

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Matheus Veronez

O MÉTODO DOS ESTADOS COERENTES ACOPLADOS COM TRAJETÓRIAS COMPLEXAS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto
de Física como parte dos requisitos para obtenção
do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Marcus A. M. de Aguiar

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação
defendida pelo aluno e orientada pelo


Prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar

Campinas, dezembro de 2011.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR
SANDRA MARIA CARLOS CARTAXO – CRB8/7088 - BIBLIOTECA DO IFGW
UNICAMP**

V599m	<p>Veronez, Matheus, 1984- O método dos estados coerentes acoplados com trajetórias complexas / Marcus Aloizio Martinez de Aguiar. -- Campinas, SP : [s.n.], 2011.</p> <p>Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".</p> <p>1. Dinâmica quântica. 2. Limite semi-clássico. 3. Estados coerentes. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez de. 1960- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.</p>
-------	---

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Coupled coherent states with complex trajectories

Palavras-chave em inglês:

Quantum dynamics

Semiclassical limit

Coherent states

Área de Concentração: Métodos Matemáticos da Física

Titulação: Mestre em Física

Banca Examinadora:

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar [Orientador]

Alexandre Dias Ribeiro

Silvio Antônio Sachetto Vitiello

Data da Defesa: 31-10-2011

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE Mestrado de **MATHEUS VERONEZ** – R.A. 024671 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 31 / 10 / 2011.

COMISSÃO JULGADORA:

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

Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro – DF/UFPR

Prof. Dr. Silvio Antonio Sachetto Vitiello – DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a meus pais, Valdir e Gloria, cujos ensinamentos e apoio foram as substâncias mais importantes para que eu cumprisse esta etapa de meu trabalho e de minha vida. Agradeço também a meus familiares: Milton, Marilena, Jean, Priscila, Margarida, Floriano, Ivani, Celso, Samantha, Audie, Ozílio (*in memoriam*) e Vivandina, dos quais sempre trago no coração os bons momentos e a saudade.

Agradeço aos amigos. Os surinamitas: Sono, Pipoca, Zé, KZ, Glauco, Renan, Adilson, Fael, Marcão, Douglas e respectivas namoradas, noivas e esposas; um pouco distantes mas cujo companheirismo sempre esteve perto. Aos parlamentares (antigos e novos) e agregados: Barrozo, Jaul, Ana, Fedô, Vitão, Amilcar, Thamiris, Pira, Rods, Rato, Pri, Shao, Henrique, Trefilio, GB, Ericão, Monique, Adele, Nat, Leo, Gaúcho, Bacani, Campello, João, Nove, Gleidy, Vanessa, Spike e mais uma legião de pessoas que me ajudou a tornar a vida mais leve. À Marseille, minha cúmplice nesta jornada, cujo carinho e motivação foram essenciais.

Agradeço ao David, o Alberto e o Douglas que me acolheram nesta fase final em nossa humilde república.

Agradeço ao apoio do pessoal do GSD: Adriano, Marcelo, Thiago, Beth, Wendell; e a todos os amigos físicos do IFGW. Aos professores que direta ou indiretamente tornaram possível a realização e conclusão deste projeto: Escobar, Saa, Sílvio e Alexandre (Cabelo). Agradeço ao Marcus que aceitou me guiar neste trabalho e com quem tive grande aprendizado nesses pouco mais de dois anos.

Por fim agradeço à CAPES e à FAPESP pelo auxílio financeiro.

Resumo

Nas duas últimas décadas do séc. XX os estados coerentes entraram em cena como uma poderosa representação sobre a qual pode-se apoiar a mecânica quântica, possibilitando a extensão do cálculo de integrais de trajetória a uma classe de estados mais abrangente, da qual os autoestados de posição e momento são membros. Cálculos semiclássicos revelaram que as contribuições mais importantes ao propagador quântico provêm de domínios centrados em trajetórias complexas no espaço de fase. O método dos estados coerentes acoplados emprega estados dinâmicos para desenvolver um esquema exato para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, dinâmica esta que emprega trajetórias reais. O regime semiclássico deste método exato conduz a um resultado similar ao obtido a partir das integrais de trajetória, porém empregando trajetórias reais. Neste trabalho o interesse é desenvolver a teoria dos estados coerentes acoplados empregando as trajetórias complexas naturais à aproximação semiclássica e estudar a viabilidade deste método.

Abstract

By the end of the last century the harmonic oscillator coherent states were extensively studied as a powerful representation for doing quantum mechanics on the phase space. They were employed in the development of a more general class of path integrals which has the usual Feynman path integral as a particular case. The semiclassical limit of these path integrals involves contributions of functions evaluated on complex trajectories on the phase space. The coupled coherent states (CCS), an exact method devised for solving Schrödinger's equation employing a set of path guided states driven by real trajectories, has its semiclassical limit in accordance with that provided by the path integral method, respecting the differences among the trajectories each one employs. In this work we extend the range of the CCS using complex trajectory guided states and we study the complex CCS theory thus obtained.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Estrutura da tese	6
2	Elementos de dinâmica clássica	7
2.1	Descrição hamiltoniana	10
2.2	A ação	13
2.3	A matriz tangente	15
2.4	Exemplos	18
2.4.1	Oscilador harmônico	18
2.4.2	Partícula livre	20
2.5	Conexão com a teoria semiclássica	21
2.6	Panorama	22
3	Estados coerentes do oscilador harmônico	23
3.1	Dinâmica dos estados coerentes	25
3.2	Propriedades algébricas dos estados coerentes	31
3.3	Estados coerentes congelados dinâmicos	36
3.4	Trajetórias complexas	40
3.5	Exemplos	45
3.5.1	Oscilador harmônico	45
3.5.2	Partícula livre	47
3.6	O interesse nos estados coerentes	49

4	O método dos estados coerentes acoplados	51
4.1	Equação dinâmica	52
4.2	Um caso analítico	58
4.3	Aplicações numéricas da equação dinâmica	60
4.3.1	Oscilador harmônico perturbado	60
4.3.2	Parede de potencial	61
4.4	Limite semiclássico	64
4.4.1	Teoria das gaussianas congeladas	65
4.4.2	Teoria das gaussianas derretidas	66
5	Os estados coerentes complexos acoplados	71
5.1	Diferenças entre trajetórias reais e complexas	74
5.2	Reformulação da equação dinâmica	78
5.2.1	Caso analítico: oscilador harmônico	81
5.3	Limite semiclássico	82
5.4	Teste da equação dinâmica	85
6	Considerações finais	91
A	Integrais gaussianas	93

Capítulo 1

Introdução

Desde o início da teoria ondulatória da matéria e o advento da equação dinâmica proposta por Schrödinger [1], grande empenho tem sido posto em aprimorar e refinar métodos para resolver tal equação, seja desenvolvendo ferramentas computacionais que tornem os cálculos mais velozes ou desenvolvendo constructos teóricos que forneçam novas visões sobre o mundo quântico e, como consequência, fornecendo novos substratos matemáticos.

Um elemento quase tão antigo quanto a própria teoria quântica que vem atraindo a atenção de físicos nas últimas décadas são os estados coerentes [2, 3, 4]. Estes estados foram pela primeira vez notados no estudo do oscilador harmônico por apresentarem uma dinâmica muito particular e interessante. Apesar de serem entidades quânticas, a evolução temporal destes estados têm uma forte analogia com órbitas clássicas no espaço de fase, o que, associado ao fato de eles saturarem a desigualdade de Heisenberg, os leva à posição de entidade quase clássica dentro da mecânica quântica. A analogia que o movimento destes estados apresenta provém de seu comportamento dinâmico ser igual ao movimento de um ponto material sujeito a uma força harmônica, ou seja, um movimento periódico na forma de senos e cossenos, com a diferença clara de se tratar de uma função de onda gaussiana, de incerteza mínima, e não de um ponto. Estas características dinâmicas dos estados coerentes per-

mitem que eles possam ser estudados sobre um arcabouço clássico quando sob evolução em um potencial harmônico.

Apesar dos estados coerentes terem sido pela primeira vez observados no estudo do potencial harmônico, estados quânticos coerentes ocorrem em muitos outros sistemas físicos, tão diversos como a dinâmica de corpos com momento angular e a dinâmica da ocupação de níveis bosônicos [5, 6, 7, 8].

Uma das interpretações dadas à mecânica clássica consiste em compreendê-la a partir da perspectiva de alguém que se distanciou do mundo quântico, ou seja, a escala típica dos eventos envolve um parâmetro de ação muito maior do que a constante de Planck, \hbar . Isto implica em realizarmos uma descrição quântica onde operadores canônicos aproximadamente comutam e a dinâmica é muito bem descrita pela equivalência de Ehrenfest, quase sem flutuações quânticas. Sob essa ótica é totalmente plausível interpretarmos os estados coerentes como estados que ignoram um fator de vínculo quântico proporcionado pela constante \hbar e vêm um mundo clássico em seu meio. Porém, infelizmente, somente sob evolução temporal harmônica eles têm essa característica.

O fato da constante que sintoniza os fenômenos quânticos ser pelo menos 20 ordens de grandeza menor do que a escala de fenômenos do mundo macroscópico motivou uma abordagem perturbativa para a mecânica quântica, onde \hbar faz o papel de um pequeno parâmetro, consistindo a mecânica clássica do limite em que $\hbar \rightarrow 0$. Essa construção permite que empreguemos elementos clássicos na descrição de fenômenos quânticos, o que pode nos fornecer valiosa informação sobre a relação entre estes dois domínios, ou seja, nos dá a possibilidade de examinar como a dinâmica clássica está presente na física quântica. Ela permite ir além da prescrição de Dirac, que promove os parênteses de Poisson a uma relação de comutação entre operadores, e palpar, por exemplo, como as trajetórias clássicas se vinculam para dar origem à dinâmica quântica; mesmo que, por enquanto, em um esquema perturbativo.

Foi baseado nesta prescrição perturbativa que surgiram as primeiras fór-

mulas denominadas semiclássicas, que empregam quantidades clássicas para realizar o cálculo de entidades fundamentalmente quânticas, como o propagador. Uma das primeiras aproximações dessa forma construídas foi o propagador semiclássico de van Vleck [9]:

$$K_{VV}(x_i, x_f, T) = \sum_{\Gamma} \left(2\pi i \hbar \frac{\partial x_f}{\partial p_i} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{i\hbar} S(x_i, x_f, T)}, \quad (1.0.1)$$

onde S é a ação clássica ao longo de uma trajetória Γ que conecte os extremos x_i e x_f em um tempo T ; sobre as quais a soma se estende. O prefator multiplicando a fase vinda da ação está relacionado com a confluência de trajetórias em uma região do espaço, de forma que sobre cáusticas, onde ocorre adensamento de trajetórias, a quantidade destas diverge.

Uma representação exata para o propagador quântico pode ser feita em termos de uma soma sobre todas os caminhos $\tilde{\Gamma}$ que conectem pontos com extremos em x_i e x_f que transcorram durante um tempo T ,

$$\langle x_f | \hat{K}_H(T) | x_i \rangle = \sum_{\tilde{\Gamma}} e^{-\frac{1}{i\hbar} S_{\tilde{\Gamma}}}, \quad (1.0.2)$$

onde estes caminhos são arbitrários (uma vez dadas suas condições de contorno) e não constituem necessariamente as trajetórias físicas determinadas pelo princípio de mínima ação. Aqui

$$\hat{K}_H(T) = \exp\left(\hat{H}t/i\hbar\right) \quad (1.0.3)$$

é o operador de evolução temporal quântico. A este propagador quântico denominamos propagador de Feynman [10, 11]. Pode-se demonstrar que realizando a soma sobre as trajetórias em uma vizinhança das trajetórias Γ , que satisfazem o princípio de Hamilton, obtemos o propagador de van Vleck [12, 13, 14, 15].

Nestes dois exemplos acima, a motivação clássica está evidente, tanto para

o propagador exato de Feynman (1.0.2) como para seu parceiro aproximado de van Vleck (1.0.1), uma vez que ambos empregam caminhos ou trajetórias definidas em um espaço de fase clássico em seus cálculos. Um fato digno de nota é que as contribuições ao propagador exato provêm inclusive de caminhos que não têm sentido físico claro no contexto da mecânica clássica. Contudo, nestes caminhos, há grande oscilação da fase provinda da ação de maneira que, na média, suas contribuições são nulas no limite semiclássico.

Tanto no propagador de Feynman quanto em seu aproximante semiclássico, empregamos elementos de uma base de estados quânticos “abruptos” para os cálculos, no sentido de suas funções de onda serem extremamente localizadas no espaço de coordenadas, $\langle x'|x \rangle = \delta(x' - x)$. Estes estados têm na dinâmica clássica um análogo que é a partícula pontual, com uma única diferença: esta partícula não está definida com relação a seu momento. Estes estados, pela natureza não-suave de suas funções, são menos naturais à mecânica quântica do que algum estado cuja função de onda seja mais bem comportada, por exemplo, os estados coerentes sucintamente explicados acima. Estes estados também tomam parte importante no elo entre o substrato clássico e o quântico da mecânica, e o papel nesse elo é forte o suficiente a ponto de existir um esquema de quantização que os emprega como entidade fundamental [16, 17].

Dessa maneira nada impede que estes estados sejam também empregados para que a dinâmica quântica seja realizada sobre o mesmo espaço de fase sobre o qual se realiza a mecânica clássica. Nesse sentido, é aceitável a construção de um propagador na representação provida pelos estados coerentes:

$$K(z_i, z_f, T) = \langle z_f | \widehat{K}_H(T) | z_i \rangle, \quad (1.0.4)$$

onde os números z rotulam os estados. Em geral, este propagador não tem uma forma simples, mas seu limite semiclássico dado pelo propagador de BAKKS¹, equivalente à forma de van Vleck para o propagador de Feynman,

¹Em menção aos autores do trabalho [18]: Baranger-Aguiar-Keck-Korsch-Schellhaas.

é descrito na literatura [18, 19]. Nesta forma semiclássica emerge um conjunto exótico de trajetórias que demandam uma complexificação das variáveis de posição e momento do espaço de fase, o que indiretamente torna a aplicação da fórmula semiclássica uma tarefa de certa forma delicada [20, 21, 22, 23].

Recentemente foi proposto um método exato para se resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo empregando uma base de estados coerentes guiados sobre trajetórias reais no espaço de fase, isto é, estados com dinâmica previamente incorporada, método que foi denominado *coupled coherent states* (CCS) [24, 25, 26, 27, 28, 29]. O adjetivo reais qualificando as trajetórias indica que elas não sofrem do problema de complexificação, que é necessária às trajetórias dos estados coerentes na expressão semiclássica de (1.0.4). Tais estados quânticos dotados de dinâmica clássica não devem ser encarados como um construção artificial pois é deles que provêm a conexão quântico-clássico que se deseja analisar. O limite semiclássico dos CCS é equivalente ao limite semiclássico de (1.0.4) apenas com a diferença que diz respeito à complexificação das trajetórias.

As trajetórias complexas permitem a descrição de alguns fenômenos quânticos já no nível clássico devido a seu comportamento diferente, e são naturais ao cálculo semiclássico de funções de onda. Apesar disso sua utilização como elemento central em um método exato, que as empregue para atribuir dinâmica aos estados coerentes, nunca foi realizado. Esta lacuna está representada esquematicamente abaixo.

Propagador exato	Teoria dinâmica exata	Limite semiclássico
Trajetoórias reais	CCS	análogo BAKKS
Trajetoórias complexas	<i>CCCS?</i>	BAKKS

Neste trabalho, o objetivo principal é desenvolver um método CCS complexo, ou CCCS (do inglês *complex* CCS) e estudá-lo na resolução de problemas em que tanto a forma semiclássica de (1.0.4) quanto os CCS reais garantem resultados de boa qualidade para a função de onda de um estado quântico temporalmente evoluído.

1.1 Estrutura da tese

Nos dois primeiros capítulos que se seguem a esta introdução, descreveremos detalhadamente os elementos necessários à construção dos CCS e da teoria semiclássica advinda dele: no capítulo 2 abordaremos a dinâmica clássica no espaço de fase, empregando trajetórias reais; e no capítulo 3 discorreremos sobre os estados coerentes do oscilador harmônico, analisando a forma com que eles podem adquirir dinâmica no espaço de fase. Ao final do terceiro capítulo exibiremos como ocorre a complexificação do espaço de fase.

No capítulo 4 faremos a demonstração das equações chave dos CCS com trajetória reais e realizaremos algumas aplicações do método. Tomaremos o limite semiclássico das equações exatas, exibindo o caráter essencial que o método possui. Em seguida, no capítulo 5 buscaremos uma forma de generalizar os CCS para o caso de trajetórias complexas, e analisaremos a teoria CCCS complexa obtida.

Capítulo 2

Elementos de dinâmica clássica

No desenvolvimento da teoria dos CCS, assumiremos como entidade fundamental a equação de evolução temporal

$$|\Psi, T\rangle = \hat{K}_H(T) |\Psi, 0\rangle, \quad (2.0.1)$$

que resolve a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi, t\rangle = \hat{H} |\Psi, t\rangle. \quad (2.0.2)$$

Obviamente, esta expressão tem dependência explícita na hamiltoniana quântica \hat{H} do sistema em que estamos interessados. Se esta hamiltoniana puder ter seus autoestados $\{|\varphi_i\rangle\}$ (contínuos e/ou discretos) totalmente determinados, a evolução temporal pode ser explicitamente calculada a partir de

$$|\Psi, T\rangle = \sum_i \Psi(\varphi_i, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^T E_i dt} |\varphi_i\rangle, \quad (2.0.3)$$

onde $\Psi(\varphi_i, 0) = \langle \varphi_i | \Psi, 0 \rangle$ é a função de onda inicial na representação provida por $\{|\varphi_i\rangle\}$. No caso de um sistema aberto, o espectro E_i é contínuo, podendo admitir um subconjunto discreto, enquanto que em um sistema fechado den-

tro de um potencial atrativo, o espectro é sempre discreto.

A determinação dos autoestados da hamiltoniana quântica não é um procedimento simples de ser realizado computacionalmente e poucos casos analíticos são factíveis. Poderíamos simplificar o problema truncando a somatória ou integral presente (2.0.3) a um valor $E_{max} > E_i$, dependente da energia do pacote de onda inicial, procedimento que possivelmente renderia uma boa aproximação para a função de onda temporalmente evoluída. Contudo para espalhamentos de estados, cuja energia fosse muito acima da energia do estado fundamental e dos primeiros estados excitados, o cálculo ainda seria custoso, limitando a aplicação de métodos baseados no espectro de \hat{H} .

Para contornar esta dificuldade, usualmente empregamos uma outra base de estados mais geral do que a própria base de autoestados do operador de evolução temporal para calcular a dinâmica quântica. Um exemplo tradicional de tal base é aprendido nos cursos elementares de mecânica quântica, em que se estuda a equação de Schrödinger escrita na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q, t) \right] \Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t),$$

onde é utilizada a representação de coordenadas, dos autoestados de \hat{q} , $\{|q\rangle\}$. O propagador de Feynman faz uso direto de tal base ao buscarmos os elementos de matriz do operador de evolução temporal 1.0.3. Aqui novamente, o cálculo exato destes elementos de matriz não é simples, até mesmo para alguns casos cuja solução analítica existe – como o oscilador harmônico e a partícula livre –, e a abordagem computacional pode ser necessária.

O emprego da hamiltoniana como entidade fundamental para evolução temporal de um sistema quântico sugere que, no limite apropriado, o emprego de quantidades clássicas provenientes do formalismo hamiltoniano deva oferecer um caminho interessante a ser perseguido. O propagador de Feynman emprega os autoestados de posição; no entanto, nada nos impediria de nos

assentar sobre os autoestados de momento, procedimento amplamente difundido na física do estado sólido [30] e em física de partículas [31]. Ao colocar o problema nesta forma, abrimos a possibilidade de trabalhar a mecânica quântica em um mesmo substrato onde apoiamos a mecânica clássica: o espaço de fase das variáveis clássicas conjugadas, q (posição) e p (momento).

Uma forma de representar um estado quântico no espaço de fase é dada pela transformação de Wigner [32, 33, 34], que correlaciona a função de onda em uma das duas representações com uma quasiprobabilidade $P(q, p)$ construída a partir das variáveis clássicas:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(q, t) = \langle q | \Psi, t \rangle \rightarrow \\ \quad P(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(q+s, t) \Psi(q-s, t) e^{2ips/\hbar} ds, \\ \Phi(p, t) = \langle p | \Psi, t \rangle \rightarrow \\ \quad P(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p+s, t) \Phi(p-s, t) e^{-2ips/\hbar} ds, \end{array} \right. \quad (2.0.4)$$

cujas distribuições marginais geram as densidades de probabilidade originais nas representações de posição e momento. A função de Wigner oferece valiosa representação da disposição do pacote quântico em um espaço clássico, e sua dinâmica é governada pela equação de Moyal. Outra forma de se representar a dinâmica quântica no espaço de fase é dada pela projeção em estados coerentes, como veremos adiante.

Quando um sistema quântico apresenta algum parâmetro s , característico de sua dinâmica e possuindo dimensão de ação, com valor muito superior a \hbar , esperamos que fenômenos quânticos comecem a se tornar cada vez menores, uma vez que

$$[\widehat{q}, \widehat{p}] = i\hbar \ll is,$$

o que torna os efeitos provenientes do comutador quântico pequenos comparados a efeitos clássicos. Nesse regime, o teorema de Ehrenfest [35, 36] nos levaria a concluir que a dinâmica quântica se aproximaria muito da dinâmica

clássica em um cenário onde a densidade de probabilidade faz o papel de uma função classicamente propagada. Assim, para o parâmetro $s \gg \hbar$ a física quântica se acercaria, com boa aproximação, da física clássica, de forma que quantidades clássicas tornariam-se altamente pertinentes na descrição dos fenômenos envolvidos. Neste limite semiclássico, o cálculo do propagador de Feynman (1.0.2) envolve majoritariamente contribuições providas da vizinhança de trajetórias clássicas $q(t)$ que conectem os pontos extremos nos quais os elementos de matriz são calculados, ou seja, das trajetórias que no intervalo de tempo T conectem os pontos $q(0) = x_i$ e $q(T) = x_f$. Tais argumentos são os que conduzem à construção do propagador semiclássico de van Vleck (1.0.1). A motivação para olharmos com avidez para esta teoria semiclássica é a possibilidade de aplicação de alguns de seus elementos em uma teoria exata para resolver a equação de Schrödinger: os CCS. O emprego de quantidades clássicas transforma a equação dinâmica quântica em uma equação integrodiferencial mais adequada para tratamento numérico.

