



Thiago de Freitas Viscondi

Propagação Semiclássica na Representação de Estados Coerentes

Campinas
2013



UNICAMP

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Thiago de Freitas Viscondi

Propagação Semiclássica na Representação de Estados Coerentes

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física “Gleb
Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas para obtenção
do título de Doutor em Ciências.

Este exemplar corresponde à versão final da tese defendida pelo
aluno Thiago de Freitas Viscondi e orientada pelo Prof. Dr.
Marcus Aloizio Martinez de Aguiar.

Campinas
2013

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR
VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW
UNICAMP**

V822p Viscondi, Thiago de Freitas, 1985-
 Propagação semiclássica na representação de estados
 coerentes / Thiago de Freitas Viscondi. -- Campinas, SP :
 [s.n.], 2013.

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

1. Aproximação semiclássica. 2. Estados coerentes.
3. Integrais de trajetórias. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez
de, 1960- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de
Física “Gleb Wataghin”. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Semiclassical propagation in the coherent-state representation

Palavras-chave em inglês:

Semiclassical approximation

Coherent states

Path integrals

Área de Concentração: Física

Titulação: Doutor em Ciências

Banca Examinadora:

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar [Orientador]

Amir Ordacgi Caldeira

Eduardo Miranda

Alexandre Dias Ribeiro

Marcel Novaes

Data da Defesa: 18-02-2013

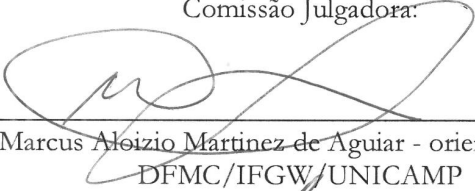
Programa de Pós-Graduação em: Física




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

Membros da Comissão Julgadora de tese de doutorado de Thiago Freitas Viscondi – RA 025270, apresentada e aprovada ao Instituto de Física “Gleb Wataghin”, da Universidade Estadual de Campinas, em 18/02/2013.


Comissão Julgadora:



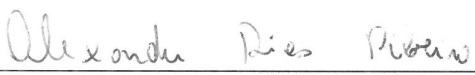
Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar - orientador do candidato.
DFMC/IFGW/UNICAMP



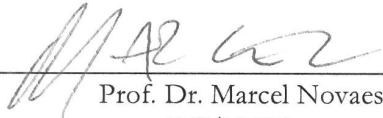
Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Eduardo Miranda
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro
DF/UFPR



Prof. Dr. Marcel Novaes
DF/UFSCar

Agradecimentos

A vida, indubitavelmente, é um caminho bastante tortuoso. Apesar de nossos inúmeros esforços em busca da calma, nossos trajetos estarão sempre repletos de ironias, ilusões e instabilidades. No entanto, em meio a este evidente caos, existe uma genuína constante: a família. Aos membros deste grupo, transmito minha gratidão.

Ronaldo e Rosana, meus pais, obrigado por suas incontáveis demonstrações de generosidade, dignidade, força e determinação.

Gabriel e Lucas, meus irmãos, obrigado pelos numerosos momentos de felicidade, amizade, orgulho e aprendizado.

Yukari, minha esposa, obrigado por suas grandiosas manifestações de cumplicidade, confiança, altruísmo e dedicação.

Minha família, obrigado pelos incontestáveis exemplos de comprometimento, união, coragem e compaixão.

Kyoko e Marcus, meus orientadores, obrigado pelas muitas exposições de paciência, sinceridade, coerência e temperança.

Professores, colegas e funcionários do instituto de física, obrigado por estes dez anos de ensinamentos, experiências, ideias e indagações.

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, FAPESP, o financiamento deste projeto sob o processo 2008/09491-9.

Resumo

A propagação semiclássica consiste na elaboração e aplicação de métodos para a resolução aproximada da equação de Schrödinger dependente do tempo, assumindo como hipótese que a ação clássica do sistema possui valor bastante superior à constante de Planck. Dentro deste contexto, o propagador quântico representa um elemento de interesse central, uma vez que esta grandeza corresponde à amplitude de probabilidade para a transição entre dois estados do sistema físico.

Em um estágio preliminar de nosso trabalho, empregamos o conceito generalizado de estados coerentes para reformular o propagador quântico em termos de uma integral de caminho. Em seguida, com a utilização do método do ponto de sela, realizamos uma dedução detalhada para a aproximação semiclássica do propagador correspondente a uma ampla classe de grupos dinâmicos. A aplicação deste resultado formal está subordinada à resolução de equações clássicas de movimento sob condições de contorno, considerando um espaço de fase com dimensão duplicada.

De maneira geral, a busca por trajetórias clássicas sujeitas a valores de contorno demonstra elevado custo computacional e complexidade técnica. Por esta razão, desenvolvemos três diferentes aproximações semiclássicas determinadas exclusivamente por condições iniciais. Em uma primeira situação, elaboramos um método de propagação constituído por uma integral sobre soluções clássicas no espaço de fase duplicado. No segundo caso, com a formulação do operador semiclássico de evolução temporal, eliminamos a necessidade pela duplicação dos graus de liberdade clássicos. A terceira abordagem, designada por propagador clássico corrigido, está definida pela contribuição de uma única trajetória. Com o propósito de avaliar a precisão e eficiência das expressões semiclássicas adquiridas, exemplificamos a aplicação destas ferramentas teóricas para os estados coerentes de $SU(2)$ e $SU(3)$.

Por fim, apresentamos uma extensa discussão sobre as vantagens introduzidas pelo espaço de fase duplicado na implementação de uma aproximação semiclássica. Deste modo, verificamos que soluções clássicas tunelantes possuem uma importante participação na descrição precisa da penetração parcial de um pacote de onda em uma barreira de potencial finita. Além disto, mostramos que o fenômeno quântico de reflexão por um potencial atrativo está diretamente associado à ocorrência de trajetórias com comportamento não-clássico.

Abstract

The semiclassical propagation comprises the development and application of methods for obtaining approximate solutions to the time-dependent Schrödinger equation, assuming the hypothesis that the classical action of the system is much greater than the Planck constant. In this context, the quantum propagator represents an element of central interest, since this quantity corresponds to the probability amplitude for the transition between two states of the physical system.

In a preliminary stage of our work, we employ the generalized concept of coherent states to reformulate the quantum propagator in terms of a path integral. Then, with use of the saddle-point method, we conduct a detailed derivation of the semiclassical approximation for the propagator corresponding to a wide class of dynamical groups. The application of this formal result depends on the resolution of classical equations of motion under boundary conditions, considering a phase space with doubled dimension.

Generally, the search for classical trajectories subject to boundary values demonstrates high computational cost and technical complexity. For this reason, we have developed three distinct semiclassical approximations exclusively determined by initial conditions. In a first situation, we elaborate a propagation method composed of an integral over classical solutions in the doubled phase space. In the second case, with the formulation of the semiclassical time-evolution operator, we eliminate the need for the duplication of the classical degrees of freedom. The third approach, designated as corrected classical propagator, is defined by the contribution of a single trajectory. In order to evaluate the accuracy and efficiency of the obtained semiclassical expressions, we exemplify the application of these theoretical tools for the coherent states of $SU(2)$ and $SU(3)$.

At last, we present an extensive discussion on the advantages introduced by the doubled phase space in implementing a semiclassical approximation. In this way, we find that tunneling classical solutions have an important participation in the accurate description of the partial penetration of a wave packet in a finite potential barrier. Furthermore, we show that the quantum phenomenon of reflection by an attractive potential is directly associated to the occurrence of trajectories with non-classical behavior.

Sumário

Resumo	ix
Abstract	xi
Notação	1
1 Introdução	3
1.1 Considerações Iniciais	3
1.2 Estrutura da Tese	5
2 Estados Coerentes	7
2.1 Definições	7
2.1.1 Grupo Dinâmico	7
2.1.2 Espaço Quociente e Estados Coerentes	8
2.1.3 Parametrização	9
2.1.4 Potencial de Kähler e Métrica	11
2.1.5 Estrutura Simplética	12
2.2 Exemplos	13
2.2.1 Estados Coerentes Canônicos	13
2.2.2 Estados Coerentes de Spin	16
2.2.3 Estados Coerentes Bosônicos de $SU(n)$	18
3 Propagador Semiclássico	21
3.1 Apresentação	21
3.2 Dedução	23
3.2.1 Integral de Caminho	24
3.2.2 Primeira Variação do Funcional de Ação	32
3.2.3 Aproximação Semiclássica	35
3.2.4 Cálculo do Propagador Reduzido	42
3.2.5 Equação de Jacobi	51
3.2.6 Resultado	54

4	Representações a Valores Iniciais	57
4.1	Propagação a Valores Iniciais no Espaço Duplicado	58
4.1.1	Dedução	59
4.1.2	Filtro Heurístico	61
4.1.3	Definições Preliminares	63
4.1.4	Aplicação: Condensado em Poço Triplo	65
4.2	Operador de Evolução Semiclássica	76
4.2.1	Resultado	77
4.2.2	Dedução	78
4.2.3	Aplicação: Revisitando o Condensado em Poço Triplo	84
4.3	Reobtenção do Propagador Semiclássico	86
4.4	Propagador Clássico Corrigido	91
4.4.1	Resultado	92
4.4.2	Dedução	92
4.4.3	Correspondência com o Propagador Semiclássico	97
4.4.4	Aplicação: Condensado em Poço Duplo	98
5	Dinâmica Semiclássica no Espaço de Fase Duplicado: A Emergência de Fenô- menos Quânticos	103
5.1	Variáveis Canônicas no Espaço de Fase Duplicado	104
5.2	Caracterização de Fenômenos Quânticos no Espaço de Fase Duplicado	108
5.2.1	Trajетórias Tunelantes	108
5.2.2	Comportamento Não-clássico	111
5.3	Aplicações	112
5.3.1	Potencial Gaussiano	112
5.3.2	Barreira Gaussiana	114
5.3.3	Poço Gaussiano	124
6	Conclusão	131
A	Definições Matriciais	135
B	Propagação Clássica	139
C	Propagação Clássico-Estatística	147
C.1	Conservação de Volumes em Sistemas Hamiltonianos	147
C.2	Formulação Clássico-Estatística	150
	Bibliografia	157

Notação

Com o intuito de estabelecer uma fonte de rápida referência para os aspectos particulares da notação empregada ao longo da presente tese, apresentamos uma lista com as observações de maior relevância:

- Os vetores possuem notação indistinta em relação às variáveis escalares. Ou seja, na designação de grandezas vetoriais, não realizamos o acréscimo de negrito ou uma flecha sobrescrita ($\vec{}$).
- Por convenção, as quantidades vetoriais são representadas por matrizes de uma única coluna. Entretanto, a multiplicação à esquerda por um vetor simboliza o produto por uma matriz linha.
- A conjugação complexa é indicada com a introdução de um asterisco sobrescrito ($*$) ao lado direito de uma variável. Por outro lado, a utilização de uma barra ($\bar{}$) sobre uma quantidade complexa não denota a operação de conjugação. Em geral, o acréscimo de uma barra determina uma grandeza completamente independente em relação à variável original.
- A justaposição de dois vetores u e v , ambos com dimensão d , simboliza o produto matricial $uv = u_1v_1 + u_2v_2 + \dots + u_dv_d$.
- A derivada de uma função escalar $h(v)$ por uma quantidade vetorial d -dimensional v representa um novo vetor com entradas definidas por $\left[\frac{\partial h(v)}{\partial v}\right]_j = \frac{\partial h(v)}{\partial v_j}$, para $j = 1, 2, \dots, d$.
- A derivada de uma grandeza vetorial d_1 -dimensional u por um vetor d_2 -dimensional v simboliza uma matriz com elementos descritos por $\left[\frac{\partial u}{\partial v}\right]_{jk} = \frac{\partial u_j}{\partial v_k}$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.
- A derivada dupla de uma função escalar $h(u, v)$ por dois vetores u e v , com dimensões respectivas d_1 e d_2 , denota a matriz com entradas determinadas por $\left[\frac{\partial^2 h(u, v)}{\partial u \partial v}\right]_{jk} = \frac{\partial^2 h(u, v)}{\partial u_j \partial v_k}$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.
- O símbolo \otimes indica o produto diádico entre dois vetores. Ou seja, o resultado da multiplicação $u \otimes v$ corresponde a uma matriz com elementos determinados pela relação $[u \otimes v]_{jk} = u_j v_k$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.

- O elemento de integração sobre uma variável vetorial d -dimensional u é denotado pela expressão $du = \prod_{j=1}^d du_j$.
- O determinante Jacobiano entre dois conjuntos de vetores $\{u^1, u^2, \dots, u^n\}$ e $\{v^1, v^2, \dots, v^n\}$ possui a seguinte definição:

$$\frac{\partial(u^1, u^2, \dots, u^n)}{\partial(v^1, v^2, \dots, v^n)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial u^1}{\partial v^1} & \frac{\partial u^1}{\partial v^2} & \dots & \frac{\partial u^1}{\partial v^n} \\ \frac{\partial u^2}{\partial v^1} & \frac{\partial u^2}{\partial v^2} & \dots & \frac{\partial u^2}{\partial v^n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u^n}{\partial v^1} & \frac{\partial u^n}{\partial v^2} & \dots & \frac{\partial u^n}{\partial v^n} \end{pmatrix}.$$

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Iniciais

Os métodos semiclássicos possuem sua origem nos estágios iniciais de formulação da mecânica quântica, devido às justificáveis tentativas de compreensão dos fenômenos quânticos em termos da mecânica clássica, uma vez que esta teoria usufruía de uma posição consolidada dentro da comunidade científica. Atualmente, como consequência dos progressos realizados na física quântica, as fórmulas semiclássicas são interpretadas como procedimentos de resolução aproximada para a equação de Schrödinger, considerando como hipótese que a ação clássica do sistema observado apresenta valores típicos substancialmente superiores à constante de Planck.

A elaboração de aproximações semiclássicas possui duas principais motivações. Primeiramente, na investigação de sistemas físicos com muitos graus de liberdade, acredita-se que a aplicação de métodos semiclássicos resulte em uma considerável redução do custo computacional em relação aos cálculos quânticos exatos. Ou seja, dentro de seu regime de validade, as fórmulas semiclássicas representam uma alternativa viável na análise de problemas bastante complexos. Por esta razão, as abordagens semiclássicas demonstram elevada relevância na química teórica, especialmente no estudo da dinâmica atômica e molecular¹⁻⁸.

Como segunda justificativa para o desenvolvimento de expressões semiclássicas, devemos destacar o estabelecimento de ferramentas importantes para o profundo entendimento das conexões entre as teorias clássica e quântica. De acordo com o princípio da correspondência, a física clássica constitui um caso limítrofe da mecânica quântica. Embora este resultado possua um sólido embasamento, existem ainda muitas questões abertas na região de transição entre os dois domínios teóricos. Em particular, a utilização de tratamentos semiclássicos possibilita a discussão apurada de tópicos fundamentais como caos^{9;10} e sistemas quânticos abertos¹¹⁻¹⁵.

Na presente tese, estamos interessados predominantemente na construção de aproximações semiclássicas para a evolução temporal de sistemas quânticos isolados. Por este motivo, o elemento central de nosso trabalho corresponde ao *propagador quântico*, o qual definimos como a amplitude de probabilidade para a transição entre dois vetores de estado.

A formulação semiclássica para o propagador na representação de posição foi originalmente obtida por Van Vleck¹⁶, na metade inicial do século passado. Entretanto, este resultado fundamental possui duas características desfavoráveis, as quais dificultam consideravelmente a

elaboração de suas possíveis aplicações. Primeiramente, a avaliação explícita do propagador de Van Vleck está sujeita à determinação de trajetórias clássicas sob a imposição de *condições de contorno*. De maneira geral, a busca por estas soluções específicas apresenta severas complicações técnicas, sobretudo em sistemas multidimensionais e caóticos. O segundo grande obstáculo corresponde à ocorrência de *pontos focais*, os quais são responsáveis por divergências na aproximação semiclássica.

Como uma tentativa de contornar as dificuldades causadas pelos pontos focais, vários estudos foram dirigidos ao desenvolvimento do propagador semiclássico na representação dos estados coerentes canônicos, os quais estão associados ao grupo de Weyl-Heisenberg¹⁷⁻²³. Embora ambos os problemas da fórmula de Van Vleck tenham persistido, a abordagem alternativa à dinâmica semiclássica demonstrou algumas significativas vantagens sobre a representação de posição, como a possibilidade de visualização imediata do sistema sobre o espaço de fase completo.

No entanto, como compensação pelos benefícios adquiridos na representação dos estados coerentes canônicos, duas novas propriedades adversas são introduzidas. Em uma primeira situação, resultante da aparente sobre-determinação das equações clássicas de movimento, verifica-se a necessidade pela *duplicação do espaço de fase*. Este artifício matemático implica em um aumento expressivo dos recursos computacionais exigidos para o cálculo da aproximação semiclássica. Além disto, como uma segunda consequência negativa da utilização de estados coerentes na elaboração do propagador semiclássico, observamos o aparecimento de *trajetórias espúrias*²⁴⁻²⁹. Estas soluções clássicas, apesar de satisfazerem corretamente as condições de contorno, fornecem contribuições impróprias à dinâmica semiclássica.

Objetivando o tratamento de sistemas com spin, diversas deduções corretas para o propagador semiclássico na representação dos estados coerentes de SU(2) foram obtidas independentemente³⁰⁻³⁵. Dentre estas diferentes demonstrações, Kóchetov estendeu seus resultados para grupos dinâmicos arbitrários^{36;37}. Portanto, com o auxílio de uma definição ampla para os estados coerentes^{38;39}, a aplicação de métodos semiclássicos tornou-se possível para uma enorme variedade de sistemas físicos, incluindo os casos cujo o análogo clássico não possui formato evidente.

Grande parte dos problemas frequentes na propagação semiclássica foi resolvida com a introdução de um importante conceito, conhecido como *representação a valores iniciais*¹. Esta concepção teórica corresponde à designação comum para um vasto conjunto de técnicas orientadas ao desenvolvimento de aproximações semiclássicas determinadas exclusivamente por condições iniciais.

Em meio às numerosas abordagens semiclássicas constituídas por trajetórias sujeitas a valores iniciais, devemos salientar o método apresentado recentemente por Aguiar e colaboradores⁴⁰. Este novo procedimento de aproximação semiclássica, restrito à representação dos estados coerentes canônicos, possui uma característica bastante distintiva, correspondente à utilização de condições iniciais sobre o espaço de fase duplicado. Adicionalmente, demonstrou-se que regras elementares para a eliminação das trajetórias espúrias podem fornecer resultados com elevada precisão.

Nas etapas posteriores desta tese, pretendemos contribuir na investigação de três aspectos relevantes da teoria semiclássica. Inicialmente, realizaremos uma dedução independente para

o propagador semiclássico na representação de estados coerentes. Então, empregando as expressões elaboradas ao longo desta demonstração, discutiremos a formulação e aplicação de aproximações semiclássicas a valores iniciais para grupos dinâmicos arbitrários. Finalmente, examinaremos as propriedades singulares das trajetórias clássicas no espaço de fase duplicado, com ênfase na descrição de fenômenos estritamente quânticos.

1.2 Estrutura da Tese

No capítulo 2, apresentamos uma breve revisão do conceito generalizado de estados coerentes. Dentro deste contexto, introduzimos as principais hipóteses utilizadas durante o desenvolvimento de nossos resultados. Além disto, definimos diversas quantidades bastante recorrentes ao longo da presente tese, como o potencial de Kähler e a métrica do espaço de fase. Na seção 2.2, com a intenção de estabelecer uma clara conexão entre a fundamentação matemática e alguns sistemas físicos usuais na mecânica quântica, exibimos três exemplos de particularização para a definição ampla de estado coerente.

O capítulo 3 corresponde a uma discussão detalhada sobre o propagador semiclássico na representação de estados coerentes. Inicialmente, na seção 3.1, realizamos uma apresentação preliminar dos objetos centrais na construção da teoria semiclássica, como o funcional de ação, as equações clássicas de movimento e a função Hamiltoniana efetiva. Em seguida, na seção 3.2, desenvolvemos uma minuciosa dedução do propagador semiclássico. No primeiro estágio desta demonstração, referente à subseção 3.2.1, efetuamos a reformulação do propagador quântico em termos de uma integral de caminho. Então, na subseção 3.2.2, elaboramos uma pequena digressão, na qual obtemos um importante conjunto de relações auxiliares decorrentes da primeira variação da ação clássica. Em uma etapa posterior, descrita pela subseção 3.2.3, estabelecemos o procedimento de aproximação semiclássica, resultante de uma aplicação direta do método do ponto de sela. Por fim, nas subseções 3.2.4-3.2.6, exibimos a resolução explícita da integral de caminho Gaussiana relativa à propagação semiclássica.

As representações a valores iniciais constituem o tema principal do capítulo 4, no qual apresentamos três diferentes abordagens aproximativas à dinâmica quântica. A primeira formulação, designada por propagação semiclássica a valores iniciais no espaço de fase duplicado, está definida na subseção 4.1.1. Em sequência, nas subseções 4.1.2 e 4.1.3, introduzimos várias ferramentas relevantes na implementação e visualização dos resultados semiclássicos, como o filtro heurístico e a distribuição Q . O operador semiclássico de evolução temporal, discutido na seção 4.2, representa um segundo método de aproximação determinado exclusivamente por condições iniciais. Na seção 4.3, demonstramos que a propagação no espaço duplicado e o operador de evolução semiclássica estão bidirecionalmente relacionados pelo método do ponto de sela. Finalmente, na seção 4.4, realizamos a dedução de uma terceira expressão semiclássica, correspondente ao propagador clássico corrigido.

Com o objetivo de avaliar a precisão das aproximações semiclássicas a valores iniciais, nas subseções 4.1.4, 4.2.3 e 4.4.4, mostramos alguns exemplos de aplicação para os três métodos desenvolvidos. Considerando um modelo simplificado para a dinâmica de um condensado de Bose-Einstein em um potencial de poço triplo, analisamos os resultados provenientes da propa-

gação no espaço duplicado e do operador de evolução semiclássica. De maneira distinta, com a utilização de um modelo para um condensado em poço duplo, examinamos o propagador clássico corrigido.

No capítulo 5, exibimos algumas evidências dos benefícios proporcionados pela duplicação dos graus de liberdade na construção de uma aproximação semiclássica. Como primeiro passo nesta discussão, reescrevemos as equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase duplicado em termos de um conjunto de variáveis canônicas. Então, na seção 5.2, introduzimos dois conceitos importantes para a comparação entre as diferentes abordagens semiclássicas, os quais designamos como trajetórias tunelantes e comportamento não-clássico. O propósito destas definições torna-se evidente na seção 5.3, na qual investigamos as características relevantes para uma descrição semiclássica precisa da incidência de uma partícula sobre um potencial Gaussiano.

O capítulo 6 apresenta as considerações finais de nosso trabalho. Com o encerramento da porção principal do texto, exibimos uma sequência de resultados auxiliares. Primeiramente, no apêndice A, estabelecemos uma notação compacta para algumas quantidades matriciais com utilização recorrente na teoria semiclássica. Posteriormente, no apêndice B, empregamos o princípio variacional na formulação do método de propagação clássica. Por fim, no apêndice C, realizamos uma dedução generalizada para o teorema de Liouville da mecânica Hamiltoniana, o qual possibilita a elaboração do procedimento de aproximação clássico-estatística.

Capítulo 2

Estados Coerentes

Os estados coerentes foram inicialmente vislumbrados por Schrödinger⁴¹ como estados Gaussianos de mínima incerteza, cuja dinâmica demonstra máxima similaridade com o oscilador harmônico clássico. O interesse nestes estados específicos, os quais estão relacionados com o grupo de Weyl-Heisenberg, foi novamente despertado pelos trabalhos de Glauber⁴²⁻⁴⁴, Klauder⁴⁵⁻⁴⁷ e Sudarshan⁴⁸, com o surgimento das primeiras aplicações nas áreas da ótica quântica e aproximação semiclássica.

A generalização dos estados coerentes para grupos de Lie arbitrários foi originalmente examinada por Klauder, mas uma discussão completa e detalhada deste assunto foi desenvolvida somente mais tarde por Perelomov³⁸ e Gilmore³⁹. Deste modo, as interessantes propriedades dos estados coerentes de Weyl-Heisenberg foram estendidas para outros grupos de interesse físico, resultando em um cenário ideal para o estudo da correspondência clássico-quântica.

No presente capítulo, realizaremos uma revisão do conceito generalizado de estado coerente. Além disto, apresentaremos as principais hipóteses utilizadas na futura elaboração de aproximações semiclássicas.

