- [8] M. F. Herman and E. Kluk, Chem. Phys. **91** (1984) 27.
- [9] Thiago F. Viscondi and M.A.M. de Aguiar, J. Chem. Phys. 134 (2011) 234105.
- [10] Adriano Grigolo. Dinâmica semiclássica na representação de estados coerentes. Master's thesis, Unicamp, Brasil, 2011.
- [11] A. O. Bolivar. Teorema de Ehrenfest e o limite clássico da mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís. 2001, vol.23, n.2, pp. 190-195.
- [12] R.J. Glauber, Coherent and incoherent states of radiation field, Phys. Rev. 131 (1963) 2766-2788
- [13] Y. Weissman, J. Chem. Phys. 76(8), 15 Apr. 1982.
- [14] A.L. Xavier Jr. e M.A.M. de Aguiar - Ann. Phys. (NY) 252 (1996) 458-478.
- [15] Z. R. Gong, H. Ian, Yu-xi Liu, C. P. Sun, Franco Nori, Physical Review A **80**, 065801 (2009).
- [16] Marcus A. M. Aguiar. Tópicos de Mecânica Clássica, Editora Livraria da Física, 2010.
- [17] Marcus A. M. Aguiar. Notas de aula: O Limite Semiclássico da Mecânica Quântica, não publicado.

- [18] Ribeiro A D, Novaes M and Aguiar M A M de 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 050405
- [19] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner and G. Vattay, *Chaos: Classical and Quantum*, ChaosBook.org (Niels Bohr Institute, Copenhagen 2012)
- [20] John R. Klauder, B. S. Skagerstam, *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific Pub Co Inc (June 1985).
- [21] K. G. Kay, *J. Chem. Phys.* **100(6)** (1994) 4377.
- [22] K. G. Kay, *J. Chem. Phys.* **100** (1994) 4432.
- [23] K. G. Kay, *J. Chem. Phys.* **322** (2006) 3.
- [24] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **62** (1975) 1544.
- [25] J.M. Moix and Eli Pollak, *J. Chem. Phys.* **100** (2008) 064515.
- [26] D. Huber and E.J. Heller, *J. Chem. Phys.* **87** (1987) 5302.
- [27] D. Huber, E.J. Heller and R.G. Littlejohn, *J. Chem. Phys.* **89** (1988) 2003.
- [28] S. Tomsovic and E. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **67** 664 (1991).
- [29] S. Tomsovic and E. Heller, *Phys. Rev. E* **47** 282 (1992).
- [30] M. Novaes, M.A.M de AGUIAR, *Physical Review. A* **72** 032105, (2005).
- [31] M. Novaes, *J. of Math. Phys.* **46** 102102, 2005.
- [32] Shalashilin D V and Child M S 2004 *Chem. Phys.* **304** 103
- [33] D. V. Shalashilin and I. Burghardt, *J. Chem. Phys.* **129** 084104 (2008).
- [34] William H. Miller, *Molecular Phys.* **Vol 100** No. 4, 397-400 (2002).

Apêndice A

A evolução temporal

Para realizarmos a evolução temporal de um sistema quântico de um instante t_0 a um instante t qualquer, usamos o operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$ que é obtido resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (\text{A.1})$$

onde \hat{H} é a Hamiltoniana do sistema. Para levarmos um estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$ ao estado final $|\psi(t)\rangle$, aplicamos o operador evolução temporal da seguinte forma

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (\text{A.2})$$

É importante lembrar duas propriedades do operador $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}, \text{ onde } \hat{1} \text{ é o operador identidade.} \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_1, t) \hat{U}(t, t_0), \text{ para } t_1 > t > t_0. \quad (\text{A.4})$$