Neste capítulo, faremos uma breve revisão da mecânica clássica na formulação de Hamilton com alguns exemplos ilustrativos. Sempre assumiremos potenciais dependentes do tempo, de maneira que a transição para sistemas conservativos pode ser feita no limite em que

$$\frac{\partial}{\partial t} V(q, t) = 0.$$

2.1 Descrição hamiltoniana

Quando lidamos com um sistema unidimensional de uma partícula clássica, a dinâmica é descrita pela equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (2.1.1)$$

em que $L \equiv L(q, \dot{q}, t)$ é a lagrangiana

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q, t). \quad (2.1.2)$$

A equação de Euler-Lagrange obtida aplicando (2.1.1) a (2.1.2) é a equação de movimento habitual para sistemas unidimensionais sujeitos a um potencial:

$$m\ddot{q} + \frac{\partial V(q, t)}{\partial q} = 0.$$

Aplicando uma transformada de Legendre que substitua a dependência de \dot{q} em L em favor de uma nova variável p

$$H(q, p, t) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t), \quad (2.1.3)$$

onde

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (2.1.4)$$

é o momento canônico conjugado a q , podemos reescrever a dinâmica em termos da hamiltoniana $H(q, p, t)$ (2.1.3). Para isso, buscamos as equações de movimento, análogas à equação de Euler-Lagrange, satisfeitas por q e p . Primeiro, de (2.1.4) vemos que

$$\dot{p} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

em virtude da equação de Euler-Lagrange (2.1.1). A segunda equação de movimento, que rege a dinâmica de q , é facilmente extraída de (2.1.3): $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$. Para finalizar, vemos também que $\dot{H} = -\frac{\partial L}{\partial t}$. Assim a dinâmica clássica

está sintetizada nas equações de Hamilton:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q}, \\ \dot{H} &= -\frac{\partial L}{\partial t},\end{aligned}\tag{2.1.5}$$

com H dado explicitamente a partir de (2.1.3) por

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q, t).\tag{2.1.6}$$

Logicamente que $\frac{dH}{dt} = 0$, se $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$, que é o caso de sistemas conservativos. As equações de Hamilton (2.1.5) para as variáveis canônicas q e p podem ser escritas em uma forma mais compacta e elegante

$$\dot{\xi} = \mathbf{J}\nabla_{\xi}H,\tag{2.1.7}$$

onde $\xi = (q, p)^T$, $\nabla_{\xi} = \left(\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p}\right)^T$ e \mathbf{J} é a matriz simplética de ordem 2

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.\tag{2.1.8}$$

Essas equações dinâmicas precisam ser complementadas especificando-se quais pontos do espaço de fase estamos interessados em propagar. Para o uso das trajetórias no propagador semiclássico de van Vleck, o caminho pertinente é aquele que conecta o ponto inicial $q(0) = x_i$ ao ponto final $q(T) = x_f$. Contudo, que informação obtemos sobre o momento da partícula ao longo desta trajetória, uma vez que se torna necessário o cálculo de quantidades como $\frac{\partial q_f}{\partial p_i}$ naquela fórmula semiclássica?

Uma forma indireta de obter tais informações é realizar uma transformação canônica nas variáveis que marcam os extremos da trajetória de modo

a converter uma delas em informação ou sobre o momento da partícula ao longo da trajetória ou sobre o momento inicial do movimento. Uma transformação boa para tal propósito é oferecida pelo funcional ação, descrita na subseção que se segue.

2.2 A ação

Definimos como ação a seguinte quantidade:

$$S(x_i, x_f, T) = \int_0^T dt L(q, \dot{q}, t), \quad (2.2.1)$$

que é calculada ao longo de uma trajetória clássica $q(t)$, solução de (2.1.5), que conecte x_i a x_f no tempo T . Para mostrar como podemos obter informação sobre o momento da partícula que descreve uma trajetória clássica, realizaremos uma variação na ação e avaliaremos como ela responde a tal variação. Seguiremos o procedimento adotado em [15].

Tomemos um caminho $\tilde{q}(t)$ próximo à trajetória $q(t)$, que se inicie e termine no intervalo de tempo $[\delta t_0, T + \delta T]$, lembrando que fazemos sempre $t_0 = 0$:

$$\tilde{q}(t) = q(t) + \delta q(t),$$

onde a distância $\delta q(t)$ entre as trajetórias é calculada a tempo fixo. A distância entre os extremos finais de ambas as trajetórias é dada por

$$\begin{aligned} \delta q_f &\equiv \tilde{q}(T + \delta T) - q(T) \\ &= \tilde{q}(T) + \dot{\tilde{q}}(T) \delta T - q(T) \\ &= \tilde{q}(T) - q(T) + \dot{q}(T) \delta T. \end{aligned}$$

Aqui trocamos $\dot{\tilde{q}}$ por \dot{q} , pois em primeira ordem nas variações δT eles são

equivalentes. De forma similar, no extremo inicial das trajetórias

$$\delta q_i = \tilde{q}(0) - q(0) + \dot{q}(0) \delta t_0.$$

A variação produzida na ação pela mudança de trajetória é descrita por

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{\delta t_0}^{T+\delta T} dt L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) - \int_0^T dt L(q, \dot{q}, t) \\ &= \int_{\delta t_0}^0 dt \tilde{L} + \int_0^T dt \tilde{L} + \int_T^{T+\delta T} dt \tilde{L} - \int_0^T dt L, \end{aligned}$$

onde $\tilde{L} = L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t)$ é a lagrangiana calculada na trajetória perturbada. Na primeira e terceira integrais, como o intervalo de integração é infinitesimal podemos aproximar a função integrada pelo seu valor em um dos extremos do intervalo; a segunda e a quarta integrais têm o mesmo limite de integração, e podemos expandir \tilde{q} em torno de q nelas. Assim, resultamos com

$$\begin{aligned} \delta S &= \tilde{L}(T) \delta T - \tilde{L}(0) \delta t_0 + \int_0^T dt \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial q} \delta q \right] \\ &= L(T) \delta T - L(0) \delta t_0 + \int_0^T dt \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial q} \right] \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \Big|_0^T, \end{aligned}$$

onde realizamos uma integração por partes e a troca de \tilde{L} por L . Pela definição de momento (2.1.4) e pela equação de Euler-Lagrange, temos

$$\begin{aligned} \delta S &= L(t) \delta t \Big|_0^T + p \delta q \Big|_0^T \\ &= L(t) \delta t \Big|_0^T + p (\delta q_x - \dot{q} \delta t) \Big|_0^T \\ &= (L - p\dot{q}) \delta t \Big|_0^T + p \delta q_x \Big|_0^T \\ &= -E_f \delta T + E_i \delta t_0 + p_f \delta q_f - p_i \delta q_i, \end{aligned}$$

em que $\delta q_x \Big|_{0,T} = \delta q_{i,f}$, $p_i = p(0)$, $p_f = p(T)$, $E_i = H(0)$ e $E_f = H(T)$. Como as variações são arbitrárias e independentes, no limite em que elas são

infinitesimais podemos promover δ a uma diferencial exata, e resultamos com

$$\begin{aligned} p_i &= -\frac{\partial S}{\partial q_i}, \\ p_f &= \frac{\partial S}{\partial q_f}, \\ E_i &= \frac{\partial S}{\partial t_0}, \\ E_f &= -\frac{\partial S}{\partial T}. \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

Tais equações algébricas suprem a necessidade de relacionar os momentos de uma trajetória a alguma outra quantidade, no caso a ação. No propagador semiclássico de van Vleck aparece um prefator que pode ser calculado em termos dessas derivadas da ação. É fácil notar que

$$\frac{\partial q_f}{\partial p_i} = \left(\frac{\partial p_i}{\partial q_f} \right)^{-1} = \left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_f} \right)^{-1}. \tag{2.2.3}$$

Contudo ainda há um problema que limita a aplicação desta expressão: como calcular numericamente a ação e/ou uma de suas derivadas? Necessitamos agora de um artifício que torne possível este cálculo.

2.3 A matriz tangente

O prefator (2.2.3) mostrado anteriormente é parte de uma instância mais completa que relaciona a propagação de perturbações ou variações nas trajetórias clássicas: a matriz tangente. Definimos essa matriz como

$$\begin{pmatrix} \delta q_f \\ \delta p_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{qq} & m_{qp} \\ m_{pq} & m_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta q_i \\ \delta p_i \end{pmatrix}, \tag{2.3.1}$$

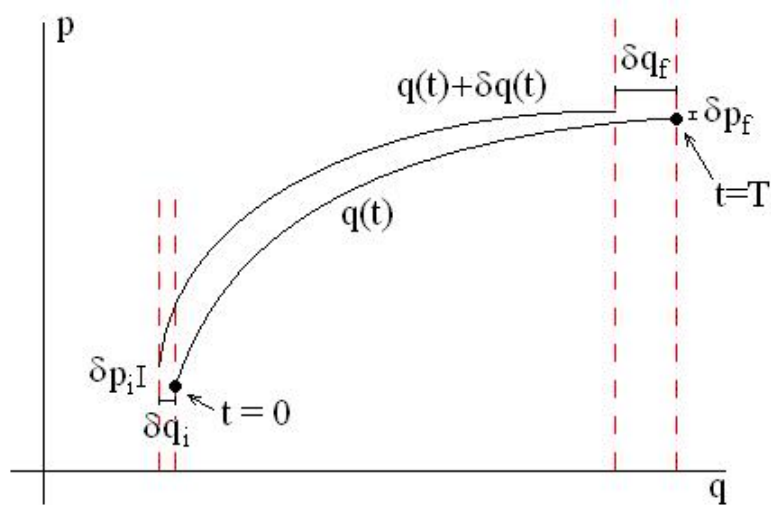


Figura 2.3.1: Matriz tangente: propagação de uma perturbação $\delta q_i, \delta p_i$ do instante $t = 0$ até o instante $t = T$, $\delta q_f, \delta p_f$.

onde δq e δp são as perturbações no instante inicial (com subíndice i) evoluídas até o tempo final (com subíndice f), ilustradas na Figura 2.3.1, cujos elementos são dados por

$$\mathbf{m} \equiv \begin{pmatrix} \left. \frac{\delta q_f}{\delta q_i} \right|_{\delta p_i=0} & \left. \frac{\delta q_f}{\delta p_i} \right|_{\delta q_i=0} \\ \left. \frac{\delta p_f}{\delta q_i} \right|_{\delta p_i=0} & \left. \frac{\delta p_f}{\delta p_i} \right|_{\delta q_i=0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q_f}{\partial q_i} & \frac{\partial q_f}{\partial p_i} \\ \frac{\partial p_f}{\partial q_i} & \frac{\partial p_f}{\partial p_i} \end{pmatrix}. \quad (2.3.2)$$

Se detivermos uma maneira de calcular a dinâmica desta matriz, também temos uma forma de calcular o prefator através do elemento $m_{qp} = \partial q_f / \partial p_i$ da matriz tangente, e por conseguinte as derivadas da ação. De modo bastante geral, qualquer elemento da matriz tangente pode ser relacionado a essas derivadas, por exemplo, para m_{pq} :

$$m_{pq} = \left(\frac{\partial p_f}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_f} = -m_{qp}^{-1}.$$

Retomando a notação aplicada nas equações de movimento (2.1.7), re-

alizaremos uma variação $\delta\xi$ nas coordenadas do espaço de fase, de forma que a variação que a hamiltoniana clássica sofre como consequência é dada por

$$\delta H = (\nabla_\xi^T H) \delta\xi,$$

que explicitamente implica $\delta H = \frac{\partial H}{\partial q} \delta q + \frac{\partial H}{\partial p} \delta p$. Realizando a mesma variação às equações de movimento e aplicando o elemento acima, resultamos em primeira ordem com

$$\delta \dot{\xi} = \mathbf{J} \nabla_\xi (\delta H) = \mathbf{J} (\nabla_\xi \nabla_\xi^T H) \delta\xi. \quad (2.3.3)$$

Podemos identificar na igualdade a matriz hessiana da hamiltoniana

$$\mathbf{H}_{hess} \equiv \nabla_\xi \nabla_\xi^T H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial q} & \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} & \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial p} \end{pmatrix},$$

também chamada de matriz de estabilidade. Para obtermos a equação dinâmica que a matriz tangente \mathbf{m} obedece, precisamos encontrar as equações que envolvam os seus elementos. Derivando (2.3.2) em relação ao tempo e considerando que as variações no instante inicial sejam fixas, de modo que só haja as derivadas de δq_f e δp_f , resultamos com

$$\frac{d}{dt} \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{q}_f}{\partial q_i} & \frac{\partial \dot{q}_f}{\partial p_i} \\ \frac{\partial \dot{p}_f}{\partial q_i} & \frac{\partial \dot{p}_f}{\partial p_i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{\xi}}{\partial q_i} & \frac{\partial \dot{\xi}}{\partial p_i} \end{pmatrix}, \quad (2.3.4)$$

em que ξ é o vetor coluna definido em (2.1.7).

Voltando à equação (2.3.3), vemos que podemos reescrevê-la na seguinte forma com colunas duplicadas:

$$\begin{pmatrix} \frac{\delta \dot{\xi}}{\delta q_i} & \frac{\delta \dot{\xi}}{\delta p_i} \end{pmatrix} = \mathbf{J} \mathbf{H}_{hess} \begin{pmatrix} \frac{\delta \xi}{\delta q_i} & \frac{\delta \xi}{\delta p_i} \end{pmatrix},$$

onde a primeira coluna foi reescalada por $1/\delta q_i$ e a segunda por $1/\delta p_i$. Recon-

hecemos agora o lado esquerdo da igualdade como $\dot{\mathbf{m}}$, definida em (2.3.4), e o lado esquerdo como $\mathbf{JH}_{hess}\mathbf{m}$, definida de acordo com (2.3.2). Finalizando, a equação dinâmica matricial que rege a matriz tangente é

$$\dot{\mathbf{m}} = \mathbf{JH}_{hess}\mathbf{m},$$

com condição inicial $\mathbf{m}(0) = \mathbf{1}$, onde aqui $\mathbf{1}$ é matriz identidade de ordem 2, devido a, no tempo inicial, $p_f = p_i$ e $q_f = q_i$. Tal equação tem solução formal

$$\mathbf{m} = \exp \left\{ \int^T \mathbf{JH}_{hess} dt \right\}. \quad (2.3.5)$$

2.4 Exemplos

Para ilustrar como calcular a dinâmica da matriz tangente e da ação, calcularemos tais quantidades explicitamente para dois sistemas simples de hamiltonianas quadráticas, o oscilador harmônico e a partícula livre. Posteriormente empregaremos as quantidades calculadas para obter o propagador de Feynman no regime semiclássico pela fórmula de van Vleck.

2.4.1 Oscilador harmônico

Partiremos da hamiltoniana harmônica

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

As equações de movimento (2.1.5) são dadas por

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{p}{m}, \\ \dot{p} &= -m\omega^2 q.\end{aligned}$$

A partir de um conjunto de condições de contorno $q(0) = x_i$ e $q(T) = x_f$ podemos resolver as equações acima para obter

$$\begin{aligned}q(t) &= \frac{x_f \sin(\omega t) - x_i \sin[\omega(t - T)]}{\sin(\omega T)} \\ p(t) &= \frac{m\omega x_f \cos(\omega t) - m\omega x_i \cos[\omega(t - T)]}{\sin(\omega T)}.\end{aligned}$$

A ação é dada a partir de (2.2.1), e resulta

$$\begin{aligned}S(x_i, x_f, T) &= \int_0^T dt [p\dot{q} - H(q, p)] \\ &= \frac{1}{2}m\omega \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos(\omega T) - 2x_i x_f}{\sin(\omega T)};\end{aligned}$$

de onde podemos obter por derivação direta com relação a x_i e x_f os momentos iniciais e finais, os quais são equivalentes aos obtidos pela integração das equações diferenciais. Para obter a matriz tangente para qualquer instante de tempo, integraremos diretamente a equação formal (2.3.5). Para isso precisamos da hessiana da hamiltoniana

$$\mathbf{H}_{hess} = \begin{pmatrix} m\omega^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{m} &= \exp \int^T \mathbf{JH}_{hess} dt \\
 &= \exp \int^T \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m\omega^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} \end{pmatrix} dt \\
 &= \exp \begin{pmatrix} 0 & \frac{T}{m} \\ -m\omega^2 T & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\omega T) & \frac{1}{m\omega} \sin(\omega T) \\ -m\omega \sin(\omega T) & \cos(\omega T) \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

onde a exponencial matricial pode ser calculada, por exemplo, diagonalizando-se a matriz.

2.4.2 Partícula livre

Repetindo os cálculos anteriores para a hamiltoniana

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} p^2,$$

obtemos a trajetória

$$\begin{aligned}
 q(t) &= \frac{x_f t + x_i (T - t)}{T}, \\
 p(t) &= \frac{m(x_f - x_i)}{T}.
 \end{aligned}$$

A ação ao longo desta trajetória é dada por

$$S(x_i, x_f, T) = \frac{m(x_f - x_i)^2}{2T}$$

e a matriz tangente tem solução

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{T}{m} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tal matriz pode ser calculada por exponenciação direta, como sugerido acima para o oscilador harmônico, ou tomando-se o limite $\omega \rightarrow 0$ na matriz do próprio oscilador harmônico; o que corresponde a abrir mão do potencial e ficarmos somente com a dinâmica livre.

2.5 Conexão com a teoria semiclássica

O propagador semiclássico de van Vleck é exato para hamiltonianas quânticas quadráticas em q e p , o que é verdade para os dois exemplos feitos anteriormente, em que calculamos algumas quantidades relacionadas às trajetórias clássicas para o oscilador harmônico e a partícula livre. Para realizar a conexão explícita entre as duas teorias, calcularemos o propagador semiclássico para ambas as hamiltonianas; e como dito, ele se mostrará exato.

Para o oscilador harmônico os elementos que entram na fórmula de van Vleck são

$$\begin{aligned} m_{qp} &= \frac{1}{m\omega} \sin(\omega T), \\ S &= \frac{1}{2} m\omega \frac{(x_i^2 + x_f^2) \cos(\omega T) - 2x_i x_f}{\sin(\omega T)}. \end{aligned}$$

O número de pontos focais k é dado pelo número de vezes que a função seno zera a entrada m_{qp} da matriz tangente, de maneira que a cada ciclo do oscilador, a função de onda tem sua fase invertida. Esta fase pode ser revertida no módulo de m_{qp} tomando a raiz quadrada correta do elemento.

Assim, resultamos com

$$K_{VV}(x_i, x_f, T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(x_i^2 + x_f^2) \cos(\omega T) - 2x_i x_f]}. \quad (2.5.1)$$

Para a partícula livre,

$$\begin{aligned} m_{qp} &= \frac{T}{m}, \\ S &= \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{T}, \end{aligned}$$

de maneira que

$$K_{VV}(x_i, x_f, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}} e^{\frac{im}{2\hbar T} (x_f - x_i)^2}. \quad (2.5.2)$$

Ambos os resultados, (2.5.1) e (2.5.2), são equivalentes aos exatos.

2.6 Panorama

Até este ponto descrevemos brevemente alguns elementos da mecânica clássica de uma partícula sujeita a um potencial $V(q, t)$. Tal estudo abre caminho para a inserção de outros elementos sobre este arcabouço, por exemplo, o emprego de coordenadas complexas $z = q + ip$ no espaço de fase. No capítulo seguinte mostraremos como o emprego de estados coerentes pode levar a hamiltoniana quântica a um análogo clássico que habita um espaço complexo homomórfico ao espaço de fase clássico, e como a mecânica clássica de uma partícula pode ser feita a partir desta hamiltoniana complexa. A diferença entre estas duas formulações (real e complexa) reside no fato do elemento móvel da teoria não ser mais uma partícula pontual clássica, mas sim um pacote de onda gaussiano que translada no espaço de fase sob o fluxo hamiltoniano.

Capítulo 3

Estados coerentes do oscilador harmônico

No capítulo anterior descrevemos de forma sucinta o formalismo hamiltoniano, empregado para tratar a mecânica clássica. Ali expusemos como é a dinâmica de uma partícula pontual no espaço de fase das variáveis canonicamente conjugadas de posição e momento e comentamos brevemente que no limite em que o sistema tem um parâmetro característico $s \gg \hbar$, os fenômenos quânticos podem ser bem descritos em termos de quantidades clássicas. Intuitivamente, nesse regime limítrofe da mecânica quântica, podemos postular que a dinâmica de uma função de onda possa ser razoavelmente bem descrita pela propagação direta das amplitudes no espaço de fase, onde cada ponto é guiado por sua trajetória clássica conduzida pelo fluxo hamiltoniano. Se empregamos uma representação no espaço de fases para $|\Psi\rangle$ em $t = 0$, por exemplo a oferecida pela transformação de Wigner (2.0.4), poderíamos determiná-la da seguinte forma:

$$P(q, p, t) = P(q(t), p(t), 0), \quad (3.0.1)$$

onde $q(t)$ e $p(t)$ são trajetórias clássicas no espaço de fase. Essa aproximação desconsidera completamente qualquer interação de natureza quântica, se abstenho de descrever por exemplo interferências e propagação de incertezas; fenômenos intrinsecamente quânticos.

Para refinar essa teoria semiclássica podemos agregar à propagação de um ponto, que carrega consigo uma amplitude associada à função de onda, a interação com regiões vizinhas próximas. Essa é a idéia por trás do propagador de van Vleck, que pode ser demonstrada fazendo uma aproximação quadrática no núcleo do integrando da integral de trajetória

$$K(x_i, x_f, T) = \int d\tilde{\Gamma} e^{-\frac{S_{\tilde{\Gamma}}}{i\hbar}}, \quad (3.0.2)$$

onde $\tilde{\Gamma}$ são todos os caminhos que ligam os pontos extremos de propagação no tempo T , $d\tilde{\Gamma}$ é um elemento infinitesimal apropriado – por exemplo tomando seções infinitesimais de tempo [18]–, e $S_{\tilde{\Gamma}}$ é a ação ao longo de um caminho $\tilde{\Gamma}$.

Ambas as aproximações semiclássicas anteriores são exatas para classes muito restritas de sistemas. A fórmula semiclássica de van Vleck é exata apenas para hamiltonianas quadráticas na posição e no momento, como foi testado no final do primeiro capítulo quando calculamos o propagador de Feynman para a partícula livre e para o oscilador harmônico. Já a aproximação totalmente clássica (3.0.1) só funcionará para uma pequena classe de estados quânticos em sistemas que possibilitem um dinâmica perfeitamente coerente, nos quais fenômenos quânticos tenham expressão nula.