2.1 Definições

2.1.1 Grupo Dinâmico

Considere um grupo G e sua álgebra correspondente \mathfrak{g} . Estes dois conjuntos estão associados pelo mapa exponencial⁴⁹:

$$a = e^{iA}, \quad (2.1)$$

onde $a \in G$ e $A \in \mathfrak{g}$. Dado que o conjunto de operadores $\{A_1, A_2, \dots, A_{d_g}\}$ constitui uma base para a álgebra \mathfrak{g} , dizemos que um sistema físico de interesse possui *grupo dinâmico* G se seu Hamiltoniano H pode ser descrito como uma função dos geradores deste grupo, ou seja,

$$H = H(A_1, A_2, \dots, A_{d_g}). \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano determina o espaço de estados dinamicamente acessíveis ao sistema físico, o qual denotamos por \mathbb{H}_l . Como a primeira hipótese fundamental deste capítulo, supomos que

o espaço de Hilbert \mathbb{H}_l suporta uma *representação unitária irredutível* do grupo G , denotada por U_l e especificada pelo conjunto de índices l . De acordo com o mapa (2.1), as representações unitárias do grupo G estão associadas a representações Hermitianas da álgebra \mathfrak{g} . Então, como segunda hipótese, assumimos que a base de \mathfrak{g} pode ser decomposta da seguinte forma:

$$\{A_j\} = \{Q_k, E_m^\dagger + E_m, i(E_m^\dagger - E_m)\}, \quad (2.3)$$

com $j = 1, 2, \dots, d_{\mathfrak{g}}$, $k = 1, 2, \dots, r_{\mathfrak{g}}$ e $m = 1, 2, \dots, (d_{\mathfrak{g}} - r_{\mathfrak{g}})/2$. Os geradores Q_k formam um conjunto máximo de operadores comutantes entre os elementos da base de \mathfrak{g} e, conseqüentemente, suas representações podem ser simultaneamente diagonalizadas. Também apresentadas na última equação, as quantidades não-Hermitianas E_m e E_m^\dagger são conhecidas, respectivamente, como os *operadores de abaixamento e levantamento* no espaço \mathbb{H}_l .

Como mencionado anteriormente, sempre podemos encontrar uma base para \mathbb{H}_l de maneira a diagonalizar simultaneamente as representações dos operadores Q_k . Entre os elementos desta base específica, existe um único estado normalizado $|\psi_0^l\rangle$, conhecido como *estado de mínimo peso*, tal que

$$E_m |\psi_0^l\rangle = 0, \quad (2.4)$$

para todos os valores possíveis de m . Além disto, também pode existir um subconjunto de valores dos índices m , que indicaremos por m' , de forma que

$$E_{m'}^\dagger |\psi_0^l\rangle = 0. \quad (2.5)$$

Apenas com o intuito de explicitar todas as relações que definem o estado $|\psi_0^l\rangle$, escrevemos suas equações de autovalores associadas aos geradores Q_k :

$$Q_k |\psi_0^l\rangle = \lambda_k(l) |\psi_0^l\rangle. \quad (2.6)$$

Por fim, considerando uma escolha particular para a decomposição (2.3), observe que o grupo dinâmico G e o espaço de Hilbert acessível \mathbb{H}_l determinam inequivocamente o estado $|\psi_0^l\rangle$, exceto por uma fase global sem significado físico.

2.1.2 Espaço Quociente e Estados Coerentes

O *subgrupo de estabilidade* S é definido como o subconjunto de operadores unitários s , pertencentes ao grupo G , que conservam o *estado de referência* $|\psi_0^l\rangle$ invariante a menos de uma fase global, ou seja,

$$s |\psi_0^l\rangle = e^{i\phi(s)} |\psi_0^l\rangle, \quad (2.7)$$

para $s \in S$ e $\phi(s) \in \mathbb{R}$. Com o auxílio da definição do subgrupo de estabilidade, podemos discriminar os elementos do *espaço quociente* G/S , o qual é constituído pelas operações contidas em G que produzem resultados fisicamente não-equivalentes entre si quando aplicadas individualmente sobre $|\psi_0^l\rangle$. Decorre diretamente das propriedades fundamentais⁵⁰ do grupo G a existência única, para toda operação $a \in G$, de uma decomposição

$$a = qs, \quad (2.8)$$

de modo que $s \in S$ e, por definição, $q \in G/S$. Logo, a aplicação de qualquer elemento $a \in G$ sobre o estado de referência resulta em uma identidade com a seguinte forma:

$$a|\psi_0^l\rangle = qs|\psi_0^l\rangle = e^{i\phi(s)}q|\psi_0^l\rangle. \quad (2.9)$$

Portanto, como evidenciado na equação anterior, duas operações distintas do grupo G sobre $|\psi_0^l\rangle$ podem produzir estados com conteúdos físicos equivalentes, provenientes de uma mesma aplicação de $q \in G/S$, embora estes resultados difiram por uma fase global decorrente de diferentes elementos em S . Então, para evitar esta ambiguidade de procedência física, definimos os *estados coerentes*^{38;39} como a ação do espaço quociente G/S sobre o estado de referência:

$$|\psi^l(q)\rangle = q|\psi_0^l\rangle. \quad (2.10)$$

Note que os estados coerentes possuem correspondência biunívoca com os elementos do espaço quociente e, conseqüentemente, herdam deste espaço suas propriedades algébricas e geométricas. Observe também que, para os propósitos deste trabalho, fizemos a opção deliberada do estado de referência como um estado de mínimo peso. Esta escolha não é única, embora resulte em inúmeras propriedades físicas e matemáticas interessantes, as quais serão essenciais nos desenvolvimentos futuros.

2.1.3 Parametrização

Considerando a decomposição (2.3) e as identidades (2.4-2.6), podemos concluir que o subgrupo de estabilidade resulta da exponenciação de combinações lineares dos geradores Q_k , $(E_{m'}^\dagger + E_{m'})$ e $i(E_{m'}^\dagger - E_{m'})$, para $k = 1, 2, \dots, r_g$ e valores de m' definidos pela equação (2.5). Ou seja, de acordo com o mapa exponencial (2.1), os elementos de S são dados por:

$$s = \exp \left[i \sum_k \sigma_k Q_k + \sum_{m'} \left(\gamma_{m'} E_{m'}^\dagger - \gamma_{m'}^* E_{m'} \right) \right], \quad (2.11)$$

para $\sigma_k \in \mathbb{R}$ e $\gamma_{m'} \in \mathbb{C}$. Então, utilizando novamente as expressões (2.4-2.6), podemos calcular facilmente a ação do grupo S sobre o estado de referência:

$$s|\psi_0^l\rangle = \exp \left[i \sum_k \sigma_k \lambda_k(l) \right] |\psi_0^l\rangle. \quad (2.12)$$

O espaço quociente é gerado pelos elementos da base de \mathfrak{g} que não estão presentes na equação (2.11). Logo, uma operação unitária pertencente a G/S possui a seguinte parametrização exponencial:

$$q = \exp \left[\sum_{m \neq m'} (\tau_m E_m^\dagger - \tau_m^* E_m) \right], \quad (2.13)$$

para $\tau_m \in \mathbb{C}$. Note que a somatória no expoente da última equação cobre somente os valores de m ausentes na identidade (2.5). A ação de um elemento q sobre o estado de referência resulta

em um estado coerente associado ao grupo G no espaço \mathbb{H}_l :

$$|\psi^l(\tau)\rangle = \exp \left[\sum_{m \neq m'} (\tau_m E_m^\dagger - \tau_m^* E_m) \right] |\psi_0^l\rangle, \quad (2.14)$$

onde τ é o vetor complexoⁱ d -dimensional que parametriza naturalmente os estados coerentes, ao passo que $d \leq (d_g - r_g)/2$ é o número de valores possíveis do índice m subtraído dos elementos presentes no subconjunto indicado por m' . Daqui em diante, visando uma notação mais conveniente e compacta, mas preservando a generalidade da discussão, escolheremos arbitrariamente um ordenamento específico para os valores m , de maneira que $\tau = (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_d)^T$. Este procedimento equivale a reordenar os operadores de levantamento, colocando aqueles que não satisfazem a relação (2.5) nas primeiras d posições.

Em geral, com a utilização das relações de comutação pertinentes, a exponencial encontrada na equação (2.14) pode ser reescrita como um produto de novas exponenciais dos operadores envolvidos. Desta forma, podemos fatorar a dependência da exponencial original nos operadores de abaixamento, cuja ação sobre o estado de referência possui cálculo trivial, de acordo com a identidade (2.4). Portanto, após a realização das manipulações indicadas, obtemos uma reparametrização para o conjunto de estados coerentes⁵¹:

$$|\psi^l(z)\rangle = \mathcal{N}(z^*, z) \exp \left(\sum_{m=1}^d z_m E_m^\dagger \right) |\psi_0^l\rangle, \quad (2.15)$$

para $z = (z_1, z_2, \dots, z_d)^T$ e $z_m \in \mathbb{C}$. A quantidade $\mathcal{N}(z^*, z)$ representa um fator escalar de normalização, responsável por toda a dependência do estado coerente nas variáveis complexo-conjugadas z^* . Neste trabalho, não abordaremos as relações algébricas entre os parâmetros τ e z , pois apenas as propriedades desta última parametrização são interessantes para nossas aplicações subsequentes. Também por este motivo, de agora em diante, adotaremos a equação (2.15) como a definição funcional para os estados coerentes.

Note que os parâmetros z foram apresentados como variáveis complexas sem qualquer restrição em seus possíveis valores. Esta propriedade corresponde implicitamente à terceira hipótese fundamental deste capítulo, com a qual exigimos que as variáveis z_m possuam o plano complexo completo como domínio. A parametrização introduzida pela equação (2.15) representa uma forma bastante particular de descrever os estados coerentes, pois estes se tornam analíticos em z , exceto pelo fator de normalização. No entanto, para certas escolhas do grupo dinâmico, não é possível satisfazer a condição de domínio complexo irrestrito juntamente com a opção por uma parametrização analítica⁵². Portanto, os resultados elaborados nas etapas posteriores deste trabalho demonstram algumas limitações em sua aplicabilidade, provenientes dos requisitos impostos sobre o grupo G .

ⁱAo longo deste trabalho, os vetores serão simbolizados de maneira idêntica às variáveis escalares, sem o acréscimo de negrito ou uma flecha sobrescrita. Por convenção, as variáveis vetoriais serão representadas, quando necessário, por matrizes de uma única coluna. No entanto, a multiplicação à esquerda por um vetor indicará o produto por uma matriz linha. Neste caso, o símbolo de transposição será omitido sem qualquer prejuízo à compreensão das equações pertinentes.

2.1.4 Potencial de Kähler e Métrica

Como mostrado nas subseções anteriores, um conjunto de estados coerentes é determinado inequivocamente pelas escolhas do grupo dinâmico G e do espaço de Hilbert \mathbb{H}_l . Uma vez que esta estrutura geométrica subjacente está bem estabelecida, com o intuito de simplificar a notação, passamos a rotular os estados coerentes apenas com seus parâmetros complexos:

$$|z\rangle = |z_1, z_2, \dots, z_d\rangle. \quad (2.16)$$

Como discutido anteriormente, exceto pelo fator de normalização, os estados coerentes descritos pela equação (2.15) são funções analíticas de seus parâmetros complexos z . Por esta razão, torna-se relevante a definição dos *estados coerentes não-normalizados*:

$$|z\rangle = \mathcal{N}(z^*, z)^{-1}|z\rangle = \exp\left(\sum_{m=1}^d z_m E_m^\dagger\right)|\psi_0^l\rangle, \quad (2.17)$$

os quais evidenciam as propriedades analíticas da parametrização escolhida. Desta última definição decorre diretamente a construção de uma continuação analítica para o *potencial de Kähler*ⁱⁱ:

$$f(z'^*, z) = \ln\{z'|z\rangle\}, \quad (2.18)$$

no qual está codificada toda informação geométrica do subespaço não-linear de \mathbb{H}_l constituído pelos estados coerentes, cuja topologia foi herdada do espaço quociente G/S . Note que o potencial $f(z'^*, z)$ é uma função analítica bem definida das variáveis z'^* e z . Observe também que o fator de normalização pode ser reescrito em termos desta nova quantidade:

$$\mathcal{N}(z^*, z) = \exp\left[-\frac{1}{2}f(z^*, z)\right]. \quad (2.19)$$

Neste momento, devido a sua grande recorrência nos desenvolvimentos posteriores, é conveniente definirmos a continuação analítica da *métrica do espaço quociente*:

$$g(z'^*, z) = \frac{\partial^2 f(z'^*, z)}{\partial z \partial z'^*}, \quad (2.20)$$

a qual é constituída simplesmente pela matriz de segundas derivadas cruzadas do potencial de Kählerⁱⁱⁱ. Definida a métrica do espaço de parâmetros, utilizamos a propriedade de sobre-completudeza do conjunto de estados coerentes para construir uma *resolução da identidade* em \mathbb{H}_l :

$$\int_{z \in \mathbb{C}^d} d\mu(z^*, z) |z\rangle \langle z| = \mathbb{1}. \quad (2.21)$$

ⁱⁱO potencial de Kähler é usualmente definido para $z' = z$. Por este motivo, ressaltamos que a formulação descrita pela equação (2.18) representa uma continuação analítica.

ⁱⁱⁱA derivada dupla de uma função escalar $h(u, v)$ por dois vetores u e v , com dimensões respectivas d_1 e d_2 , denota a matriz com entradas determinadas por $\left[\frac{\partial^2 h(u, v)}{\partial u \partial v}\right]_{jk} = \frac{\partial^2 h(u, v)}{\partial u_j \partial v_k}$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.

Observe que, na equação anterior, o caráter irrestrito das variáveis z está evidenciado no domínio de integração. A *medida invariante* $d\mu(z^*, z)$ é constituída essencialmente pelo determinante da métrica e, conseqüentemente, pode possuir dependência explícita nas coordenadas do espaço quociente:

$$d\mu(z^*, z) = \kappa(l) \det[g(z^*, z)] \frac{d^2z}{\pi^d}. \quad (2.22)$$

A constante de normalização $\kappa(l)$ depende apenas da escolha do espaço de Hilbert e, portanto, também é especificada apenas pelo conjunto de índices l . Lembramos que, por hipótese, o espaço \mathbb{H}_l suporta a representação irredutível unitária U_l do grupo G . Logo, $\kappa(l)$ é mais uma quantidade definida diretamente pela representação do grupo de interesse no espaço de Hilbert acessível. Na equação (2.22), também introduzimos a seguinte notação^{iv}:

$$\begin{aligned} d^2z &= \prod_{j=1}^d d^2z_j = \prod_{j=1}^d dx_j dy_j \\ &= \prod_{j=1}^d \frac{dz_j^* dz_j}{2i} = \frac{dz^* dz}{(2i)^d}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde $x_j = \text{re}(z_j)$ e $y_j = \text{im}(z_j)$.

2.1.5 Estrutura Simplética

A escolha do estado de referência como um estado de mínimo peso concede uma estrutura simplética natural ao conjunto de estados coerentes determinado pela equação (2.15)^{53;54}. Em outras palavras, sob a condição (2.4), o espaço quociente G/S constitui um *espaço de fase*, parametrizado pelas variáveis complexas z . Conseqüentemente, podemos equipar o espaço de parâmetros com um mapa bilinear, amplamente conhecido como *parênteses de Poisson*^v:

$$\{\mathcal{A}_1(z^*, z), \mathcal{A}_2(z^*, z)\} = -i \left[\frac{\partial \mathcal{A}_1}{\partial z} \xi^T(z^*, z) \frac{\partial \mathcal{A}_2}{\partial z^*} - \frac{\partial \mathcal{A}_1}{\partial z^*} \xi(z^*, z) \frac{\partial \mathcal{A}_2}{\partial z} \right], \quad (2.24)$$

onde $\mathcal{A}_1(z^*, z)$ e $\mathcal{A}_2(z^*, z)$ representam duas funções suaves arbitrárias sobre o espaço de fase e $\xi(z^*, z) = g^{-1}(z^*, z)$ simboliza a matriz inversa da métrica. Dentre as propriedades funda-

^{iv}O elemento de integração sobre uma variável vetorial d -dimensional u é denotado por $du = \prod_{j=1}^d du_j$.

^vA derivada de uma função escalar $h(v)$ por uma quantidade vetorial d -dimensional v representa um novo vetor com entradas definidas por $\left[\frac{\partial h(v)}{\partial v} \right]_j = \frac{\partial h(v)}{\partial v_j}$, para $j = 1, 2, \dots, d$.

mentais dos parênteses de Poisson, destacamos as seguintes identidades:

$$\{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2\} = -\{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_1\}, \quad (2.25a)$$

$$\{\{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2\}, \mathcal{A}_3\} + \{\{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3\}, \mathcal{A}_1\} + \{\{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_1\}, \mathcal{A}_2\} = 0, \quad (2.25b)$$

$$\{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2\mathcal{A}_3\} = \{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2\}\mathcal{A}_3 + \{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_3\}\mathcal{A}_2, \quad (2.25c)$$

$$\{z_j^*, z_k\} = i\xi_{jk}(z^*, z), \quad (2.25d)$$

$$\{z_j, z_k\} = \{z_j^*, z_k^*\} = 0. \quad (2.25e)$$

Por fim, como conclusão para nossa discussão geral sobre os estados coerentes, resumimos as três principais hipóteses realizadas até o presente momento:

1. O espaço de Hilbert acessível ao sistema físico de interesse suporta uma representação unitária irredutível do grupo dinâmico escolhido.
2. A base da álgebra associada ao grupo dinâmico admite uma decomposição com a forma indicada pela equação (2.3).
3. As variáveis z , correspondentes à parametrização analítica dos estados coerentes, não possuem restrição em seus domínios no plano complexo.

Em geral, a construção de estados coerentes para grupos que não satisfazem as exigências anteriores também é praticável. No entanto, grande parte dos resultados elaborados posteriormente neste trabalho está restrita aos grupos dinâmicos especificados pelas três condições apresentadas. Em outras palavras, estas hipóteses determinam os conjuntos de estados coerentes utilizados em nossos desenvolvimentos futuros.

2.2 Exemplos

2.2.1 Estados Coerentes Canônicos

Considere um sistema bosônico com d modos⁵⁵. Neste caso, torna-se conveniente a definição do *operador de criação* a_j^\dagger , cuja aplicação sobre um estado arbitrário do espaço de Hilbert resulta na adição de uma partícula no j -ésimo modo. Em contrapartida, o *operador de aniquilação* a_j é responsável pela subtração de um bóson no modo j . Os operadores a_j^\dagger e a_j , para $j = 1, 2, \dots, d$, estão sujeitos às *relações canônicas de comutação bosônica*:

$$[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (2.26a)$$

$$[a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = 0. \quad (2.26b)$$

Inspecionando as identidades anteriores, notamos que o conjunto $\{\mathbf{1}, a_j^\dagger a_j, a_j^\dagger + a_j, i(a_j^\dagger - a_j)\}$, para um valor de j fixo, constitui a base de uma álgebra, uma vez que seus elementos geram

um espaço vetorial fechado pela operação bilinear de comutação. A álgebra formada pelos operadores de criação e aniquilação bosônicos é conhecida como *álgebra de Weyl-Heisenberg*, a qual denotamos por \mathfrak{h}_4 .

O espaço de Hilbert acessível a um sistema arbitrário com d modos bosônicos é identificado como \mathbb{B}^d , ou espaço de Fock bosônico. Uma base usual para \mathbb{B}^d é formada pelo conjunto de estados normalizados $\{|m_1, m_2, \dots, m_d\rangle\}$, onde m_j representa o número de bósons ocupantes do j -ésimo modo e, portanto, assume valores inteiros não-negativos. Como consequência das relações (2.26), os *estados de ocupação* e os operadores bosônicos de criação e aniquilação estão relacionados pelas seguintes identidades:

$$a_j |m_1, \dots, m_j, \dots, m_d\rangle = \sqrt{m_j} |m_1, \dots, m_j - 1, \dots, m_d\rangle, \quad (2.27a)$$

$$a_j^\dagger |m_1, \dots, m_j, \dots, m_d\rangle = \sqrt{m_j + 1} |m_1, \dots, m_j + 1, \dots, m_d\rangle. \quad (2.27b)$$

Observe que, como resultado de sua própria construção, os estados de ocupação constituem auto-estados dos operadores $a_j^\dagger a_j$, ou seja, $a_j^\dagger a_j |m_1, m_2, \dots, m_d\rangle = m_j |m_1, m_2, \dots, m_d\rangle$.

O espaço de Fock \mathbb{B}^1 , resultante da restrição das equações (2.27) para um valor fixo de j , suporta a única representação unitária irredutível do grupo de Weyl-Heisenberg H_4 , associado à álgebra \mathfrak{h}_4 pelo mapa exponencial (2.1). Portanto, \mathbb{B}^d representa o espaço de suporte para a representação irredutível do produto direto $H_4^d = H_4^{(1)} \times H_4^{(2)} \times \dots \times H_4^{(d)}$, no qual $H_4^{(j)}$ representa o grupo dinâmico do j -ésimo modo tomado isoladamente. Comparando as definições (2.4-2.6) às identidades (2.27), concluímos que o *estado de vácuo* $|0, 0, \dots, 0\rangle$, caracterizado por ocupação nula nos d modos, corresponde ao estado de mínimo peso desta única representação unitária de H_4^d .

Conhecidos os operadores de levantamento e abaixamento associados ao grupo dinâmico H_4^d e o estado de referência de sua representação irredutível, podemos aplicar diretamente a definição (2.17) e, desta maneira, obtemos os *estados coerentes canônicos* em sua forma não-normalizada:

$$\begin{aligned} |z\rangle &= \exp(za^\dagger) |0, 0, \dots, 0\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2, \dots, m_d=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^d \frac{z_j^{m_j}}{\sqrt{m_j!}} \right] |m_1, m_2, \dots, m_d\rangle, \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde, buscando simplicidade de notação^{vi}, introduzimos o vetor $a^\dagger = (a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_d^\dagger)^T$. A partir da expressão anterior, podemos calcular imediatamente a sobreposição entre estados coerentes:

$$\{z'|z\rangle = \exp\{z'^* z\}, \quad (2.29)$$

da qual decorre, de acordo com a equação (2.18), o potencial de Kähler:

$$f(z'^*, z) = z'^* z. \quad (2.30)$$

^{vi}A justaposição de dois vetores u e v , ambos com dimensão d , denota o produto matricial $uv = u_1 v_1 + u_2 v_2 + \dots + u_d v_d$.

Como esperado, $f(z'^*, z)$ é uma função analítica em seus dois argumentos. Então, com o auxílio da identidade (2.19), podemos calcular o fator $\mathcal{N}(z'^*, z)$ e, conseqüentemente, obtemos uma expressão normalizada para os estados coerentes canônicos:

$$|z\rangle = e^{-\frac{z'^*z}{2}} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_d=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^d \frac{z_j^{m_j}}{\sqrt{m_j!}} \right] |m_1, m_2, \dots, m_d\rangle. \quad (2.31)$$

Substituindo o resultado (2.30) na definição (2.20), obtemos a métrica associada ao espaço de parâmetros:

$$g(z'^*, z) = \mathbf{1}. \quad (2.32)$$

Observe que, de acordo com a última identidade, os estados coerentes canônicos estão associados a um espaço quociente com geometria plana. Outra quantidade relevante, que compõe muitos resultados nos capítulos posteriores, é o determinante da métrica:

$$\det[g(z'^*, z)] = 1, \quad (2.33)$$

o qual, devido à forma extremamente simples da expressão (2.32), apresenta cálculo trivial, que exibimos explicitamente neste momento apenas para uma comparação direta com os exemplos encontrados nas próximas subseções. Em seguida, utilizando a identidade (2.22), encontramos prontamente a medida de integração:

$$d\mu(z^*, z) = \kappa \frac{d^2z}{\pi^d}, \quad (2.34)$$

cujo fator de normalização pode ser determinado como:

$$\kappa = 1. \quad (2.35)$$

Observe que o fator κ não depende de um possível conjunto de índices, os quais especificariam as representações irredutíveis do grupo dinâmico empregado na construção dos estados coerentes canônicos. Evidentemente, este resultado era esperado, uma vez que H_4^d possui apenas uma única representação unitária irredutível.