Quando a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, podemos representar o operador evolução temporal na forma:

$$\hat{U}(t) = \exp \left[-\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right] \quad (\text{A.5})$$

onde tomamos $t_0 = 0$. Podemos calcular \hat{U} em termos da base de autoestados de \hat{H} , $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$ da seguinte maneira:

$$\hat{U}(t) = \sum_{m,n} |\psi_m\rangle \langle \psi_m | e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} | \psi_n\rangle \langle \psi_n | \quad (\text{A.6})$$

supondo que o espectro é discreto. Vendo que

$$\langle \psi_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} | \psi_n \rangle = \delta_{mn} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (\text{A.7})$$

chegamos a

$$\hat{U}(t) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | . \quad (\text{A.8})$$

Podemos descrever o sistema no espaço de configuração dado por $\vec{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_j)$, onde j é o número de graus de liberdade. Tomamos o estado inicial em $t = 0$ como $|\vec{q}_0\rangle$ e a probabilidade de encontrarmos o sistema no estado $|\vec{q}\rangle$ no instante t é

$$P(\vec{q}, \vec{q}_0; t) = |\langle \vec{q} | \hat{U}(t) | \vec{q}_0 \rangle|^2 = |K(\vec{q}, \vec{q}_0; t)|^2 \quad (\text{A.9})$$

onde

$$K(\vec{q}, \vec{q}_0; t) \equiv \langle \vec{q} | \hat{U}(t) | \vec{q}_0 \rangle. \quad (\text{A.10})$$

Com isso, definimos o *propagador* de \vec{q}_0 no instante t_0 a \vec{q} no instante t . A equação A.10 representa uma amplitude de probabilidade para ir do estado $|\vec{q}_0\rangle$ ao estado $|\vec{q}\rangle$. Para uma representação em termos da base $|\psi_n\rangle$, substituímos o operador \hat{U} da equação A.8 na equação A.10 e assim obtemos a representação espectral do propagador:

$$K(\vec{q}, \vec{q}_0; t) = \sum_n \psi_n(\vec{q}) \psi_n^*(\vec{q}_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (\text{A.11})$$

onde $\langle \vec{q} | \psi \rangle = \psi(\vec{q})$.

Apêndice B

Variáveis adimensionais e reescala do sistema

Nestes resultados, faremos uso de variáveis adimensionais, característica que já se apresenta na escolha das variáveis (u, v) 3.45, lembrando que $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$ tem dimensão de posição e $c = \sqrt{\hbar m\omega}$ tem dimensão de momento o que torna o rótulo

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

uma quantidade adimensional. Partindo das equações de Hamilton:

$$\frac{dq}{d\tau} = \frac{d}{dp} H(q, p) \quad \text{e} \quad \frac{dp}{d\tau} = -\frac{d}{dq} H(q, p)$$

mudamos para as variáveis

$$Q = \frac{q}{b}, \quad P = \frac{p}{c}, \quad \text{com} \quad bc = \hbar.$$

Se temos ainda uma unidade de tempo natural, como a frequência do oscilador, podemos definir $t = \tau/T$, onde $T = 2\pi/\Omega$. Isso leva a

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar\Omega} \frac{d}{dQ} H(bQ, cP)$$

e ai definimos

$$H'(Q, P) \equiv \frac{2\pi}{\hbar\omega} H(bQ, cP)$$

Portanto, podemos efetuar os cálculos usando razões das larguras dos estados coerentes b e c como condições iniciais em termos das escalas típicas do problema em questão [10]. Por exemplo, para o sistema optomecânico apresentado na seção 2.2.4 a frequência natural da cavidade é $\omega_0 = 10^2 THz$ e do ressonador $\Omega = 10^{-1} GHz$ que possui uma massa $m = 0,5ng$ e cavidade possui um comprimento de $L = 1\mu m$. Com estes parâmetros um fóton na cavidade tem uma energia média de $E_{kerr} \approx 1,05 \cdot 10^{-34} J$. Se pudermos efetuar em um sistema desta magnitude as medidas com uma precisão $b \approx 1nm$ para um valor $Q_0 = 10nm$ distante da posição de equilíbrio, a condição inicial seria na nova coordenada $q_0 = 10b$.

Nos cálculos deste trabalho usaremos as coordenadas já reescaladas e adimensionalizadas com seus valores descritos em termos das grandezas características do problema.