Um caso emergente de sistema coerente quântico ocorre para o oscilador harmônico, em que a evolução temporal gerada pela hamiltoniana

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (3.0.3)$$

garante dinâmica trivial para os autoestados $|z\rangle$ do operador de aniquilação \hat{a} ,

indexados pelo seu próprio autovalor z . Definindo o estado temporalmente evoluído $|z, T\rangle \equiv \widehat{K}_H(T)|z\rangle$, com $\widehat{K}_H(T)$ calculado com a hamiltoniana harmônica, um desses estados é propagado na forma

$$|z, T\rangle = e^{-i\omega T/2}|e^{-i\omega T}z\rangle = e^{-i\omega T/2}|e^{-i\omega T}z, 0\rangle, \quad (3.0.4)$$

equação que será em breve demonstrada (3.1.6). Se calcularmos a função de onda de tal estado na representação de coordenadas, $X(q, z, T) = \langle q|z, T\rangle$, temos:

$$X(q, z, T) = e^{-i\omega T/2}X(q, e^{-i\omega T}z, 0), \quad (3.0.5)$$

que, a menos da fase global $-i\omega T/2$, tem a forma do ansatz clássico (3.0.1), onde a quantidade dinâmica é o próprio autovalor do estado, ao invés de sua coordenada e seu momento. Em verdade, para qualquer representação empregada, a forma clássica da dinâmica é verificada. A estes autoestados $|z\rangle$ do operador \widehat{a} denominamos *estados coerentes*.

Este capítulo se destina ao estudo de algumas propriedades fundamentais e importantes desses estados, que são a chave para entender sua escolha como representação para realizar a dinâmica quântica no espaço de fase. O exemplo acima indica que tais estados têm uma essência clássica mesmo estando dentro do mundo quântico, o que se deve à forma como se dá sua dinâmica, obedecendo à equação (3.0.4). Outros motivos serão explicados ao longo do texto que segue.

3.1 Dinâmica dos estados coerentes

Como mencionado anteriormente, os estados coerentes são construídos como autovalores do operador de aniquilação de quanta do oscilador harmônico

$$\widehat{a}|z\rangle = z|z\rangle, \quad (3.1.1)$$

e de modo geral, como \hat{a} não é hermitiano, os autovalores z são números complexos. Para todos os fins, estamos interessados apenas no caso unidimensional; contudo, existe generalização destes estados para maiores dimensões [4]. Estes estados podem ser decompostos em termos dos autovalores da hamiltoniana harmônica:

$$|z\rangle = \sum_n \varphi_n(z) |n\rangle,$$

onde $\varphi_n(z) = \langle n|z\rangle$ é o estado coerente expressado na base dos autoestados de energia. Pela equação de autovalor (3.1.1), a fórmula de decomposição acima se converte em

$$\hat{a}|z\rangle = \sum_n \varphi_n(z) \hat{a}|n\rangle = \sum_n \varphi_n(z) \sqrt{n}|n-1\rangle = z|z\rangle;$$

que fechado com o *bra* de um autoestado de energia $|m\rangle$ resulta

$$z\varphi_n(z) = \sum_n \varphi_n(z) \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle.$$

Pela relação de ortonormalidade $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$,

$$z\varphi_{n-1}(z) = \varphi_n(z) \sqrt{n}, \quad (3.1.2)$$

que é uma relação de recorrência para os termos $\varphi_n(z)$. Como n é inteiro, temos que $\varphi_m(z) = 0$ se $m < 0$, como esperado. Se definirmos $\varphi_0(z) = C$, uma constante de normalização, a equação (3.1.2) gera o termo geral

$$\varphi_n(z) = C \frac{z^n}{\sqrt{n!}}. \quad (3.1.3)$$

Um estado $|n\rangle$ é expresso como uma função do estado fundamental do

oscilador, $|0\rangle$, na forma

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

o que nos leva a uma expressão alternativa para o estado coerente $|z\rangle$:

$$|z\rangle = \sum_n C \frac{(z\hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = C e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle. \quad (3.1.4)$$

Agora se torna possível o cálculo do fator de normalização, uma vez que seja imposto $\langle z|z\rangle = 1$,

$$\begin{aligned} \langle z|z\rangle &= |C|^2 \langle 0| \exp(z^*\hat{a}) \exp(z\hat{a}^\dagger) |0\rangle \\ &= |C|^2 \langle 0| \exp(|z|^2) \exp(z\hat{a}^\dagger) \exp(z^*\hat{a}) |0\rangle \\ &= |C|^2 \exp(|z|^2) \\ &= 1. \end{aligned}$$

Na passagem da primeira para a segunda linha foi empregada a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [37] para a exponencial dos operadores. Temos então que a menos de uma fase, $C = \exp(-|z|^2/2)$. Escolhendo C como um número real, completamos a equação (3.1.4)

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle. \quad (3.1.5)$$

Naturalmente, esta última expressão é uma consequência imediata de (3.1.1), de maneira que costuma-se empregá-la como uma definição equivalente àquela. A partir de (3.1.5) pode-se obter o *overlap* entre dois estados coerentes:

$$\langle z|z'\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2 + z'z^*\right].$$

Realizar a construção desta representação dos estados coerentes na base dos autoestados de energia é interessante pois ela nos revela que $|z\rangle$ é uma

composição poissoniana dos estados $|n\rangle$ com parâmetro $|z|^2/2$, e esta decomposição nos permite calcular de forma simples a dinâmica quântica desses estados sob ação do oscilador harmônico, já apresentada em (3.0.4). Inicialmente, sabemos que a evolução temporal de $|n\rangle$ é

$$\widehat{K}_H(T) |n\rangle = e^{-i\omega T/2} e^{-in\omega T} |n\rangle,$$

de forma que

$$\begin{aligned} \widehat{K}_H(T) |z\rangle &= \widehat{K}_H(T) e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{-i\omega T/2} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega T} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega T/2} e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{(e^{-i\omega T} z)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega T/2} |e^{-i\omega T} z\rangle. \end{aligned} \tag{3.1.6}$$

Quase toda a dinâmica quântica de $|z\rangle$ está contida em seu autovalor sob a forma $e^{-i\omega T} z$, sendo que o termo estritamente quântico provém do fator $\hbar\omega/2$ da hamiltoniana, cuja origem reside na não-comutação entre \widehat{q} e \widehat{p} ; manifestada pelos operadores de criação e aniquilação, e corresponde à oscilação temporal do estado. Quando olhamos para a forma da função de onda do estado coerente nas representações de momento e coordenadas, $X(p, z, T) = \langle p|z\rangle$ e $X(q, z, T) = \langle q|z\rangle$, respectivamente, entendemos precisamente quem é esse autovalor, e o que ele representa no espaço de fase. Para calcular as funções de onda, empregaremos a equação de autovalor (3.1.1) primeiramente na representação de coordenadas, e a resolveremos para a função $X(q, z, T)$; um cálculo completamente análogo segue para o caso $X(p, z, T)$, que também

pode ser obtido por uma transformação de Fourier em $X(q, z, T)$. Como

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{q} + i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p} \right),$$

temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \langle q | \left(\frac{1}{b} \hat{q} + i \frac{1}{c} \hat{p} \right) | z \rangle &= z \langle q | z \rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{b} q + b \frac{\partial}{\partial q} \right) X(q, z) &= z X(q, z), \end{aligned}$$

onde inserimos os fatores de escala de posição $b = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ e momento $c = \hbar/b = (m\hbar\omega)^{-1/2}$. Estes parâmetros definem as escalas de comprimento e momento, respectivamente, e seu produto é \hbar . Eles podem funcionar como sintonizadores entre a representação de momento, quando $c \rightarrow 0$, e a representação de coordenadas, para $b \rightarrow 0$ [38].

A solução dessa equação diferencial é dada pela função de onda

$$X(q, z) = C_z e^{-\frac{q^2}{2b^2} + \sqrt{2} \frac{qz}{b}}, \quad (3.1.7)$$

onde C_z é uma constante de normalização. Integrando sobre a reta real $q \in (-\infty, \infty)$ a densidade de probabilidade associada à função acima e igualando à unidade,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |X(q, z)|^2 dq &= |C_z|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{q^2}{b^2} + 2\sqrt{2} \frac{q}{b} \Re[z]} dq \\ &= |C_z|^2 e^{2(\Re[z])^2} b \sqrt{\pi} \\ &= 1. \end{aligned}$$

Escolhemos $C_z = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-z \Re[z]}$, onde $\Re[z] = (z + z^*)/2$. A função de

onda resultante pode ser finalmente expressa na forma gaussiana

$$X(q, z) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{q}{b\sqrt{2}} - z\right)^2 + \frac{z}{2}(z - z^*)}, \quad (3.1.8)$$

cujo parceiro na representação de momentos é

$$X(p, z) = (\pi c^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{p}{c\sqrt{2}} + iz\right)^2 - \frac{z}{2}(z + z^*)}. \quad (3.1.9)$$

Com estas funções de onda calcularemos o valor esperado e o desvio quadrático médio da posição q e do momento p em um estado coerente. Segue o cálculo para a posição; para o momento o cálculo não será feito explicitamente, mas o resultado será exposto por completeza do texto. Para o valor médio da posição avaliamos a seguinte integral gaussiana:

$$\begin{aligned} \langle \hat{q} \rangle \equiv \langle z | \hat{q} | z \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} X(q, z)^* q X(q, z) dq \\ &= \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} q e^{-\frac{1}{b^2}(q^2 + 2b\Re[z](-\sqrt{2}q + b\Re[z]))} dq \\ &= b\sqrt{2}\Re[z]. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Para o momento,

$$\langle \hat{p} \rangle = c\sqrt{2}\Im[z]. \quad (3.1.11)$$

Um resultado interessante surge em (3.1.10) e (3.1.11): a parte real do autovalor é proporcional ao centro do pacote gaussiano (3.1.8), enquanto que a parte imaginária é proporcional ao centro do pacote gaussiano (3.1.9). Ou seja, o autovalor é a quantidade complexa

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_z}{b} + i \frac{p_z}{c} \right), \quad (3.1.12)$$

onde $q_z = \langle \hat{q} \rangle$ e $p_z = \langle \hat{p} \rangle$, e representa o centro do estado gaussiano cujas larguras provindas de (3.1.8) e (3.1.9) são b ao longo do eixo de posição e c

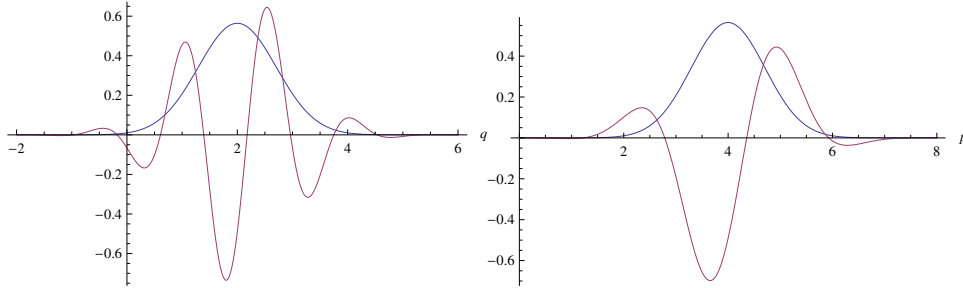


Figura 3.1.1: Função de onda do estado coerente $z = (x_0/b + ip_0/c) / \sqrt{2}$, com $x_0 = 2$, $p_0 = 4$ e $b = c = 1$. Acima, distribuição de probabilidade e parte real da função de onda $X(q, z)$ – representação de coordenada. Abaixo, distribuição de probabilidade e parte real da função de onda $X(p, z)$ – representação de momento. O estado está centrado sobre os valores x_0 e p_0 .

ao longo do eixo de momento.

Colocando no espaço de fase, podemos elevar a estrutura simplética do plano q, p e gerar a variável complexa $z = (q/b + ip/c) / \sqrt{2}$ que indexa os centros dos estados coerentes. Isto faz corresponder a cada ponto do espaço de fase um estado coerente, gaussiano, com parâmetros de largura constantes. Um estado coerente está representado na Figura 3.1.1.

3.2 Propriedades algébricas dos estados coerentes

A construção da relação unívoca entre o espaço de fase, homeomórfico a \mathbb{R}^2 e o espaço dos estados coerentes, homeomórfico ao plano complexo \mathbb{C} , gera uma poderosa ferramenta sobre a qual pode-se embasar métodos exatos e semiclassicos para calcular a dinâmica quântica, permitindo a construção da representação dos estados coerentes. Para que seja possível que um conjunto de estados quânticos $|\alpha\rangle$, com α sendo tanto um índice discreto quanto um

contínuo, forneça uma representação para escrevermos funções de onda

$$\Psi(\alpha) = \langle \alpha | \Psi \rangle,$$

é imprescindível que estes estados forneçam uma realização do operador identidade, usualmente denominada relação de completeza,

$$\hat{1} = \int d\alpha F(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha|,$$

onde no caso discreto a integração se transforma em uma soma sobre os estados. A função arbitrariamente inserida, $F(\alpha)$, pode ser, por exemplo, uma função peso ou densidade relativa à distribuição dos estados no espaço de parâmetros conveniente.

É possível verificar por integração sobre o plano complexo que a relação de completeza

$$\hat{1} = \int \frac{d\Re[z] d\Im[z]}{\pi} |z\rangle\langle z|$$

reproduz aquela empregada para os autoestados de energia. Em vista da definição da variável z em (3.1.12), o operador identidade assume a forma

$$\hat{1} = \int d^2z |z\rangle\langle z|, \quad (3.2.1)$$

onde definimos o elemento de área $d^2z = dq_z dp_z / 2\pi\hbar$.

A base composta pelos estados coerentes, que nos permite escrever o operador identidade acima, é supercompleta. A grosso modo, isto significa dizer que o contínuo de estados no plano complexo contém informação redundante sobre a função de onda. Esta propriedade dos estados coerentes é um grande atrativo para seu emprego em cálculos numéricos. O uso de uma quantidade finita de estados, que amostram uma região adequada do espaço de fase, é suficiente para que não haja grande perda de informação sobre o pacote de onda a ser evoluído, bastando que estes estados alocados numericamente sejam

suficientes para cobrir, no espaço de fase, a região onde ocorre a dinâmica.

Com estes estados é possível escrever funções de onda na forma

$$\Psi(z^*, z) = \langle z | \Psi \rangle, \quad (3.2.2)$$

e empregá-las para resolver a equação de Schrödinger de maneira exata ou aproximada. A forma (3.2.2) também é uma boa candidata para representar os estados quânticos no espaço de fase, tal qual a transformação de Wigner (2.0.4). A dependência da função de onda do estado $|\Psi\rangle$ nas variáveis complexas z e z^* foi explicitamente escrita, pois na construção dos estados coerentes existe um termo de normalização dependente de $|z|^2$, logicamente uma função de ambas. A porção da função de onda dependente de z está implícito em $\Psi(z^*, z)$ somente através desta normalização, uma vez que, como podemos notar de (3.1.8) e (3.1.9), os *bras* $\langle z|$ dependem somente de z^* pois as funções de onda do *ket* são da forma $X(q, z)$.

Apesar desta não-analiticidade da função de onda¹, genericamente escreveremos ao longo do texto as funções de onda como $\Psi(z^*)$, omitindo assim uma dependência via fator de normalização. Não devemos pensar em momento algum que se tratam de funções holomórficas na variável z^* , apesar de existir uma representação similar à dos estados coerentes que o é. Esta representação holomórfica é construída a partir de estados coerentes não-normalizados – $C = 1$ em (3.1.4)–, onde abrimos mão da norma em prol da analiticidade. As funções de onda são da forma $\Psi'(z^*) = \langle z | \Psi \rangle$ e aqui diferenciamos os estados normalizados $|z\rangle$ dos não-normalizados $|z\rangle$ pela notação. A esta representação holomórfica no índice dos estados coerentes denominamos representação de Bargmann [39].

Reescrever a equação de Schrödinger empregando os estados coerentes é tarefa simples. Tomando (2.0.2), fechando à esquerda com um estado $\langle \tilde{z} |$ e

¹Ela não satisfaz a condição de Cauchy-Riemann $\partial\Psi/\partial z^* = 0$.

inserindo uma identidade no lado direito da igualdade, resultamos com

$$\langle \tilde{z} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi, t \rangle = \int d^2 z \langle \tilde{z} | \hat{H} | z \rangle \langle z | \Psi, t \rangle. \quad (3.2.3)$$

Dois fatos importantes entram em cena neste momento. Como o estado coerente $|\tilde{z}\rangle$ não depende do tempo, podemos passá-lo para dentro da derivação temporal; além disso, escrevendo a hamiltoniana na forma ordenada

$$H_{ord}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = \sum_{i,j} h_{ij} (\hat{a}^\dagger)^i (\hat{a})^j \quad (3.2.4)$$

e empregando o fato de $|\tilde{z}\rangle$ ser autoestado de \hat{a} , seu elemento de matriz tem forma simples dada por

$$\langle \tilde{z} | \hat{H} | z \rangle = \langle \tilde{z} | z \rangle H_{ord}(\tilde{z}^*, z), \quad (3.2.5)$$

obtida por substituição dos operadores pelos autovalores em (3.2.4). Assim, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\tilde{z}^*, t) = \int d^2 z \langle \tilde{z} | z \rangle H_{ord}(\tilde{z}^*, z) \Psi(z^*, t), \quad (3.2.6)$$

que é a equação dinâmica de $|\Psi, t\rangle$ na representação dos estados coerentes do oscilador harmônico.

Resolver matematicamente esta equação dinâmica e encontrar uma solução em forma fechada não é mais simples do que resolvê-la na representação de coordenada ou de momento. A vantagem dessa forma reside no fato da entidade fundamental da representação ser um análogo quântico do ponto clássico no espaço de fase, um estado gaussiano de mínima incerteza. Aqui, não lidamos com estados completamente determinados no espaço e momento indefinido (como um autoestado de \hat{q}) ou vice-versa (um autoestado de \hat{p}), mas com algo que tem aspecto mais similar ao de função de onda, uma entidade delocalizada.

Usualmente, soluções para a equação (3.2.6) são buscadas numericamente

a partir de uma função de onda inicial $\Psi(z^*, 0)$, por integração direta. Para realizar tal procedimento necessitamos discretizar o espaço de fase, ou seja, granular estados coerentes sobre o plano complexo empregando algum procedimento: pontos regularmente espaçados [23], pontos aleatoriamente alocados segundo alguma distribuição [29], ou algum outro método; o que transforma a integral formal em uma soma discreta sobre esses estados. Naturalmente a quantidade de estados necessários cresce com o intervalo de tempo apropriado, pois devem haver pontos distribuídos em todas as regiões em que o pacote de onda faz seu passeio quântico no espaço de fase, e também cresce com a dimensão e complexidade do sistema de interesse. Por exemplo, para integrar a equação de movimento para uma partícula com alto valor de momento lançada em uma rede cristalina, é necessária uma quantidade muito maior de estados do que simular a mesma partícula em um simples poço unidimensional de potencial. Isso ocorre devido à necessidade de descrever o espalhamento em cada átomo do cristal, em contraste a um movimento altamente confinado em uma região do espaço.

Para movimentos quânticos onde valha a condição de semiclassicalidade $s \gg \hbar$, a dinâmica do pacote de onda quântico deve se concentrar em uma região clássica do espaço de fase, ou seja, deve aproximadamente seguir o fluxo hamiltoniano no sentido em que explicitamos anteriormente. Seria interessante se os estados coerentes empregados para resolver a equação de Schrödinger pudessem acompanhar esse movimento clássico, pois isso garantiria que, em boa aproximação, um conjunto de estados alocados próximos ao pacote de onda inicial descreveria o movimento quântico. Dotar de dinâmica estes pontos quânticos parece uma idéia simples, mas somente recentemente este método foi proposto para o cálculo dinâmico de funções de onda [40, 41]. Também interessante é que este procedimento continua valendo para s da ordem de \hbar .

Mostraremos agora como apropriar dinâmica aos estados coerentes que constituem a base de estados (3.2.1).

3.3 Estados coerentes congelados dinâmicos

A forma do operador identidade (3.2.1) nada contém de informação sobre evolução temporal. Podemos encará-la como uma expressão instantânea da identidade, valendo sempre que, a cada ponto do espaço de fase clássico, corresponde um estado coerente, com escalas constantes. Dessa maneira, qualquer transformação realizada no espaço de fase, ou seja, nas variáveis q_z e p_z dos estados coerentes, que leve o espaço de fase a ele mesmo preservando áreas, manterá a forma do operador identidade fixa. Ora, qualquer movimento como os descritos pelas equações de Hamilton (2.1.5), mantém o espaço de fase inalterado, não muda sua forma, apenas translada pontos para coordenadas diferentes, preservando a área de regiões do espaço. Devemos esperar portanto que a relação de completeza seja preservada por dinâmicas hamiltonianas nas variáveis q_z e p_z .

Calculamos anteriormente a dinâmica quântica de um estado coerente sob a ação do oscilador harmônico, e mostramos que podemos interpretá-la como a dinâmica do próprio índice do estado (3.0.4), ou seja, q_z e p_z se movem, sujeitos a um movimento que, por ser hamiltoniano, preserva o operador identidade. Esperamos assim que toda a mecânica quântica calculada a partir da equação (3.2.3) também fique preservada com o decorrer desta dinâmica. De forma geral, podemos escrever portanto

$$\hat{1}(t) = \int d^2z(t) |z(t)\rangle\langle z(t)|, \quad (3.3.1)$$

contanto que a dinâmica de z seja hamiltoniana. Emerge aqui uma questão que concerne como definir essa dinâmica clássica. Existem três possibilidades atualmente estudadas e empregadas:

1. A forma de Weyl, que consiste em tomar diretamente a hamiltoniana clássica adaptada às variáveis complexas z e z^* , empregada para o

desenvolvimento da teoria semiclássica de Herman-Kluk [42, 43, 44] e também na obtenção do propagador de van Vleck (1.0.1);

2. O símbolo-P, provindo da representação de Glauber-Sudarshan [45, 46], definido por

$$\hat{H} = \int d^2z |z\rangle H_P(z^*, z) \langle z|,$$

e a equação dinâmica provém de H_P revertido para variáveis as clássicas q e p ;

3. O símbolo-Q, que emerge diretamente dos termos diagonais do elemento de matriz normalizado (3.2.5), $H_Q \equiv H_{ord}(z^*, z)$, que é empregado na teoria semiclássica BAKKS.

Na equação de Schrödinger na representação de estados coerentes (3.2.3) surge o elemento de matriz da hamiltoniana entre dois estados coerentes. Isto sugere que a escolha mais natural para atribuir dinâmica aos estados seja pela terceira opção das listadas acima, o símbolo-Q do operador. Se a forma da hamiltoniana naquela equação fosse uma das outras duas apresentadas acima, a escolha imediata seria diferente.