Substituindo os resultados (2.34) e (2.35) na expressão (2.21), construímos uma resolução da identidade em \mathbb{B}^d :

$$\int \frac{d^2z}{\pi^d} |z\rangle \langle z| = \mathbf{1}. \quad (2.36)$$

Os estados coerentes canônicos estabelecem uma estrutura teórica aplicável em uma ampla variedade de sistemas físicos, devido à grande recorrência do grupo dinâmico H_4^d . Em especial, podemos citar os Hamiltonianos com o formato $H = H(\hat{q}, \hat{p})$, onde $\hat{q} = (\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_d)^T$ e $\hat{p} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_d)^T$ representam respectivamente os operadores de posição e momento linear. Esta possibilidade de utilização decorre do seguinte homomorfismo:

$$\hat{q}_j = \frac{\zeta_j}{\sqrt{2}} (a_j^\dagger + a_j), \quad (2.37a)$$

$$\hat{p}_j = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\zeta_j} (a_j^\dagger - a_j), \quad (2.37b)$$

no qual ζ_j simboliza um parâmetro real com dimensão de comprimento e valor arbitrário.

2.2.2 Estados Coerentes de Spin

Considere um sistema composto por d partículas localizadas e dotadas de spin. Em geral, podemos descrever o Hamiltoniano deste sistema como uma função do conjunto de operadores $\{\hat{J}_{k,x}, \hat{J}_{k,y}, \hat{J}_{k,z}\}$, para $k = 1, 2, \dots, d$, onde $\hat{J}_{k,x}$, $\hat{J}_{k,y}$ e $\hat{J}_{k,z}$ representam as três componentes cartesianas de momento angular da k -ésima partícula.

O conjunto $\{\hat{J}_{k,x}, \hat{J}_{k,y}, \hat{J}_{k,z}\}$, para um valor fixo de k , forma uma base para a álgebra $\mathfrak{su}(2)$, associada ao grupo $\text{SU}(2)$ pelo mapa exponencial (2.1). Portanto, podemos identificar o grupo dinâmico associado ao sistema completo de d partículas como o produto direto $\text{SU}^d(2) = \text{SU}^{(1)}(2) \times \text{SU}^{(2)}(2) \times \dots \times \text{SU}^{(d)}(2)$, no qual $\text{SU}^{(k)}(2)$ representa o grupo dinâmico para a k -ésima partícula tomada isoladamente. Os geradores de $\text{SU}^d(2)$ estão sujeitos às seguintes relações fundamentais de comutação⁵⁶:

$$[\hat{J}_{k,\alpha}, \hat{J}_{k',\beta}] = i\hbar\delta_{kk'} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_{k,\gamma}, \quad (2.38)$$

para $k, k' = 1, 2, \dots, d$ e $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$. Como resultado das relações anteriores, observamos que os operadores Casimir⁵⁷ $\hat{J}_k^2 = \hat{J}_{k,x}^2 + \hat{J}_{k,y}^2 + \hat{J}_{k,z}^2$ e os geradores $\hat{J}_{k,z}$, para $k = 1, 2, \dots, d$, formam um conjunto completo de observáveis comutantes para o nosso sistema de interesse. Conseqüentemente, os autovetores simultâneos de \hat{J}_k^2 e $\hat{J}_{k,z}$ formam uma base ortogonal para o espaço de Hilbert \mathbb{H} correspondente às d partículas localizadas:

$$\hat{J}_k^2 |J_1, J_2, \dots, J_d; M_1, M_2, \dots, M_d\rangle = J_k(J_k + 1)\hbar^2 |J_1, J_2, \dots, J_d; M_1, M_2, \dots, M_d\rangle, \quad (2.39a)$$

$$\hat{J}_{k,z} |J_1, J_2, \dots, J_d; M_1, M_2, \dots, M_d\rangle = M_k \hbar |J_1, J_2, \dots, J_d; M_1, M_2, \dots, M_d\rangle, \quad (2.39b)$$

onde $J_k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ e $M_k = -J_k, -J_k + 1, \dots, J_k - 1, J_k$. O conjunto de índices $\{J_1, J_2, \dots, J_d\}$ determina uma representação unitária irredutível de $\text{SU}^d(2)$. Logo, de acordo com as hipóteses da subseção 2.1.1, devemos especificar os valores de J_k de maneira a restringir a dinâmica do sistema ao subespaço de suporte de uma única representação irredutível do grupo dinâmico. Esta condição equivale a fixar a amplitude do momento angular intrínseco de cada partícula e, conseqüentemente, possui interpretação física bastante direta.

Doravante, limitaremos nosso sistema de interesse ao espaço de Hilbert $\mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$, no qual escolhemos um valor particular para o conjunto de índices $\{J_1, J_2, \dots, J_d\}$. Então, com o intuito de simplificar a notação, omitiremos a representação explícita destes índices nos elementos da base introduzida pelas equações (2.39). Note que $\mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$ constitui um subespaço de \mathbb{H} , tal que $\mathbb{H} = \bigoplus_{J_1, J_2, \dots, J_d} \mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$.

Os operadores de levantamento $\hat{J}_{k,+}$ e abaixamento $\hat{J}_{k,-}$, correspondentes à k -ésima partícula, são definidos em função dos geradores de $\mathfrak{su}(2)$ pela seguinte identidade:

$$\hat{J}_{k,\pm} = \hat{J}_{k,x} \pm i\hat{J}_{k,y}. \quad (2.40)$$

Então, com o auxílio das relações (2.38), podemos determinar a operação de $\hat{J}_{k,\pm}$ sobre os elementos normalizados da base:

$$\hat{J}_{k,\pm} |M_1, \dots, M_j, \dots, M_d\rangle = \hbar \sqrt{(J_k \mp M_k)(J_k \pm M_k + 1)} |M_1, \dots, M_j \pm 1, \dots, M_d\rangle. \quad (2.41)$$

Como resultado desta última equação, concluímos que $|-J_1, -J_2, \dots, -J_d\rangle$ representa o estado de mínimo peso em $\mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$. Conhecido o estado de referência, empregamos a definição (2.17) para a obtenção dos estados coerentes não-normalizados de $SU^d(2)$:

$$\begin{aligned} |z\rangle &= \exp\left(\sum_{k=1}^d z_k \hat{J}_{k,+}\right) |-J_1, -J_2, \dots, -J_d\rangle \\ &= \bigotimes_{k=1}^d \sum_{M_k=-J_k}^{J_k} \binom{2J_k}{J_k + M_k}^{\frac{1}{2}} z_k^{J_k + M_k} |M_k\rangle. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Em seguida, calculamos a sobreposição entre dois estados coerentes possivelmente distintos:

$$\{z'|z\rangle = \prod_{k=1}^d (1 + z_k'^* z_k)^{2J_k}. \quad (2.43)$$

Desta última identidade, decorre imediatamente a continuação analítica do potencial de Kähler:

$$f(z'^*, z) = 2 \sum_{k=1}^d J_k \ln(1 + z_k'^* z_k). \quad (2.44)$$

Agora, utilizando a fórmula (2.19), realizamos a normalização dos *estados coerentes de spin*⁵⁸:

$$|z\rangle = \bigotimes_{k=1}^d \frac{1}{(1 + z_k^* z_k)^{J_k}} \sum_{M_k=-J_k}^{J_k} \binom{2J_k}{J_k + M_k}^{\frac{1}{2}} z_k^{J_k + M_k} |M_k\rangle. \quad (2.45)$$

Efetuada as segundas derivadas cruzadas do resultado (2.44), obtemos a continuação analítica da métrica:

$$g_{kk'}(z'^*, z) = \frac{2J_k}{(1 + z_k'^* z_k)^2} \delta_{kk'}. \quad (2.46)$$

Note que, assim como no caso dos estados coerentes canônicos, a métrica possui forma diagonal, indicando a inexistência de acoplamento geométrico entre os diversos graus de liberdade do sistema. No entanto, diferentemente da subseção anterior, $g(z'^*, z)$ depende explicitamente dos parâmetros z'^* e z , evidenciando a curvatura natural do espaço de fase. Apesar desta complicação de origem topológica, o cálculo do determinante da métrica permanece trivial:

$$\det[g(z'^*, z)] = \prod_{k=1}^d \frac{2J_k}{(1 + z_k'^* z_k)^2}. \quad (2.47)$$

Como consequência direta desta última identidade, a medida de integração adquire um fator com dependência explícita nas coordenadas complexas do espaço de fase:

$$d\mu(z^*, z) = \kappa(J_1, J_2, \dots, J_d) \left[\prod_{k=1}^d \frac{2J_k}{(1 + z_k^* z_k)^2} \right] \frac{d^2 z}{\pi^d}. \quad (2.48)$$

Devido às múltiplas possibilidades de escolha para a representação unitária irredutível de $SU^d(2)$, a constante de normalização torna-se uma função dos índices de $\mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$:

$$\kappa(J_1, J_2, \dots, J_d) = \prod_{k=1}^d \frac{2J_k + 1}{2J_k}. \quad (2.49)$$

No entanto, para valores elevados das amplitudes de spin, a constante de normalização anterior aproxima-se do resultado (2.35), ou seja,

$$\kappa(J_1, J_2, \dots, J_d) \stackrel{J_1, J_2, \dots, J_d \gg 1}{\approx} 1. \quad (2.50)$$

Por fim, substituindo as expressões (2.48) e (2.49) na equação (2.21), obtemos a resolução da identidade em $\mathbb{H}_{\{J_1, J_2, \dots, J_d\}}$:

$$\int \frac{d^2 z}{\pi^d} \left[\prod_{k=1}^d \frac{2J_k + 1}{(1 + z_k^* z_k)^2} \right] |z\rangle \langle z| = \mathbf{1}. \quad (2.51)$$

2.2.3 Estados Coerentes Bosônicos de $SU(n)$

Considere um sistema composto por N bósons idênticos em n modos. Neste caso, diferentemente do exemplo discutido na subseção 2.2.1, assumiremos que o número total de partículas permanece invariante sob a dinâmica imposta pelo Hamiltoniano H . Por esta razão, torna-se conveniente a definição do *operador de número total de partículas*:

$$\hat{N} = \sum_{j=1}^n a_j^\dagger a_j. \quad (2.52)$$

Com o auxílio desta definição, podemos reformular a restrição sobre o Hamiltoniano em linguagem matemática:

$$[\hat{N}, H] = 0. \quad (2.53)$$

Observe que os elementos da base ortonormal $\{|m_1, m_2, \dots, m_n\rangle\}$, introduzida pelas equações (2.27), formam um conjunto completo de autovetores para o operador \hat{N} , cujos autovalores são descritos por $N = \sum_{j=1}^n m_j$. Uma vez que o sistema de interesse possui número total de partículas fixo e bem definido, concluímos que o espaço de Hilbert acessível dinamicamente é constituído pelo auto-espaço de \hat{N} com autovalor N , o qual denotaremos por \mathbb{B}_N^n .

A condição (2.53) equivale a exigir que H seja uma função dos *bilineares bosônicos* $a_j^\dagger a_k$, para $j, k = 1, 2, \dots, n$. Portanto, empregando as identidades canônicas (2.26), podemos encontrar as relações fundamentais de comutação entre os elementos geradores da dinâmica:

$$[a_\alpha^\dagger a_\beta, a_\gamma^\dagger a_\eta] = \delta_{\beta\gamma} a_\alpha^\dagger a_\eta - \delta_{\alpha\eta} a_\beta^\dagger a_\gamma, \quad (2.54)$$

onde $\alpha, \beta, \gamma, \eta = 1, 2, \dots, n$. Observe que os operadores $a_j^\dagger a_k$, juntamente com suas possíveis combinações lineares, constituem um espaço vetorial fechado por comutação. Entretanto, levando em consideração a conservação do número total de bósons, torna-se mais conveniente a

escolha de uma base de geradores constituída somente por operadores de traço nulo:

$$Q_\alpha = a_{\alpha+1}^\dagger a_{\alpha+1} - a_\alpha^\dagger a_\alpha, \quad (2.55a)$$

$$X_{\beta\gamma} = a_\beta^\dagger a_\gamma + a_\gamma^\dagger a_\beta, \quad (2.55b)$$

$$P_{\beta\gamma} = i(a_\beta^\dagger a_\gamma - a_\gamma^\dagger a_\beta), \quad (2.55c)$$

nos quais $\alpha = 1, 2, \dots, (n-1)$, $\beta, \gamma = 1, 2, \dots, n$ e $\beta > \gamma$. As relações (2.55) representam um homomorfismo entre os bilineares bosônicos e a base da álgebra $\mathfrak{su}(n)$ ⁵⁹. De fato, o espaço de Hilbert \mathbb{B}_N^n suporta uma *representação irredutível totalmente simetrizada* do grupo $SU(n)$ ⁵⁰. Inspecionando os geradores (2.55), podemos concluir que uma escolha possível do estado de referência é descrita pelo elemento $|0, 0, \dots, 0, N\rangle$, no qual apenas o último modo possui ocupação diferente de zero. Então, conhecidas todas as grandezas necessárias, empregamos a definição (2.17) na obtenção dos estados coerentes não-normalizados em \mathbb{B}_N^n :

$$\begin{aligned} |z\rangle &= \exp\left(\sum_{j=1}^{n-1} z_j a_j^\dagger a_n\right) |0, 0, \dots, 0, N\rangle \\ &= \sum_{m_1+m_2+\dots+m_n=N} \left(\frac{N!}{m_1!m_2!\dots m_n!}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^{n-1} z_j^{m_j}\right] |m_1, m_2, \dots, m_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Observe que o espaço de fase é parametrizado por $d = (n-1)$ variáveis complexas, ou seja, o número de graus de liberdade é inferior ao número de modos acessíveis no espaço de Fock bosônico. Evidentemente, esta diferença em relação aos resultados da subseção 2.1.1 provém da restrição sobre o número total de partículas. Utilizando a expressão anterior, calculamos a sobreposição entre dois estados coerentes possivelmente distintos:

$$\{z'|z\rangle = (1 + z'^* z)^N, \quad (2.57)$$

da qual resulta diretamente a continuação analítica do potencial de Kähler:

$$f(z'^*, z) = N \ln(1 + z'^* z). \quad (2.58)$$

Agora, substituindo esta formulação particular de $f(z'^*, z)$ na identidade (2.19), obtemos o fator de normalização necessário na construção dos *estados coerentes bosônicos de $SU(n)$* ⁶⁰:

$$|z\rangle = \sum_{m_1+m_2+\dots+m_n=N} \left(\frac{N!}{m_1!m_2!\dots m_n!}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^{n-1} \frac{z_j^{m_j}}{(1 + z^* z)^{\frac{N}{2}}}\right] |m_1, m_2, \dots, m_n\rangle. \quad (2.59)$$

Em seguida, realizando as derivadas cruzadas do potencial de Kähler, obtemos a continuação analítica para a métrica do espaço de fase^{vii}:

$$g(z'^*, z) = N \frac{(1 + z'^* z)\mathbb{1} - z'^* \otimes z}{(1 + z'^* z)^2}. \quad (2.60)$$

^{vii}O símbolo \otimes denota o produto diádico entre dois vetores. Ou seja, o resultado da multiplicação $u \otimes v$ representa uma matriz com elementos descritos por $[u \otimes v]_{jk} = u_j v_k$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.

Ao contrário dos exemplos discutidos anteriormente, a métrica associada aos estados coerentes de $SU(n)$ não é diagonal. Logo, os diferentes graus de liberdade do espaço de parâmetros estão acoplados geometricamente. Observe também que o cálculo geral do determinante de $g(z'^*, z)$ não permanece trivial:

$$\det[g(z'^*, z)] = \frac{N^{n-1}}{(1 + z'^* z)^n}. \quad (2.61)$$

Devido à curvatura natural do espaço de fase, as coordenadas complexas apresentam-se explicitamente no elemento de integração:

$$d\mu(z^*, z) = \kappa(N) \frac{N^{n-1}}{(1 + z^* z)^n} \frac{d^2 z}{\pi^{n-1}}, \quad (2.62)$$

cujo fator de normalização possui a seguinte forma específica:

$$\kappa(N) = \frac{(N + n - 1)!}{N! N^{n-1}}. \quad (2.63)$$

Note que, de maneira semelhante à expressão (2.50), a constante de normalização aproxima-se da unidade para valores de N bastante superiores ao número de modos n :

$$\kappa(N) \stackrel{N \gg n}{\approx} 1. \quad (2.64)$$

Empregando os resultados (2.62) e (2.63), podemos construir uma resolução da identidade em \mathbb{B}_N^n :

$$\int \frac{d^2 z}{\pi^{n-1}} \frac{(N + n - 1)!}{N!} \frac{|z\rangle\langle z|}{(1 + z^* z)^n} = \mathbb{1}. \quad (2.65)$$

Diferentemente dos resultados (2.32) e (2.46), a inversão da métrica (2.60) não representa uma tarefa simples para valores arbitrários de n , devido à presença de elementos não-nulos fora da diagonal principal. Portanto, objetivando as aplicações encontradas em capítulos posteriores, apresentamos a forma explícita para a inversa de $g(z'^*, z)$:

$$\xi(z'^*, z) = \frac{1 + z'^* z}{N} (\mathbb{1} + z'^* \otimes z). \quad (2.66)$$

Capítulo 3

Propagador Semiclássico

3.1 Apresentação

O *propagador quântico* na representação de estados coerentes é definido como a amplitude de transição entre o estado coerente inicial $|z_i\rangle$, no instante de tempo t_i , e o estado coerente final $\langle z_f|$, no instante de tempo t_f , ou seja,

$$K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \langle z_f | \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} H(t) dt \right] | z_i \rangle, \quad (3.1)$$

onde \hat{T} é o operador de ordenamento temporal e $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema, o qual pode depender explicitamente do tempo.

Em geral, podemos reformular o propagador quântico como uma *integral de caminho*³², constituída por contribuições do *funcional de ação* provenientes de todas as *trajetórias geométricas* sobre o espaço de fase que conectam os pontos z_i e z_f . Como esperado, o cálculo explícito de uma integral de caminho para um sistema físico arbitrário representa uma tarefa extremamente complicada. Resultados exatos são conhecidos somente para os casos mais simples, geralmente identificados com os Hamiltonianos lineares nos geradores do grupo dinâmico. Entretanto, as integrais de caminho possuem grande importância como ferramenta teórica na elaboração de diversas aplicações práticas da mecânica quântica, particularmente no desenvolvimento de abordagens aproximativas para a expressão (3.1).

A *aproximação semiclássica* consiste na expansão do funcional de ação até segunda ordem em torno de *trajetórias clássicas* adequadas, possibilitando a resolução analítica da integral de caminho correspondente ao propagador quântico. O resultado final deste procedimento é conhecido como o *propagador semiclássico*³⁷:

$$K_{sc}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) e^{\frac{i}{\hbar} [S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + I(z_f^*, z_i; t_f, t_i)] + \Lambda(z_f^*, z_i)}. \quad (3.2)$$

Por definição, as trajetórias clássicas representam as soluções do seguinte sistema de *equações*

de movimento:

$$\dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}}, \quad (3.3a)$$

$$\dot{\bar{z}} = \frac{i}{\hbar} \xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z}, \quad (3.3b)$$

no qual $\xi(\bar{z}, z) = g^{-1}(\bar{z}, z)$. Nas identidades anteriores, introduzimos a *Hamiltoniana clássica efetiva*, obtida do operador H por diversas prescrições equivalentes:

$$\mathcal{H}(\bar{z}, z; t) = \langle z | H(t) | z \rangle |_{z^* = \bar{z}} = \frac{\{\bar{z}^* | H(t) | z\}}{\{\bar{z}^* | z\}}. \quad (3.4)$$

Todos os funcionais componentes da fórmula semiclássica (3.2) são calculados sobre trajetórias clássicas específicas, caracterizadas por um conjunto de *condições temporais de contorno*:

$$z(t_i) = z_i, \quad (3.5a)$$

$$\bar{z}(t_f) = z_f^*. \quad (3.5b)$$

As equações diferenciais (3.3) usualmente não possuem solução única sob a imposição de condições de contorno. Por esta razão, inserimos um símbolo somatório na expressão (3.2), como indicação para a soma sobre todas as trajetórias sujeitas simultaneamente às identidades (3.3) e (3.5).

Note que as variáveis vetoriais complexas z e \bar{z} são *completamente independentes*, ou seja, geralmente $\bar{z}(t) \neq z^*(t)$. Esta *duplicação do espaço de fase* representa outra consequência direta da imposição de condições de contorno às equações clássicas de movimento. Se supusermos a igualdade entre $\bar{z}(t)$ e $z^*(t)$, concluiríamos que as equações diferenciais vetoriais (3.3a) e (3.3b) são redundantes e, conseqüentemente, as condições de contorno $z(t_i) = z_i$ e $z^*(t_f) = z_f^*$ tornariam o problema *sobredeterminado*. Portanto, o *espaço de fase duplicado* apresenta-se como um conceito essencial para a solução das equações clássicas de movimento na representação de estados coerentes.

O *funcional de ação*, do qual as equações clássicas de movimento decorrem por extremização, possui o seguinte formato em parametrização complexa:

$$\frac{i}{\hbar} S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(\dot{\bar{z}}, \dot{z}, \bar{z}, z; t) dt + \frac{i}{\hbar} \Gamma(z_f^*, z(t_f), \bar{z}(t_i), z_i), \quad (3.6a)$$

$$\frac{i}{\hbar} L(\dot{\bar{z}}, \dot{z}, \bar{z}, z; t) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}, z; t), \quad (3.6b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \Gamma(z_f^*, z(t_f), \bar{z}(t_i), z_i) = \frac{1}{2} f(z_f^*, z(t_f)) + \frac{1}{2} f(\bar{z}(t_i), z_i), \quad (3.6c)$$

onde introduzimos as quantidades auxiliares L , correspondente à *Lagrangiana* do sistema, e Γ , conhecida como *termo de contorno*. Embora a presença da função Γ seja pouco usual na maioria das discussões básicas acerca da dinâmica clássica ou quântica, esta grandeza mostra-se fundamental na obtenção correta das equações (3.3) sob as condições (3.5). Observe que, de maneira geral, a Hamiltoniana clássica e o funcional de ação assumem valores complexos sobre o espaço de fase duplicado.

Outro componente importante na construção do propagador semiclássico é representado pelo *termo de correção à ação*ⁱ:

$$\frac{i}{\hbar}I(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \frac{i}{4\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \text{tr} \left[\frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\xi \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\xi^T \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{z}} \right) \right] dt. \quad (3.7)$$

Devido à sobrecompleteza do conjunto de estados coerentes, a aproximação semiclássica pode ser corretamente efetuada por vários procedimentos distintos, os quais correspondem às diversas possibilidades de escolha para um esquema de classicalização. Cada uma destas abordagens, caracterizadas por prescrições não-equivalentes para a Hamiltoniana clássica em termos do operador H , resulta em uma formulação completamente diferente para o termo de correção^{22;61}.

Os fatores de normalização dos estados coerentes inicial e final do propagador quântico também estão presentes na expressão (3.2). No entanto, esta informação está codificada na definição do *termo de normalização*:

$$\Lambda(z_f^*, z_i) = -\frac{1}{2}f(z_f^*, z_f) - \frac{1}{2}f(z_i^*, z_i), \quad (3.8)$$

Finalmente, apresentamos o elemento exterior à exponencial em K_{sc} , geralmente designado como o *pré-fator do propagador semiclássico*:

$$\mathcal{C}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \left\{ \left[\frac{\det g(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\det g(\bar{z}(t_f), z(t_f))} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.9)$$

A quantidade $\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}$ está diretamente relacionada a um bloco da *matriz tangente* \mathbb{M} , a qual é responsável pela dinâmica de pequenos deslocamentos em torno de uma trajetória clássica. Em geral, as aplicações práticas e teóricas do propagador semiclássico são amplamente facilitadas por um conhecimento aprofundado das propriedades de \mathbb{M} . Por esta razão, reservamos o apêndice A para uma discussão detalhada de alguns aspectos da dinâmica clássica linearizada.

3.2 Dedução

Nesta seção, realizaremos a demonstração de todos os resultados apresentados no início deste capítulo. Embora a dedução minuciosa do propagador semiclássico represente uma longa série

ⁱA derivada de um vetor d_1 -dimensional u por um vetor d_2 -dimensional v simboliza a matriz cujos elementos são descritos por $\left[\frac{\partial u}{\partial v} \right]_{jk} = \frac{\partial u_j}{\partial v_k}$, para $j = 1, 2, \dots, d_1$ e $k = 1, 2, \dots, d_2$.

de exercícios estritamente formais, acreditamos que uma análise crítica destes fundamentos teóricos possa fornecer uma compreensão bastante aprofundada da correspondência entre as mecânicas clássica e quântica.

No entanto, devemos enfatizar que a leitura da presente seção não é necessária para o entendimento adequado dos próximos capítulos. Em geral, a aplicação e a demonstração de cada fórmula semiclássica são desenvolvidas de maneira independente ao longo desta tese.