Para determinar as equações que regem tal dinâmica, devemos ter em vista aquelas obedecidas pelas variáveis no espaço de fase e fazer a conexão com q e p através do número complexo z dado por (3.1.12). Inicialmente, vejamos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q} &= \frac{1}{b\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z^*} \right), \\ \frac{\partial}{\partial p} &= \frac{i}{c\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z^*} \right); \end{aligned}$$

de maneira que

$$\begin{aligned}\dot{z} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{b} \dot{q} + \frac{i}{c} \dot{p} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{b} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{i}{c} \frac{\partial H}{\partial q} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial H}{\partial z^*},\end{aligned}$$

em que a hamiltoniana na segunda linha difere daquela na primeira linha somente pelas variáveis empregadas como argumento. Um cálculo similar revela que para z^* basta tomar o complexo conjugado da equação acima, ou seja, as duas equações em variáveis reais se convertem em uma para uma variável complexa; sendo a complexo conjugada da equação acima, redundante. Assim,

$$\begin{aligned}\dot{z} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial H}{\partial z^*} \\ \dot{z}^* &= -\frac{1}{i\hbar} \frac{\partial H}{\partial z}\end{aligned}\tag{3.3.2}$$

são as equações adequadas de movimento para o centro dos pacotes gaussianos com larguras constantes, onde aqui $H(z^*, z) = \langle z | \hat{H} | z \rangle$. Para ilustrar estas trajetórias, na Figura 3.3.1 exibimos uma pacote gaussiano espalhado em um potencial quártico acompanhado de um conjunto de trajetórias de estados coerentes localizado em uma região próxima, guiados pelas equações (3.3.2).

Denominamos estes estados coerentes dinâmicos por congelados pois somente o seu centro tem mobilidade no espaço, enquanto sua forma gaussiana mantém o mesmo aspecto. Esta nomenclatura provém de uma aproximação semiclássica denominada FGA (*frozen gaussian approximation*), em que estados gaussianos são propagados somente pelo deslocamento de seu centro [47]. Em essência, este método acopla amplitudes vinculadas a um conjunto de gaussianas congeladas através da equação de Schrödinger para obtermos uma função de onda exata ao final do processo.

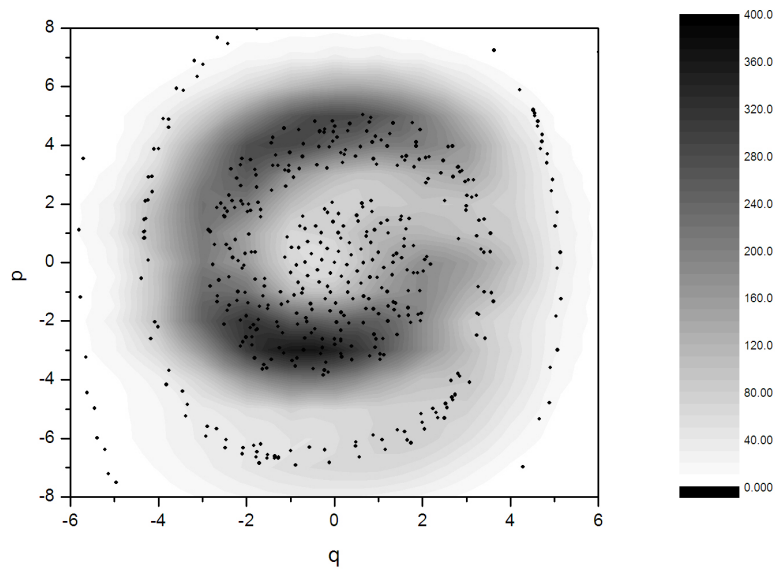


Figura 3.3.1: Amplitude da função de onda de um estado coerente propagado em um potencial quártico, ilustrada no espaço de fase clássico. Os pontos representam o final das trajetórias de um grid inicialmente alocado próximo ao estado coerente. As trajetórias acompanham a região de maiores amplitudes. A evolução quântica foi unitária, porém a escala de amplitudes é arbitrária.

3.4 Trajetórias complexas

As equações de movimento (3.3.2) obtidas anteriormente aparecem também quando calculamos diretamente o limite semiclássico do elemento de matriz do operador de evolução temporal na representação dos estados coerentes:

$$\langle z_f | \widehat{K}_H(T) | z_i \rangle \approx \sum_{\Gamma} \sqrt{\frac{\partial z^*(0)}{\partial z^*(T)}} e^{-\frac{1}{i\hbar} S - \frac{1}{i\hbar} \mathcal{I}} e^{-\frac{1}{2} |z_f|^2 - \frac{1}{2} |z_i|^2}, \quad (3.4.1)$$

que é análogo ao propagador de van Vleck. Nesta expressão

$$S(z_i, z_f^*, T) = \int^T \left[\frac{i\hbar}{2} (z^* \dot{z} - \dot{z}^* z) - H(z^*, z) \right] dt - \frac{i\hbar}{2} [z_f^* z(T) + z^*(0) z_i] \quad (3.4.2)$$

é a ação complexa ao longo das trajetórias Γ que satisfazem (3.3.2) condicionadas aos contornos

$$\begin{aligned} z(0) &= z_i, \\ z^*(T) &= z_f^*, \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

e

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2} \int^T \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}} dt$$

é uma correção de segunda ordem à ação provinda da classicalização da hamiltoniana. Uma demonstração formal desta equação é feita em [18], onde é realizada uma aproximação quadrática na integral de trajetória (3.0.2) na representação de estados coerentes. Outras duas abordagens para o cálculo do propagador semiclássico (3.4.1) são realizadas em [48], empregando argumentos geométricos à formulação do princípio variacional, onde se demonstra que o funcional ação tem a forma (3.4.2), e em [19], a partir de um *ansatz* WKB para o propagador. A fórmula semiclássica (3.4.1) é a forma de BAKKS

para o propagador semiclássico na representação dos estados coerentes.

Para estas condições de contorno, surge um problema similar à determinação dos momentos no caso das trajetórias reais: quem são, matematicamente, as variáveis conjugadas $z^*(0)$ e $z(T)$? Para resolver este problema no caso das trajetórias clássicas reais foi usado o artifício do funcional de ação. Procederemos da mesma forma para o caso complexo.

Suponha que sejam realizadas variações sobre as variáveis independentes na ação: δz_i , δz_f^* e δT . Isto induz variações δz_i^* e δz_f nas outras duas variáveis, além de uma variação $\delta z(t)$ e $\delta z^*(t)$ na própria trajetória. A variação da ação sob tal mudança é dada por

$$\begin{aligned} \delta S = & \int^T dt \\ & \left[\frac{i\hbar}{2} (\delta z^* \dot{z} + z^* \delta \dot{z} - \delta \dot{z}^* z - \dot{z}^* \delta z) - \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z^*} \delta z^* - \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z} \delta z \right] \\ - \frac{i\hbar}{2} & (\delta z_f^* z_f + z_f^* \delta z_f + \delta z_i^* z_i + z_i^* \delta z_i) + \delta T \left[\frac{i\hbar}{2} (z_f^* \dot{z}_f - \dot{z}_f^* z_f) - H(z_f^*, z_f) \right]. \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

A integração temporal dos primeiros termos entre parênteses pode ser realizada por partes da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \int^T z^* \delta \dot{z} dt &= z_f^* \delta z(T) - z_i^* \delta z(0) - \int^T \dot{z}^* \delta z dt, \\ - \int^T \delta \dot{z}^* z dt &= -\delta z^*(T) z_f + \delta z^*(0) z_i + \int^T \delta z^* \dot{z} dt. \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

Para concluir este cálculo precisamos avaliar qual é a variação nos extremos inicial e final da trajetória induzida por uma variação temporal. Assim, um ponto final z_f é deslocado por uma quantidade

$$\begin{aligned} \delta z_f &= \delta z(T) + \dot{z}_f \delta T, \\ \delta z_f^* &= \delta z^*(T) + \dot{z}_f^* \delta T, \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

onde a segunda equação é equivalente à primeira por conjugação complexa. No tempo inicial a variação no tempo é nula, de forma que z_i não sofre a influência da variação temporal, resultando em

$$\begin{aligned}\delta z_i &= \delta z(0) \\ \delta z_i^* &= \delta z^*(0).\end{aligned}\tag{3.4.7}$$

Inserindo (3.4.5), (3.4.6) e (3.4.7) em (3.4.4) resultamos com

$$\begin{aligned}\delta S = \int^T \left[\left(i\hbar \dot{z} - \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z^*} \right) \delta z^* - \left(i\hbar \dot{z}^* + \frac{\partial H(z^*, z)}{\partial z} \right) \delta z \right] dt \\ - i\hbar (\delta z_f^* z_f + z_i^* \delta z_i) - H(z_f^*, z_f) \delta T.\end{aligned}\tag{3.4.8}$$

O princípio de Hamilton exige que tal variação seja nula, de maneira que o integrando se anula identicamente fornecendo as equações de movimento (3.3.2). A independência com relação às variações nas variáveis livres, δz_f^* , δz_i e δT , fornece as seguintes equações para o par de variáveis remanescentes e para a energia final do movimento:

$$\begin{aligned}-i\hbar z_f &= \frac{\partial S}{\partial z_f^*}, \\ -i\hbar z_i^* &= \frac{\partial S}{\partial z_i}, \\ H(z_f^*, z_f) &= -\frac{\partial S}{\partial T}.\end{aligned}\tag{3.4.9}$$

Se o movimento for conservativo, vale $\partial S/\partial T = -E$, onde E é a energia do movimento.

Estas equações têm uma sutileza que pode passar despercebida mas que representa um obstáculo muito importante em cálculos que empreguem estas trajetórias complexas. Uma vez especificados os extremos z_i e z_f^* , nada garante que a equação que define z_i^* conduza a um resultado que seja de fato o complexo conjugado de z_i , e algo novo surge aqui, pois as soluções $z(t)$ e

$z^*(t)$ devem ser tratadas como variáveis independentes, ou seja, em geral

$$(z^*(t))^* \neq z(t). \quad (3.4.10)$$

A origem deste problema reside justamente no conjunto de condições de contorno (3.4.3) que especifica as trajetórias. Uma trajetória real no espaço de fase exige duas condições para ser completamente especificada, ficando as outras duas subjugadas pelo funcional de ação, ou por um funcional equivalente através de uma transformação de Legendre². No caso das condições de contorno (3.4.3), temos na verdade quatro condições de contorno, uma complexa inicial e outra complexa final. Contornar esta sobre-determinação faz com que pontos que supostamente deveriam ser conjugados se desdobrem, o que nos impele a considerar z e z^* como trajetórias independentes, e por conseguinte, variáveis independentes dobrando a dimensionalidade do espaço de fase. Abordaremos este fenômeno futuramente. Para o método dos estados coerentes acoplados, como será demonstrado em breve, estaremos sempre lidando com trajetórias em que z_i^* é, de fato, o conjugado de z_i , e portanto z_f^* é o conjugado de z_f , de forma a eliminarmos por construção este problema da dimensionalização dobrada do espaço de fase. Nesse caso a única condição de contorno é dada no tempo inicial: $z(0) = z_i$, sendo a condição complexo conjugada a ela $z^*(0) = z_i^*$.

Para definir a matriz tangente em termos das variáveis complexas procedemos de forma similar à real, conectando variações nos extremos finais das trajetórias, z_f e z_f^* , a variações nos extremos iniciais das mesmas, z_i e z_i^* :

$$\begin{pmatrix} \delta z_f \\ \delta z_f^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta z_f}{\delta z_i} & \frac{\delta z_f}{\delta z_i^*} \\ \frac{\delta z_f^*}{\delta z_i} & \frac{\delta z_f^*}{\delta z_i^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z_i \\ \delta z_i^* \end{pmatrix},$$

²Estas transformações de Legendre são sempre provindas de uma transformação canônica que traduza uma condição de contorno em um dos extremos temporais, por exemplo a coordenada final, para outra condição no mesmo extremo temporal, como o momento final.

e então

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} M_{zz} & M_{z^*z} \\ M_{zz^*} & M_{z^*z^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial z_f}{\partial z_i} & \frac{\partial z_f}{\partial z_i^*} \\ \frac{\partial z_f^*}{\partial z_i} & \frac{\partial z_f^*}{\partial z_i^*} \end{pmatrix}, \quad (3.4.11)$$

onde empregamos a letra \mathbf{M} maiúscula para diferenciá-la da matriz real \mathbf{m} , com caractere minúsculo. É imediato notar que esta matriz é hermitiana. Criamos o vetor $\chi = (z, z^*)^T$ com as coordenadas complexas. Realizando uma variação nas coordenadas de uma trajetória a tempo fixo, uma variação resultante na hamiltoniana semiclássica $H \equiv H(z^*, z)$ é dada por

$$\delta H = (\nabla_{\chi}^T H) \delta \chi.$$

Levando estas variações às equações de movimento complexas (3.3.2) temos:

$$\delta \dot{\chi} = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{J} \nabla_{\chi} (\delta H) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{J} (\nabla_{\chi} \nabla_{\chi}^T H) \delta \chi,$$

que pode ser reescalada em termos de δz_i e δz_i^* para obter

$$\dot{\mathbf{M}} = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{J} \mathbf{H}_{hess} \mathbf{M}, \quad (3.4.12)$$

onde a hessiana é calculada em termos das componentes de χ . Esta equação (3.4.12) é equivalente a (2.3.4) pela mudança de coordenadas, apenas adicionada do fator de Dirac $i\hbar$, o que implica que a condição inicial também é igual à matriz identidade $\mathbf{M}(0) = \mathbf{1}$. Uma mudança na ordem das variáveis em χ adiciona um sinal negativo ao lado direito da equação dinâmica de \mathbf{M} , o que corresponde a uma conjugação complexa das coordenadas. Para uma análise mais detalhada vide [18]. A partir de (3.4.11) reconhecemos na fórmula semiclássica (3.4.1) o prefator $\frac{\partial z^*(0)}{\partial z^*(T)} = 1/M_{z^*z^*}$ com o elemento da matriz tangente calculado no instante $t = T$.

3.5 Exemplos

As equações de movimento nas variáveis complexas (3.3.2) são análogas às das com variáveis reais (2.1.5), bem como as equações para a ação e a matriz tangente. Para ilustrá-las, vamos repetir os exemplos já mostrados do oscilador harmônico e da partícula livre neste formalismo complexo.

3.5.1 Oscilador harmônico

A hamiltoniana harmônica escrita em termos dos operadores de criação e aniquilação é $\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2)$, o que nos leva a um elemento de matriz diagonal dado por $H(z^*, z) = \hbar\omega (z^* z + 1/2)$. As equações de movimento são, então, dadas por

$$\begin{aligned}\dot{z} &= -i\omega z, \\ \dot{z}^* &= i\omega z^*.\end{aligned}$$

Dado um conjunto de condições de contorno $z(0) = z_i$ e $z^*(T) = z_f^*$ podemos resolver as equações acima para obter

$$\begin{aligned}z(t) &= z_i e^{-i\omega t}, \\ z^*(t) &= z_f^* e^{i\omega(t-T)},\end{aligned}\tag{3.5.1}$$

o que nos resulta um simples caso em que ambas as equações estão desacopladas. A ação é dada a partir de (3.4.2), e resulta

$$\begin{aligned}S(z_i, z_f^*, T) &= \int_0^T \left[\frac{i\hbar}{2} (z^* \dot{z} - \dot{z}^* z) - H(z^*, z) \right] dt - \frac{i\hbar}{2} [z_f^* z(T) + z^*(0) z_i] \\ &= -\frac{\hbar\omega T}{2} - i\hbar z_i z_f^* e^{-i\omega T}.\end{aligned}\tag{3.5.2}$$

As equações acessórias (3.4.9) nos fornecem as condições complementares

$$\begin{aligned} z(T) &= z_i e^{-i\omega T}, \\ z^*(0) &= z_f^* e^{-i\omega T}, \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

que satisfazem ambas (3.5.1) e (3.5.3) são satisfeitas. A matriz tangente será obtida por integração direta de (3.4.12). A hessiana da hamiltoniana complexa é dada por

$$\mathbf{H}_{hess} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

de maneira que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{M}} &= \frac{1}{i\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar\omega \\ \hbar\omega & 0 \end{pmatrix} \mathbf{M} \\ &= -i\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{M}, \end{aligned}$$

com solução

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}.$$

Esta solução poderia ter sido obtida diretamente a partir da definição (3.4.11).

Estes elementos estritamente clássicos calculados podem ser aplicados à fórmula (3.4.1) com a finalidade de se determinar o propagador quântico entre dois estados coerentes. Um cálculo inicial simples nos mostra que $\mathcal{I} = \hbar\omega T/2$, de modo que temos:

$$\begin{aligned} \langle z_f | \widehat{K}_H(T) | z_i \rangle &= \frac{1}{\sqrt{M_{z^* z^*}}} e^{-\frac{1}{i\hbar} S - \frac{1}{i\hbar} \mathcal{I}} e^{-\frac{1}{2}|z_f|^2 - \frac{1}{2}|z_i|^2} \\ &= e^{-i\omega T/2} e^{z_i z_f^* e^{-i\omega T} - \frac{1}{2}|z_f|^2 - \frac{1}{2}|z_i|^2} \\ &= e^{-i\omega T/2} \langle z_f | e^{-i\omega T} | z_i \rangle. \end{aligned}$$

Este resultado é exato, como pode ser visto projetando a equação (3.0.4) em $|z_f\rangle$.

3.5.2 Partícula livre

A hamiltoniana quântica da partícula livre $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ escrita como uma função dos operadores de criação e aniquilação é dada por

$$\hat{H} = \frac{c^2}{4m} (1 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2),$$

o que nos resulta um elemento diagonal de matriz

$$H(z^*, z) = c^2 (1 - (z^* - z)^2) / 4m.$$

As equações de Hamilton complexas são facilmente calculadas:

$$\dot{z} = \dot{z}^* = \frac{ic^2}{2m\hbar} (z^* - z).$$

A partir das mesmas condições de contorno que demos ao oscilador harmônico anterior, integramos estas equações para obter

$$\begin{aligned} z(r) &= \beta z_i + (1 - \beta) (z_f^* r + z_i (1 - r)) \\ z^*(r) &= \beta z_f^* + (1 - \beta) (z_f^* r + z_i (1 - r)), \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

e a energia do movimento é a constante $H(z^*, z) = c^2 (1 - \beta^2 (z_i - z_f^*)^2) / 4m$, onde definimos $\beta = (1 - c^2 T / 2im\hbar)^{-1}$ e $r = t/T$ por conveniência, com T o instante final de evolução temporal. Para calcular a ação complexa basta substituir a variável temporal por r em (3.4.2) e obtemos

$$S(z_i, z_f^*, T) = -\frac{i\hbar}{2\beta} (\beta - 1) - \frac{i\hbar}{2} [z_f^{*2} + z_i^2 - \beta (z_f^* - z_i)^2].$$

Quanto à matriz tangente, podemos calculá-la diretamente a partir da solução para as trajetórias. Para tanto precisamos determinar $z_i^* \equiv z^*(0)$ e escrever z_f^* em termos dele. O resultado é

$$z_f^* = \frac{1}{\beta} [z_i^* - (1 - \beta) z_i],$$

o que nos leva a uma variante das equações (3.5.4) para as trajetórias:

$$\begin{aligned} z(r) &= \beta z_i + \frac{(1 - \beta)}{\beta} [z_i^* r + z_i (\beta - r)] \\ z^*(r) &= z_i^* - (1 - \beta) z_i + \frac{(1 - \beta)}{\beta} [z_i^* r + z_i (\beta - r)]. \end{aligned}$$

Assim, por derivação direta em relação a z_i e z_i^* temos

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1-\beta}{\beta} r & -\frac{1-\beta}{\beta} r \\ r \frac{1-\beta}{\beta} & 1 + \frac{1-\beta}{\beta} r \end{pmatrix}.$$

Para calcularmos o propagador semiclássico entre os estados coerentes $|z_i\rangle$ e $|z_f\rangle$ fazemos uso novamente da expressão semiclássica (3.4.1). Para a partícula livre, $\mathcal{I} = i\hbar(1 - \beta)/\beta$, de modo que

$$\begin{aligned} \langle z_f | \widehat{K}_H(T) | z_i \rangle &= \frac{1}{\sqrt{M_{z^* z^*}}} e^{-\frac{1}{i\hbar} S - \frac{1}{i\hbar} \mathcal{I}} e^{-\frac{1}{2} |z_f|^2 - \frac{1}{2} |z_i|^2} \\ &= \beta^{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{i\hbar} \left(\frac{i\hbar}{2\beta} (\beta - 1) + \frac{i\hbar}{2} [z_f^{*2} + z_i^2 - \beta (z_f^* - z_i)^2] \right) + \frac{1}{i\hbar} \frac{i\hbar}{2\beta} (\beta - 1)} e^{-\frac{1}{2} |z_f|^2 - \frac{1}{2} |z_i|^2} \\ &= \beta^{\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{\beta} (\beta - 1)} e^{\frac{1}{2} [z_f^* (z_f^* - z_f) + z_i (z_i - z_i^*) - \beta (z_f^* - z_i)^2]}. \end{aligned}$$

Revertendo para as variáveis usuais:

$$\begin{aligned} \langle z_f | \widehat{K}_H(T) | z_i \rangle &= \\ &= \frac{e^{c^2 T / 2im\hbar} e^{-\frac{|z_f|^2}{2} - \frac{|z_i|^2}{2}}}{\sqrt{1 - c^2 T / 2im\hbar}} \exp \left\{ \frac{z_i z_f^* - c^2 T (z_f^{*2} + z_i^2) / 4im\hbar}{1 - c^2 T / 2im\hbar} \right\}, \end{aligned}$$

temos o resultado exato.

3.6 O interesse nos estados coerentes

Poder expressar o operador identidade em termos de um conjunto de estados quânticos é uma condição imperiosa para podermos empregar este conjunto para resolver a equação dinâmica de Schrödinger. O conjunto dos estados coerentes do oscilador harmônico tem essa propriedade, e obtivemos a equação dinâmica na representação oferecida por eles (3.2.3). A vantagem em lidarmos com estes estados é que eles fornecem um elo entre a física clássica e a quântica, o que nos permite empregá-los como uma poderosa ferramenta para realizar a dinâmica quântica usando um pano de fundo clássico, de fácil computabilidade, o que é vantajoso.

Para inserir de um modo natural a mecânica clássica subjacente, dotamos estes estados de dinâmica, fazendo o centro dos pacotes gaussianos terem movimento segundo as equações (3.3.2), porém mantendo a forma física do estado no espaço de fase inalterada. Ou seja, estabelecemos uma dinâmica clássica a uma entidade quântica, gerando uma base dependente do tempo. Esta dinâmica pode, e será, empregada para transformar (3.2.3) em uma equação equivalente que apresenta algumas vantagens do ponto de vista técnico em relação à primeira.

No método original [19, 18] são usadas como base trajetórias reais no espaço de fase, apenas reescritas em termos da variável complexa z e da hamiltoniana classicalizada (3.2.5). Tais trajetórias são construídas a partir de condições iniciais $z(0) = z_i$ somente. Contudo, em cálculos semiclássicos um tipo similar de trajetória aparece, guiada pelas mesmas equações de movimento mas determinadas pelas condições de contorno (3.4.3). Estas condições, como foi anteriormente explicado, levam a uma duplicação do espaço de fase e ao desvínculo entre as trajetórias z e z^* por conjugação complexa (3.4.10).

Demonstraremos mais adiante que a equação dinâmica semiclássica obtida do método dos estados coerentes acoplados é similar à equação (3.4.1), apenas com a substituição das condições de contorno pela condição inicial que determina uma trajetória real. Buscamos neste trabalho uma equação dinâmica exata que preencha a lacuna entre a equação de Schrödinger e a equação semiclássica.

Capítulo 4

O método dos estados coerentes acoplados

No capítulo anterior desenvolvemos um método que permite colocar a equação de Schrödinger na representação dos estados coerentes do oscilador harmônico, no caso de uma base estática de estados. Uma vez que existe uma relação de equivalência entre estados coerentes sob ação do fluxo hamiltoniano no espaço de fase e o próprio espaço de fase, é perfeitamente possível construir uma base de estados dinâmica. A hamiltoniana que rege o movimento dos estados advém dos elementos diagonais da matriz $H(z^*, z) = \langle z | \hat{H} | z \rangle$, que aparecem na equação de movimento (3.3.2).

Desenvolveremos neste capítulo a teoria que emprega estes estados dinâmicos para reescrever a equação de Schrödinger. A primeira etapa desta construção consiste na obtenção da equação dinâmica que acopla a amplitude da função de onda

$$R_z \equiv R(z(t), t) = \langle z(t) | \Psi, t \rangle \quad (4.0.1)$$

para todos os estados $|z(t)\rangle$ da base dinâmica. Para esta função de onda, usualmente empregamos sua representação no espaço de fase clássico, provida pela bijeção (3.1.12).

Como qualquer estado quântico pode ser decomposto na forma

$$\begin{aligned} |\Psi, t\rangle &= \widehat{K}_H(t) |\Psi, 0\rangle \\ &= \int d^2 z_0 \widehat{K}_H(t) |z_0\rangle R(z_0, 0), \end{aligned}$$

onde empregamos uma identidade calculada em $t = 0$ com estados coerentes rotulados pelo conjunto $\{z_0\}$, estaremos particularmente interessados em calcular o propagador de um destes estados coerentes $|z_0\rangle$ na base dinâmica $|z(t)\rangle$

$$K_z \equiv K_z(z_0, t) = \langle z(t) | \widehat{K}_H(t) | z_0 \rangle.$$

Tendo estes propagadores, a reconstrução da função de onda do estado $|\Psi, t\rangle$ é feita na base dinâmica por

$$\langle z(t) | \Psi, t \rangle = \int d^2 z_0 K_z(z_0, t) R(z_0, 0).$$

Faremos sempre a distinção entre a função de onda de um estado quântico genérico $|\Psi\rangle$, que será denotada por R , e a função de onda de um estado coerente, denotada por K .

4.1 Equação dinâmica

A fim de obter a equação dinâmica para os estados coerentes acoplados, iniciaremos calculando a variação temporal da onda avaliada sobre um estado dinâmico $|\tilde{z}\rangle$:

$$\frac{d}{dt} R_{\tilde{z}} = \left[\frac{d}{dt} \langle \tilde{z}(t) | \right] |\Psi, t\rangle + \langle \tilde{z}(t) | \left[\frac{d}{dt} |\Psi, t\rangle \right]. \quad (4.1.1)$$

A derivada temporal do estado coerente dinâmico pode ser calculada facilmente a partir de (3.1.5). Assumindo como z a função dependente do tempo,

$$\frac{d}{dt}|z\rangle = \frac{d}{dt} \left(e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle \right) = \frac{d}{dt} \left(-\frac{1}{2}|z|^2 + z\hat{a}^\dagger \right) |z\rangle.$$

Inserindo uma resolução da identidade (3.3.1) com estados dinâmicos na equação (4.1.1) e usando a equação de Schrödinger para a derivada temporal do estado quântico $|\Psi, t\rangle$ resultamos com

$$\begin{aligned} \dot{R}_{\tilde{z}} &= \int d^2z(t) \left[\frac{d}{dt} \langle \tilde{z}(t) | \right] |z(t)\rangle \langle z(t) | \Psi, t\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \tilde{z}(t) | \hat{H} | z(t)\rangle \langle z(t) | \Psi, t\rangle \\ &= \int d^2z \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{z}|^2 + z\dot{\tilde{z}}^* + \frac{1}{i\hbar} H(\tilde{z}^*, z) \right\} \langle \tilde{z} | z \rangle R_z, \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

onde na última expressão omitimos deliberadamente a dependência temporal, que a partir deste ponto será implicitamente assumida para os estados coerentes dinâmicos. A fim de simplificar a equação (4.1.2) definimos o potencial de acoplamento

$$\delta_2 \equiv \delta_2(z^*, z; \tilde{z}) = H(\tilde{z}^*, z) - \left[H(\tilde{z}^*, \tilde{z}) + \frac{\partial H(\tilde{z}^*, \tilde{z})}{\partial \tilde{z}} (z - \tilde{z}) \right], \quad (4.1.3)$$

que nada mais é do que a diferença entre $H(\tilde{z}^*, z)$ e sua expansão em primeira ordem para a variável z em torno de \tilde{z} , gerando uma função do termo diagonal da matriz hamiltoniana. Substituindo (4.1.3) em (4.1.2) e usando a equação de movimento para $\dot{\tilde{z}}$,

$$\dot{R}_{\tilde{z}} = \int d^2z \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{z}|^2 + \frac{1}{i\hbar} [\delta_2 + H(\tilde{z}^*, \tilde{z}) + i\hbar \tilde{z} \dot{\tilde{z}}^*] \right\} \langle \tilde{z} | z \rangle R_z. \quad (4.1.4)$$

O próximo passo para a simplificação da equação dinâmica consiste em substituir na equação acima a derivada temporal total da ação (3.4.2). Tal etapa exige um certo cuidado.

Quando construímos a ação complexa, especificamos uma dupla condição de contorno para uma trajetória, na qual o ponto inicial z_i e o ponto final z_f^* devem ser conectados em um tempo T . Determinar a trajetória que conecta estes pontos não é tarefa simples [49]. Para construir a equação dinâmica dos CCS empregaremos uma base dinâmica guiada pelo análogo clássico da hamiltoniana quântica (3.2.5) a partir de um conjunto de condições iniciais z_i e z_i^* . Este procedimento torna o método uma representação a valores iniciais (IVR, do inglês *initial value representation*) [50, 51]. Essas trajetórias são reais, com posição e momento iniciais dados por

$$q(0) = \frac{1}{b\sqrt{2}}\Re[z_i], \quad p(0) = \frac{1}{b\sqrt{2}}\Im[z_i].$$

O ponto final $z_f^* \equiv z_i^*(t)$ é simplesmente função das coordenadas iniciais e do tempo. As condições de contorno ficam assim escritas como

$$\begin{aligned} z(0) &= z_i \\ z^*(t) &= z_i^*(t). \end{aligned}$$

Aqui indicamos o ponto final pelo rótulo temporal t , pois ele é dinâmico. Dessa forma, derivando (3.4.2):

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{i\hbar}{2} (z^*\dot{z} - \dot{z}^*z) - H(z^*, z) - \frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dt} |z|^2 \\ &= \frac{i\hbar}{2} (z^*\dot{z} - \dot{z}^*z) - H(z^*, z) - \frac{i\hbar}{2} (z^*\dot{z} + \dot{z}^*z) \\ &= -i\hbar z\dot{z}^* - H(z^*, z), \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

válida para as trajetórias que se iniciam em z_i e z_i^* . Tal forma para a derivada da ação é similar ao obtido em [19] por um *ansatz* semiclássico do tipo WKB para a fase da função de onda (4.0.1), que é uma solução da equação de Hamilton-Jacobi. Vale ainda ressaltar que nestas trajetórias $z^*(t)$ é de fato o complexo conjugado de $z(t)$. Temos, então, substituindo a derivada da

ação (4.1.5) na equação (4.1.4),

$$\dot{R}_{\tilde{z}} = \int d^2z \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{z}|^2 + \frac{1}{i\hbar} [\delta_2 - \dot{S}_{\tilde{z}}] \right\} \langle \tilde{z}|z \rangle R_z,$$

onde $S_{\tilde{z}}$ é a ação ao longo da trajetória $\tilde{z}(t)$, sobre a qual é calculada a função de onda derivada no lado esquerdo da igualdade acima, $R_{\tilde{z}}$. Os termos em \tilde{z} não dependem da variável de integração, e podem ser fatorados. Assim

$$\dot{R}_{\tilde{z}} = \left(-\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{z}|^2 - \frac{1}{i\hbar} \dot{S}_{\tilde{z}} \right) R_{\tilde{z}} + \int \frac{d^2z}{i\hbar} \delta_2 \langle \tilde{z}|z \rangle R_z. \quad (4.1.6)$$

Supondo uma função de onda na forma

$$R_z = C_z e^{-\frac{1}{i\hbar} \sigma_z}, \quad (4.1.7)$$

onde definimos a ação reduzida

$$\begin{aligned} \sigma(z_i, z_f^*, t) &= S(z_i, z_f^*, t) + \frac{i\hbar}{2} |z(t)|^2 + \frac{i\hbar}{2} |z(0)|^2 \\ &= \int^t \left[\frac{i\hbar}{2} (z^* \dot{z} - \dot{z}^* z) - H(z^*, z) \right] dt' \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

com $C_z \equiv C(z(t), t)$ uma função do estado coerente guiado sobre $z(t)$ com $z(0) = z_i$, a inserimos na equação (4.1.6), e rearranjamos na forma

$$\dot{C}_{\tilde{z}} = \int \frac{d^2z}{i\hbar} \delta_2 \langle \tilde{z}|z \rangle C_z e^{\frac{1}{i\hbar} (\sigma_{\tilde{z}} - \sigma_z)}, \quad (4.1.9)$$

que é a equação chave do método dos estados coerentes acoplados.

Em [29] a equação (4.1.9) é obtida omitindo-se inicialmente da ação os termos de contorno e empregando-se σ . Este procedimento não leva a nenhum erro na construção do método, contudo devemos ter em vista que as relações algébricas obtidas por causa desta omissão são diferentes do conjunto de equações (3.4.9).

A equação dinâmica (4.1.9) tem uma forma muito simples, acoplando as amplitudes C_z por dois fatores, um provindo de δ_2 , a segunda derivada da hamiltoniana quântica classicalizada, e outro que gera uma modulação de fase, oriunda da diferença entre a ação ao longo dos caminhos clássicos dos estados coerentes. Quanticamente estes são os ingredientes que precisamos para acoplar as funções de onda, uma amplitude de interação e uma fase que reproduza as interferências. Aqui essas quantidades surgiram de modo natural por termos colocado a dinâmica quântica sobre um pano de fundo clássico, o qual está embutido na estrutura dos estados coerentes dinâmicos. A equação dinâmica dos CCS é completamente equivalente à equação de Schrödinger na representação dos estados coerentes estáticos (3.2.3).

O método dos estados coerentes acoplados oferece algumas vantagens em comparação com outras abordagens exatas para o propagador quântico. A primeira e mais evidente característica é a possibilidade de se economizar recursos na construção de uma base de estados. Como foi anteriormente abordado, a resolução do operador identidade (3.3.1) torna viável criarmos uma base de estados dinâmicos no espaço de fase, fluxo esse que guia os estados por trajetórias que em boa aproximação acompanham os pacotes de onda. Uma segunda vantagem diz respeito ao caráter das funções que são acopladas na equação dinâmica. Quando realizamos a fatoração (4.1.7), que é inspirada nas funções de onda da aproximação WKB, estamos deliberadamente isolando uma fase $\sigma/i\hbar$, que detém grande quantidade da informação sobre as oscilações da onda; restando uma função de caráter mais bem-comportado, ou seja, um termo C menos oscilatório. Os outros termos são parte da normalização e se cancelam no funcional de ação. Este método que emprega uma função mais bem comportada é de maior interesse na elaboração de cálculos numéricos para a dinâmica quântica quando comparado com outros métodos exatos [24, 25, 26, 27, 28, 29].

Na implementação da equação (4.1.9), a integração é convertida em uma soma sobre um conjunto de trajetórias $\{z_\Gamma\}$ que adequadamente preencha a

região do espaço de fase onda de dará a dinâmica:

$$\int d^2z \rightarrow \sum_{z_T},$$

e os estados de referência nos quais calculamos a função C_z fazem parte deste conjunto. Nos CCS, contudo, a dinâmica não é originária de condições de extremos na trajetória, mas sim de condições puramente iniciais, de maneira que, para as trajetórias que contribuem na soma, $z_f = z_i(t)$ e $z_f^* = z_i^*(t)$ ¹. Uma forma de demonstrar a invariância do elemento de integração d^2z sob esse movimento das trajetórias dos estados coerentes é avaliar o determinante jacobiano da matriz de mudança das variáveis, que é a própria matriz tangente (3.4.11). Devido à condição inicial $\mathbf{M}(0) = \mathbf{1}$, basta calcular a derivada temporal deste determinante, cujo cálculo é um pouco extenso, porém imediato; e como é esperado pelo teorema de Liouville, resulta

$$\frac{d}{dt} \det \mathbf{M} = 0.$$

Isto mostra que o fluxo hamiltoniano preserva os elementos de área no espaço complexo:

$$d^2z(t) = d^2z(0).$$

A invariância da medida de integração corresponde à ausência de uma função peso na soma sobre as trajetórias, e assim é suficiente que escolhamos uma forma de alocar os pontos iniciais das trajetórias no espaço de fase para calcularmos a dinâmica quântica. Até o presente momento temos conhecimento de duas formas para esta alocação:

1. a primeira consiste na elaboração de um grid regular no entorno do pacote de ondas a ser propagado [23];

¹Tais trajetórias são reais, pois quando revertemos a notação para q e p , estes não são números complexos.

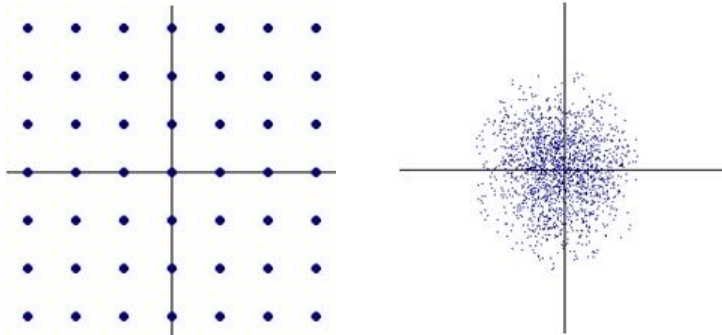


Figura 4.1.1: Formas de alocar pontos iniciais para trajetórias: à esquerda, grid regular; à direita, amostragem.

2. uma segunda forma é a utilização de amostragem de trajetórias baseada em uma função de distribuição $f(z^*, z)$, que associa um peso $w_z = 1/f$ a cada trajetória escolhida [29].

Estas formas de alocação estão representadas na Figura 4.1.1. Nas implementações realizadas neste trabalho optamos pela primeira escolha.

4.2 Um caso analítico

Como ponto de verificação da teoria apresentada, resolveremos o elemento de matriz do operador de evolução temporal na representação de estados coerentes para um sistema que já ilustrou o capítulo anterior: o oscilador harmônico. Calcularemos este elemento de matriz para um estado inicial coerente:

$$|\Psi, 0\rangle = |z_0\rangle.$$

O oscilador harmônico é de particular interesse pois na construção dos CCS empregamos um conjunto de estados natural a ele.

Na resolução analítica da equação dinâmica do CCS não é necessária a discretização do espaço, e podemos considerá-los como construídos sobre o próprio meio contínuo do espaço de fase clássico, onde a cada ponto z corresponde uma trajetória $z(t)$. Estas trajetórias já foram calculadas em (3.5.1) e são dadas por

$$z(t) = ze^{-i\omega t}.$$

A ação reduzida calculada ao longo delas é extraída de (4.1.8) pela substituição da condição final $z^*(T) = z^*(0)e^{i\omega T}$:

$$\sigma_z = -\frac{\hbar\omega T}{2}.$$

Para resolver (4.1.9) nos resta avaliar o potencial de acoplamento

$$\delta_2 = \hbar\omega \left(\tilde{z}^* z + \frac{1}{2} \right) - \left[\hbar\omega \left(\tilde{z}^* \tilde{z} + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \tilde{z}^* (z - \tilde{z}) \right] = 0.$$

Substituindo na equação dinâmica temos

$$\dot{C}_{\tilde{z}} = 0.$$

Este é o resultado mais simples que podemos obter e está relacionado à total coerência dos estados $|z\rangle$, cuja dinâmica é essencialmente clássica. As amplitudes vinculadas aos estados coerentes são constantes ao longo do tempo, de forma que a dinâmica do elemento de matriz provém somente das quantidades clássicas. Da definição (4.1.7), para um estado coerente, temos que

$$\begin{aligned} C(z, 0) &= K(z, 0) = \langle z|z_0\rangle \\ &= C(z(t), t). \end{aligned}$$

Concluindo o cálculo do elemento de matriz

$$\begin{aligned} K_z &= \langle z|z_0\rangle \exp\left(-\frac{i\omega T}{2}\right) \\ &= e^{-i\omega T/2}\langle z|z_0\rangle. \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

Relembrando da definição (4.0.1), neste caso $K_z = \langle z(T)|\widehat{K}_H(T)|z_0\rangle$, o que nos mostra que o overlap entre o estado coerente propagado $\widehat{K}_H(T)|z_0\rangle$ e o estado coerente da base dinâmica $|z(T)\rangle$ é sempre igual ao overlap inicial $\langle z|z_0\rangle$ acrescentado da fase $-i\omega T/2$. Ou seja, ao longo da dinâmica, o estado coerente não sofre nenhum fenômeno de espalhamento no potencial harmônico nem de auto interferência.

4.3 Aplicações numéricas da equação dinâmica

O método dos estados coerentes acoplados foi aplicado a dois poços potenciais de características distintas: o oscilador harmônico com uma perturbação adicional quártica e a parede dupla de potencial com uma região de dinâmica livre. Foram fixados os seguintes parâmetros:

$$b = c = m = 1;$$

que determinam também $\hbar = 1$.

Os estados coerentes foram alocados em um grid de dimensões $5b \times 5c$ ao longo dos eixos de posição e momento em torno do centro do estado coerente z_0 , diferente em cada caso.

4.3.1 Oscilador harmônico perturbado

O potencial empregado foi o oscilador de massa e frequência unitárias acoplado a uma anarmonicidade quártica pequena:

$$V(q) = \frac{q^2}{2} + \lambda \frac{q^4}{4},$$

com $\lambda = 1/30$. Foi utilizado um grid regular de 19 x 19 trajetórias em torno do ponto z_0 centrado em $x_i = -3$ e $p_i = 0$, ou seja, um pacote de onda gaussiano, sem momento, lançado a partir de um ponto à esquerda do eixo $q = 0$. A dinâmica foi integrada por um tempo equivalente a dois períodos do oscilador não-perturbado, $T = 4\pi$.

Na Figura 4.3.1 estão representadas a densidade de probabilidade do pacote propagado e a parte real da função da onda dada na representação de coordenadas por

$$\Psi(x, t) = \langle x | z_0 \rangle = \int d^2z(t) \langle x | z(t) \rangle \langle z(t) | z_0 \rangle.$$

O resultado dos CCS reproduz com precisão fenômenos quânticos, calculados por um acoplamento de estados guiados por trajetórias clássicas. O resultado padrão foi reproduzido por *split-time operator* com técnica de transformada rápida de Fourier [52].

4.3.2 Parede de potencial

Este potencial foi estudado em [18] para o elemento de matriz semiclássico (3.4.1) e consiste de duas paredes exponenciais simetricamente localizadas em relação ao eixo $q = 0$, com região intermediária de dinâmica quase livre. Este potencial é dado por

$$V(q) = 0,0135 \cosh q.$$

Para este potencial, foi empregado um grid inicial composto por 15 x 15 trajetórias localizadas ao redor do ponto z_0 posto na origem, $x_i = 0$ com momento inicial $p_i = 3$. Tal estado consiste em um pacote gaussiano lançado contra a parede à direita. A dinâmica foi desenvolvida por um período de tempo $T = 6$, suficiente para avaliarmos os resultados da primeira colisão e o início da colisão com a parede à esquerda da origem.

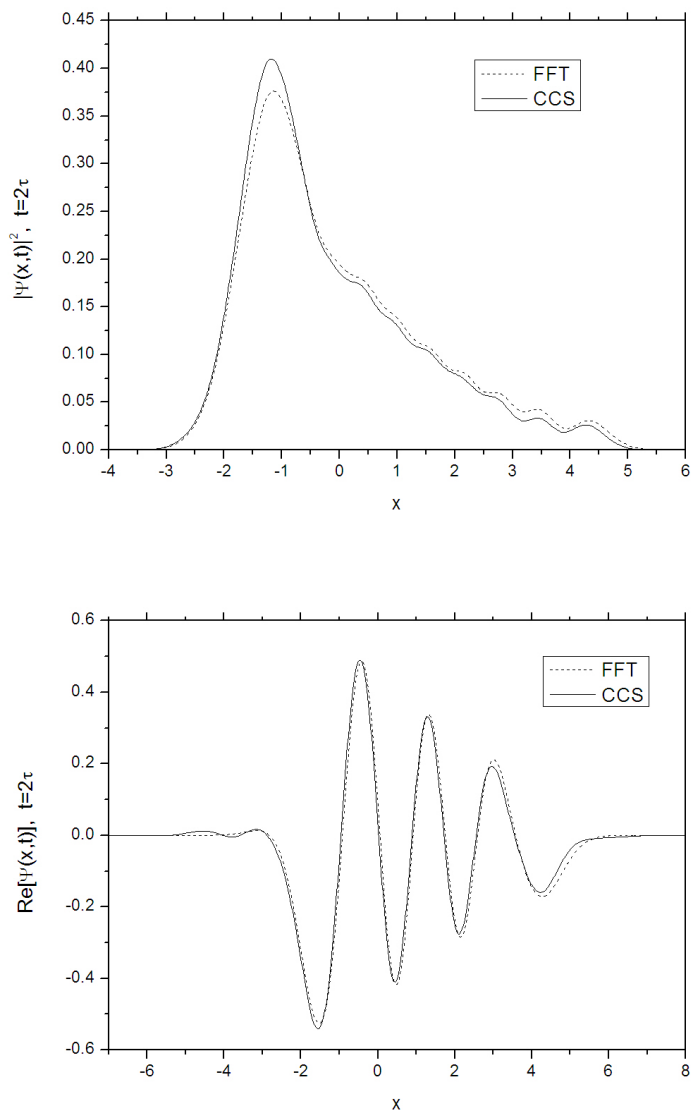


Figura 4.3.1: Potencial quártico. Acima: densidade de probabilidade. Abaixo: componente real da função de onda. É possível ver com nitidez que o pacote gaussiano se desfez devido ao termo não harmônico do potencial. A pequena diferença observada entre os dois métodos se deve fundamentalmente à finitude da quantidade de estados coerentes alocados.