A expressão (3.2) foi obtida primeiramente por Kochetov³⁷, como uma aplicação direta de sua formulação original para a integral de caminho na representação de estados coerentes arbitrários³⁶. Contudo, em nenhum dos trabalhos citados foi apresentada uma dedução detalhada para a generalização do propagador semiclássico, uma vez que os resultados exibidos constituem apenas a extensão imediata dos cálculos específicos para o grupo $SU(2)$ ³².

Sob certos aspectos, as seguintes subseções representam uma generalização da demonstração proposta por Braun e Garg^{23;35}, a qual se restringe aos estados coerentes canônicos e de spin. No entanto, nossos resultados também incorporam alguns novos elementos introduzidos por uma recente dedução para o propagador semiclássico de $SU(n)$ ⁶².

3.2.1 Integral de Caminho

Com o objetivo de reformular a expressão (3.1) como uma integral de caminho, realizamos a divisão do intervalo de propagação ($t_f - t_i$) em M partes idênticas:

$$\varepsilon = \frac{t_f - t_i}{M}. \quad (3.10)$$

Deste modo, podemos reescrever o propagador quântico na forma de um produto:

$$K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \langle z_f | \hat{T} \prod_{j=1}^M \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{j-1}}^{t_j} H(t) dt \right] | z_i \rangle, \quad (3.11)$$

no qual definimos a notação para o *tempo discretizado*

$$t_j = t_i + j\varepsilon, \quad (3.12)$$

com $j = 0, 1, \dots, M$. Para M suficientemente grande, podemos aproximar a integral na equação (3.11) por $H(t_j)\varepsilon$. Desta forma, o operador de ordenamento temporal torna-se desnecessário e o propagador adquire o seguinte valor aproximado:

$$K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) \approx \langle z_f | \prod_{j=1}^M \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t_j)\varepsilon \right] | z_i \rangle. \quad (3.13)$$

No *limite de tempo contínuo*, representado por $M \rightarrow \infty$ ou $\varepsilon \rightarrow 0$ com $M\varepsilon = (t_f - t_i)$, a aproximação anterior deve convergir novamente ao resultado exato. Então, sob a aplicação

deste limite, inserimos uma resolução da identidade (2.21) entre cada fator do operador de evolução temporal na expressão (3.13):

$$K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{k=1}^{M-1} d\mu(z^{k*}, z^k) \right] \prod_{j=1}^M \langle z^j | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_j) \varepsilon} | z^{j-1} \rangle. \quad (3.14)$$

Nesta última equação, introduzimos a notação para uma *trajetória discretizada* no espaço de fase:

$$z^j = z(t_j), \quad (3.15a)$$

$$z^{j*} = z^*(t_j), \quad (3.15b)$$

para $j = 1, 2, \dots, (M-1)$. Também podemos estender esta definição para as condições de contorno do propagador:

$$z^0 = z(t_i) = z_i, \quad (3.16a)$$

$$z^{M*} = z^*(t_f) = z_f^*. \quad (3.16b)$$

Considerando o limite de tempo contínuo, podemos realizar a seguinte aproximação de primeira ordem em ε :

$$\begin{aligned} \langle z^j | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_j) \varepsilon} | z^{j-1} \rangle &\approx \langle z^j | \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} H(t_j) \varepsilon \right) | z^{j-1} \rangle \\ &= \langle z^j | z^{j-1} \rangle \left[1 - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right] \\ &\approx \langle z^j | z^{j-1} \rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Na equação anterior, definimos a *Hamiltoniana efetiva discretizada*:

$$\mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) = \frac{\langle z^j | H(t_j) | z^{j-1} \rangle}{\langle z^j | z^{j-1} \rangle} = \frac{\{z^j | H(t_j) | z^{j-1}\}}{\{z^j | z^{j-1}\}}. \quad (3.18)$$

Agora, substituindo a identidade (3.17) no propagador (3.14), obtemos:

$$K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{k=1}^{M-1} d\mu(z^{k*}, z^k) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{S}_d \right]. \quad (3.19)$$

Nesta última equação, com o intuito de simplificar a notação, definimos a seguinte quanti-

dade:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \tilde{S}_d &= \sum_{j=1}^M \left[\ln \langle z^j | z^{j-1} \rangle - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right] \\
&= \sum_{j=1}^M \left[f(z^{j*}, z^{j-1}) - \frac{1}{2} f(z^{j*}, z^j) - \frac{1}{2} f(z^{j-1*}, z^{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right] \\
&= \sum_{j=1}^M \left[f(z^{j*}, z^{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right] - \sum_{j=1}^{M-1} f(z^{j*}, z^j) \\
&\quad - \frac{1}{2} f(z_f^*, z_f) - \frac{1}{2} f(z_i^*, z_i).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Embora tenhamos efetuado diversas manipulações matemáticas, o resultado (3.19) ainda representa uma formulação exata para o propagador quântico, completamente equivalente à expressão original. No entanto, visando a implementação de aproximações semiclássicas, assumiremos que apenas as trajetórias contínuas sobre o espaço de fase são relevantes no cálculo do propagador.

Não há qualquer garantia que, no regime quântico, as trajetórias descontínuas tenham contribuição nula ou insignificante à dinâmica de um sistema descrito por uma integral de caminho. Ademais, poderíamos esperar que as trajetórias descontínuas tenham especial importância em fenômenos quânticos característicos, como o tunelamento e o emaranhamento. No entanto, este panorama é inteiramente modificado nos regimes clássico e semiclássico, caracterizados por elevados valores de $|\tilde{S}_d|$ em relação a \hbar . Nestes casos, somente os caminhos suficientemente próximos aos valores estacionários de \tilde{S}_d são poupados pela interferência de fase destrutiva.

No limite $\varepsilon \rightarrow 0$, os valores estacionários do expoente (3.20) adquirem a forma de caminhos contínuos, identificados como as trajetórias clássicas. Portanto, para os propósitos da dinâmica semiclássica no limite temporal contínuo, precisamos considerar apenas os caminhos que apresentam valores consecutivos de z^{j*} e z^j bastante próximos.

De maneira a promover o tratamento privilegiado das trajetórias contínuas, podemos efetuar aproximações sobre o expoente \tilde{S}_d , sob o pressuposto que as quantidades $|z^{j*} - z^{j-1*}|$ e $|z^j - z^{j-1}|$ possuem a mesma ordem de grandeza de ε . Com a aplicação desta hipótese, obtemos as seguintes relações auxiliares:

$$f(z^{j*}, z^j) \approx f(z^{j+1*}, z^j) + \frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j+1*}} (z^{j*} - z^{j+1*}), \tag{3.21a}$$

$$f(z^{j*}, z^j) \approx f(z^{j*}, z^{j-1}) + \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}), \tag{3.21b}$$

para $j = 1, 2, \dots, (M - 1)$. Então, utilizando as aproximações (3.21), reescrevemos o segundo

somatório na penúltima linha da equação (3.20):

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M-1} f(z^{j*}, z^j) &\approx \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \left[\frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j+1*}} (z^{j*} - z^{j+1*}) + \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=2}^M f(z^{j*}, z^{j-1}) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} f(z^{j*}, z^{j-1}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Com o auxílio do resultado anterior, escrevemos uma nova expressão para a fase do integrando do propagador:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_d &\approx \frac{1}{2} f(z_f^*, z^{M-1}) + \frac{1}{2} f(z^{1*}, z_i) - \frac{1}{2} f(z_f^*, z_f) - \frac{1}{2} f(z_i^*, z_i) - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^M \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \left[\frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j+1*}} (z^{j+1*} - z^{j*}) - \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}) \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ainda supondo que, para M suficientemente grande, os valores de z^{j*} e z^j formam uma trajetória contínua para qualquer valor de j , estendemos as aproximações (3.21) para os extremos do intervalo de tempo:

$$f(z_i^*, z_i) \approx f(z^{1*}, z_i) + \frac{\partial f(z^{1*}, z_i)}{\partial z^{1*}} (z_i^* - z^{1*}), \quad (3.24a)$$

$$f(z_f^*, z_f) \approx f(z_f^*, z^{M-1}) + \frac{\partial f(z_f^*, z^{M-1})}{\partial z^{M-1}} (z_f - z^{M-1}). \quad (3.24b)$$

Observe que, nas expressões anteriores, utilizamos as definições $z^{0*} = z_i^*$ e $z^M = z_f$. Empregando as equações (3.24), podemos reescrever a quantidade (3.23) como um único somatório:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_d &\approx \sum_{j=1}^M \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} (z^{j*} - z^{j-1*}) - \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}) \right] \right. \\ &\left. - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1}) \varepsilon \right\}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Os valores de z^{j*} e z^j que extremizam \tilde{S}_d formam uma *trajetória clássica discretizada*. Portanto, calculando as primeiras derivadas de \tilde{S}_d e igualando os resultados a zero, encontramos um conjunto de equações algébricas para os valores clássicos dos parâmetros complexos. Então,

a partir da expressão (3.25), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{S}_d}{\partial z^{j*}} &\approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*2}} (z^{j*} - z^{j-1*}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*} \partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} - \frac{1}{2} \frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j+1*}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} \varepsilon, \end{aligned} \quad (3.26a)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{S}_d}{\partial z^j} &\approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j \partial z^{j+1*}} (z^{j+1*} - z^{j*}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j2}} (z^{j+1} - z^j) \\ &- \frac{1}{2} \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} + \frac{1}{2} \frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j} \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.26b)$$

Descartando contribuições quadráticas em ε , podemos simplificar significativamente as equações anteriores. Com este intuito, utilizamos as seguintes aproximações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j+1*}} &\approx \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} + \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*2}} (z^{j+1*} - z^{j*}) \\ &+ \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*} \partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}), \end{aligned} \quad (3.27a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j-1}} &\approx \frac{\partial f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j} + \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j2}} (z^{j-1} - z^j) \\ &+ \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j \partial z^{j+1*}} (z^{j*} - z^{j+1*}), \end{aligned} \quad (3.27b)$$

as quais são válidas em primeira ordem no intervalo temporal ε . Portanto, as derivadas de \tilde{S}_d podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{S}_d}{\partial z^{j*}} &\approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*2}} (-z^{j+1*} + 2z^{j*} - z^{j-1*}) - \frac{\partial^2 f(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*} \partial z^{j-1}} (z^j - z^{j-1}) \\ &- \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} \varepsilon, \end{aligned} \quad (3.28a)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{S}_d}{\partial z^j} &\approx \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j \partial z^{j+1*}} (z^{j+1*} - z^{j*}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^{j2}} (z^{j+1} - 2z^j + z^{j-1}) \\ &- \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j} \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.28b)$$

Note que os termos proporcionais a $(z^{j+1} - 2z^j + z^{j-1})$ e $(z^{j+1*} - 2z^{j*} z^{j-1*})$ podem ser eliminados, pois representam grandezas da ordem de ε^2 sob a suposição de trajetórias contínuas. Logo, considerando apenas os termos lineares em ε nas aproximações (3.28), chegamos

finalmente às equações de movimento clássicas discretizadas:

$$g^T(z^{j*}, z^{j-1})(z^j - z^{j-1}) = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j*}, z^{j-1})}{\partial z^{j*}} \varepsilon, \quad (3.29a)$$

$$g(z^{j+1*}, z^j)(z^{j+1*} - z^{j*}) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^{j+1*}, z^j)}{\partial z^j} \varepsilon, \quad (3.29b)$$

para $j = 1, 2, \dots, (M-1)$. Embora as coordenadas z^{j*} simbolizem as variáveis complexo-conjugadas de z^j , vemos que as expressões (3.29a) e (3.29b) não são redundantes para um valor escolhido de j , uma vez que os dois conjuntos de equações estão deslocados parcialmente por um passo de tempo. Portanto, possuímos $2(M-1)$ equações complexas para as $(M-1)$ variáveis da trajetória clássica, visto que as quantidades $z^0 = z_i$ e $z^{M*} = z_f^*$ já estão determinadas pelas condições de contorno (3.16).

O problema imposto pelas identidades (3.29) está *sobredeterminado* e, conseqüentemente, não possui solução para um Hamiltoniano arbitrário. Para resolver esta questão, podemos supor que os valores de z^{j*} são completamente independentes de z^j . De maneira geral, esta duplicação no número de variáveis disponíveis estabelece um sistema de equações algébricas bem determinado.

A *duplicação do espaço de fase* torna-se possível somente devido à ausência das quantidades $z^M = z_f$ e $z^{0*} = z_i^*$ nas identidades (3.29), pois estes valores estão atrelados aos seus complexo-conjugados pelas condições de contorno. Também por este motivo, concluímos que $|z^{0*} - z^{1*}|$ e $|z^M - z^{M-1}|$ não representam grandezas infinitesimais para uma trajetória clássica arbitrária e, portanto, as aproximações (3.24) não são válidas em primeira ordem no intervalo ε .

A conclusão anterior invalida o resultado (3.25), mas ainda permite que as equações (3.29) sejam deduzidas corretamente. Para este fim, precisamos apenas substituir as identidades (3.24) pelas seguintes aproximações:

$$f(z^{1*}, z_i) \approx f(z^*(t_i), z_i) + \frac{\partial f(z^{1*}, z_i)}{\partial z^{1*}} (z^{1*} - z^*(t_i)), \quad (3.30a)$$

$$f(z_f^*, z^{M-1}) \approx f(z_f^*, z(t_f)) - \frac{\partial f(z_f^*, z^{M-1})}{\partial z^{M-1}} (z(t_f) - z^{M-1}), \quad (3.30b)$$

nas quais $z^*(t_i)$ e $z(t_f)$ representam os valores corretos destas variáveis dinâmicas nos extremos do intervalo de tempo. Realizadas as considerações pertinentes, o limite temporal contínuo das equações de movimento discretizadas é prontamente obtido:

$$g^T(z^*, z) \dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z^*}, \quad (3.31a)$$

$$g(z^*, z) \dot{z}^* = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z}. \quad (3.31b)$$

Nestas últimas identidades, introduzimos também o limite contínuo para a *Hamiltoniana clássica efetiva*:

$$\mathcal{H}(z^*, z) = \langle z | H | z \rangle. \quad (3.32)$$

Se persistirmos na interpretação de $z^*(t)$ como o conjunto de variáveis complexo-conjugadas em relação a $z(t)$, é evidente que as equações de movimento (3.31) tornam-se herdeiras da sobre-determinação de suas versões discretizadas. Nesta nova situação, as identidades (3.31a) e (3.31b) são precisamente redundantes, o que implica em uma única equação diferencial vetorial de primeira ordem para as duas condições de contorno $z^*(t_f) = z_f^*$ e $z(t_i) = z_i$. Logo, excetuando casos acidentais, o sistema (3.31) não possui solução sob as restrições (3.16).

No entanto, de maneira similar ao caso discretizado, podemos supor que a variável vetorial $z^*(t)$ é completamente independente de $z(t)$. Esta duplicação no número de graus de liberdade clássicos elimina a redundância entre as identidades (3.31a) e (3.31b). Conseqüentemente, passamos a possuir um problema bem determinado, composto por duas equações diferenciais de primeira ordem sujeitas a duas condições de contorno. É interessante observar que a descrição da trajetória clássica em termos de quantidades independentes $z^*(t)$ e $z(t)$ possui origem na representação discretizada, devido ao deslocamento temporal entre as expressões (3.29a) e (3.29b).

Para indicar explicitamente a duplicação do espaço de fase nos desenvolvimentos futuros, introduzimos uma mudança de notação:

$$z^*(t) \rightarrow \bar{z}(t). \quad (3.33)$$

Devemos enfatizar que, no restante deste trabalho, continuaremos a utilizar a quantidade $z^*(t)$, mas somente para simbolizar inequivocamente a operação de conjugação complexa sobre o vetor $z(t)$. Excetuando algumas situações especiais, em grande parte comentadas durante a elaboração dos resultados posteriores, a notação (3.33) geralmente implica em $\bar{z}(t) \neq z^*(t)$.

Com exceção de uma evidente multiplicação pela matriz $\xi(\bar{z}, z) = g^{-1}(\bar{z}, z)$, note que as equações de movimento (3.3) representam um exemplo imediato de aplicação da transformação (3.33), pois decorrem simplesmente de uma modificação na notação das identidades (3.31).

Considerando o limite temporal contínuo no espaço de fase duplicado, as condições de contorno (3.16) adquirem o formato apresentado na seção anterior, pelas equações (3.5). Neste caso, devemos notar que as quantidades $\bar{z}(t_i)$ e $z(t_f)$ não estão determinadas por restrições sobre o propagador, ou seja, de maneira geral

$$\bar{z}(t_i) \neq z_i^*, \quad (3.34a)$$

$$z(t_f) \neq z_f. \quad (3.34b)$$

Como discutido anteriormente, as identidades (3.24) não são válidas no espaço de fase duplicado, pois $|z_i^* - \bar{z}^1|$ e $|z_f - z^{M-1}|$ representam grandezas finitas no limite contínuo, em concordância com as relações (3.34). Logo, sob as condições de contorno (3.16), o limite contínuo de \tilde{S}_d geralmente não pode ser realizado a partir da equação (3.25), a qual está fundamentada em aproximações inconsistentes com a exigência de linearidade no parâmetro ε . Contudo, sem qualquer prejuízo, podemos obter diretamente da equação (3.23) a forma contínua para a fase

do propagadorⁱⁱ:

$$\frac{i}{\hbar}\tilde{S} = \frac{i}{\hbar}S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + \Lambda(z_f^*, z_i). \quad (3.35)$$

A quantidade Λ simboliza novamente o termo de normalização, introduzido na seção 3.1 pela equação (3.8). Em função da Lagrangiana L e do termo de contorno Γ , o funcional de ação S correspondente ao resultado (3.35) possui a seguinte forma:

$$\frac{i}{\hbar}S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(\dot{z}^*, \dot{z}, z^*, z; t) dt + \frac{i}{\hbar}\Gamma(z_f^*, z(t_f), z^*(t_i), z_i), \quad (3.36a)$$

$$\frac{i}{\hbar}L(\dot{z}^*, \dot{z}, z^*, z; t) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f(z^*, z)}{\partial z^*} \dot{z}^* - \frac{\partial f(z^*, z)}{\partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(z^*, z), \quad (3.36b)$$

$$\frac{i}{\hbar}\Gamma(z_f^*, z(t_f), z^*(t_i), z_i) = \frac{1}{2}f(z_f^*, z(t_f)) + \frac{1}{2}f(z^*(t_i), z_i). \quad (3.36c)$$

Observe que, diferentemente da definição apresentada na seção anterior pelas equações (3.6), não empregamos a notação (3.33) nas identidades (3.36), pois a duplicação do espaço de fase não é estritamente necessária para a avaliação do propagador quântico dentro da aproximação com trajetórias contínuas.

A princípio, a integral de caminho (3.19) é constituída por trajetórias puramente geométricas, sujeitas apenas às condições de contorno (3.16). De maneira distinta, as trajetórias clássicas devem respeitar adicionalmente às equações de movimento (3.31) e, conseqüentemente, precisam residir em um espaço de fase ampliado. Portanto, a duplicação dos graus de liberdade clássicos torna-se indispensável para o cálculo do propagador somente com a realização da aproximação semiclássica, devido à expansão do funcional de ação em torno de seus valores extremos.

Empregando a identidade (3.35), obtemos o limite temporal contínuo do propagador (3.19):

$$\tilde{K}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \int D\mu(z^*, z) \exp \left[\frac{i}{\hbar}S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + \Lambda(z_f^*, z_i) \right], \quad (3.37)$$

o qual descrevemos como uma integral sobre a seguinte *medida de caminho*:

$$D\mu(z^*, z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} d\mu(z^{j*}, z^j). \quad (3.38)$$

Observe que a expressão (3.37) possui notação diferenciada, uma vez que este resultado geralmente representa uma aproximação para o propagador quântico, na qual assumimos que as trajetórias descontínuas sobre o espaço de fase possuem contribuição irrelevante ao cálculo da integral de caminho.

ⁱⁱNote que o subíndice d é utilizado para indicar os funcionais definidos sobre trajetórias temporalmente discretizadas. Evidentemente, o limite de tempo contínuo destes funcionais é simbolizado com a omissão do subíndice d .

Entretanto, em algumas situações de interesse, a quantidade \tilde{K} demonstra correspondência exata com a definição (3.1). Em particular, no caso dos estados coerentes canônicos, as equações (3.21-3.23) e (3.26-3.28) não constituem relações aproximadas, de forma que os propagadores (3.19) e (3.37) permanecem equivalentes.

3.2.2 Primeira Variação do Funcional de Ação

Nesta subseção deduziremos uma série de identidades úteis relacionadas ao funcional de ação. Além disto, tendo em vista os nossos desenvolvimentos futuros, utilizaremos aqui a notação (3.33), adequada ao espaço de fase duplicado. Resultados análogos para o espaço de fase simplesⁱⁱⁱ constituem casos particulares das expressões apresentadas a seguir, pois podemos recuperá-los sob a restrição $\bar{z}(t) = z^*(t)$.

O funcional de ação S , a Lagrangiana L e o termo de contorno Γ estão definidos, em notação apropriada ao espaço de fase duplicado, pelas equações (3.6). Semelhantemente, a continuação analítica para a Hamiltoniana clássica efetiva \mathcal{H} está descrita, em termos do operador Hamiltoniano H , pela identidade (3.4).

Com o intuito de calcular a primeira variação do funcional S , incluindo pequenos deslocamentos no intervalo de tempo e nas extremidades da trajetória, introduzimos as seguintes quantidades:

$$z' = z(t_i + \delta t_i) \approx z(t_i) + \dot{z}(t_i)\delta t_i, \quad (3.39a)$$

$$\bar{z}' = \bar{z}(t_i + \delta t_i) \approx \bar{z}(t_i) + \dot{\bar{z}}(t_i)\delta t_i, \quad (3.39b)$$

$$z'' = z(t_f + \delta t_f) \approx z(t_f) + \dot{z}(t_f)\delta t_f, \quad (3.39c)$$

$$\bar{z}'' = \bar{z}(t_f + \delta t_f) \approx \bar{z}(t_f) + \dot{\bar{z}}(t_f)\delta t_f, \quad (3.39d)$$

cujos desvios de primeira ordem são dados por:

$$\delta z' = \delta z(t_i) + \dot{z}(t_i)\delta t_i, \quad (3.40a)$$

$$\delta \bar{z}' = \delta \bar{z}(t_i) + \dot{\bar{z}}(t_i)\delta t_i, \quad (3.40b)$$

$$\delta z'' = \delta z(t_f) + \dot{z}(t_f)\delta t_f, \quad (3.40c)$$

$$\delta \bar{z}'' = \delta \bar{z}(t_f) + \dot{\bar{z}}(t_f)\delta t_f. \quad (3.40d)$$

Aplicando as definições anteriores, escrevemos uma formulação geral para a primeira varia-

ⁱⁱⁱEmpregamos o termo “espaço de fase simples” em contrapartida à definição do espaço duplicado. Deste modo, procuramos evitar possíveis ambiguidades nas referências ao espaço de fase usual, no qual a duplicação dos graus de liberdade está ausente.

ção do funcional de ação:

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial z} \delta z + \frac{\partial L}{\partial \bar{z}} \delta \bar{z} + \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \delta \dot{z} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{z}}} \delta \dot{\bar{z}} \right] dt + L|_{t_f} \delta t_f - L|_{t_i} \delta t_i \\
&\quad + \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_i)} \delta z' + \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)} \delta \bar{z}' + \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_f)} \delta z'' + \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_f)} \delta \bar{z}'' \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \left[\frac{\partial L}{\partial z} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) \right] \delta z + \left[\frac{\partial L}{\partial \bar{z}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{z}}} \right) \right] \delta \bar{z} \right\} dt \\
&\quad + L|_{t_f} \delta t_f - L|_{t_i} \delta t_i + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \delta z \right]_{t_i}^{t_f} + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{z}}} \delta \bar{z} \right]_{t_i}^{t_f} \\
&\quad + \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_i)} \delta z' + \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)} \delta \bar{z}' + \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_f)} \delta z'' + \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_f)} \delta \bar{z}'' .
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Agora, utilizando explicitamente a expressão (3.6b), calculamos as primeiras derivadas da Lagrangiana:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \dot{z} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z}, \tag{3.42a}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \dot{\bar{z}} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z} \dot{z} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}}, \tag{3.42b}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial z}, \tag{3.42c}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{z}}} = \frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}}. \tag{3.42d}$$

Por completeza, exibimos também as derivadas temporais necessárias na construção de δS :

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \dot{z} \right], \tag{3.43a}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{z}}} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z} \dot{z} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \dot{\bar{z}} \right]. \tag{3.43b}$$

Então, empregando a identidade (3.6), obtemos as primeiras derivadas do termo de contorno:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_i)} = \frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)}, \quad (3.44a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)} = \frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)}, \quad (3.44b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial z(t_f)} = \frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)}, \quad (3.44c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{z}(t_f)} = \frac{1}{2} \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)}. \quad (3.44d)$$

Substituindo os resultados (3.42)-(3.44) na equação (3.41), reescrevemos a variação do funcional de ação:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \delta S = & \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \left[g(\bar{z}, z) \dot{\bar{z}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \right] \delta z + \left[-g^T(\bar{z}, z) \dot{z} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \right] \delta \bar{z} \right\} dt \\ & - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \delta t_f + \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)} \delta \bar{z}'' \\ & + \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \delta t_i + \frac{\partial f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)} \delta z'. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Sob as restrições $\delta \bar{z}(t_f) = \delta z(t_i) = 0$ e $\delta t_f = \delta t_i = 0$, correspondentes a condições de contorno e intervalo de tempo fixos, a identidade $\delta S = 0$ resulta novamente nas equações de movimento (3.31), mas em notação adequada ao espaço de fase duplicado. Como esperado, as trajetórias clássicas são identificadas como os extremos do funcional de ação.