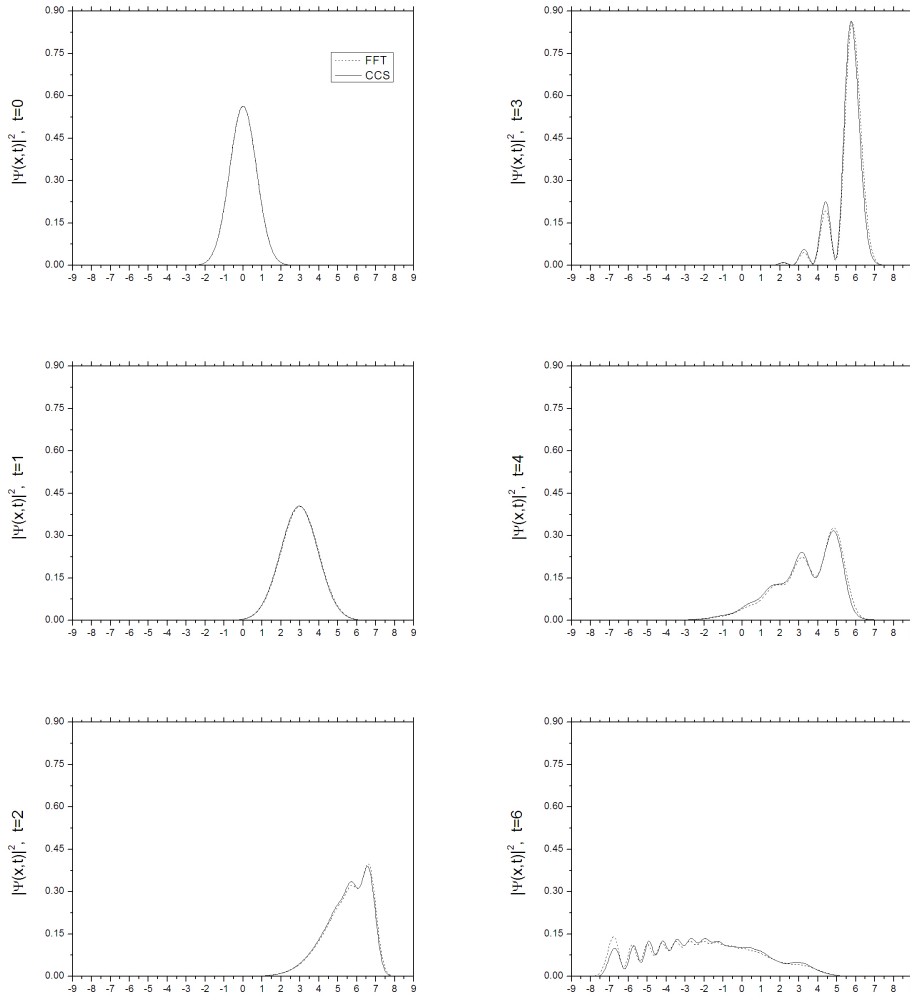


Figura 4.3.2: Propagação de um pacote gaussiano entre duas paredes de potencial. De cima para baixo e da esquerda para a direita está representada a evolução temporal de estado. A reprodução da colisão com a primeira parede entre os instantes $t = 2$ e $t = 3$ pôde ser muito bem feita, da mesma forma que o início da colisão com a parede à esquerda no instante $t = 6$, instante em que se observa a auto-interferência com a porção refletida da onda. Eixos horizontais são as coordenadas de posição.

A evolução do pacote de onda está representada na Figura 4.3.2.

4.4 Limite semiclássico

O método dos estados coerentes acoplados, percorrido anteriormente, é uma técnica exata para se resolver a equação de Schrödinger. Se possuímos uma base de estados coerentes suficientemente numerosa e uma precisão numérica adequada, podemos obter resultados tão bons quanto desejemos para a propagação de um pacote de ondas quântico. O caráter altamente não analítico da equação dinâmica dificulta a obtenção de resultados em forma fechada para as funções de onda, existindo somente alguns poucos casos de solução factível.

O núcleo de integração da equação (4.1.9) é uma função complexa dada por

$$\frac{1}{i\hbar} \delta_2 \langle \tilde{z} | z \rangle e^{\frac{1}{i\hbar}(\sigma_{\tilde{z}} - \sigma_z)}, \quad (4.4.1)$$

onde os índices z e \tilde{z} indicam as trajetórias que estão sendo acopladas. Esta função tem uma amplitude essencialmente dependente do *overlap* $\langle \tilde{z} | z \rangle$ entre os estados coerentes envolvidos e do termo de segunda ordem da hamiltoniana classicalizada, além de uma fase cuja maior contribuição provém da diferença da ação reduzida ao longo das trajetórias dos estados coerentes, $\sigma_{\tilde{z}} - \sigma_z$.

O potencial de acoplamento δ_2 conecta a amplitude das funções de onda C_z , contudo este termo vem blindado pelo *overlap* entre os estados, e quanto mais distantes estão os estados, menor a amplitude do *overlap* pois ela decai exponencialmente com o afastamento. Dessa maneira, esperamos que para estados distantes na espaço de fase, o acoplamento seja pequeno de forma que ele deve se concentrar em um vizinhança restrita da trajetória de referência \tilde{z} . De forma similar, o termo de interferência envolvendo a ação será mais oscilatório quanto maior a distância entre as trajetórias, o que resulta em um cancelamento médio destas grandes oscilações quando somamos a contribuição de trajetórias distantes. Isso sugere que uma aproximação à

equação dinâmica dos CCS pode ser realizada se restringirmos nosso foco para o entorno desta trajetória de referência \tilde{z} , sobre a qual a amplitude $C_{\tilde{z}}$ é calculada.

Mostraremos a seguir que aproximações de ordens diferentes ao núcleo de integração conduzem a modelos de dinâmica semiclassica bastante conhecidos: 1) as aproximações de ordem zero e um são equivalentes à teoria das gaussianas congeladas [47], enquanto que 2) a aproximação de segunda ordem é equivalente à teoria das gaussianas derretidas [42, 43, 18], e, em particular, demonstraremos a fórmula semiclassica BAKKS para o elemento de matriz do operador de evolução temporal nesta aproximação, calculada com trajetórias reais.

4.4.1 Teoria das gaussianas congeladas

Realizar uma aproximação de ordem zero no núcleo de integração (4.4.1) é equivalente a negligenciar o potencial de acoplamento δ_2 entre as amplitudes, vinculadas às trajetórias dos estados dinâmicos. Este é sempre o caso para oscilador harmônico, cuja dinâmica gera estados rígidos guiados no espaço de fase, sem a interveniência de fenômenos essencialmente quânticos.

O resultado imediato deste procedimento é que a amplitude $C(z(t), t)$ é constante ao longo da trajetória, ou seja,

$$\begin{aligned} C(z(t), t) &= C(z(0), 0) \\ &= R(z(0), 0). \end{aligned}$$

Se carregamos este resultado para a função de onda, temos

$$R(z(t), t) = \langle z(0) | \Psi, 0 \rangle \exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\sigma_z\right),$$

o que nos mostra que a amplitude associada à trajetória $z(t)$ depende somente da contribuição no instante inicial $\langle z(0) | \Psi, 0 \rangle$, evoluída por uma fase

dependente da ação reduzida. A substituição direta de $|\Psi, 0\rangle$ por um estado coerente $|z_0\rangle$ nos leva à fórmula para a solução do oscilador harmônico (4.2.1).

Tomar a aproximação de ordem zero é a forma mais simples de realizar a dinâmica, contudo, tomar uma aproximação uma ordem superior não resulta em nada diferente do obtido aqui, pois em primeira ordem o potencial de acoplamento continua sendo nulo. O primeiro termo significativo provém da aproximação de segunda ordem.

4.4.2 Teoria das gaussianas derretidas

Faremos a expansão no entorno da trajetória de referência \tilde{z} , e para tanto, tomaremos $z = \tilde{z} + \delta z$, e seu respectivo conjugado para z^* . Isto transforma o elemento de integração de (4.1.9) em $d^2z = d^2\delta z$. O primeiro termo significativo no potencial de acoplamento provém da derivada segunda da hamiltoniana

$$\delta_2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H(\tilde{z}^*, \tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} \delta z^2. \quad (4.4.2)$$

Para expandir em segunda ordem as outras funções do núcleo de integração é necessário certo cuidado. As variáveis sobre as quais deverão ser feitas as expansões têm de ser as mesmas que estão sob o sinal da integral, ou seja, $z(t)$ e $z^*(t)$. Contudo, o expoente que resta além do acoplamento é

$$\begin{aligned} \rho &= -\frac{1}{2} |\tilde{z}|^2 - \frac{1}{2} |z|^2 + \tilde{z}^* z + \frac{1}{i\hbar} \sigma_{\tilde{z}} - \frac{1}{i\hbar} \sigma_z \\ &= -|z|^2 + \tilde{z}^* z + \frac{1}{i\hbar} S_{\tilde{z}} + \frac{1}{2} |\tilde{z}(0)|^2 - \frac{1}{i\hbar} S_z - \frac{1}{2} |z(0)|^2. \end{aligned} \quad (4.4.3)$$

Os pontos de início das trajetórias clássicas, $z(0)$ não dependem das trajetórias $z(t)$, de maneira que para eles fazemos

$$z(0) \approx \tilde{z}(0). \quad (4.4.4)$$

O funcional de ação é uma função somente da variável $z_f^* \equiv z^*(t)$ e $z_i = z(0)$. Como a integração envolve apenas a trajetória no tempo t , expandimos a ação em relação ao ponto final somente. Assim, computando em segunda ordem a ação em torno de $z^* = \tilde{z}^* + \delta z^*$:

$$S_z \approx S_{\tilde{z}} + \frac{\partial S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^*} \delta z^* + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} \delta z^{*2}. \quad (4.4.5)$$

Inserindo as aproximações (4.4.4) e (4.4.5) no termo da fase (4.4.3) resultamos com

$$\rho = -\delta z^* (\tilde{z} + \delta z) - \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\partial S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^*} \delta z^* + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} \delta z^{*2} \right).$$

A derivada da ação pode ser removida devido à relação acessória (3.4.9):

$$-\frac{1}{i\hbar} \frac{\partial S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^*} = \tilde{z};$$

de modo que simplificamos mais a equação para a fase do núcleo de integração, obtendo

$$\rho = -\delta z^* \delta z - \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} \delta z^{*2}. \quad (4.4.6)$$

Agrupando os resultados (4.4.2) e (4.4.6) em (4.4.1) e inserindo este na equação (4.1.9) resultamos com

$$\dot{C}_{\tilde{z}} = \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d^2 \delta z}{i\hbar} C_z \frac{\partial^2 H(\tilde{z}^*, \tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} \delta z^2 \exp \left(-\delta z^* \delta z - \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} \delta z^{*2} \right).$$

Por estarmos realizando uma integração sobre contribuições próximas à trajetória de referência, tomaremos a função de amplitude C_z e empregaremos somente sua contribuição principal na vizinhança de \tilde{z} na forma

$$C_z \approx C_{\tilde{z}}$$

de forma a podermos fatorá-la da integral. Esta aproximação é válida, pois a função C é bastante suave devido à fatoração da fase da função de onda, e

para pontos distantes, a blindagem gaussiana se torna um fator dominante. Para hamiltonianas quadráticas em q e p , este procedimento ainda conduz a resultados exatos. Logo a equação dinâmica dos CCS se transforma em

$$\frac{d}{dt} \ln C_{\tilde{z}} = \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H(\tilde{z}^*, \tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} \int d^2 \delta z (\delta z^2) \exp \left(-\delta z^* \delta z - \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} \delta z^{*2} \right),$$

que é uma integral gaussiana sobre todo o espaço de fase complexo, e pode ser avaliada por (A.0.3). Após a integração obtemos uma equação diferencial para as amplitudes na forma

$$\frac{d}{dt} \ln C_{\tilde{z}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \frac{\partial^2 H(\tilde{z}^*, \tilde{z})}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}}. \quad (4.4.7)$$

Integrar esta equação envolve uma manipulação com a matriz tangente (3.4.11). Primeiramente, das relações (3.4.9) e da equação dinâmica da matriz tangente (3.4.12) temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^{*2}} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{z}^*} \frac{\partial S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{z}^*} \\ &= -\frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial \tilde{z}^*} \\ &= -\frac{\partial \delta \dot{\tilde{z}}^*}{\partial \tilde{z}^*} - \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}} \\ &= -\frac{d}{dt} \ln \delta z^* - \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}}, \end{aligned}$$

que substituído em (4.4.7) resulta

$$\frac{d}{dt} \ln C_{\tilde{z}} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \ln \delta z^* - \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}}.$$

Devemos interpretar o termo δz^* no limite em que ele tende a zero. A integração deste termo logarítmico é feita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \lim_{\delta z^* \rightarrow 0} \int^t \frac{d}{dt} \ln \delta z^* dt' &= \lim_{\delta z^* \rightarrow 0} \ln \frac{\delta z^*(t)}{\delta z^*(0)} \\ &= \ln \frac{\partial z^*(t)}{\partial z^*(0)} \\ &= \ln M_{z^* z^*}; \end{aligned}$$

e por fim obtemos

$$C_{\tilde{z}}(t) = \frac{C_{\tilde{z}}(0)}{\sqrt{M_{z^* z^*}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int^t \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}} dt' \right].$$

Esta amplitude relacionada à função de onda calculada sobre a trajetória $\tilde{z}(t)$ difere da aproximação das gaussianas congeladas pelo prefator que a modula, dependente da matriz tangente. Com esta função de amplitude aproximada semiclassicamente podemos escrever uma forma explícita para o elemento de matriz do operador de evolução temporal entre dois estados coerentes, um fixo inicial $|z_0\rangle$ e outro dinâmico final $|z(t)\rangle$, cuja condição inicial da trajetória seja $z(0) = z_0$, a partir de(4.1.7):

$$\begin{aligned} \langle z(t) | z_0, t \rangle &= \frac{1}{\sqrt{M_{z^* z^*}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int^t \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{z}^* \partial \tilde{z}} dt' \right] \times \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{1}{i\hbar} S(z_0, z^*(t), t) - \frac{1}{2} |z(t)|^2 - \frac{1}{2} |z_0|^2 \right]. \end{aligned}$$

Esta expressão é exatamente igual a (3.4.1) para o caso em que $z_i = z_0$ e $z_f^* = z^*(t)$, ou seja, quando aquela fórmula é calculada ao longo da trajetória central do estado coerente inicial.

Capítulo 5

Os estados coerentes complexos acoplados

Na discussão que segue a equação (3.4.10), motivamos o emprego de uma classe de trajetórias que são reais e definidas no espaço de fase clássico a partir de condições iniciais. Estas trajetórias são um pequeno subconjunto de uma classe muito mais ampla de trajetórias que é construída a partir de condições iniciais duplas, na forma

$$z(0) = z_i, \quad z^*(0) = z_j^*, \quad (5.0.1)$$

de maneira a tornar o método CCCS também uma IVR. Em especial, sempre existirá um $z_j^* = z_{0f}^*$ que conduzirá à condição final $z^*(t) = z_f^*$ de (3.4.3). Claramente que as trajetórias reais têm $z_j^* = z_i^*$. É possível atribuir dinâmica à base de estados coerentes empregando as equações de Hamilton complexas com as condições iniciais acima, e este é o nosso próximo passo.

Em primeiro lugar, para simplificar a notação das variáveis que rotulam as trajetórias, faremos a seguinte mudança de variáveis,

$$\begin{cases} z(t) \rightarrow u(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q(t)}{b} + i \frac{p(t)}{c} \right), \\ z^*(t) \rightarrow v(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q(t)}{b} - i \frac{p(t)}{c} \right), \end{cases} \quad (5.0.2)$$

com o propósito de deixar explícita a diferença entre ambas e não gerar uma notação abusiva em que o complexo conjugado de z não é z^* , de maneira que (3.4.10) é reescrita como

$$(v(t))^* \neq u(t). \quad (5.0.3)$$

Devido à definição (5.0.2), a diferença entre ambas as quantidades acima implica que $q(t)$ e $p(t)$ dados por

$$q(t) = \frac{b}{\sqrt{2}} (u(t) + v(t)), \quad p(t) = \frac{c}{i\sqrt{2}} (u(t) - v(t))$$

são variáveis complexas. Tal fato é estranho do ponto de vista da dinâmica quântica, uma vez que \hat{q} e \hat{p} são observáveis, ou seja, seus autovalores são quantidades reais. Assim, deve-se procurar por uma maneira de se alocar no espaço de fase trajetórias $w(t), w^*(t)$ que sejam reais. As formas de fazê-lo são escolher para $w(t)$ uma das quatro quantidades: $u(t)$ ou $v(t)$ ou seus complexos conjugados. Isto determina completamente $w^*(t)$. Essa escolha não torna as variáveis complexas originais q e p reais, mas permite que criemos um espaço de fase onde existe um par de variáveis reais Q e P dados por

$$Q(t) = b\sqrt{2}\Re[w(t)], \quad P(t) = c\sqrt{2}\Im[w(t)],$$

sobre o qual se dá a dinâmica da trajetória dos estados coerentes. Para simplificar, denominamos o espaço de fase simples das trajetórias w por $\mathbb{V}1$ e o espaço de fase duplicado de u, v por $\mathbb{V}2$.

Precisamos determinar qual escolha faremos para as trajetórias a serem empregadas em $\mathbb{V}1$ e, para realizá-la, olharemos para a solução do oscilador harmônico em termos das condições de contorno (5.0.1):

$$\begin{aligned} u(t) &= z_i e^{-i\omega t} \\ v(t) &= z_j^* e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

O estado $|z_i\rangle$ determina a condição inicial das trajetórias $u(0) = z_i$. Se escolhermos $w(t) = u(t)$ ou $w(t) = u^*(t)$, o conjunto de trajetórias que guia os estados coerentes contém apenas uma trajetória, que depende do estado a ser quanticamente propagado, $w(t) = z_i e^{-i\omega t}$. Não desejamos um conjunto que contém apenas um elemento¹, portanto analisaremos as escolhas $w(t) = v(t)$ e $w(t) = v^*(t)$.

O funcional de ação apresenta dependência explícita em z_i e em z_f^* . Em termos de operadores de criação e aniquilação há duas maneiras de z_f^* aparecer como autovalor: através de um *ket* $|z_f^*\rangle$ ou de um *bra* $\langle z_f|$. Como z_i surge via um *ket*, supomos que um *bra* é relacionado a z_f^* , e este elemento deve ser $\langle z_f|$. Isto sugere que a trajetória deve aparecer na forma $\langle v^*(t)|$. Este sendo o caso, fazemos as trajetórias em $\mathbb{V}1$ como $w(t) = v^*(t)$.

Pode ser demonstrado que o fluxo hamiltoniano gerado em $\mathbb{V}2$ preserva volumes, valendo o teorema de Liouville: $d^2u(t) d^2v(t) = d^2u(0) d^2v(0)$. Isto não é verdade para as curvas integrais das trajetórias $v^*(t)$ em $\mathbb{V}1$. De modo que necessitamos de um determinante jacobiano que conecte os elementos de área iniciais e finais,

$$d^2w(t) = \left| \frac{\partial (w^*(t), w(t))}{\partial (w^*(0), w(0))} \right| d^2w(0).$$

¹Se fizermos a escolha de w como u ou u^* , esta base degenerada de um estado ainda resolve exatamente ao oscilador harmônico, porém somente a ele.

Este jacobiano pode ser avaliado tendo em mente que $\partial v(t) / \partial v^*(0) = 0^2$, o que nos leva a

$$d^2 v(t) = |M_{vv}|^2 d^2 v(0);$$

onde pela substituição (5.0.2), $M_{vv} \equiv M_{z^* z^*}$.

Neste capítulo desenvolveremos a teoria dos estados coerentes acoplados empregando estas trajetórias complexas. O alvo da investigação será a obtenção de uma equação dinâmica que acople as funções de onda calculadas sobre vários estados dinâmicos. Em particular buscaremos soluções para elemento de matriz do operador de evolução entre dois estados coerentes, um estático $|z_i\rangle$ e outro dinâmico $|v^*(t)\rangle$ na forma

$$R(v^*(t), t) = \langle v^*(t) | z_i, t \rangle = \langle v^*(t) | \widehat{K}_H(t) | z_i \rangle,$$

o que nos permitirá uma analogia direta com a expressão semiclássica BAKKS (3.4.1), que é quem motiva o uso destas trajetórias complexas.

A obtenção desta equação dinâmica, cujo método denominaremos CCCS (*complexified coupled coherent states*), nos permitirá preencher uma lacuna dada pela ausência de um método exato que leve as trajetórias complexas a uma fórmula semiclássica em um regime de aproximação local.

5.1 Diferenças entre trajetórias reais e complexas

Ao olharmos para as integrais de movimento das trajetórias $v^*(t)$ no espaço de fase $\mathbb{V}1$, originárias de uma seção de $\mathbb{V}2$ feita a partir do subespaço determinado pela condição inicial $u(0) = z_i$, temos que elas não obedecem um fluxo hamiltoniano tal qual o fluxo total em $\mathbb{V}2$. Uma consequência imediata disto é a violação da conservação da energia ao longo de uma trajetória,

²O fluxo é holomórfico em $\mathbb{V}2$.

energia esta que, em $\mathbb{V}1$ com variáveis Q, P , assume os valores

$$H(Q, P) = H(v(t), v^*(t)) = \langle v^*(t) | \hat{H} | v^*(t) \rangle$$

Um resultado de grande relevância desta não-conservação da energia é o comportamento altamente não-trivial que estas trajetórias adquirem. Tomemos como exemplo um potencial atrativo da forma

$$V(q) = -20e^{-q^2}$$

para avaliarmos a diferença qualitativa na dinâmica entre um conjunto de trajetórias reais e outro complexo, ambos com condições iniciais similares. Para as trajetórias reais assumiremos

$$z(0) = z_0 + \eta, \quad z^*(0) = z_0^* + \eta^*,$$

e para as trajetórias complexas

$$u(0) = z_0, \quad v(0) = z_0^* + \eta^*,$$

onde z_0 é um estado coerente centralizado em um ponto à esquerda da origem $x = 0$ com momento e energia positivos e η indexa um conjunto de pontos na vizinhança de z_0 que possuem parte real da energia inicial positiva, de modo que para o caso das trajetórias reais não haja movimento ligado.

Na Figura 5.1.1 pode-se observar o comportamento das trajetórias reais, que simplesmente atravessam o potencial gaussiano invertido com movimento assintótico livre. Esta dinâmica simples não é o que ocorre para as trajetórias complexas, como pode-se averiguar na Figura 5.1.2. Há fenômenos marcadamente "quânticos" ocorrendo para estas:

- há trajetórias que são refletidas, tal qual para um potencial repulsivo;

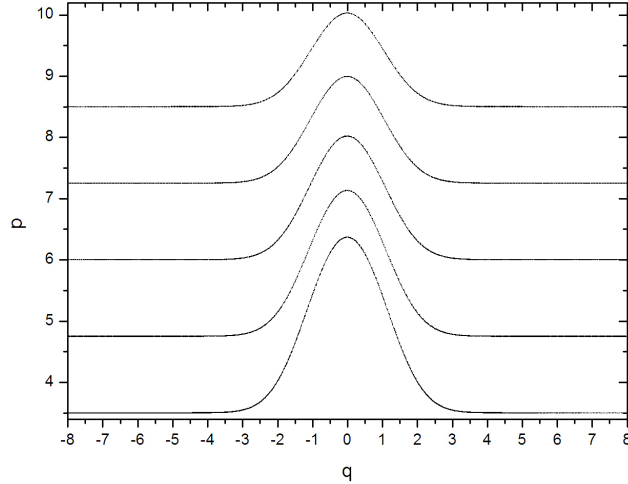


Figura 5.1.1: Trajetórias reais. Os estados incidentes pela esquerda apenas ganham momento quando entram na região atrativa do poço gaussiano, e em seguida seguem movimento à direita.

- outras interagem mais de uma vez com o poço, como se sofressem colisões internas ali.

Isto nos mostra que as trajetórias são espalhadas no sentido da mecânica quântica, e isto é importante, pois elas refletem no nível clássico algo que não é natural a ele. A riqueza do comportamento das trajetórias complexas e o fato delas generalizarem um conceito clássico permitindo o acesso a fenômenos quânticos também nos move a tentar empregá-las na construção de um método similar aos CCS.

Não bastasse a riqueza do comportamento que as trajetórias complexas exibem, podemos observar já no nível clássico um fenômeno que nos faz lembrar da interferência de ondas quântica. No propagador semiclássico de BAKKS a expressão completa depende de uma soma sobre um conjunto de trajetórias que satisfaz certas condições de contorno, ou seja, em um único

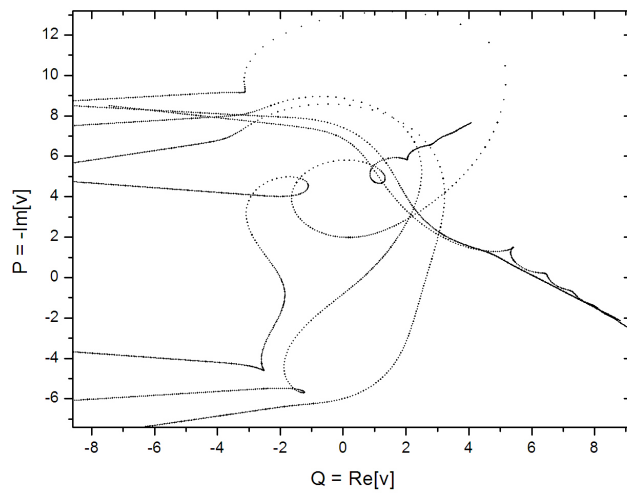


Figura 5.1.2: Trajetórias complexas: Estados coerentes incidentes no poço gaussiano têm dinâmica não trivial devido à energia complexa e não constante. Há estados congelados que são refletidos (canto esquerdo inferior) e outros que são espalhados (canto direito). Foram representadas apenas algumas trajetórias para melhor visualização.

ponto do espaço de fase há diversas contribuições vindas de trajetórias com condições iniciais distintas, de modo que o mapa dinâmico que transforma o plano não é unívoco.

Uma forma de observar esta multiplicidade de trajetórias contribuintes é traçar as curvas de nível relativas às condições iniciais e procurar as múltiplas intersecções que tenham o mesmo valor de posição e momento. Para tanto, tomamos um conjunto de estados (trajetórias) alocados sobre um grid e o evoluímos temporalmente. Ao fim do processo retornamos cada ponto para sua condição inicial, movendo o grid junto com os pontos neste processo. Esta tarefa permite que localizemos no espaço de fase inicial de $\mathbb{V}1$ quais condições de contorno terminam sua dinâmica sobre um mesmo ponto. Um exemplo está mostrado na Figura 5.1.3.

5.2 Reformulação da equação dinâmica

Empregando as trajetórias complexas extraídas do espaço de fase duplo no espaço simples para guiar uma base de estados coerentes, podemos expressar o operador identidade (3.3.1) como

$$\hat{1}(t) = \int d^2v(t) |v^*(t)\rangle\langle v^*(t)| = \int d^2v(0) |M_{vv}|^2 |v^*(t)\rangle\langle v^*(t)|, \quad (5.2.1)$$

que no caso discretizado é expresso como a soma

$$\int d^2v(0) \rightarrow \sum_{z_j^*} F(z_j^*),$$

onde $F(z_j^*)$ é um peso relativo à densidade de trajetórias alocadas no instante $t = 0$. O determinante jacobiano tem o papel de uma função peso, que se compõe com F , relativa à rarefação ou adensamento de trajetórias em uma região do espaço. Para o caso de um grid regular com área $\hbar = bc$ alocada

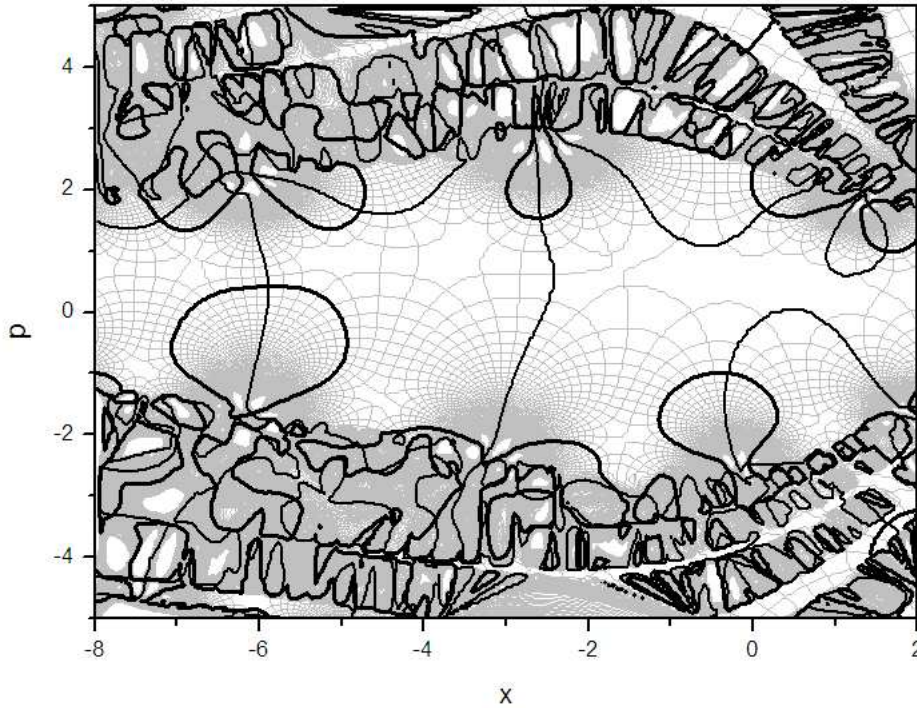


Figura 5.1.3: Curvas de nível das trajetórias para o oscilador quártico da seção 4.3.1 empregando trajetórias complexas. As linhas mais grossas representam o nível $q = -3$ e as curvas menos grossas, o nível $p = 0$. As intersecções indicam as trajetórias que retornam ao ponto inicial central do grid. Há uma grande quantidade de contribuições para este ponto, as quais participam no cálculo da função de auto-correlação para o pacote gaussiano com centro inicial em $z = -3/\sqrt{2}$.

por ponto, $F = 1 \forall z_j^*$. Caso contrário deve-se reescalar a área.

A demonstração de uma equação similar a (4.1.9) procede-se realizando as mesmas etapas anteriores, e a calcularemos, sem perda de generalidade³ para um estado inicial coerente, como já mencionado. Iniciaremos tomando a derivada temporal de $K_v \equiv K(v^*(t), t) = \langle v^*(t) | z_i, t \rangle$ em um estado coerente $v = \tilde{v}$ e iremos inserir uma identidade (5.2.1) de modo conveniente:

$$\begin{aligned} \dot{K}_{\tilde{v}} &= \int d^2v(t) \left[\frac{d}{dt} \langle \tilde{v}^*(t) | | v^*(t) \rangle \langle v^*(t) | z_i, t \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{i\hbar} \langle \tilde{v}^*(t) | \hat{H} | v^*(t) \rangle \langle v^*(t) | z_i, t \rangle \right] \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

$$= \int d^2v \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{v}|^2 + v^* \dot{\tilde{v}} + \frac{1}{i\hbar} H(\tilde{v}, v^*) \right\} \langle \tilde{v}^* | v^* \rangle K_v. \quad (5.2.3)$$

Na segunda linha omitimos a dependência temporal. A fim de simplificar esta equação, novamente definimos um potencial de acoplamento dado por

$$\delta_2 \equiv \delta_2(v, v^*; \tilde{v}^*) = H(\tilde{v}, v^*) - \left[H(\tilde{v}, \tilde{v}^*) + \frac{\partial H(\tilde{v}, \tilde{v}^*)}{\partial \tilde{v}^*} (v^* - \tilde{v}^*) \right],$$

que é a diferença entre $H(\tilde{v}, v^*)$ e sua expansão em primeira ordem em torno de $v^* = \tilde{v}^*$. Substituindo o potencial de acoplamento em (5.2.3) temos

$$\dot{K}_{\tilde{v}} = \int d^2v \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\tilde{v}|^2 + \frac{1}{i\hbar} \left[\delta_2 - \dot{S} \right] \right\} \langle \tilde{v}^* | v^* \rangle K_v,$$

onde \tilde{S} é a ação ao longo da trajetória \tilde{u}, \tilde{v} , lembrando que a ação é definida agora para um par de trajetórias no espaço $\mathbb{V}2$ dado por condições de contorno (5.0.1). Estas condições nos motivam a uma outra forma para a fatoração, pois agora $u(0) = z_i$ é um ponto fixo:

$$K_v = C_v e^{-\frac{1}{2}|z_i|^2 - \frac{1}{2}|v(t)|^2} e^{-\frac{1}{i\hbar} S}, \quad (5.2.4)$$

³Sempre é possível reconstruir uma função de onda tendo a sua decomposição em termos de um conjunto de estados coerentes

em que S é a ação para a trajetória u, v . Resultamos com uma equação que acopla as amplitudes C_v dada por

$$\dot{C}_{\tilde{v}} = \int \frac{d^2v}{i\hbar} \delta_2 \langle \tilde{v}^* | v^* \rangle C_v e^{\frac{1}{2} [|\tilde{v}|^2 - |v|^2]} e^{\frac{1}{i\hbar} (\tilde{S} - S)}. \quad (5.2.5)$$

Esta equação dinâmica (5.2.5) é equivalente à (4.1.9) e a diferença entre elas está nas trajetórias que são utilizadas em seu cálculos. A mesma análise realizada anteriormente se aplica aqui, inclusive no que se refere aos aspectos que nos motivam a realizar aproximações de cunho local, aproximando as amplitudes C_v na vizinhança da trajetória de referência $C_{\tilde{v}}$.

A integral presente em (5.2.5) provém de (5.2.1), e para seu emprego em cálculos numéricos uma forma discretizada adequada é

$$\dot{C}_{\tilde{v}} = \sum_{z_j^*} \frac{|M_{vv}|^2}{i\hbar} \delta_2 \langle \tilde{v}^* | v^* \rangle C_v e^{\frac{1}{2} [|\tilde{v}|^2 - |v|^2]} e^{\frac{1}{i\hbar} (\tilde{S} - S)}.$$

5.2.1 Caso analítico: oscilador harmônico

Apesar da forma diferente entre as equações (4.1.9) e (5.2.5), elas são equivalentes e a simplicidade da solução para o oscilador harmônico, dada em (4.2.1) fica aqui também evidente, pois

$$\delta_2(v, v^*; \tilde{v}^*) = \hbar\omega \left(\tilde{v}v^* + \frac{1}{2} \right) - \left[\hbar\omega \left(\tilde{v}\tilde{v}^* + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega\tilde{v}(v^* - \tilde{v}^*) \right] = 0.$$

Isto nos leva a $\dot{C}_{\tilde{v}} = 0$. As trajetórias complexas do oscilador harmônico são dadas por

$$\begin{aligned} u(t) &= z_i e^{-i\omega t} \\ v(t) &= z_j^* e^{i\omega t}, \end{aligned}$$

e por conseguinte

$$\begin{aligned}
R(v^*(t), t) &= C(v^*(t), t) e^{-\frac{1}{2}|z_i|^2 - \frac{1}{2}|z_j|^2} e^{-\frac{1}{i\hbar}S} \\
&= e^{-\frac{1}{2}|z_i|^2 - \frac{1}{2}|z_j|^2} e^{-\frac{1}{i\hbar}S} \\
&= e^{-i\omega T/2} \langle z_j^* | z_i \rangle,
\end{aligned}$$

que é o resultado exato já exibido em (4.2.1).

5.3 Limite semiclássico

No capítulo anterior obtivemos um análogo da expressão semiclássica BAKKS empregando um conjunto de trajetórias reais para fazer uma aproximação local à integral, sobre todo o espaço de fase, presente na equação dinâmica dos CCS. Contudo as trajetórias reais não são o elemento central por trás da teoria que culmina na aproximação semiclássica (3.4.1), as trajetórias complexas o são. Assim, a utilização das trajetórias complexas no método dos CCS deve recuperar aquela expressão semiclássica na aproximação local em torno da trajetória de referência. Para verificar se esta proposição é satisfeita, realizaremos a seguir os mesmos procedimentos adotados ao longo da seção 4.4, repetindo o cálculo, agora com as trajetórias complexas.

Iniciamos tomando a expansão de todas as funções no integrando em uma vizinhança da trajetória de referência \tilde{v}^* , aproximando $v^* = \tilde{v}^* + \delta v^*$. Para calcular o potencial de acoplamento convém tomar sua expansão na forma

$$\delta_2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H(\tilde{v}, \tilde{u})}{\partial \tilde{u}^2} (v^* - \tilde{u})^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H(\tilde{v}, \tilde{u})}{\partial \tilde{u}^2} (\tilde{v}^* - \tilde{u} + \delta v^*)^2. \quad (5.3.1)$$

Esta derivada não poderia ser tomada em relação a \tilde{v}^* pois esta não é a trajetória que está presente nas equações de Hamilton (3.3.2) e nas condições de contorno (3.4.3) e estamos interessados em empregar quantidades que sejam naturais à trajetória que está presente na ação complexa.

O elemento de área se transforma como $d^2v = d^2\delta v$ nas proximidades de \tilde{v}^* . O expoente total do núcleo de integração é dado por

$$\begin{aligned}\rho &= -\frac{1}{2}|\tilde{v}|^2 - \frac{1}{2}|v|^2 + v^*\tilde{v} + \frac{1}{2}|\tilde{v}|^2 - \frac{1}{2}|v|^2 + \frac{1}{i\hbar}(\tilde{S} - S) \\ &= v^*(\tilde{v} - v) + \frac{1}{i\hbar}(\tilde{S} - S).\end{aligned}\quad (5.3.2)$$

Expandindo-o em torno da trajetória de referência resultamos em

$$\rho = -\delta v(\tilde{v}^* + \delta v^*) - \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\partial\tilde{S}}{\partial\tilde{v}}\delta v + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial\tilde{v}^2}\delta v^2\right).$$

Da relação (3.4.9) calculada realizando-se a substituição $z \rightarrow u$ e $z^* \rightarrow v$ (5.0.2),

$$-\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial\tilde{S}}{\partial\tilde{v}} = \tilde{u},$$

de modo que simplificamos ainda mais a equação para a fase (5.3.2) do núcleo de integração para obter

$$\rho = (\tilde{u} - \tilde{v}^*)\delta v - \delta v^*\delta v - \frac{1}{2}\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial\tilde{v}^2}\delta v^2.\quad (5.3.3)$$

Agrupando os resultados (5.3.1) e (5.3.3) e inserindo na equação (5.2.5) resultamos com a equação semiclássica dos CCS:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\ln C_{\tilde{v}} &= \frac{1}{2}\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial^2 H(\tilde{v}, \tilde{u})}{\partial\tilde{u}^2}\int d^2\delta v(\tilde{v}^* - \tilde{u} + \delta v^*)^2 \times \\ &\quad \times \exp\left((\tilde{u} - \tilde{v}^*)\delta v - \delta v^*\delta v - \frac{1}{2}\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial\tilde{v}^2}\delta v^2\right),\end{aligned}\quad (5.3.4)$$

onde fizemos novamente a aproximação local $C_v \approx C_{\tilde{v}}$ por estarmos interessados somente em contribuições vindas de trajetórias próximas à de referência. Esta integral sobre o espaço de fase $\mathbb{V}1$ na variável δv pode ser feita

empregando-se a fórmula de integração (A.0.3), o que nos leva ao resultado

$$\frac{d}{dt} \ln C_{\tilde{v}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \frac{\partial^2 H(\tilde{v}, \tilde{u})}{\partial \tilde{u}^2} \frac{\partial^2 S_{\tilde{z}}}{\partial \tilde{v}^2}.$$

Se a expansão do potencial de acoplamento fosse tomada somente em relação à trajetória de referência e não em relação à trajetória \tilde{u} de $\mathbb{V}2$ projetada em $\mathbb{V}1$, o resultado seria diferente do obtido acima, o qual tem total analogia com aquele obtido empregando trajetórias reais (4.4.7). A integração temporal é realizada igual àquele caso e não a reproduziremos integralmente. Seu resultado é

$$C_{\tilde{v}}(t) = \frac{C_{\tilde{v}}(0)}{\sqrt{M_{vv}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int^t \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{u} \partial \tilde{v}} dt' \right].$$

Esta amplitude relacionada à função de onda calculada sobre a trajetória $\tilde{v}^*(t)$ permite escrevermos uma forma explícita para o elemento de matriz o operador de evolução temporal entre dois estados coerentes, um fixo inicial $|z_i\rangle$ e outro dinâmico final $|v^*(t)\rangle$, cuja condição inicial da trajetória seja $u(0) = z_i$ e $v(0) = z_j^*$, a partir de (5.2.4):

$$\begin{aligned} \langle v^*(t) | z_i, t \rangle &= \frac{1}{\sqrt{M_{vv}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int^t \frac{\partial^2 H}{\partial \tilde{u} \partial \tilde{v}} dt' \right] \times \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{1}{i\hbar} S(z_i, v(t), t) - \frac{1}{2} |v(t)|^2 - \frac{1}{2} |z_i|^2 \right]. \end{aligned}$$

Esta expressão é exatamente igual à contribuição de uma trajetória do conjunto Γ fórmula semiclassical de BAKKS (3.4.1), para o caso em que $z_i = z_0$ e $z_f^* = v(t)$. Aquela expressão é recuperada completamente quando somamos em um ponto z_f fixo todas as trajetórias $v^*(t)$ que ali se concentram.

Com a reobtenção precisa da equação (3.4.1), o método dos CCCS cumpre um dos propósitos para o qual foi elaborado, preencher o espaço entre a dinâmica no espaço de fase com as trajetórias complexas e uma aproximação

semiclássica. Para o caso do método com trajetórias reais, tanto a equação semiclássica obtida a partir dele quanto sua forma exata garantem resultados de qualidade para a evolução temporal de estados quânticos [29]. Desta maneira, uma vez que a forma semiclássica dos CCCS é um bom aproximante para a dinâmica quântica no espaço de fase, podemos esperar de sua forma exata que ela seja, pelo menos, tão bem-sucedida quanto. Porém, curiosamente, isto não é observado.

5.4 Teste da equação dinâmica

O elemento central da teoria dos estados coerentes acoplados, que viabiliza o emprego de uma base de estados dinâmicos, é podermos expressar o operador identidade em termos dos estados da base. De nada valeria empregarmos uma forma do operador identidade que seja falsa com o propósito de obter uma equação dinâmica. Analisaremos se a equação (5.2.1) é válida calculando a integral

$$|\text{id}(t)|^2 \equiv \langle z'|z' \rangle = \int d^2v(0) |M_{vv}|^2 |\langle v^*(t)|z' \rangle|^2, \quad (5.4.1)$$

que oferece um estimador do módulo da identidade, e que supostamente deve sempre valer um.

A princípio sabemos que a avaliação numérica de (5.4.1) pode não ser a unidade, basta para tanto tomarmos o estado z' suficientemente distante da região de $\mathbb{V}1$ onde ocorre a dinâmica. O *overlap* entre os estados será sempre ínfimo e portanto o resultado se aproximará de zero. Isto mostra que o modo como escolhemos $v(0)$ é importante.

Tomaremos casos em que os pontos z' são fixados no espaço de fase de maneira que nem sempre a base de estados dinâmicos está totalmente alocada ao redor deles, ou seja, eles estarão em posições estratégicas em que a base, durante um certo intervalo de tempo será insuficiente para descrevê-los. Para isso tomaremos $v(0)$ em torno de um valor central z_0 . Um diagrama sobre

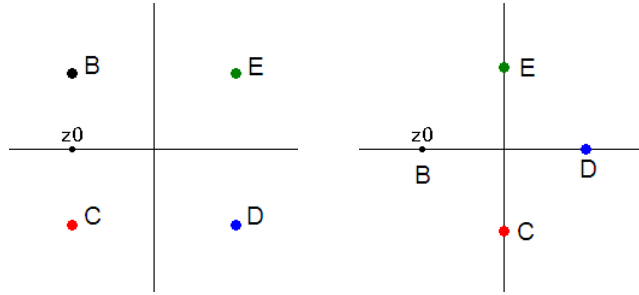


Figura 5.4.1: Esquerda, modelo 1, em forma de quadrado. Direita, modelo 2, em forma de cruz. O ponto z_0 é o centro do conjunto de trajetórias e os outros quatro pontos, z' , são fixos. Avaliamos a passagem da base por eles (z_0 coincide com um destes quatro no modelo 2).

duas formas de se realizar a escolha está representado na Figura 5.4.1. Para que a dinâmica quântica seja razoavelmente bem descrita, esperamos que a integral (5.4.1) que representa o operador identidade sempre valha um em pelo menos um dos pontos escolhidos.