O funcional S , quando calculado sobre uma trajetória extrema, recebe a denominação de *ação clássica*. Neste caso, a integral constituinte da expressão (3.45) torna-se identicamente nula, possibilitando-nos encontrar as seguintes derivadas parciais:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t_i} = \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}(t_i), z(t_i)), \quad (3.46a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t_f} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}(t_f), z(t_f)), \quad (3.46b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial z(t_i)} = \frac{\partial f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)}, \quad (3.46c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial \bar{z}(t_f)} = \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)}. \quad (3.46d)$$

As segundas derivadas da ação clássica em relação aos extremos da trajetória decorrem imediatamente dos resultados anteriores:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{z}(t_f)^2} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)^2} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (3.47a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \quad (3.47b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (3.47c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial z(t_i)^2} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)^2} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)}. \quad (3.47d)$$

De acordo com estas últimas identidades, os blocos da matriz \mathbb{T} , definidos no apêndice A, estão diretamente relacionados com as derivadas duplas da ação clássica.

3.2.3 Aproximação Semiclássica

A aproximação semiclássica ao propagador consiste basicamente em expandir o funcional de ação, para condições de contorno e intervalo de propagação fixos, até segunda ordem em torno de uma trajetória clássica^{iv}:

$$S \approx S_c + \frac{1}{2} \delta^2 S_c, \quad \delta S_c = 0. \quad (3.48)$$

A decomposição anterior corresponde à aplicação do *método do ponto de sela*⁶³ ao cálculo de uma integral de caminho. Espera-se que este método assintótico produza resultados satisfatórios para valores suficientemente elevados do expoente no integrando do propagador (3.37), ou seja, para $|S| \gg \hbar$.

Como discutido na subseção (3.2.1), a existência de uma solução para as equações clássicas de movimento sob condições de contorno está subordinada à duplicação do número de graus de liberdade. Portanto, precisamos estender a definição (3.37) ao espaço de fase duplicado, de maneira a incluir a trajetória clássica na integral de caminho. Então, como preparação para a expansão (3.48), reescrevemos o limite contínuo do propagador quântico de acordo com a notação (3.33):

$$\tilde{K}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \int D\mu(\bar{z}, z) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + \Lambda(z_f^*, z_i) \right]. \quad (3.49)$$

Note que a modificação mais evidente na equação anterior, em comparação com a expressão

^{iv}O subíndice c é utilizado para indicar os funcionais calculados sobre uma trajetória clássica. No entanto, para simplificar a notação, omitiremos o subíndice c sempre que sua ausência não provocar ambiguidades.

(3.37), está presente na medida de caminho:

$$D\mu(\bar{z}, z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} d\mu(\bar{z}^j, z^j), \quad (3.50a)$$

$$d\mu(\bar{z}^j, z^j) = \kappa(l) \det [g(\bar{z}^j, z^j)] \prod_{k=1}^d \frac{d\bar{z}_k^j dz_k^j}{2\pi i}. \quad (3.50b)$$

A inserção da notação (3.33) na identidade (3.50b) indica implicitamente que, para cada valor de j e k , o domínio de integração foi transferido do plano complexo para uma superfície bidimensional no espaço duplicado, a qual contém um único ponto da trajetória clássica. Esta deformação do domínio de integração somente é permitida se o integrando do propagador representar uma função analítica de \bar{z}_k^j e z_k^j na região entre as duas superfícies consideradas.

Objetivando o cálculo da segunda variação $\delta^2 S_c$, introduzimos novas variáveis para a integral de caminho:

$$\eta(t) = z(t) - z_c(t), \quad (3.51a)$$

$$\bar{\eta}(t) = \bar{z}(t) - \bar{z}_c(t). \quad (3.51b)$$

As funções $\bar{z}_c(t)$ e $z_c(t)$ denotam uma solução das equações de movimento (3.3) sob as condições de contorno (3.5). Consequentemente, as quantidades $\bar{\eta}(t)$ e $\eta(t)$ correspondem a desvios em relação à trajetória clássica. Sob a transformação de variáveis anterior, as condições de contorno adquirem a seguinte forma:

$$\eta(t_i) = 0, \quad (3.52a)$$

$$\bar{\eta}(t_f) = 0. \quad (3.52b)$$

Substituindo a decomposição (3.48) no propagador (3.49) e realizando a transformação (3.51) sobre as variáveis de integração, obtemos a expressão inicial para o *propagador semiclássico*:

$$K_{sc}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \sum_{\text{traj.}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_c(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + \Lambda(z_f^*, z_i) \right] \int D\mu(\bar{\eta}, \eta) e^{\frac{i}{2\hbar} \delta^2 S_c}. \quad (3.53)$$

Como discutido anteriormente, as equações de movimento (3.3), quando sujeitas a condições de contorno, podem resultar em múltiplas soluções. Por este motivo, de acordo com a prescrição usual do método do ponto de sela, introduzimos no propagador semiclássico um sinal somatório, que implica na adição das contribuições resultantes de cada trajetória clássica especificada pelas identidades (3.5).

Aplicando a transformação (3.51) sobre as equações (3.50), escrevemos explicitamente o elemento de integração correspondente ao propagador (3.53):

$$D\mu(\bar{\eta}, \eta) \approx \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} \left\{ \kappa(l) \det [g(\bar{z}_c^j, z_c^j)] \prod_{k=1}^d \frac{d\bar{\eta}_k^j d\eta_k^j}{2\pi i} \right\}. \quad (3.54)$$

Observe que o determinante da métrica é calculado diretamente sobre a trajetória clássica. Esta aproximação também está prevista no método do ponto de sela, sob a hipótese que a função $\det [g(\bar{z}^j, z^j)]$ varia lentamente na região do domínio de integração com contribuição mais relevante do integrando.

Como consequência do resultado (3.54), o cálculo do propagador semiclassical se resume à avaliação de uma integral de caminho Gaussiana, a qual designamos por *propagador reduzido*:

$$K_{red} = \int D\mu(\bar{\eta}, \eta) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \delta^2 S \right]. \quad (3.55)$$

Empregando a definição (3.6a), obtemos uma expressão geral para a segunda variação da ação em torno da trajetória clássica:

$$\begin{aligned} \delta^2 S &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} \eta + 2\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \bar{z}} \bar{\eta} + \bar{\eta} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z}^2} \bar{\eta} + 2\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \dot{\eta} + 2\bar{\eta} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \dot{\bar{\eta}} \right. \\ &\quad \left. + 2\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{\bar{z}}} \dot{\bar{\eta}} + 2\bar{\eta} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{z}} \dot{\eta} \right] + \eta(t_f) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z(t_f)^2} \eta(t_f) + \bar{\eta}(t_i) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \bar{\eta}(t_i) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \eta \left[\frac{\partial^2 L}{\partial z^2} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \right) \right] \eta + \bar{\eta} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z}^2} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \right) \right] \bar{\eta} \right. \\ &\quad \left. + 2\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{\bar{z}}} \bar{\eta} + 2\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \dot{\eta} + 2\bar{\eta} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{z}} \dot{\eta} \right\} + \left[\eta \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \eta \right]_{t_i}^{t_f} \\ &\quad + \left[\bar{\eta} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \bar{\eta} \right]_{t_i}^{t_f} + \eta(t_f) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z(t_f)^2} \eta(t_f) + \bar{\eta}(t_i) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \bar{\eta}(t_i). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Nesta última equação, durante a passagem para a segunda igualdade, assumimos que a Lagrangiana possui as seguintes propriedades de simetria funcional:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \right]^T = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{z} \partial z}, \quad (3.57a)$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} = \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \right]^T = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\bar{z}} \partial \bar{z}}. \quad (3.57b)$$

Objetivando o cálculo explícito da expressão (3.56), utilizamos a equação (3.6b) na obtenção

das segundas derivadas da Lagrangiana:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z^2}, \quad (3.58a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z}^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \bar{z}^2}, \quad (3.58b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \bar{z}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}}, \quad (3.58c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z}, \quad (3.58d)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2}, \quad (3.58e)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2}, \quad (3.58f)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{\bar{z}}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}}, \quad (3.58g)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{z}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z} \partial z}. \quad (3.58h)$$

Observe que, de acordo com as identidades (3.58e) e (3.58f), as suposições (3.57) são verdadeiras. Por completeza, exibimos também as derivadas temporais necessárias na avaliação de $\delta^2 S$:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \right) = -\frac{1}{2} \left(\dot{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \right] - \frac{1}{2} \left(\dot{\bar{z}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \right], \quad (3.59a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \right) = \frac{1}{2} \left(\dot{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \right] + \frac{1}{2} \left(\dot{\bar{z}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \right]. \quad (3.59b)$$

Em seguida, empregando a definição (3.6c), calculamos as segundas derivadas do termo de contorno:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z(t_f)^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)^2}, \quad (3.60a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \bar{z}(t_i)^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)^2}. \quad (3.60b)$$

Então, substituindo as equações (3.58)-(3.60) na expressão (3.56), reescrevemos concisa-

mente a segunda variação da ação:

$$\frac{i}{\hbar} \delta^2 S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\eta g(\bar{z}, z) \dot{\bar{\eta}} - \bar{\eta} g^T(\bar{z}, z) \dot{\eta} + \eta A \eta + 2\eta B \bar{\eta} + \bar{\eta} C \bar{\eta} \right]. \quad (3.61)$$

As matrizes A , B e C , apresentadas na identidade anterior, possuem as seguintes descrições:

$$\begin{aligned} A &= \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial z^2} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \dot{z}} \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial z} [g(\bar{z}, z) \dot{\bar{z}}] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \\ &= -\frac{i}{\hbar} g(\bar{z}, z) \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \right], \end{aligned} \quad (3.62a)$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 L}{\partial z \partial \bar{z}} \\ &= \frac{1}{2} \left(\dot{\bar{z}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - \dot{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) g(\bar{z}, z) - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \\ &= -\frac{i}{2\hbar} g(\bar{z}, z) \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \right] \\ &\quad - \frac{i}{2\hbar} \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \right] \right\}^T g(\bar{z}, z), \end{aligned} \quad (3.62b)$$

$$\begin{aligned} C &= \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z}^2} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{z} \partial \dot{\bar{z}}} \right) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial \bar{z}} [g^T(\bar{z}, z) \dot{z}] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \\ &= -\frac{i}{\hbar} g^T(\bar{z}, z) \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \right]. \end{aligned} \quad (3.62c)$$

Note que cada uma entre as matrizes A , B e C recebeu três formulações distintas, porém completamente equivalentes. A primeira forma de cada matriz representa sua definição fundamental, que decorre diretamente da identidade (3.56). A segunda representação será empregada na próxima subseção, durante a realização das integrais de caminho correspondentes ao propagador reduzido. O último formato apresentado para as matrizes demonstra-se bastante útil para cálculos explícitos destas quantidades, considerando métrica e Hamiltoniana específicas. A terceira prescrição para B também será utilizada na subseção (3.2.6), no desenvolvimento da expressão definitiva para o propagador semiclássico. Por fim, em referência somente à segunda linha das equações (3.62a) e (3.62c), devemos ressaltar que as velocidades $\dot{\bar{z}}$ e \dot{z} constituem variáveis independentes de \bar{z} e z com relação à avaliação de derivadas, em concordância com o caráter funcional da Lagrangiana L .

Empregando o resultado (3.61), reformulamos a expressão original do propagador reduzido:

$$K_{red} = \int D\mu(\bar{\eta}, \eta) \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt [\eta g(\bar{z}, z) \dot{\eta} - \bar{\eta} g^T(\bar{z}, z) \dot{\eta} + \eta A \eta + 2\eta B \bar{\eta} + \bar{\eta} C \bar{\eta}] \right\}. \quad (3.63)$$

Neste momento, torna-se conveniente uma segunda modificação nas variáveis de integração, descrita pela seguinte transformação linear:

$$\nu(t) = \Theta^T(\bar{z}_c(t), z_c(t)) \eta(t), \quad (3.64a)$$

$$\bar{\nu}(t) = \Theta(\bar{z}_c(t), z_c(t)) \bar{\eta}(t), \quad (3.64b)$$

na qual a matriz Θ está relacionada formalmente com a continuação analítica da métrica:

$$\Theta(\bar{z}, z) = g^{\frac{1}{2}}(\bar{z}, z). \quad (3.65)$$

As condições de contorno para as novas variáveis decorrem imediatamente das equações (3.52):

$$\nu(t_i) = 0, \quad (3.66a)$$

$$\bar{\nu}(t_f) = 0. \quad (3.66b)$$

Aplicando as inversas das transformações (3.64) aos dois primeiros termos no expoente da identidade (3.63), obtemos a seguinte expressão:

$$\eta g \dot{\eta} - \bar{\eta} g^T \dot{\eta} = (\nu \dot{\bar{\nu}} - \bar{\nu} \dot{\nu}) + \nu(\Theta^{-1} \dot{\Theta} - \dot{\Theta} \Theta^{-1}) \bar{\nu}. \quad (3.67)$$

Observe que, na equação anterior, empregamos a relação matricial $\frac{d}{dt} \Theta^{-1} = -\Theta^{-1} \dot{\Theta} \Theta^{-1}$. Note também que as matrizes $g(\bar{z}, z)$ e $\Theta(\bar{z}, z)$ podem ser consideradas como funções de dependência exclusiva no tempo, pois elas estão calculadas sobre a trajetória clássica. Evidentemente, este mesmo raciocínio se aplica a todas as outras quantidades envolvidas no cálculo da segunda variação da ação. Então, com o auxílio da identidade (3.67), redefinimos os outros termos de $\delta^2 S$ em função das novas variáveis de integração:

$$\eta A \eta = \nu \Theta^{-1} A (\Theta^{-1})^T \bar{\nu} = \nu \tilde{A} \bar{\nu}, \quad (3.68a)$$

$$2\eta B \bar{\eta} + \nu(\Theta^{-1} \dot{\Theta} - \dot{\Theta} \Theta^{-1}) \bar{\nu} = 2\nu \left[\Theta^{-1} B \Theta^{-1} + \frac{1}{2}(\Theta^{-1} \dot{\Theta} - \dot{\Theta} \Theta^{-1}) \right] \bar{\nu} = 2\nu \tilde{B} \bar{\nu}, \quad (3.68b)$$

$$\bar{\eta} C \bar{\eta} = \bar{\nu} (\Theta^{-1})^T C \Theta^{-1} \bar{\nu} = \bar{\nu} \tilde{C} \bar{\nu}. \quad (3.68c)$$

Inserindo os resultados (3.67) e (3.68) na equação (3.61), reescrevemos a segunda variação da ação clássica:

$$\frac{i}{\hbar} \delta^2 S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left[(\nu \dot{\bar{\nu}} - \bar{\nu} \dot{\nu}) + \nu \tilde{A} \bar{\nu} + 2\nu \tilde{B} \bar{\nu} + \bar{\nu} \tilde{C} \bar{\nu} \right]. \quad (3.69)$$

Como consequência da transformação (3.64), o elemento de integração (3.54) adquire a seguinte forma:

$$\begin{aligned} D\mu(\bar{\nu}, \nu) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} \kappa(l) \frac{d\bar{\nu}^j d\nu^j}{(2\pi i)^d} \\ &\approx \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} \frac{d\bar{\nu}^j d\nu^j}{(2\pi i)^d}. \end{aligned} \tag{3.70}$$

Note que, na segunda linha desta última equação, realizamos a aproximação

$$\kappa(l) \stackrel{l \gg 1}{\approx} 1, \tag{3.71}$$

de maneira a evitar a divergência ($\kappa(l) > 1$) ou o cancelamento ($\kappa(l) < 1$) do propagador reduzido devido ao produto infinito de fatores de normalização encontrado na medida de caminho (3.70). Como discutido na subseção 2.1.4, a constante $\kappa(l)$ é especificada pelo mesmo conjunto de índices l que determina o espaço de Hilbert acessível ao sistema físico de interesse. Em geral, esta coleção de índices é constituída por números quânticos fundamentais, como momento angular, número de partículas e energia total. Portanto, a conjectura $l \gg 1$, incorporada na identidade (3.71), equivale à hipótese de *elevados números quânticos*. Esta suposição está em concordância com o regime de aplicabilidade da aproximação semiclássica, uma vez que a condição $l \gg 1$ geralmente implica em $|S| \gg \hbar$.

No caso dos estados coerentes canônicos, apresentados na subseção 2.2.1, o fator κ não depende de possíveis números quânticos associados ao espaço B^d . No entanto, de acordo com a identidade (2.35), a conjectura (3.71) é exatamente satisfeita. Uma vez que o conjunto de valores l inexiste, a aproximação semiclássica correspondente aos estados coerentes (2.31) não está fundamentada de forma evidente na hipótese de elevados números quânticos. Por esta razão, torna-se bastante comum a utilização não-sistemática da justificativa $|S| \gg \hbar$, o que resulta em conclusões mais vagas e menos rigorosas.

Por outro lado, conforme indicado pela equação (2.50), os estados coerentes de spin satisfazem a suposição (3.71) para elevados valores das amplitudes de momento angular. Portanto, neste caso particular, espera-se que a aproximação semiclássica demonstre maior êxito no *regime de “grandes spins”*. Semelhantemente, os estados coerentes bosônicos de $SU(n)$ exibem características adequadas à dinâmica semiclássica no *regime de muitas partículas*, como sugerido pela identidade (2.64). Observe que, nestes dois últimos exemplos, a hipótese de elevados números quânticos possui um significado preciso, pois geralmente podemos analisar sistematicamente as propriedades fundamentais do sistema de interesse em função dos parâmetros J_k e N .

A medida de caminho (3.70), após realizada a aproximação (3.71), assume a mesma forma de um elemento de integração em um espaço plano, ou seja, o mesmo resultado seria obtido prontamente da equação (3.54) para $g(\bar{z}, z) = \mathbf{1}$. No entanto, a curvatura do espaço de fase ainda está contida implicitamente na trajetória clássica e, conseqüentemente, na segunda variação da ação. Logo, as aproximações efetuadas sobre o propagador não removem as propriedades geométricas introduzidas pelos estados coerentes, embora a dedução apresentada neste trabalho fundamente-se em reduzir o propagador semiclássico a sua forma algébrica específica para o espaço plano.

Substituindo os resultados (3.69) e (3.70) na equação (3.63), reobtemos o propagador reduzido no limite temporal contínuo para o terceiro conjunto de variáveis de integração:

$$K_{red} = \int D\mu(\bar{\nu}, \nu) \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[(\nu \dot{\bar{\nu}} - \bar{\nu} \dot{\nu}) + \nu \tilde{A} \nu + 2\nu \tilde{B} \bar{\nu} + \bar{\nu} \tilde{C} \bar{\nu} \right] \right\}. \quad (3.72)$$

A expressão anterior para K_{red} é adequada à resolução da integral de caminho Gaussiana em termos de quantidades clássicas bem determinadas. No entanto, a próxima etapa desta dedução corresponde a uma digressão, na qual recorreremos à discretização temporal do propagador semiclássico.

3.2.4 Cálculo do Propagador Reduzido

Objetivando o cálculo da integral de caminho (3.72), reescrevemos o propagador reduzido (3.55) em sua forma temporalmente discretizada:

$$K_{red} = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{j=1}^{M-1} d\mu(\bar{\eta}^j, \eta^j) \right] \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \delta^2 S_d \right]. \quad (3.73)$$

De acordo com a fórmula (3.54), a medida de integração em cada instante de tempo é representada pela seguinte expressão:

$$d\mu(\bar{\eta}^j, \eta^j) \approx \kappa(l) \det [g(\bar{z}^j, z^j)] \prod_{k=1}^d \frac{d\bar{\eta}_k^j d\eta_k^j}{2\pi i}. \quad (3.74)$$

Observe que as derivadas do expoente \tilde{S}_d , descrito pela equação (3.23), são idênticas às derivadas de S_d , pois estas duas quantidades diferem apenas pela constante de normalização $\Lambda(z_f^*, z_i)$, conforme estabelecido pela definição (3.35). Logo, considerando somente os termos de primeira ordem em ε nas identidades (3.28), obtemos as primeiras derivadas do funcional de ação discretizado:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S_d}{\partial z^j} \approx g(\bar{z}^{j+1}, z^j) (\bar{z}^{j+1} - \bar{z}^j) - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j} \varepsilon, \quad (3.75a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial S_d}{\partial \bar{z}^j} \approx -g^T(\bar{z}^j, z^{j-1}) (z^j - z^{j-1}) - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}^j, z^{j-1})}{\partial \bar{z}^j} \varepsilon, \quad (3.75b)$$

nas quais utilizamos a notação adequada ao espaço de fase duplicado. Então, visando o cálculo

da variação $\delta^2 S_d$, realizamos novas derivações sobre as expressões (3.75):

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j{}^2} \approx \frac{\partial}{\partial z^j} [g(\bar{z}^{j+1}, z^j)(\bar{z}^{j+1} - \bar{z}^j)] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j{}^2} \varepsilon = -D_{j,j}, \quad (3.76a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^j{}^2} \approx -\frac{\partial}{\partial \bar{z}^j} [g^T(\bar{z}^j, z^{j-1})(z^j - z^{j-1})] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^j, z^{j-1})}{\partial \bar{z}^j{}^2} \varepsilon = -D_{\bar{j},\bar{j}}, \quad (3.76b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j \partial \bar{z}^j} \approx -g(\bar{z}^{j+1}, z^j) = -D_{j,\bar{j}}, \quad (3.76c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^j \partial z^j} \approx -g^T(\bar{z}^j, z^{j-1}) = -D_{\bar{j},j}. \quad (3.76d)$$

As equações anteriores são válidas somente para $j = 1, 2, \dots, (M-1)$. De maneira distinta, as segundas derivadas restantes do funcional de ação discretizado estão restritas aos valores $j = 1, 2, \dots, (M-2)$:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \approx \frac{\partial}{\partial \bar{z}^{j+1}} [g(\bar{z}^{j+1}, z^j)(\bar{z}^{j+1} - \bar{z}^j)] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \varepsilon = -D_{j,\bar{j}+1}, \quad (3.77a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^{j+1} \partial z^j} \approx -\frac{\partial}{\partial z^j} [g^T(\bar{z}^{j+1}, z^j)(z^{j+1} - z^j)] - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial \bar{z}^{j+1} \partial z^j} \varepsilon = -D_{\bar{j}+1,j}. \quad (3.77b)$$

Empregando as equações (3.76) e (3.77), escrevemos a segunda variação da ação em torno de uma trajetória clássica:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \delta^2 S_d &= \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{M-1} \left[\eta^j \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j{}^2} \eta^j + \bar{\eta}^j \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^j{}^2} \bar{\eta}^j + \eta^j \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j \partial \bar{z}^j} \bar{\eta}^j + \bar{\eta}^j \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^j \partial z^j} \eta^j \right] \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{M-2} \left[\eta^j \frac{\partial^2 S_d}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \bar{\eta}^{j+1} + \bar{\eta}^{j+1} \frac{\partial^2 S_d}{\partial \bar{z}^{j+1} \partial z^j} \eta^j \right] \\ &\approx - \sum_{j=1}^{M-1} [\eta^j D_{j,j} \eta^j + \bar{\eta}^j D_{\bar{j},\bar{j}} \bar{\eta}^j + \eta^j D_{j,\bar{j}} \bar{\eta}^j + \bar{\eta}^j D_{\bar{j},j} \eta^j] \\ &\quad - \sum_{j=1}^{M-2} [\eta^j D_{j,\bar{j}+1} \bar{\eta}^{j+1} + \bar{\eta}^{j+1} D_{\bar{j}+1,j} \eta^j], \end{aligned} \quad (3.78)$$

na qual introduzimos uma versão temporalmente discretizada da transformação (3.51):

$$\eta^j = z^j - z_c^j, \quad (3.79a)$$

$$\bar{\eta}^j = \bar{z}^j - \bar{z}_c^j. \quad (3.79b)$$

Com o objetivo de simplificar os cálculos futuros, podemos eliminar os termos de ordem superior a ε na expressão (3.78). Neste intuito, introduzimos as seguintes identidades:

$$D_{j,\bar{j}} \approx g(\bar{z}^j, z^j) + \frac{\partial g(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial \bar{z}^{j+1}}(\bar{z}^{j+1} - \bar{z}^j), \quad (3.80a)$$

$$D_{\bar{j},j} \approx g^T(\bar{z}^j, z^j) + \frac{\partial g^T(\bar{z}^j, z^j)}{\partial z^{j-1}}(z^{j-1} - z^j), \quad (3.80b)$$

das quais decorrem novas aproximações, também válidas somente em primeira ordem no intervalo infinitesimal ε :

$$\eta^j D_{j,\bar{j}} \bar{\eta}^j + \eta^j D_{j,\bar{j}+1} \bar{\eta}^{j+1} \approx \eta^j g(\bar{z}^j, z^j) \bar{\eta}^j + \eta^j \left[\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \varepsilon - g(\bar{z}^{j+1}, z^j) \right] \bar{\eta}^{j+1}, \quad (3.81a)$$

$$\bar{\eta}^j D_{\bar{j},j} \eta^j + \bar{\eta}^j D_{\bar{j},j-1} \eta^{j-1} \approx \bar{\eta}^j g^T(\bar{z}^j, z^j) \eta^j + \bar{\eta}^j \left[\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^j, z^{j-1})}{\partial \bar{z}^j \partial z^{j-1}} \varepsilon - g^T(\bar{z}^j, z^{j-1}) \right] \eta^{j-1}. \quad (3.81b)$$

Nestas últimas equações, assumimos que as trajetórias relevantes ao cálculo da integral de caminho (3.73) apresentam valores de $|\eta^{j+1} - \eta^j|$ e $|\eta^j - \eta^{j-1}|$ linearmente proporcionais a ε no limite temporal contínuo. Em outras palavras, empregamos novamente a hipótese de trajetórias contínuas, discutida detalhadamente na subseção 3.2.1.