A fim de integrar o operador identidade, um cuidado ainda deve ser tomado. Devido ao comportamento pouco trivial das trajetórias complexas, como ilustrado na Figura 5.1.2, muitas vezes as trajetórias apresentam comportamento altamente não físico e se torna necessário realizar um monitoramento sobre elas devido a dois fenômenos:

1. O módulo do elemento da matriz tangente que entra sob integração pode divergir numericamente, de forma que impomos um valor de corte μ a ele. Este valor é arbitrário e realizado de modo tentativo, contudo há trabalhos que sugerem uma faixa de valores apropriada [23].
2. A fatoração realizada para a função de onda (5.2.4) exige uma condição para ser bem determinada; se a parte imaginária da ação calculada ao longo da trajetória na qual se calcula a amplitude tiver um valor negativo d , a função de onda escala exponencialmente com e^d . Isto nos faz considerar um valor de corte para a parte imaginária da ação.

Estes valores de corte são, assim, puramente heurísticos.

Estudamos a evolução de (5.4.1) para o oscilador harmônico e para o oscilador harmônico com o termo quártico. Em ambos os casos, empregamos valores de corte

$$\begin{aligned} |M_{vv}| &< \mu = 2.5, \\ \Im[S] &> d = -\hbar. \end{aligned}$$

Na Figura 5.4.2 exibimos o comportamento do estimador da identidade, calculada com os modelos de estados mostrados na Figura 5.4.1. O modelo 1 foi empregado para o oscilador harmônico, com z_0 dado por $q_0 = -2, p_0 = 0$ e os estados $|z'\rangle$ dispostos nos vértices do quadrado de lado quatro centrado na origem. Para o caso quártico, empregamos o modelo 2 com o mesmo z_0 , com os estados dispostos ao longo dos eixos coordenados a uma distância de duas unidades da origem.

Quando lidamos com o oscilador harmônico é extremamente viável a realização do operador identidade devido à forma que têm as soluções das equações dinâmicas. Este não é o caso do oscilador quártico, visto que a identidade para este, em um intervalo de tempo curto, começa a sofrer desconfigurações.

O aspecto serrilhado do valor da identidade para o caso não harmônico provém dos cortes realizados nas trajetórias, onde elementos são retirados da base de estados coerentes. Caso este procedimento não fosse realizado, para $t < 2$ a identidade já teria valor maior do que um, e este valor divergiria rapidamente.

Analisar o operador identidade é o cálculo mais simples que podemos realizar. Aqui, nenhum fenômeno de interferência quântica entre as amplitudes avaliadas nos estados dinâmicos está sendo levado em conta, mas somente a dinâmica das trajetórias. Quando integramos a equação (5.2.5) que dá a variação das amplitudes da função de onda, a tendência é que a desconfiguração

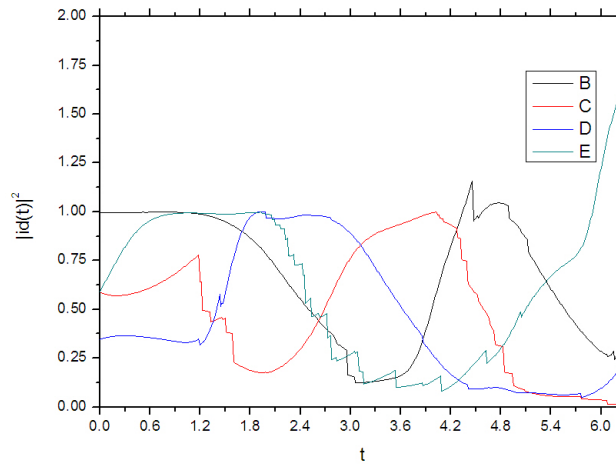
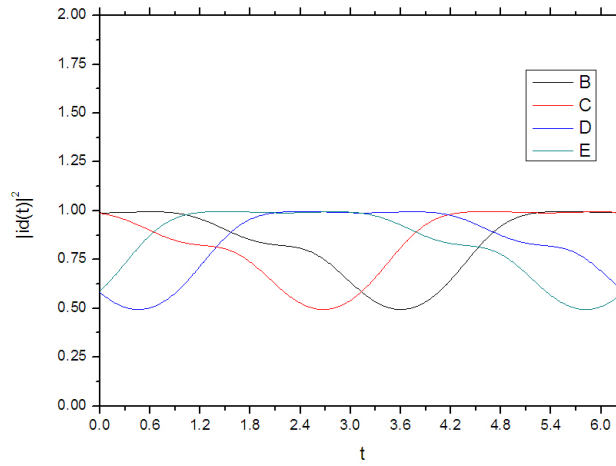


Figura 5.4.2: Evolução do operador identidade. Acima, para o oscilador harmônico, de modo recorrente a identidade volta a valer um quando a base alcança os estados em sua dinâmica. Abaixo, para o oscilador quártico, a base começa a demonstrar tal comportamento, porém ele se descaracteriza com o passar do tempo.

da identidade se propague de forma dramática no cálculo dinâmico, disseminando o problema presente em algumas trajetórias para todo o sistema, devido ao acoplamento, o que torna os resultados provindos da aplicação de (5.2.5) não verídicos inclusive para tempos curtos. Na Figura 5.4.3 exibimos a função de onda para o mesmo sistema quártico estudado na seção 4.3.1, calculado agora empregando trajetórias complexas.

Esta invalidade da teoria exata CCCS para tempos longos, ao menos no caso estudado, é algo surpreendente, pois seu análogo semiclássico não apresenta as dificuldades que ela tem, apesar de se tratar de um método aproximado. O que torna os resultados semiclássicos viáveis é justamente a aproximação local. Por ela envolver a soma sobre as trajetórias, a remoção de uma delas que seja problemática deve melhorar a qualidade do resultado final. Por outro lado, no método dinâmico, o acoplamento e a indeterminação prévia de uma trajetória anormal faz com que o controle que temos no caso semiclássico seja perdido.

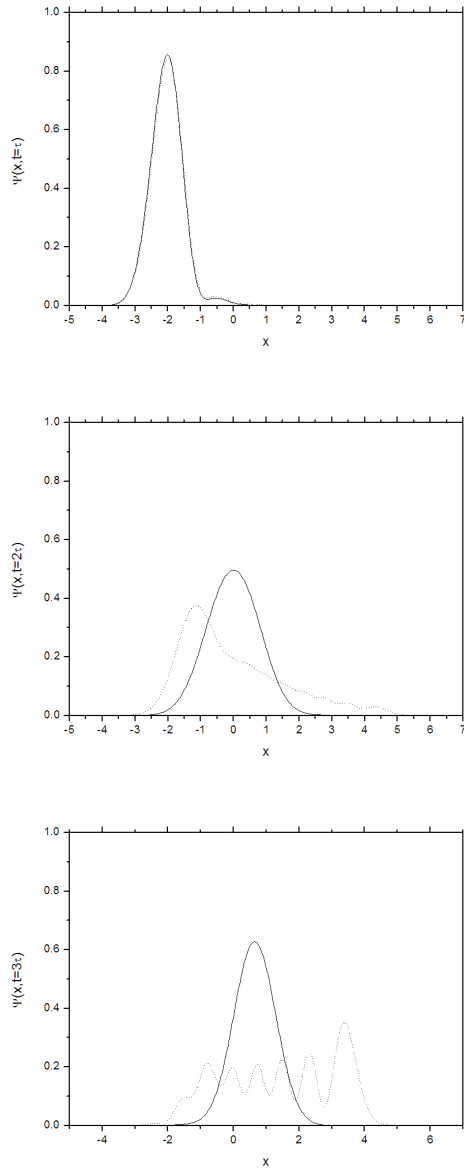


Figura 5.4.3: Evolução quântica do pacote gaussiano sob o potencial quártico calculada por *split-time operator* e com CCCS. A partir de um período do movimento não-perturbado, perde-se a resolução apurada do pacote de ondas.

Capítulo 6

Considerações finais

O objetivo central deste trabalho foi o desenvolvimento de um método exato para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, empregando para isso uma base de estados coerentes dinâmicos guiados sobre trajetórias complexas. Na teoria semiclássica estas trajetórias complexas têm um papel central e expandem os horizontes da dinâmica no espaço de fase, tendo um comportamento que se assemelha ao espalhamento de pacotes de onda quânticos. O método exato dos CCS é construído a partir de estados coerentes guiados sobre as, mais bem comportadas, trajetórias reais e ele foi tomado como referência na elaboração de uma equação dinâmica que empregasse as trajetórias complexas.

Inicialmente demonstramos de forma cuidadosa a equação dinâmica dos CCS, restringindo o tipo de trajetória permitida no espaço de fase clássico ao conjunto das reais. A generalização da equação dinâmica para as trajetórias complexas foi demonstrada apenas abolindo esta restrição.

O sucesso obtido pela aproximação semiclássica do elemento de matriz BAKKS para o propagador quântico nos fez supor que o emprego de um esquema exato que o antecederesse, e a partir do qual pudesse ser obtido, seria tão bem ou melhor sucedido que o aproximante semiclássico. Contudo não foi com este panorama que nos deparamos. Quando estudamos a dinâmica do

operador identidade construído com os estados guiados sobre as trajetórias complexas observamos um comportamento anômalo deste, decorrente em grande parte de alguns problemas intrínsecos a estas trajetórias.

No espaço de fase onde se dá a dinâmica, o fluxo gerado pelas curvas integrais das trajetórias viola o teorema de Liouville, o que nos obriga a empregar uma correção provinda da matriz tangente para o elemento de área. Contudo, a dinâmica desta matriz apresenta divergências inclusive para tempos curtos de evolução, o que torna o cálculo problemático. Outro fator que compromete o sucesso do método exato é a ação ser uma função complexa que ressurgue na forma de uma fase, o que gera termos que são exponenciais de funções positivas e que conduzem também a divergências.

Uma forma de lidar com estes problemas é tratar estas trajetórias problemáticas, com significado quase não-físico, como corpos estranhos no cálculo, e as omitir quando seus parâmetros atingem certa faixa de valores. Contudo a impossibilidade de previamente determinar quais são tais trajetórias pode nos levar a realizar o corte tarde demais, de modo que o problema a esta altura já está disseminado como uma doença nas outras trajetórias. E mais, o corte pode ser acidentalmente feito em trajetórias sadias que retornam para dentro da faixa de parâmetros adequada em um tempo posterior, o que prejudica de sobremaneira os cálculos realizados com o método exato.

Formalmente o métodos dos CCCS é verdadeiro e nos conduz a uma equação dinâmica que, quando aplicada a alguns casos analíticos e numéricos simples, tal como o oscilador harmônico e a partícula livre, reproduz os resultados exatos. Nesta formulação que propomos, a limitação de sua aplicabilidade está na impossibilidade de determinar quem são as trajetórias físicas e quem são as trajetórias patológicas a partir de condições iniciais.

Apêndice A

Integrais gaussianas

Integrais gaussianas de uma variável complexa são escritas na forma

$$\mathcal{GI} = \int d^2z \exp \{ a_1 z^2 + a_2 z^{*2} + a_3 z^* z + b_1 z + b_2 z^* \}, \quad (\text{A.0.1})$$

onde podemos entender d^2z como uma integração sobre as partes real e imaginária de z , denominadas respectivamente por Q e P :

$$\int d^2z = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dQ \int_{-\infty}^{\infty} dP.$$

Para avaliar a integral (A.0.1), escrevemos z e z^* em termos de Q e P , e integramos ambas no intervalo $[-\infty, \infty]$:

$$\begin{aligned} \mathcal{GI} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dQ \int_{-\infty}^{\infty} dP \times \\ \times e^{a_1(Q+iP)^2 + a_2(Q-iP)^2 + a_3(Q^2+P^2) + b_1(Q+iP) + b_2(Q-iP)}. \end{aligned}$$

Expandindo o expoente da expressão acima:

$$\mathcal{GI} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dQ dP}{\pi} e^{A_1 Q^2 + A_2 P^2 + A_3 QP + B_1 Q + B_2 P},$$

onde, agora, $A_1 = a_1 + a_2 + a_3$, $A_2 = -a_1 - a_2 + a_3$, $A_3 = 2ia_1 - 2ia_2$, $B_1 = b_1 + b_2$ e $B_2 = ib_1 - ib_2$. Tomamos o expoente e completamos os quadrados primeiro em Q e depois em P , de maneira que Q_0 abaixo pode ser função de P , mas sem P_0 ser função de Q em contrapartida:

$$\begin{aligned} A_1(Q - Q_0)^2 + S(P - P_0)^2 + T &= \\ &= A_1Q^2 - 2A_1QQ_0 + A_1Q_0^2 + SP^2 - 2SPP_0 + SP_0^2 + T = \\ &= A_1Q^2 + A_2P^2 + A_3QP + B_1Q + B_2P. \end{aligned}$$

Isto implica que

$$Q_0 = -\frac{B_1 + A_3P}{2A_1}$$

e conseqüentemente

$$\begin{aligned} A_1Q^2 + Q(B_1 + A_3P) + \frac{1}{4A_1}(B_1 + A_3P)^2 + SP^2 - 2SPP_0 + SP_0^2 + T &= \\ &= A_1Q^2 + \left(\frac{A_3^2}{4A_1} + S\right)P^2 + A_3QP + B_1Q + \\ &+ \left(\frac{B_1A_3}{2A_1} - 2SP_0\right)P + SP_0^2 + \frac{B_1^2}{4A_1} + T = \\ &= A_1Q^2 + A_2P^2 + A_3QP + B_1Q + B_2P. \end{aligned}$$

Extraímos agora

$$S = A_2 - \frac{A_3^2}{4A_1}$$

e assim

$$\begin{aligned}
A_1 Q^2 + A_2 P^2 + A_3 QP + B_1 Q + \left[\frac{B_1 A_3}{2A_1} - 2 \left(A_2 - \frac{A_3^2}{4A_1} \right) P_0 \right] P + \\
+ \left(A_2 - \frac{A_3^2}{4A_1} \right) P_0^2 + \frac{B_1^2}{4A_1} + T = \\
= A_1 Q^2 + A_2 P^2 + A_3 QP + B_1 Q + B_2 P.
\end{aligned}$$

Finalizamos calculando

$$P_0 = \frac{2A_1 B_2 - B_1 A_3}{A_3^2 - 4A_1 A_2}, \quad T = \frac{A_1 B_2^2 + A_2 B_1^2 - A_3 B_1 B_2}{(A_3^2 - 4A_1 A_2)}.$$

O próximo passo é realizar a integral sobre a variável Q na reta real.

$$\begin{aligned}
\mathcal{GI}_Q &= \int_{-\infty}^{\infty} dQ e^{A_1(Q+Q_0)^2} \\
&= \sqrt{-\frac{\pi}{A_1}},
\end{aligned}$$

convergindo somente se $\Re[A_1] < 0$. Integramos agora em P , fazendo $\xi = 4A_1 A_2 - A_3^2$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{GI} &= \frac{1}{\pi} e^T \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dQ dP e^{A_1(Q-Q_0)^2 + S(P-P_0)^2} \\
&= \frac{1}{\pi} \mathcal{GI}_Q e^T \int_{-\infty}^{\infty} dP e^{\frac{1}{4A_1} \xi (P-P_0)^2} \\
&= \frac{1}{\pi} e^T \sqrt{-\frac{\pi}{A_1}} \sqrt{-\frac{4\pi A_1}{\xi}} \\
&= e^T \sqrt{\frac{4}{\xi}},
\end{aligned}$$

e a integral em P converge somente se $\Re \left[\frac{\xi}{A_1} \right] < 0$. Reescrevendo em termos das constantes a_i e b_i originais:

$$\begin{aligned} T &= \frac{b_1^2 a_2 + b_2^2 a_1 - b_1 b_2 a_3}{a_3^2 - 4a_1 a_2} \\ \frac{\xi}{4} &= a_3^2 - 4a_1 a_2. \end{aligned}$$

Assim, as integrais dadas por (A.0.1) podem ser avaliadas a partir da fórmula [18]

$$\mathcal{GI} = (a_3^2 - 4a_1 a_2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{b_1^2 a_2 + b_2^2 a_1 - b_1 b_2 a_3}{a_3^2 - 4a_1 a_2} \right\}, \quad (\text{A.0.2})$$

que converge desde que os autovalores da forma quadrática do expoente do integrando tenha autovalores

$$\mu_{\pm} = -a_3 \pm 2\sqrt{a_1 a_2}$$

com parte real não-negativa.

Integrais do tipo

$$\int z^2 d^2 z \exp \{ a_1 z^2 + a_2 z^{*2} + a_3 z^* z + b_1 z + b_2 z^* \}$$

podem ser avaliadas por derivação de (A.0.2):

$$\begin{aligned} &\int z^2 d^2 z \exp \{ a_1 z^2 + a_2 z^{*2} + a_3 z^* z + b_1 z + b_2 z^* \} = \\ &= \frac{d}{da_1} \int d^2 z \exp \{ a_1 z^2 + a_2 z^{*2} + a_3 z^* z + b_1 z + b_2 z^* \} = \\ &= \frac{d}{da_1} \left[(a_3^2 - 4a_1 a_2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{b_1^2 a_2 + b_2^2 a_1 - b_1 b_2 a_3}{a_3^2 - 4a_1 a_2} \right\} \right]. \quad (\text{A.0.3}) \end{aligned}$$

Integrais cujo integrando sejam funções quadráticas de v e v^* podem ser avaliadas empregando relações similares à anterior, derivando-se com relação a seus coeficientes.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Schrödinger, *Phys. Rev.*, **28** (6): 1049, (1926).
- [2] E. Schrödinger, *Naturwiss.*, **14** : 664, (1926).
- [3] J. R. Klauder, B.-S. Skagerstam, *Coherent States*, World Scientific, Singapore, 1985.
- [4] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and their Applications*, Springer, New York, 1986.
- [5] R. Gilmore, C. M. Bowden, L. M. Narducci, *Phys. Rev. A*, **12** : 1019 (1975).
- [6] A. Garg, E. Kochetov, K.-S. Park, M. Stone, *J. Math. Phys.*, **44** : 48 (2003).
- [7] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar, A. F. R. de Toledo Piza, *J. Phys. A*, **39** : 3085, (2006).
- [8] T. F. Viscondi, M. A. M. de Aguiar, *J. Math. Phys.*, **52** : 052104, (2011).
- [9] J. H. van Vleck, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **14** 178, (1928).
- [10] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.*, **20** (2): 367, (1948).
- [11] R. P. Feynman, A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*, v2. McGraw-Hill, New York, 1965.

- [12] K. Kay, *J. Chem. Phys.*, **100** : 4377, (1994).
- [13] K. Kay, *J. Chem. Phys.*, **100** : 4432, (1994).
- [14] K. Kay, *J. Chem. Phys.*, **101** : 2250, (1994).
- [15] M. A. M. de Aguiar, *Tópicos de Mecânica Clássica*, Editora Livraria da Física, São Paulo, 2011.
- [16] F. A. Berezin, *Math. USSR*, **8** : 1109, (1974).
- [17] F. A. Berezin, *Commun. Math. Phys.*, **40** : 153, (1975).
- [18] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch, B. Schelhaaß, *J. Phys. A*, **34** : 7227, (2001).
- [19] E. Martín-Fierro, J. M. Gomez Llorente, *Chem. Phys.*, **322** : 13, (2006).
- [20] D. Huber, E. J. Heller, *J. Chem. Phys.*, **87** : 5302, (1987).
- [21] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar, M. Baranger, *Phys. Rev. E*, **69** : 066204 (2004).
- [22] M. A. M. de Aguiar, M. Baranger, L. Jaubert, F. Parisio, A. D. Ribeiro, *J. Phys. A*, **38** : 4645, (2005).
- [23] M. A. M. de Aguiar, S. A. Vitiello, A. Grigolo, *Chem. Phys.*, **370** : 42, (2010).
- [24] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *J. Chem. Phys.*, **113** : 10028, (2000).
- [25] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *J. Chem. Phys.*, **114** : 9296, (2001).
- [26] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *J. Chem. Phys.*, **115** : 5367, (2001).
- [27] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *J. Chem. Phys.*, **118** : 2061, (2003).
- [28] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *J. Chem. Phys.*, **119** : 1961, (2003).

- [29] D. V. Shalashilin, M. S. Child, *Chem. Phys.*, **304** : 103 (2004).
- [30] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks Cole, 1976.
- [31] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley Publishing Company, 1995.
- [32] E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, **40** : 749, (1932).
- [33] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, *Phys. Rep.*, **106** : 121, (1984).
- [34] A. M. Ozorio de Almeida, *Phys. Rep.*, **295** : 265, (1998).
- [35] L. E. Ballentine, Y. Yang, J. P. Zibin, *Phys. Rev. A*, **50** : 2854, (1994).
- [36] D. Sen, S. K. Das, A. N. Basu, S. Sengupta, *Curr. Sci.*, **80** (4): 536, (2001).
- [37] F. Hausdorff, *Ber. Verh. Saechs. Akad. Wiss. Leipzig*, **58** : 19, (1906).
- [38] M. Thoss, H. Wang, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **55** : 299, (2004).
- [39] V. Bargmann, *Comm. Pure Appl. Math.*, **14** : 187, (1961).
- [40] S. I. Sawada, R. Heather, B. Jackson, H. Metiu, *J. Chem. Phys.*, **83** : 309, (1985).
- [41] S. I. Sawada, J. Metiu, *J. Chem Phys.*, **84** : 227, (1986).
- [42] M. F. Herman, E. Kluk, *Chem. Phys.*, **91** : 27, (1984).
- [43] E. Kluk, M. F. Herman, H. L. Davis, *J. Chem. Phys.*, **84** : 326, (1986).
- [44] M. F. Herman, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **45** : 83, (1994).
- [45] E. C. G. Sudarshan, *Phys. Rev. Letters*, **10** : 277, (1963).

- [46] R. J. Glauber, *Phys. Rev.*, **131** : 2766, (1963).
- [47] J. Heller, *J. Chem. Phys.*, **75** : 2923, (1981).
- [48] P. Kramer, M. Saraceno, *Geometry of the time-dependent variational principle in quantum mechanics*, Springer-Verlag, Berlin - New York, 1981.
- [49] A. L. Xavier Jr., M. A. M. de Aguiar, *Annals Phys.*, **252** : 458478, (1996).
- [50] W. H. Miller, *J. Chem. Phys.*, **53** : 3578 (1970).
- [51] W. H. Miller, T. F. George, *J. Chem Phys.*, **56** : 5668, (1972).
- [52] W. M. Gentleman, G. Sande, *Proceedings - Fall Joint Computer Conference*, 563, 1966.