Note que as aproximações (3.81) estão bem estabelecidas para os instantes de tempo $j = 1$ e $j = (M - 1)$, nos quais as quantidades $D_{\bar{j},j-1}$ e $D_{j,\bar{j}+1}$, respectivamente, não se encontram definidas pelas equações (3.77). Nestes casos, em concordância com as condições de contorno (3.52), podemos utilizar as identidades $\eta^0 = 0$ e $\bar{\eta}^M = 0$, de maneira que a ocorrência de grandezas indefinidas corresponda apenas ao acréscimo de termos identicamente nulos.

Com o propósito de simplificar a aplicação dos resultados anteriores, torna-se conveniente uma reformulação da notação:

$$D'_{j,\bar{j}} = g(\bar{z}^j, z^j), \quad (3.82a)$$

$$D'_{j,\bar{j}+1} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \varepsilon - g(\bar{z}^{j+1}, z^j). \quad (3.82b)$$

Em termos destas novas definições, reescrevemos a segunda variação da ação em sua forma temporalmente discretizada:

$$\frac{i}{\hbar} \delta^2 S_d \approx - \sum_{j=1}^{M-1} \left[\eta^j D_{j,j} \eta^j + \bar{\eta}^j D_{\bar{j},\bar{j}} \bar{\eta}^j + 2\eta^j D'_{j,\bar{j}} \bar{\eta}^j \right] - 2 \sum_{j=1}^{M-2} \eta^j D'_{j,\bar{j}+1} \bar{\eta}^{j+1}. \quad (3.83)$$

Agora, de maneira análoga à equação (3.64), realizamos uma transformação apropriada das variáveis de integração:

$$\nu^j = \Theta^T(\bar{z}_c^j, z_c^j) \eta^j = \Theta_j^T \eta^j, \quad (3.84a)$$

$$\bar{\nu}^j = \Theta(\bar{z}_c^j, z_c^j) \bar{\eta}^j = \Theta_j \bar{\eta}^j, \quad (3.84b)$$

na qual reintroduzimos a matriz $\Theta(\bar{z}^j, z^j) = g^{\frac{1}{2}}(\bar{z}^j, z^j)$, inicialmente definida pela identidade (3.65). Semelhantemente ao resultado (3.70), a medida de integração (3.74) assume a seguinte forma:

$$d\mu(\bar{\nu}^j, \nu^j) \approx \prod_{k=1}^d \frac{d\bar{\nu}_k^j d\nu_k^j}{2\pi i}. \quad (3.85)$$

Observe que empregamos novamente a conjectura (3.71), intrinsecamente associada à aproximação semiclássica. Então, aplicando a transformação (3.84) à equação (3.83), obtemos a expressão final para a segunda variação da ação discretizada:

$$\frac{i}{\hbar} \delta^2 S_d \approx - \sum_{j=1}^{M-1} \left[\nu^j \tilde{D}_{j,j} \nu^j + \bar{\nu}^j \tilde{D}_{\bar{j},\bar{j}} \bar{\nu}^j + 2\nu^j \bar{\nu}^j \right] - 2 \sum_{j=1}^{M-2} \nu^j \tilde{D}_{j,\bar{j}+1} \bar{\nu}^{j+1}, \quad (3.86)$$

na qual definimos as seguintes quantidades matriciais:

$$\tilde{D}_{j,j} = \Theta_j^{-1} D_{j,j} (\Theta_j^T)^{-1}, \quad (3.87a)$$

$$\tilde{D}_{\bar{j},\bar{j}} = (\Theta_j^T)^{-1} D_{\bar{j},\bar{j}} \Theta_j^{-1}, \quad (3.87b)$$

$$\tilde{D}_{j,\bar{j}+1} = \Theta_j^{-1} D'_{j,\bar{j}+1} \Theta_{j+1}^{-1}. \quad (3.87c)$$

Inserindo as identidades (3.85) e (3.86) no propagador reduzido (3.73), podemos escrever uma forma geral para a integral Gaussiana correspondente a cada instante de tempo:

$$\mathcal{I}_j = \int \frac{d\bar{\nu}^j d\nu^j}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \bar{\nu}^j & \nu^j \end{pmatrix} G^j \begin{pmatrix} \bar{\nu}^j \\ \nu^j \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{\nu}^j & \nu^j \end{pmatrix} V^j \right]. \quad (3.88)$$

A matriz G^j não pode ser imediatamente determinada, pois seus elementos dependem explicitamente da integração no instante de tempo $(j-1)$. Ou seja, o caráter dinâmico do propagador reduzido está codificado em G^j , cuja expressão específica permanece indefinida, exceto pelo seu valor inicial:

$$G^1 = - \begin{pmatrix} \tilde{D}_{\bar{1},\bar{1}} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \tilde{D}_{1,1} \end{pmatrix}. \quad (3.89)$$

Diferentemente da matriz G^j , o vetor V^j possui forma independente dos instantes de tempo precedentes:

$$V^j = - \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{D}_{j,\bar{j}+1} \bar{\nu}^{j+1} \end{pmatrix}. \quad (3.90)$$

A integral (3.88) pode ser resolvida sob a seguinte transformação de variáveis:

$$\beta^j - \gamma^j = -i \begin{pmatrix} \bar{\nu}^j \\ \nu^j \end{pmatrix}, \quad (3.91)$$

na qual γ^j representa um vetor constante. Empregando a equação anterior, reescrevemos prontamente a identidade (3.88):

$$\mathcal{I}_j = \int \frac{i^d d\beta^j}{(2\pi)^d} \exp \left[-\frac{1}{2} \beta^j G^j \beta^j + \frac{1}{2} \gamma^j G^j \beta^j + \frac{1}{2} \beta^j G^j \gamma^j - \frac{1}{2} \gamma^j G^j \gamma^j + i\beta^j V^j - i\gamma^j V^j \right]. \quad (3.92)$$

Em seguida, objetivando a simplificação do expoente no integrando, exigimos que os termos lineares em β^j se anulem identicamente:

$$\frac{1}{2}\gamma^j G^j \beta^j + \frac{1}{2}\beta^j G^j \gamma^j + i\beta^j V^j = 0. \quad (3.93)$$

Desta maneira, observando que G^j representa uma matriz simétrica por construção, determinamos o valor da constante γ^j em cada instante de tempo:

$$G^j \gamma^j = -iV^j = i \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1} \end{pmatrix}. \quad (3.94)$$

Com o auxílio deste último resultado, obtemos uma nova formulação para a integral (3.92):

$$\mathcal{I}_j = \int \frac{i^d d\beta^j}{(2\pi)^d} \exp \left[-\frac{1}{2}\beta^j G^j \beta^j + \frac{1}{2}\gamma^j G^j \gamma^j \right]. \quad (3.95)$$

Utilizando novamente a equação (3.94), encontramos a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} \gamma^j G^j \gamma^j &= -V^j (G^j)^{-1} V^j \\ &= - \begin{pmatrix} 0 & \bar{\nu}^{j+1} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}}^T \end{pmatrix} (G^j)^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1} \end{pmatrix} \\ &= -\bar{\nu}^{j+1} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}}^T [(G^j)^{-1}]_{22} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1}, \end{aligned} \quad (3.96)$$

na qual supomos que a matriz G^j é invertível. Empregando a equação anterior juntamente com a terceira hipótese fundamental descrita na subseção 2.1.5, calculamos a integral Gaussiana correspondente a um único instante de tempo no propagador reduzido:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_j &= \int \frac{i^d d\beta^j}{(2\pi)^d} \exp \left\{ -\frac{1}{2}\beta^j G^j \beta^j - \frac{1}{2}\bar{\nu}^{j+1} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}}^T [(G^j)^{-1}]_{22} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1} \right\} \\ &= i^d \{ \det G^j \}^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}\bar{\nu}^{j+1} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}}^T [(G^j)^{-1}]_{22} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1} \right\}. \end{aligned} \quad (3.97)$$

Então, realizando uma comparação entre as identidades (3.86), (3.88) e (3.97), podemos determinar uma relação de recorrência para as matrizes G^j :

$$G^{j+1} = - \begin{pmatrix} \tilde{D}_{\overline{j+1},\overline{j+1}} + \tilde{D}_{j,\overline{j+1}}^T [(G^j)^{-1}]_{22} \tilde{D}_{j,\overline{j+1}} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \tilde{D}_{j+1,j+1} \end{pmatrix}, \quad (3.98)$$

a qual possui validade para $j = 1, 2, \dots, (M-2)$. Observe que somente o bloco G_{11}^j é modificado explicitamente pelos instantes de tempo anteriores. Portanto, podemos estabelecer uma forma geral para G^j :

$$G^j = \begin{pmatrix} G_{11}^j & G_{12}^j \\ G_{21}^j & G_{22}^j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11}^j & -\mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & -\tilde{D}_{j,j} \end{pmatrix}, \quad (3.99)$$

a qual está definida para $j = 1, 2, \dots, (M - 1)$. Note também que um único bloco da matriz inversa $(G^j)^{-1}$ é relevante no cálculo da integral (3.97). Logo, torna-se oportuna a aplicação da seguinte representação formal:

$$\begin{aligned} (G^j)^{-1} &= \begin{pmatrix} [(G^j)^{-1}]_{11} & [(G^j)^{-1}]_{12} \\ [(G^j)^{-1}]_{21} & [(G^j)^{-1}]_{22} \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} (\mathbb{1} - G_{22}^j G_{11}^j)^{-1} G_{22}^j & (\mathbb{1} - G_{22}^j G_{11}^j)^{-1} \\ (\mathbb{1} - G_{11}^j G_{22}^j)^{-1} & (\mathbb{1} - G_{11}^j G_{22}^j)^{-1} G_{11}^j \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Utilizando as identidades (3.99) e (3.100), podemos extrair toda a informação dinâmica contida na relação de recorrência (3.98):

$$G_{11}^{j+1} = -\tilde{D}_{\overline{j+1}, \overline{j+1}} + \tilde{D}_{\overline{j}, \overline{j+1}}^T (\mathbb{1} + G_{11}^j \tilde{D}_{j,j})^{-1} G_{11}^j \tilde{D}_{j, \overline{j+1}}. \quad (3.101)$$

O particionamento em blocos da matriz G^j também possibilita uma descrição simplificada de seu determinante:

$$\begin{aligned} \det G^j &= \det \begin{pmatrix} -G_{21}^j & -G_{22}^j \\ G_{11}^j & G_{12}^j \end{pmatrix} \\ &= (-1)^d \det \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \tilde{D}_{jj} \\ -G_{11}^j & \mathbb{1} \end{pmatrix} \\ &= (-1)^d \det \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \tilde{D}_{jj} G_{11}^j & 0 \\ -G_{11}^j & \mathbb{1} \end{pmatrix} \\ &= (-1)^d \det(\mathbb{1} + \tilde{D}_{jj} G_{11}^j). \end{aligned} \quad (3.102)$$

Consequentemente, podemos reescrever o resultado (3.97) apenas em função do bloco G_{11}^j :

$$\mathcal{I}_j = \left[\det(\mathbb{1} + \tilde{D}_{jj} G_{11}^j) \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \bar{\nu}^{j+1} \tilde{D}_{\overline{j+1}, \overline{j}} (\mathbb{1} + G_{11}^j \tilde{D}_{jj})^{-1} G_{11}^j \tilde{D}_{j, \overline{j+1}} \bar{\nu}^{j+1} \right]. \quad (3.103)$$

De acordo com a identidade anterior, o propagador (3.73) é completamente determinado pela solução da equação (3.101):

$$K_{red} = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{M-1} \left[\det(\mathbb{1} + \tilde{D}_{jj} G_{11}^j) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.104)$$

Observe que, no desenvolvimento desta última expressão, utilizamos a condição de contorno $\bar{\nu}^M = 0$, correspondente à versão discretizada da equação (3.66b).

Como próximo passo na dedução do propagador semiclássico, precisamos resolver a relação de recorrência para o bloco G_{11}^j em função de quantidades clássicas familiares. Para esta finalidade, devemos realizar o limite temporal contínuo de todos os elementos constituintes da identidade (3.101). Primeiramente, empregando as equações (3.62a) e (3.62c), calculamos as

formas contínuas das definições (3.87a) e (3.87b):

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{D}_{j,j}}{\varepsilon} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Theta_j^{-1} \left\{ -\frac{\partial}{\partial z^j} \left[g(\bar{z}^{j+1}, z^j) \frac{(\bar{z}^{j+1} - \bar{z}^j)}{\varepsilon} \right] + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^{j2}} \right\} (\Theta_j^T)^{-1} \\
&= \Theta^{-1} \left\{ -\frac{\partial}{\partial z} [g(\bar{z}, z)\dot{z}] + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z^2} \right\} (\Theta^T)^{-1} \\
&= -\Theta^{-1} A (\Theta^T)^{-1} = -\tilde{A},
\end{aligned} \tag{3.105a}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{D}_{\bar{j},\bar{j}}}{\varepsilon} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\Theta_j^T)^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{z}^j} \left[g^T(\bar{z}^j, z^{j-1}) \frac{(z^j - z^{j-1})}{\varepsilon} \right] + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^j, z^{j-1})}{\partial \bar{z}^{j2}} \right\} \Theta_j^{-1} \\
&= (\Theta^T)^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{z}} [g^T(\bar{z}, z)\dot{z}] + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^2} \right\} \Theta^{-1} \\
&= -(\Theta^T)^{-1} C \Theta^{-1} = -\tilde{C}.
\end{aligned} \tag{3.105b}$$

Devido à relativa complexidade na execução do limite contínuo para a identidade (3.87c), reescrevemos esta expressão de maneira menos concisa:

$$\tilde{D}_{j,\bar{j+1}} = \Theta_j^{-1} \left[-g(\bar{z}^{j+1}, z^j) + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}^{j+1}, z^j)}{\partial z^j \partial \bar{z}^{j+1}} \varepsilon \right] \Theta_{j+1}^{-1}. \tag{3.106}$$

Em seguida, conservando somente os termos de primeira ordem em ε , estabelecemos a seguinte relação matricial:

$$\begin{aligned}
\Omega_{j,\bar{j+1}} &= \Theta^{-1}(\bar{z}^j, z^j) g(\bar{z}^{j+1}, z^j) \Theta^{-1}(\bar{z}^{j+1}, z^{j+1}) \\
&\approx \mathbb{1} + \left\{ \left[(\bar{z}^j - \bar{z}^{j+1}) \frac{\partial}{\partial \bar{z}^{j+1}} \right] \Theta^{-1}(\bar{z}^{j+1}, z^j) \right\} g(\bar{z}^{j+1}, z^j) \Theta^{-1}(\bar{z}^{j+1}, z^j) \\
&\quad + \Theta^{-1}(\bar{z}^{j+1}, z^j) g(\bar{z}^{j+1}, z^j) \left\{ \left[(z^{j+1} - z^j) \frac{\partial}{\partial z^j} \right] \Theta^{-1}(\bar{z}^{j+1}, z^j) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.107}$$

A partir desta última equação, obtemos o limite temporal contínuo associado à quantidade auxiliar $\Omega_{j,\bar{j+1}}$:

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\Omega_{j,\bar{j+1}} - \mathbb{1})}{\varepsilon} &= - \left[\left(\dot{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right) \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \right] g(\bar{z}, z) \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \\
&\quad + \Theta^{-1}(\bar{z}, z) g(\bar{z}, z) \left[\left(\dot{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \right] \\
&= \frac{1}{2} \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \left[\left(\dot{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - \dot{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) g(\bar{z}, z) \right] \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\Theta^{-1}(\bar{z}, z) \dot{\Theta}(\bar{z}, z) - \dot{\Theta}(\bar{z}, z) \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \right].
\end{aligned} \tag{3.108}$$

Na passagem para a segunda igualdade do resultado anterior, realizamos diversas manipulações algébricas sobre as derivadas das matrizes $\Theta(\bar{z}, z)$ e $g(\bar{z}, z)$. Utilizando a identidade

(3.108), em comparação com as definições (3.62b) e (3.68b), encontramos a forma contínua para a expressão (3.106):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\tilde{D}_{j,\bar{j}+1} + \mathbf{1})}{\varepsilon} = \Theta^{-1}(\bar{z}, z) \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z \partial \bar{z}} \Theta^{-1}(\bar{z}, z) - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\Omega_{j,\bar{j}+1} - \mathbf{1})}{\varepsilon} = -\tilde{B}. \quad (3.109)$$

O comportamento linear em ε da relação de recorrência (3.101) decorre diretamente das equações (3.105) e (3.109):

$$\begin{aligned} G_{11}^{j+1} &\approx G_{11}(t_j) + \dot{G}_{11}(t_j)\varepsilon \\ &\approx \tilde{C}(t_j)\varepsilon + [-\mathbf{1} - \tilde{B}^T(t_j)\varepsilon][\mathbf{1} - G_{11}(t_j)\tilde{A}(t_j)\varepsilon]^{-1}G_{11}(t_j)[- \mathbf{1} - \tilde{B}(t_j)\varepsilon] \\ &\approx \tilde{C}(t_j)\varepsilon + [\mathbf{1} + \tilde{B}^T(t_j)\varepsilon][\mathbf{1} + G_{11}(t_j)\tilde{A}(t_j)\varepsilon]G_{11}(t_j)[\mathbf{1} + \tilde{B}(t_j)\varepsilon] \\ &\approx G_{11}(t_j) + \left[\tilde{C}(t_j) + \tilde{B}^T(t_j)G_{11}(t_j) + G_{11}(t_j)\tilde{A}(t_j)G_{11}(t_j) + G_{11}(t_j)\tilde{B}(t_j) \right] \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.110)$$

Portanto, sob a aplicação do limite temporal contínuo, o bloco $G_{11}(t)$ torna-se solução de uma equação de diferencial de primeira ordem:

$$\dot{G}_{11}(t) = \tilde{C}(t) + \tilde{B}^T(t)G_{11}(t) + G_{11}(t)\tilde{A}(t)G_{11}(t) + G_{11}(t)\tilde{B}(t), \quad (3.111)$$

cuja condição inicial resulta da identidade (3.89) calculada para ε nulo:

$$G_{11}(t_i) = 0. \quad (3.112)$$

Empregando novamente a expressão (3.105a), reescrevemos o propagador reduzido (3.104) em sua forma contínua:

$$\begin{aligned} \ln K_{red} &= \lim_{M \rightarrow \infty} -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \ln \left[\det(\mathbf{1} + \tilde{D}_{jj}G_{11}^j) \right] = \lim_{M \rightarrow \infty} -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \text{tr} \left[\ln(\mathbf{1} + \tilde{D}_{jj}G_{11}^j) \right] \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{M-1} \text{tr}[\tilde{D}_{jj}G_{11}^j] = \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} \text{tr}[\tilde{A}(t)G_{11}(t)]dt. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Com o objetivo de estabelecer uma conexão entre os resultados anteriores e a aparente digressão apresentada na próxima subseção, introduzimos três transformações sucessivas sobre a equação (3.111):

$$F(t) = -\tilde{A}(t)G_{11}(t), \quad (3.114a)$$

$$\dot{X}(t)X^{-1}(t) = \mathcal{U}^{-1}(t)F(t)\mathcal{U}(t), \quad (3.114b)$$

$$Y(t) = \mathcal{U}(t)X(t). \quad (3.114c)$$

As matrizes $F(t)$, $X(t)$ e $Y(t)$ simbolizam as novas variáveis dinâmicas, ao passo que $\mathcal{U}(t)$ representa a exponencial temporalmente ordenada de uma função clássica predeterminada:

$$\mathcal{U}(t) = \hat{T} \exp \left[- \int_{t_i}^t \tilde{B}(t') dt' \right]. \quad (3.115)$$

Como consequência desta última definição, a quantidade $\mathcal{U}(t)$ satisfaz a seguinte identidade:

$$\dot{\mathcal{U}}(t) = -\tilde{B}(t)\mathcal{U}(t). \quad (3.116)$$

Primeiramente, utilizando a transformação (3.114a), reformulamos a equação diferencial (3.111) em termos da matriz $F(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{F} &= -\dot{\tilde{A}}G_{11} - \tilde{A}\dot{G}_{11} \\ &= -F^2 + (\dot{\tilde{A}}\tilde{A}^{-1} + \tilde{A}\tilde{B}^T\tilde{A}^{-1})F + F\tilde{B} - \tilde{A}\tilde{C}. \end{aligned} \quad (3.117)$$

Em seguida, com o auxílio das identidades (3.114b) e (3.116), realizamos uma segunda substituição das variáveis dinâmicas:

$$\mathcal{U}\ddot{X} = (\dot{\tilde{A}}\tilde{A}^{-1} + \tilde{A}\tilde{B}^T\tilde{A}^{-1} + \tilde{B})\mathcal{U}\dot{X} - \tilde{A}\tilde{C}\mathcal{U}X. \quad (3.118)$$

Por fim, empregando a expressão (3.114c), reescrevemos a equação anterior em função de $Y(t)$:

$$\ddot{Y} = (\tilde{A}\tilde{B}^T\tilde{A}^{-1} + \dot{\tilde{A}}\tilde{A}^{-1} - \tilde{B})\dot{Y} + (\tilde{A}\tilde{B}^T\tilde{A}^{-1}\tilde{B} - \tilde{A}\tilde{C} + \dot{\tilde{A}}\tilde{A}^{-1}\tilde{B} - \dot{\tilde{B}})Y. \quad (3.119)$$

De forma consistente com o resultado (3.112) e as transformações (3.114), obtemos as condições iniciais correspondentes aos novos conjuntos de variáveis:

$$F(t_i) = 0, \quad (3.120a)$$

$$\dot{X}(t_i) = 0, \quad X(t_i) = \mathbf{1}, \quad (3.120b)$$

$$\dot{Y}(t_i) = -\tilde{B}(t_i), \quad Y(t_i) = \mathbf{1}. \quad (3.120c)$$

Note que, devido à introdução da variável matricial $X(t)$, a equação diferencial original adquire derivadas temporais de segunda ordem. A princípio, esta transformação provoca uma indeterminação, pois ocorre uma duplicação no número de condições iniciais necessárias para a especificação unívoca de uma solução. Esta complicação é apropriadamente eliminada pela escolha do valor inicial $X(t_i) = \mathbf{1}$, o qual possibilita uma comparação direta entre a identidade (3.120c) e os resultados posteriores desta seção.

Apenas como uma preparação para os próximos estgios da presente deduco, realizamos as transformaes (3.114) sobre a expresso (3.113):

$$\begin{aligned}
\ln K_{red} &= -\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \operatorname{tr} F(t) = -\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \operatorname{tr} [\dot{X}(t)X^{-1}(t)] \\
&= -\frac{1}{2} \operatorname{tr} [\ln X(t_f)] = -\frac{1}{2} \ln \{\det X(t_f)\} \\
&= -\frac{1}{2} \ln \left\{ \det \left[\hat{T} \exp \left(\int_{t_i}^{t_f} dt \tilde{B}(t) \right) \right] \det Y(t_f) \right\} \\
&= \ln \left\{ \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \operatorname{tr} \tilde{B}(t) \right] [\det Y(t_f)]^{-\frac{1}{2}} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.121}$$

3.2.5 Equao de Jacobi

Na subseo anterior, calculamos explicitamente a integral de caminho correspondente ao propagador reduzido no limite de tempo contnuo. Contudo, a determinao completa de K_{red} encontra-se subordinada  resoluo de uma equao diferencial de segunda ordem, cujas variveis dinmicas ainda no possuem relao evidente com quantidades clssicas usuais. Ento, com o intuito de estabelecer uma interpretao fsica para a matriz $Y(t)$, recorremos a uma pequena digresso acerca da equao de Jacobi.

A segunda variao da ao, no formato apresentado pela equao (3.69), constitui um funcional sobre a trajetria descrita pelas variveis $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$. Com o propsito de introduzir uma noto adequada  manipulao de $\delta^2 S$, definimos a seguinte funo Lagrangiana:

$$\mathcal{L}(\dot{\bar{\nu}}, \dot{\nu}, \bar{\nu}, \nu; t) = (\dot{\bar{\nu}}\nu - \bar{\nu}\dot{\nu}) + \nu \tilde{A}\nu + 2\nu \tilde{B}\bar{\nu} + \bar{\nu} \tilde{C}\bar{\nu}. \tag{3.122}$$

Analogamente s variveis $\bar{\eta}(t)$ e $\eta(t)$, podemos interpretar $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$ como desvios em relao  trajetria clssica. Embora os valores destas quantidades sejam completamente arbitrrios durante a avaliao da integral de caminho (3.72), deve existir um conjunto de solues particulares que extremizam a segunda variao da ao. Objetivando a identificao das trajetrias extremas, calculamos a primeira variao de $\delta^2 S$:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \delta[\delta^2 S] &= \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nu} \delta \nu + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\nu}} \delta \dot{\nu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\nu}} \delta \bar{\nu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\nu}}} \delta \dot{\bar{\nu}} \right] dt \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nu} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\nu}} \right) \right] \delta \nu + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\nu}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\nu}}} \right) \right] \delta \bar{\nu} \right\} dt \\
&\quad + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\nu}} \delta \nu \right]_{t_i}^{t_f} + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\nu}}} \delta \bar{\nu} \right]_{t_i}^{t_f}.
\end{aligned} \tag{3.123}$$

Como esperado, igualando esta última expressão a zero, obtemos as equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\nu}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\nu}}} \right) = 0, \quad (3.124a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nu} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\nu}} \right) = 0. \quad (3.124b)$$

No entanto, para que as identidades anteriores sejam verdadeiras, devemos supor as seguintes restrições sobre a Lagrangiana:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\nu}}(t_f) = 0, \quad (3.125a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\nu}}}(t_i) = 0. \quad (3.125b)$$

Observe que, de acordo com as condições de contorno (3.66) e a definição (3.122), a função \mathcal{L} satisfaz rigorosamente as equações (3.125).

De maneira análoga aos resultados da subseção 3.2.2, a validade das identidades (3.124) também está sujeita à imposição de condições temporais mistas sobre as variações da trajetória extrema:

$$\delta \nu(t_i) = 0, \quad (3.126a)$$

$$\delta \bar{\nu}(t_f) = 0. \quad (3.126b)$$

Substituindo a expressão (3.122) nas equações de Euler-Lagrange, obtemos as equações de movimento correspondentes às variáveis dinâmicas $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$:

$$\dot{\nu} = \tilde{B}^T \nu + \tilde{C} \bar{\nu}, \quad (3.127a)$$

$$\dot{\bar{\nu}} = -\tilde{A} \nu - \tilde{B} \bar{\nu}. \quad (3.127b)$$

Note que, nas identidades anteriores, não introduzimos qualquer notação específica para as trajetórias extremas do funcional $\delta^2 S$. Entretanto, sobretudo nos cálculos referentes às subseções 3.2.3 e 3.2.4, devemos lembrar que os vetores $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$ simbolizam variáveis de integração, cujos valores são arbitrários dentro de seus respectivos domínios. Portanto, as soluções das equações de movimento (3.127), estabelecidas somente no contexto da atual digressão, representam valores particulares para os desvios em torno de uma trajetória clássica.

Durante o cálculo das equações (3.127), utilizamos as seguintes propriedades:

$$\tilde{A}^T = \tilde{A}, \quad (3.128a)$$

$$\tilde{C}^T = \tilde{C}, \quad (3.128b)$$

as quais decorrem imediatamente das definições (3.68a) e (3.68c), uma vez que as relações $A^T = A$ e $C^T = C$ são igualmente válidas, de acordo com as identidades (3.57), (3.62a) e (3.62c).

A extremização do funcional $\delta^2 S$ possui correspondência exata com a linearização das equações de movimento (3.3), uma vez que ambos procedimentos fornecem soluções totalmente equivalentes, as quais designamos por *desvios clássicos*. Consequentemente, as identidades (3.127) estão em completa analogia com as definições iniciais do apêndice A, exceto por uma evidente transformação de variáveis. A fim de reforçar a semelhança entre estes resultados aparentemente distintos, reescrevemos as equações diferenciais para $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$ em notação matricial:

$$\begin{pmatrix} \dot{\nu}(t) \\ \dot{\bar{\nu}}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{B}^T(t) & \tilde{C}(t) \\ -\tilde{A}(t) & -\tilde{B}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu(t) \\ \bar{\nu}(t) \end{pmatrix}. \quad (3.129)$$

Em seguida, de forma similar à identidade (A.2), estabelecemos uma relação entre os desvios clássicos nos extremos do intervalo de propagação:

$$\begin{pmatrix} \nu(t_f) \\ \bar{\nu}(t_f) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{M}_{11}(t_f, t_i) & \tilde{M}_{12}(t_f, t_i) \\ \tilde{M}_{21}(t_f, t_i) & \tilde{M}_{22}(t_f, t_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu(t_i) \\ \bar{\nu}(t_i) \end{pmatrix} = \tilde{\mathbb{M}}(t_f, t_i) \begin{pmatrix} \nu(t_i) \\ \bar{\nu}(t_i) \end{pmatrix}. \quad (3.130)$$

Agora, considerando $t = t_f$, substituímos a expressão anterior em ambos os lados da equação (3.129):

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{M}}_{11}(t, t_i) & \dot{\tilde{M}}_{12}(t, t_i) \\ \dot{\tilde{M}}_{21}(t, t_i) & \dot{\tilde{M}}_{22}(t, t_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{B}^T(t) & \tilde{C}(t) \\ -\tilde{A}(t) & -\tilde{B}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{M}_{11}(t, t_i) & \tilde{M}_{12}(t, t_i) \\ \tilde{M}_{21}(t, t_i) & \tilde{M}_{22}(t, t_i) \end{pmatrix}. \quad (3.131)$$

A condição inicial para a matriz $\tilde{\mathbb{M}}$ decorre diretamente da definição (3.130):

$$\tilde{\mathbb{M}}(t_i, t_i) = \mathbf{1}. \quad (3.132)$$

Observe que o sistema de equações diferenciais (3.131) acopla os blocos de $\tilde{\mathbb{M}}$ somente aos pares. Então, com a intenção de destacar as quantidades relevantes ao cálculo do propagador semiclássico, reescrevemos as relações entre \tilde{M}_{12} e \tilde{M}_{22} :

$$\dot{\tilde{M}}_{12} = \tilde{B}^T \tilde{M}_{12} + \tilde{C} \tilde{M}_{22}, \quad (3.133a)$$

$$\dot{\tilde{M}}_{22} = -\tilde{A} \tilde{M}_{12} - \tilde{B} \tilde{M}_{22}. \quad (3.133b)$$

Manipulando as expressões anteriores, podemos isolar a evolução de \tilde{M}_{22} em uma única equação diferencial de segunda ordem:

$$\ddot{\tilde{M}}_{22} = \left(\tilde{A} \tilde{B}^T \tilde{A}^{-1} + \dot{\tilde{A}} \tilde{A}^{-1} - \tilde{B} \right) \dot{\tilde{M}}_{22} + \left(\tilde{A} \tilde{B}^T \tilde{A}^{-1} \tilde{B} - \tilde{A} \tilde{C} + \dot{\tilde{A}} \tilde{A}^{-1} \tilde{B} - \dot{\tilde{B}} \right) \tilde{M}_{22}, \quad (3.134)$$

a qual recebe a denominação usual de *equação de Jacobi*. Com o auxílio das identidades (3.132) e (3.133), encontramos as condições iniciais correspondentes ao resultado (3.134):

$$\tilde{M}_{22}(t_i, t_i) = \mathbf{1}, \quad (3.135a)$$

$$\dot{\tilde{M}}_{22}(t_i, t_i) = -\tilde{B}(t_i). \quad (3.135b)$$

Note que a equação de movimento e as condições iniciais referentes ao bloco \tilde{M}_{22} são exatamente idênticas às expressões (3.119) e (3.120c), as quais determinam a evolução temporal da matriz $Y(t)$. Visto que os dois conjuntos de variáveis dinâmicas possuem a mesma dimensão, concluímos imediatamente que:

$$Y(t) = \tilde{M}_{22}(t, t_i). \quad (3.136)$$

Portanto, conforme a proposta inicial desta subseção, estabelecemos uma conexão entre a solução explícita do propagador reduzido e uma grandeza clássica de preciso significado físico.

3.2.6 Resultado

De acordo com as equações (3.64), as quantidades $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$ estão relacionadas às variações $\bar{\eta}(t)$ e $\eta(t)$ por uma simples transformação linear. Consequentemente, em comparação com as identidades (3.51), podemos definir novas variáveis dinâmicas $\bar{v}(t)$ e $v(t)$ com as seguintes propriedades:

$$\nu(t) = v(t) - v_c(t), \quad (3.137a)$$

$$\bar{\nu}(t) = \bar{v}(t) - \bar{v}_c(t). \quad (3.137b)$$

Observe que os vetores $\bar{v}_c(t)$ e $v_c(t)$, utilizados como referência para os deslocamentos $\bar{\nu}(t)$ e $\nu(t)$, constituem uma descrição alternativa da trajetória clássica.

Uma vez que as equações clássicas de movimento para $\bar{v}(t)$ e $v(t)$ permanecem desconhecidas, precisamos reescrever estas quantidades em termos das variáveis originais $\bar{z}(t)$ e $z(t)$. Então, substituindo as expressões (3.51) e (3.137) nas equações (3.64), obtemos a relação entre as duas parametrizações do espaço de fase duplicado:

$$v(t) = \Theta^T(t)z(t), \quad (3.138a)$$

$$\bar{v}(t) = \Theta(t)\bar{z}(t). \quad (3.138b)$$

Com o objetivo de aplicar a transformação anterior sobre o resultado (3.136), analogamente à identidade (A.2), representamos os blocos da matriz $\tilde{\mathbb{M}}$ na forma de derivadas entre os extremos da trajetória clássica:

$$\tilde{\mathbb{M}}(t_f, t_i) = \begin{pmatrix} \frac{\partial v(t_f)}{\partial v(t_i)} & \frac{\partial v(t_f)}{\partial \bar{v}(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{v}(t_f)}{\partial v(t_i)} & \frac{\partial \bar{v}(t_f)}{\partial \bar{v}(t_i)} \end{pmatrix}. \quad (3.139)$$

Note que, nesta última equação, omitimos novamente um possível acréscimo de notação para indicar as funções calculadas sobre a trajetória clássica. Como sugerido pelas expressões (3.138) e (3.139), podemos identificar os valores iniciais $\bar{z}(t_i)$ e $z(t_i)$ como as variáveis independentes associadas aos elementos da matriz $\tilde{\mathbb{M}}$. Contudo, devido às condições de contorno (3.5), todas as grandezas constituintes do propagador semiclássico devem possuir dependência funcional

explícita em $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$. Por esta razão, de maneira semelhante à equação (A.5), torna-se apropriada a definição de uma segunda matriz de acoplamento entre desvios clássicos:

$$\tilde{\mathbb{T}}(t_f, t_i) = \begin{pmatrix} \frac{\partial v(t_f)}{\partial \bar{v}(t_f)} & \frac{\partial v(t_f)}{\partial v(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{v}(t_f)} & \frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial v(t_i)} \end{pmatrix}. \quad (3.140)$$

Exceto por uma evidente mudança de notação, as relações entre as matrizes $\tilde{\mathbb{M}}(t_f, t_i)$ e $\tilde{\mathbb{T}}(t_f, t_i)$ encontram-se descritas pelas equações (A.8). Consequentemente, podemos estabelecer a seguinte identidade:

$$\tilde{M}_{22}(t_f, t_i) = \tilde{T}_{21}^{-1}(t_f, t_i) = \left[\frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{v}(t_f)} \right]^{-1}. \quad (3.141)$$

Inserindo sucessivamente os resultados (3.136) e (3.141) na expressão (3.121), obtemos a solução formal para a integral de caminho (3.72):

$$K_{red} = \left\{ \det \left[\frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{v}(t_f)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \operatorname{tr} \tilde{B}(t) \right]. \quad (3.142)$$

Neste momento, podemos efetuar as últimas simplificações significativas sobre os fatores de K_{red} . Primeiramente, empregando as transformações (3.138), redefinimos o bloco $\tilde{\mathbb{T}}_{21}(t_f, t_i)$ em função do conjunto original de variáveis dinâmicas:

$$\frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{v}(t_f)} = \frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{v}(t_f)} = \Theta(t_i) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \Theta^{-1}(t_f). \quad (3.143)$$

Em seguida, substituindo a definição (3.65) na identidade anterior, reescrevemos o determinante correspondente ao primeiro fator do propagador reduzido:

$$\det \left[\frac{\partial \bar{v}(t_i)}{\partial \bar{v}(t_f)} \right] = \left[\frac{\det g(t_i)}{\det g(t_f)} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right]. \quad (3.144)$$

Agora, considerando a equação (3.68b), realizamos algumas manipulações sobre o traço da quantidade $\tilde{B}(t)$:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}[\tilde{B}(t)] &= \operatorname{tr} [\Theta^{-1}(t)B(t)\Theta^{-1}(t)] \\ &= \operatorname{tr} [\xi(t)B(t)]. \end{aligned} \quad (3.145)$$

Então, utilizando a expressão (3.62b), obtemos diferentes descrições para o integrando no segundo fator do propagador (3.142):

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} [\xi(\bar{z}, z)B] &= -\frac{i}{2\hbar} \operatorname{tr} \left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{z}} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\frac{\partial \dot{z}}{\partial z} - \frac{\partial \dot{\bar{z}}}{\partial \bar{z}} \right] = \frac{1}{2} \operatorname{tr} [R_{11}(t) - R_{22}(t)]. \end{aligned} \quad (3.146)$$

Na segunda linha desta última equação, introduzimos os blocos da matriz $\mathbb{R}(t)$, definidos no apêndice A. Aplicando as simplificações (3.144-3.146) sobre a identidade (3.142), encontramos a expressão final para o propagador reduzido:

$$K_{red} = \left\{ \left[\frac{\det g(t_i)}{\det g(t_f)} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{4} \int_{t_i}^{t_f} \text{tr} [R_{22}(t) - R_{11}(t)] dt \right\}. \quad (3.147)$$

Por fim, de acordo com a definição (3.55), a simples substituição do resultado anterior sobre a equação (3.53) fornece precisamente o propagador semiclássico no formato apresentado pela identidade (3.2). Deste modo, concluímos a demonstração de todas as fórmulas exibidas no início do presente capítulo.

Capítulo 4

Representações a Valores Iniciais

Considerando o regime de validade de suas aproximações, o propagador semiclássico constitui uma ferramenta importante no estudo de sistemas quânticos. A possibilidade de investigar as primeiras correções quânticas a um modelo físico por intermédio de uma prescrição puramente clássica representa uma evidente vantagem, uma vez que a avaliação de grandezas clássicas possui custo computacional geralmente inferior ao cálculo análogo para quantidades quânticas.

No entanto, a aplicação direta da fórmula (3.2) apresenta uma série de dificuldades práticas. Primeiramente, as trajetórias constituintes do propagador semiclássico são determinadas por *condições de contorno*. Particularmente em sistemas não-lineares, a busca por estas soluções específicas representa um problema bastante complicado, sobretudo quando comparado à resolução analítica ou numérica das equações clássicas de movimento sob valores iniciais.

O segundo obstáculo para a utilização imediata dos resultados do capítulo anterior decorre do aparecimento de *pontos focais*, os quais são responsáveis por divergências na aproximação semiclássica. Por definição, um ponto focal equivale a um cruzamento entre as projeções das trajetórias clássicas em um subespaço particular do espaço de fase completo. De acordo com as identidades (A.5) e (A.8c), podemos reescrever o pré-fator (3.9) como uma função explícita de um único bloco da matriz tangente:

$$\mathcal{C}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \left\{ \left[\frac{\det g(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\det g(\bar{z}(t_f), z(t_f))} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\det [M_{22}(t_f, t_i)]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.1)$$

Portanto, o propagador semiclássico possui valores indeterminados para $\det[M_{22}(t_f, t_i)] = 0$, o que corresponde a um ponto focal no subespaço gerado pelas variáveis \bar{z} .

A princípio, a *duplicação do espaço de fase* também constitui uma complicação intrínseca ao cálculo da expressão (3.2), pois a substituição de quantidades clássicas usuais por suas continuações analíticas implica diretamente em uma maior exigência de recursos algébricos e computacionais. Ademais, o espaço de fase ampliado possibilita a ocorrência de *trajetórias espúrias*^{24–29}, as quais resultam em contribuições fisicamente impróprias ao propagador semiclássico, embora representem soluções corretas para as equações clássicas de movimento (3.3) sob as condições de contorno (3.5).

A fim de solucionar os problemas recorrentes na propagação semiclássica, diversas estratégias foram propostas nas últimas décadas. Dentre elas, destacamos os trabalhos seminais de Miller^{64;65}, o propagador de Herman-Kluk^{66;67} e as aproximações de Heller com Gaussianas derretidas⁶⁸ e congeladas⁶⁹. Estes métodos estabeleceram novos paradigmas na teoria semiclássica, devido principalmente à ampla aplicabilidade e razoável precisão de seus resultados. Em grande parte, podemos atribuir o êxito destas técnicas aproximativas ao conceito de *representação a valores iniciais*¹, na qual a dinâmica do sistema encontra-se determinada exclusivamente por condições iniciais.

Embora os métodos semiclássicos a valores iniciais tenham recebido numerosas análises, aplicações e aperfeiçoamentos em um intervalo de tempo relativamente curto⁷⁰⁻⁷⁹, devemos ressaltar a existência de dois tópicos ainda muito pouco explorados. Primeiramente, a generalização de aproximações semiclássicas para estados coerentes arbitrários permanece praticamente ausente no contexto das representações a valores iniciais, apesar da grande variedade de resultados baseados nos estados coerentes canônicos. Outro tema interessante, mas também pouco investigado, é a construção de fórmulas semiclássicas a partir da imposição exclusiva de condições iniciais sobre as trajetórias clássicas no espaço de fase duplicado. No presente capítulo, pretendemos colaborar no preenchimento destas duas lacunas da teoria semiclássica.

4.1 Propagação a Valores Iniciais no Espaço Duplicado

Ainda que diversos estudos^{20;21;26;27} tenham indicado as potenciais vantagens de uma aproximação semiclássica estabelecida sobre o espaço de fase duplicado, a aplicação desta classe de métodos foi consideravelmente dificultada pelas complicações envolvidas na busca por soluções clássicas sob condições de contorno e no tratamento adequado das trajetórias espúrias. Recentemente, Aguiar e colaboradores⁴⁰ apresentaram uma nova abordagem ao propagador semiclássico para estados coerentes canônicos, na qual estão combinados os recursos únicos das trajetórias clássicas no espaço ampliado com os evidentes benefícios de uma representação a valores iniciais. Além disto, eles demonstraram que simples regras de seleção para as trajetórias contribuintes podem produzir resultados bastante precisos.

Propagadores a valores iniciais para os estados coerentes de $SU(2)$ ⁸⁰ e outros grupos de relevância física⁸¹ já foram examinados no passado, com interesse restrito ao espaço de fase usual. Contudo, estas tentativas originais não produziram resultados absolutamente satisfatórios, pois seus desenvolvimentos não estavam fundamentados em expressões semiclássicas apropriadas aos grupos dinâmicos selecionados.

Nesta seção, apresentaremos a generalização de nosso método semiclássico a valores iniciais no espaço de fase duplicado, o qual havíamos elaborado primeiramente para os estados coerentes de $SU(n)$ ⁸². Semelhantemente ao trabalho de Aguiar e colaboradores, discutiremos também uma técnica de eliminação de trajetórias espúrias, a qual designamos como *filtro heurístico*. Por fim, exemplificaremos a aplicação dos resultados teóricos, considerando um condensado de Bose-Einstein aprisionado em um potencial de três poços simétricos.

4.1.1 Dedução

Empregando a resolução da identidade (2.21), podemos reformular nossa definição inicial para o propagador quântico na representação de estados coerentes:

$$\begin{aligned}
K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &= \langle z_f | U(t_f, t_i) | z_i \rangle \\
&= \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) \langle z_f | \bar{z}^*(t_f) \rangle \langle \bar{z}^*(t_f) | U(t_f, t_i) | z_i \rangle \\
&= \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) \langle z_f | \bar{z}^*(t_f) \rangle K(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i).
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Observe que, nesta última equação, introduzimos uma nova notação para o operador de evolução temporal:

$$U(t_f, t_i) = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} H(t) dt \right]. \tag{4.3}$$

De acordo com a identidade (4.2), podemos reconstruir um propagador quântico específico mediante uma integração sobre todos os propagadores com mesmo estado inicial $|z_i\rangle$, ponderados pela sobreposição $\langle z_f | \bar{z}^*(t_f) \rangle$. No entanto, note que a realização da integral independe dos parâmetros do estado $\langle z_f |$, os quais geralmente podem ser fatorados durante a execução dos cálculos.

Então, eliminando o estado coerente final em ambos os lados da equação (4.2), reescrevemos a dinâmica do sistema diretamente em termos de seu estado quântico:

$$|\psi(z_i; t_f, t_i)\rangle = \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle K(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i). \tag{4.4}$$

Em seguida, procedemos com a aproximação semiclássica, substituindo o propagador quântico no integrando da expressão anterior pelo resultado (3.2):

$$\begin{aligned}
|\psi(z_i; t_f, t_i)\rangle &\approx \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle K_{sc}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) \\
&= \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i)] + \Lambda(\bar{z}(t_f), z_i) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Como evidenciado na equação anterior, podemos representar a evolução do sistema como uma integral sobre quantidades clássicas determinadas pelos valores de contorno $\bar{z}(t_f)$ e z_i . Portanto, como uma consequência natural da introdução do propagador semiclássico, o integrando da expressão (4.5) está definido em função de trajetórias clássicas sobre o espaço de fase duplicado. Neste caso, observe que a integração percorre somente metade dos graus de liberdade disponíveis.

As propriedades fundamentais de uma representação a valores iniciais são inseridas na equação (4.5) por uma modificação no caráter funcional das variáveis de integração. Ou seja, passaremos a interpretar o vetor $\bar{z}(t_f)$ como uma função das condições iniciais de sua trajetória clássica correspondente:

$$\bar{z}(t_f) = \bar{z}(\bar{z}(t_i), z_i; t_f). \quad (4.6)$$

Note que um único conjunto de condições de contorno $\bar{z}(t_f)$ e z_i pode corresponder a vários pares de valores iniciais $\bar{z}(t_i)$ e z_i . Logo, a identidade (4.6) geralmente não constitui uma relação bijetiva entre trajetórias clássicas. Entretanto, a determinação da grandeza $\bar{z}(t_f)$ não apresenta ambiguidades para uma escolha particular das condições iniciais.

Sob a transformação de variáveis, obtemos a seguinte expressão para o elemento de integração:

$$\begin{aligned} \sum_{\text{traj.}} \frac{d\bar{z}(t_f)d\bar{z}^*(t_f)}{(2\pi i)^d} &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} & \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}^*(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{z}^*(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} & \frac{\partial \bar{z}^*(t_f)}{\partial \bar{z}^*(t_i)} \end{pmatrix} \frac{d\bar{z}(t_i)d\bar{z}^*(t_i)}{(2\pi i)^d} \\ &= \det \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} & 0 \\ 0 & \left[\frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} \right]^* \end{pmatrix} \frac{d\bar{z}(t_i)d\bar{z}^*(t_i)}{(2\pi i)^d} \\ &= \left| \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} \right] \right|^2 \frac{d\bar{z}(t_i)d\bar{z}^*(t_i)}{(2\pi i)^d}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nesta última equação, em concordância com a identidade (3.3b), consideramos que as equações de movimento para $\bar{z}(t)$ independem dos valores de $\bar{z}^*(t)$. Observe que a integração sobre os conjuntos de trajetórias clássicas determinadas por uma mesma condição de contorno é reduzida simplesmente a uma integral sobre todos os valores iniciais $\bar{z}(t_i)$ possíveis. Esta redefinição do domínio de integração está denotada explicitamente no resultado (4.7), com o desaparecimento do somatório sobre as trajetórias contribuintes.

Com a substituição sucessiva das expressões (2.22) e (4.7) na equação (4.5), encontramos a formulação fundamental para a *propagação semiclássica a valores iniciais no espaço de fase duplicado*:

$$\begin{aligned} |\psi_{sc}(z_i; t_f, t_i)\rangle &= \int \frac{d\bar{z}(t_i)d\bar{z}^*(t_i)}{(2\pi i)^d} |\bar{z}^*(t_f)\rangle \kappa(l) \det [g(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))] \left| \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} \right] \right|^2 \\ &\quad \times \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) e^{\frac{i}{\hbar} [S(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i)] + \Lambda(\bar{z}(t_f), z_i)}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Devemos enfatizar que, durante a avaliação do integrando de $|\psi_{sc}\rangle$, o vetor $\bar{z}(t_f)$ não simboliza uma condição de contorno, mas uma quantidade determinada inequivocamente pelos valores iniciais $\bar{z}(t_i)$ e $z(t_i)$. Novamente, note que a integração não cobre todo espaço de fase duplicado, pois metade das condições iniciais permanece fixa no parâmetro z_i .

A fórmula (4.8) representa uma solução para os problemas decorrentes da imposição de condições temporalmente mistas sobre o sistema de equações (3.3). No entanto, um ganho tão significativo não foi alcançado gratuitamente, visto que a busca por trajetórias sujeitas a condições de contorno foi substituída por uma integral sobre todos os valores possíveis de $\bar{z}(t_i)$.

Contudo, espera-se que as dificuldades técnicas introduzidas em $|\psi_{sc}\rangle$, em razão do acréscimo de uma integração, possuam complexidade inferior a uma aplicação direta da expressão (3.2).

Empregando a definição (A.2), podemos relacionar o bloco $M_{22}(t_f, t_i)$ da matriz tangente com o fator Jacobiano no integrando do resultado (4.8):

$$|\psi_{sc}(z_i; t_f, t_i)\rangle = \int \frac{d\bar{z}(t_i)d\bar{z}^*(t_i)}{(2\pi i)^d} |\bar{z}^*(t_f)\rangle \kappa(l) \det[g(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))] \times |\det M_{22}(t_f, t_i)|^2 K'_{sc}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i). \quad (4.9)$$

Na equação anterior, com o intuito de simplificar a notação, introduzimos o *propagador semiclássico de trajetória única*:

$$K'_{sc}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) = \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) e^{\frac{i}{\hbar}[S(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i)] + \Lambda(\bar{z}(t_f), z_i)}. \quad (4.10)$$

Observe que esta última expressão difere da identidade (3.2) apenas pela ausência de um símbolo somatório. Ou seja, como consequência da relação (4.6), o propagador K'_{sc} possui uma única trajetória clássica contribuinte, especificada implicitamente pelas condições iniciais $\bar{z}(t_i)$ e z_i .

Examinando os resultados (4.1), (4.9) e (4.10), podemos concluir que o integrando de $|\psi_{sc}\rangle$ é proporcional a $|\det[M_{22}(t_f, t_i)]|^{\frac{3}{2}}$. Portanto, diferentemente do fator $|\det[M_{22}(t_f, t_i)]|^{-\frac{1}{2}}$ no propagador semiclássico original, a representação a valores iniciais no espaço de fase duplicado não apresenta divergências para os pontos focais nas variáveis \bar{z} , os quais correspondem diretamente a $\det[M_{22}(t_f, t_i)] = 0$.

4.1.2 Filtro Heurístico

Como indicado por diversos trabalhos acerca da dinâmica semiclássica sob condições de contorno^{24–29}, uma parcela significativa das trajetórias clássicas no espaço duplicado produz contribuições fisicamente incorretas ao cálculo do propagador (3.2). Estas *trajetórias espúrias*, decorrentes de deformações impróprias no domínio de integração durante a aplicação do método do ponto de sela sobre a expressão (3.37), permanecem como um problema fundamental na construção de representações a valores iniciais⁴⁰, uma vez que apenas parte das condições $\bar{z}(t_i)$ resulta em soluções clássicas apropriadas à avaliação da integral (4.9) no caso de sistemas não-lineares.

O *filtro heurístico* constitui um procedimento efetivo para a eliminação das trajetórias espúrias, o qual definimos pela seguinte inequação:

$$\frac{d}{dt} \ln \left[|K'_{sc}(\bar{z}(t), z_i; t, t_i)|^2 \right] < \lambda. \quad (4.11)$$

Se uma trajetória clássica viola a desigualdade anterior no instante de tempo t , então sua condição inicial é removida da integral (4.9) para $t_f \geq t$. O parâmetro λ representa uma constante real positiva, cujo valor deve ser ajustado de maneira a otimizar os resultados da propagação semiclássica. Logo, a regra de seleção (4.11) introduz uma arbitrariedade na representação a valores iniciais, pois um método determinístico para a escolha de λ não está estabelecido.

Com intuito de fornecer uma interpretação simplificada ao filtro heurístico, reescrevemos o propagador de trajetória única na forma de uma exponencial complexa:

$$K'_{sc} = \exp(\kappa_r + i\kappa_i), \quad (4.12)$$

na qual $\kappa_r, \kappa_i \in \mathbb{R}$. Em termos desta última definição, podemos reformular a desigualdade (4.11):

$$\frac{d\kappa_r}{dt} < \frac{\lambda}{2}. \quad (4.13)$$

Note que as trajetórias eliminadas pelo filtro heurístico resultam em um crescimento abrupto na parte real de $\ln(K'_{sc})$. Portanto, a condição (4.13) possui a função de prevenir as possíveis divergências no valor absoluto do propagador semiclássico de trajetória única. Como mostrado pela equação (4.10), a variação temporal κ_r é determinada diretamente pela parte imaginária da ação corrigida ($S + I$). No entanto, de maneira distinta aos métodos publicados anteriormente^{25;40}, o pré-fator \mathcal{C} também está incluído explicitamente na caracterização das trajetórias espúrias. Evidentemente, o módulo de \mathcal{C} produz influências relevantes sobre o valor de κ_r , uma vez que esta grandeza possui a capacidade de neutralizar ou intensificar as variações súbitas em $\text{im}(S + I)$. A assimilação deste aspecto no filtro heurístico representa um elemento original importante no presente trabalho, o qual contribui consideravelmente à precisão da aproximação (4.9).

Devemos enfatizar que as regras de seleção para as trajetórias contribuintes no espaço de fase duplicado constituem um tema recorrente no contexto dos propagadores semiclássicos sob condições de contorno^{20;21;24–27}. Neste caso, diferentemente das representações a valores iniciais, o número de trajetórias clássicas relevantes é geralmente da ordem de poucas unidades. Além disto, a implementação das técnicas citadas depende de uma compreensão detalhada da dinâmica clássica subjacente ao sistema de interesse. Por outro lado, o filtro heurístico fornece um método simples e automático para a eliminação de trajetórias espúrias em meio às centenas ou milhares de condições iniciais correspondentes a uma única aplicação computacional da fórmula (4.9). Ademais, a utilização da desigualdade (4.11) não exige conhecimento preliminar referente às características particulares do modelo físico sob estudo.

Em uma situação razoavelmente distinta da atual subseção, Kay¹⁰ estabeleceu valores limitantes para o pré-fator do propagador de Herman-Kluk^{66;67}. Neste procedimento específico, com o propósito de assegurar a convergência da propagação semiclássica para uma amostra praticável de condições iniciais sobre o espaço de fase simples, as trajetórias caóticas com maior grau de instabilidade foram removidas dos cálculos numéricos. Devido à inclusão do pré-fator \mathcal{C} na construção do filtro heurístico, as trajetórias excessivamente instáveis também são eliminadas na avaliação da expressão (4.9). Contudo, devemos lembrar que o principal objetivo da desigualdade (4.11) é a exclusão das trajetórias espúrias, as quais podem ocorrer mesmo em sistemas completamente integráveis, como consequência exclusiva da duplicação do espaço de fase.

Apesar de sua diferente finalidade fundamental, o filtro heurístico pertence a uma ampla classe de técnicas orientadas ao condicionamento de integrações numéricas², entre as quais também podemos inserir o método de Kay e a filtragem de Filinov^{83–87}.

4.1.3 Definições Preliminares

Como preparação para as futuras aplicações da fórmula (4.9), apresentaremos alguns conceitos importantes na análise de métodos semiclássicos. As definições apresentadas nesta subseção possuem escopo bastante geral, o qual será explorado recorrentemente ao longo dos capítulos 4 e 5.

Representação Q

De maneira geral, podemos realizar a descrição completa de um estado quântico sobre o espaço de fase clássico⁸⁸. Embora a execução deste procedimento não possua alternativa única, a definição do propagador (3.1) sugere um método específico para a construção de uma distribuição quântica, a qual designamos por *representação Q* ⁸⁹. Considerando a concepção generalizada para os estados coerentes, a função $Q(z^*, z)$ associada a um estado arbitrário $|\psi\rangle$ está definida pela seguinte identidade:

$$\begin{aligned} Q(z^*, z) &= |\langle z|\psi\rangle|^2 \\ &= |K(z^*, z_i; t_f, t_i)|^2. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Na segunda linha desta última equação, assumimos que $|\psi\rangle$ representa a evolução temporal de um estado coerente inicial:

$$|\psi\rangle = U(t_f, t_i)|z_i\rangle. \quad (4.15)$$

Observe que a identidade anterior estabelece uma conexão imediata entre as definições (3.1) e (4.14). Empregando os métodos de dinâmica semiclássica, podemos elaborar aproximações para a representação do estado (4.15) sobre o espaço de fase simples. Por exemplo, em termos do resultado (4.9), obtemos a seguinte expressão semiclássica para a função Q :

$$Q_{sc}(z^*, z) = |\langle z|\psi_{sc}(z_i; t_f, t_i)\rangle|^2. \quad (4.16)$$

Com o auxílio da equação (2.21), podemos escrever uma relação de normalização para a distribuição Q :

$$\int d\mu(z^*, z)Q(z^*, z) = 1, \quad (4.17)$$

na qual assumimos implicitamente que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Diferentemente das expressões exatas (3.1) e (4.15), os métodos de propagação semiclássica geralmente produzem variações temporais sobre a norma do estado. Portanto, para uma comparação adequada com os resultados quânticos, torna-se necessária a normalização de Q_{sc} a cada instante de tempo.

A partir da representação Q , ou de sua versão semiclássica Q_{sc} , podemos calcular prontamente o valor médio de um observável arbitrário O :

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \int d\mu(z^*, z)\mathcal{O}_a(z^*, z)Q(z^*, z). \quad (4.18)$$

Na equação anterior, a função \mathcal{O}_a representa o símbolo antinormalmente ordenado do operador O , cuja definição fundamental é realizada de maneira implícita:

$$O = \int d\mu(z^*, z)\mathcal{O}_a(z^*, z)|z\rangle\langle z|. \quad (4.19)$$

Aproximação Clássica

Com a intenção de estabelecer um critério de comparação entre os resultados quânticos e semiclássicos, introduzimos uma nova abordagem à evolução temporal do sistema físico, a qual denominamos *aproximação clássica*. Como primeiro passo na construção deste método, definimos a *trajetória principal* como a solução das equações clássicas de movimento sob as seguintes condições iniciais¹:

$$z_p(t_i) = z_i, \quad (4.20a)$$

$$\bar{z}_p(t_i) = z_i^*. \quad (4.20b)$$

De acordo com as identidades (3.3), o espaço de fase simples constitui um subespaço invariante em relação ao sistema dinâmico duplicado. Consequentemente, a trajetória principal está sujeita à restrição $z_p^*(t) = \bar{z}_p(t)$. Então, empregando os conceitos anteriores, podemos definir a aproximação clássica para a média de um observável O :

$$\mathcal{O}_n(t_f) = \langle z_p(t_f) | O | z_p(t_f) \rangle. \quad (4.21)$$

Observe que a aproximação clássica à média de um operador consiste simplesmente no cálculo do símbolo normalmente ordenado \mathcal{O}_n sobre a trajetória principal. Apesar de sua aparente simplicidade, a expressão (4.21) possui profunda fundamentação na teoria de grupos^{54;90}. Além disto, a função $\mathcal{O}_n(t_f)$ corresponde ao resultado quântico exato em diversas situações de interesse físico. Por exemplo, no caso de um Hamiltoniano linear nos geradores do grupo dinâmico, o estado $|z_p(t_f)\rangle$ simboliza precisamente a solução da equação de Schrödinger, exceto por uma diferença de fase global e normalização.

Em geral, os métodos semiclássicos representam um aperfeiçoamento sobre a abordagem clássica, uma vez que as fórmulas decorrentes da expressão (3.2) incluem as primeiras correções quânticas à dinâmica do sistema. Portanto, a aproximação semiclássica também exhibe resultados exatos nos regimes de equivalência entre a solução quântica e a definição (4.21). Em particular, sob a restrição $H \in \mathfrak{g}$, todas as condições iniciais $\bar{z}(t_i)$ fornecem contribuições adequadas à integral (4.9). Por esta razão, o filtro heurístico torna-se desnecessário ao tratamento de sistemas lineares nos elementos da álgebra.

No apêndice B, apresentamos um estudo detalhado da aproximação clássica, no qual indicamos claramente as conexões entre a identidade (4.21) e a formulação usual da mecânica quântica.

Medida de Fidelidade

A comparação quantitativa entre dois estados físicos constitui uma tarefa bastante relevante em diversas aplicações da teoria quântica. No contexto específico da propagação semiclássica, estamos interessados em determinar a similaridade entre uma aproximação $|\psi_a(t)\rangle$ e sua correspondente solução quântica exata $|\psi_q(t)\rangle$. Com este objetivo, torna-se conveniente a introdução

¹Note que a trajetória principal é indicada explicitamente pelo subíndice p .

da *fidelidade*, a qual representa uma medida genuína de distância sobre o espaço de estados⁹¹. Como esperado, no caso particular de dois estados puros, a definição da fidelidade equivale simplesmente ao seguinte valor absoluto:

$$\mathcal{F}(t) = |\langle \psi_q(t) | \psi_a(t) \rangle|. \quad (4.22)$$

Na equação anterior, assumimos que os estados $|\psi_a(t)\rangle$ e $|\psi_q(t)\rangle$ estão normalizados, de modo a restringir os valores da fidelidade ao intervalo $0 \leq \mathcal{F} \leq 1$. Em concordância com a noção de projeção vetorial no espaço de Hilbert, a fidelidade corresponde a uma função estritamente crescente com a semelhança de conteúdo físico entre os estados considerados. Ou seja, excluindo uma possível diferença de fase global, o valor máximo de \mathcal{F} está associado somente aos pares de estados fisicamente idênticos, ao passo que uma redução nesta medida indica a divergência entre as descrições do sistema quântico.

4.1.4 Aplicação: Condensado em Poço Triplo

Como primeiro exemplo para o método de propagação semiclássica no espaço de fase duplicado, consideraremos um modelo simplificado para a dinâmica de um condensado de Bose-Einstein aprisionado em potencial de poço triplo⁹². Assumindo que os três poços da armadilha são idênticos e equivalentemente acoplados, obtemos o seguinte Hamiltoniano em uma aproximação de três modosⁱⁱ:

$$H = \Omega \sum_{j \neq k} a_j^\dagger a_k + \frac{\chi}{(N-1)} \sum_{j=1}^3 (a_j^\dagger)^2 a_j^2. \quad (4.23)$$

Na equação anterior, a_j^\dagger e a_j representam os operadores bosônicos de criação e aniquilação associados ao estado de partícula única $|u_j\rangle$, o qual simboliza o estado fundamental da aproximação harmônica centrada no j -ésimo mínimo do potencial, para $j = 1, 2, 3$. Os parâmetros Ω e χ correspondem respectivamente às taxas de tunelamento e colisão dos N bósons aprisionados.

Note que o operador H preserva o número total de partículas, de maneira que podemos restringir nossa análise ao espaço invariante com valor fixo de N , o qual denotamos por \mathbb{B}_N^3 . Portanto, em concordância com os resultados apresentados na subseção 2.2.3, os estados coerentes de $SU(3)$ são adequados ao tratamento semiclássico do condensado em poço triplo. Então, substituindo as expressões (2.56) e (4.23) na definição (3.4), encontramos a Hamiltoniana clássica efetiva para o modelo de três modos:

$$\mathcal{H}(\bar{z}, z) = \Omega N \frac{\bar{z}_1 z_2 + \bar{z}_2 z_1 + \bar{z}_1 + z_1 + \bar{z}_2 + z_2}{1 + \bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2} + \chi N \frac{\bar{z}_1^2 z_1^2 + \bar{z}_2^2 z_2^2 + 1}{(1 + \bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2)^2}. \quad (4.24)$$

Em seguida, empregando as fórmulas (2.66) e (3.3), obtemos as equações clássicas de movi-

ⁱⁱNesta subseção, com o intuito de simplificar a apresentação dos resultados, escolhemos o sistema de unidades em conformidade com a relação $\hbar = 1$.

mento para o condensado:

$$\dot{z}_j = -i\Omega(1 + z_1 + z_2)(1 - z_j) - 2i\chi \frac{z_j(\bar{z}_j z_j - 1)}{1 + \bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2}, \quad (4.25a)$$

$$\dot{\bar{z}}_j = i\Omega(1 + \bar{z}_1 + \bar{z}_2)(1 - \bar{z}_j) + 2i\chi \frac{\bar{z}_j(\bar{z}_j z_j - 1)}{1 + \bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2}, \quad (4.25b)$$

cujos subíndices estão restritos aos valores $j = 1, 2$. A partir das identidades (4.24) e (4.25), podemos calcular imediatamente todas as quantidades relevantes à propagação semiclássica, como a Lagrangiana L e a matriz \mathbb{R} , definidas respectivamente pelas equações (3.6b) e (A.1).

De acordo com as equações de movimento (4.25), a dinâmica do condensado exibe três *subespaços classicamente invariantes*, os quais são descritos pelas seguintes condições:

$$z_1 = z_2, \quad \bar{z}_1 = \bar{z}_2, \quad (4.26a)$$

$$z_1 = 1, \quad \bar{z}_1 = 1, \quad (4.26b)$$

$$z_2 = 1, \quad \bar{z}_2 = 1. \quad (4.26c)$$

As restrições anteriores possibilitam uma abordagem semiclássica alternativa para evolução temporal do condensado. Com o propósito de demonstrar esta afirmação, reescrevemos os estados coerentes (2.59) em termos dos operadores bosônicos de criação:

$$|z\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{(1 + z^* z)^{\frac{N}{2}}} \left(a_n^\dagger + \sum_{j=1}^{n-1} z_j a_j^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (4.27)$$

Por simplicidade, limitaremos nossa discussão à condição (4.26a), uma vez que os três subespaços invariantes são dinamicamente equivalentes⁹². Considerando o caso particular $n = 3$, aplicamos a restrição espacial escolhida ao estado coerente (4.27):

$$\begin{aligned} |z_1, z_2 = z_1\rangle_{\text{SU}(3)} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{(1 + 2z_1^* z_1)^{\frac{N}{2}}} \left[z_1(a_1^\dagger + a_2^\dagger) + a_3^\dagger \right]^N |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{(1 + 2z_1^* z_1)^{\frac{N}{2}}} \left(\sqrt{2}z_1 b_1^\dagger + b_2^\dagger \right)^N |0\rangle \\ &= |\sqrt{2}z_1\rangle_{\text{SU}(2)}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Na segunda linha desta última equação, realizamos uma mudança de base sobre o espaço de Hilbert de partícula única⁵⁵. Este procedimento corresponde a seguinte transformação unitária sobre os operadores bosônicos de criação:

$$\begin{aligned} b_1^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^\dagger + a_2^\dagger), \\ b_2^\dagger &= a_3^\dagger, \\ b_3^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^\dagger - a_2^\dagger). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Conforme evidenciado pela identidade (4.28), a restrição (4.26a) constitui uma relação de correspondência entre os estados coerentes de $SU(2)$ e um subconjunto dos estados coerentes de $SU(3)$. Portanto, o subespaço classicamente invariante está associado diretamente com um subgrupo dinâmico do Hamiltoniano (4.24).

Como consequência deste vínculo entre as propriedades do modelo, podemos utilizar as grandezas clássicas calculadas sobre o subespaço invariante para a construção de expressões semiclássicas na representação dos estados coerentes de $SU(2)$. Desta forma, estabelecemos uma aproximação simplificada para a dinâmica semiclássica do condensado, considerando um estado coerente inicial sob a condição (4.26a).

Observe que o estado (4.28) possui ocupação nula no modo correspondente aos operadores b_3^\dagger e b_3 . Logo, a restrição (4.26a) equivale *classicamente* à condição $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle = 0$. Ou seja, no contexto da aproximação clássica, a média do observável $b_3^\dagger b_3$ está definida pela seguinte função:

$$\langle z_1, z_2 | b_3^\dagger b_3 | z_1, z_2 \rangle = \frac{N}{2} \frac{(z_1^* - z_2^*)(z_1 - z_2)}{1 + z_1^* z_1 + z_2^* z_2}, \quad (4.30)$$

cujos valores nulos sobre espaço de fase simples estão inequivocamente relacionados com as identidades $z_1 = z_2$ e $z_1^* = z_2^*$. Contudo, aplicando a transformação (4.29) sobre o Hamiltoniano (4.23), notamos claramente que a média $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle$ não permanece nula sob a evolução *quântica* do condensado, considerando um estado inicialmente desocupado neste modo. Portanto, os subespaços (4.26) não possuem análogos quânticos com características idênticas.

As aproximações semiclássicas com estados coerentes de $SU(2)$ decorrem de uma projeção do espaço de Hilbert, na qual removemos a possibilidade de acesso dinâmico aos estados com ocupação média não-nula em relação ao operador $b_3^\dagger b_3$. Consequentemente, esperamos que esta simplificação produza resultados precisos somente quando os cálculos similares no espaço irrestrito apresentarem valores irrelevantes para $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle$.

Aproximação Semiclássica com Estados Coerentes de $SU(2)$

O *operador de desbalanço populacional* S_z representa um observável importante no estudo da dinâmica imposta pelo Hamiltoniano (4.23), pois seu valor médio descreve a diferença de ocupação entre os dois modos efetivamente populados no subespaço invariante clássico (4.26a). Em termos dos operadores bosônicos introduzidos pela transformação (4.29), o observável S_z possui a seguinte definição:

$$S_z = \frac{b_1^\dagger b_1 - b_2^\dagger b_2}{2}. \quad (4.31)$$

A figura 4.1.a exibe a comparação entre a evolução clássica, quântica e semiclássica da quantidade $\langle S_z \rangle / S$, considerando $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -1$ e estado inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{SU(2)} = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{SU(2)}$. Observe que a média de S_z está normalizada pela constante $S = \frac{N}{2}$, de maneira que a restringir seus valores ao intervalo $-1 \leq \langle S_z \rangle / S \leq 1$. Para a aproximação semiclássica, empregamos a fórmula (4.9) na representação de $SU(2)$, com 712 condições iniciais e valor limitante $\lambda = 10$ para o filtro heurístico.

Note que as oscilações da aproximação clássica apresentam amplitude constante, diferentemente dos resultados quântico e semiclássico. Apesar de sua restrição aos estados coerentes de

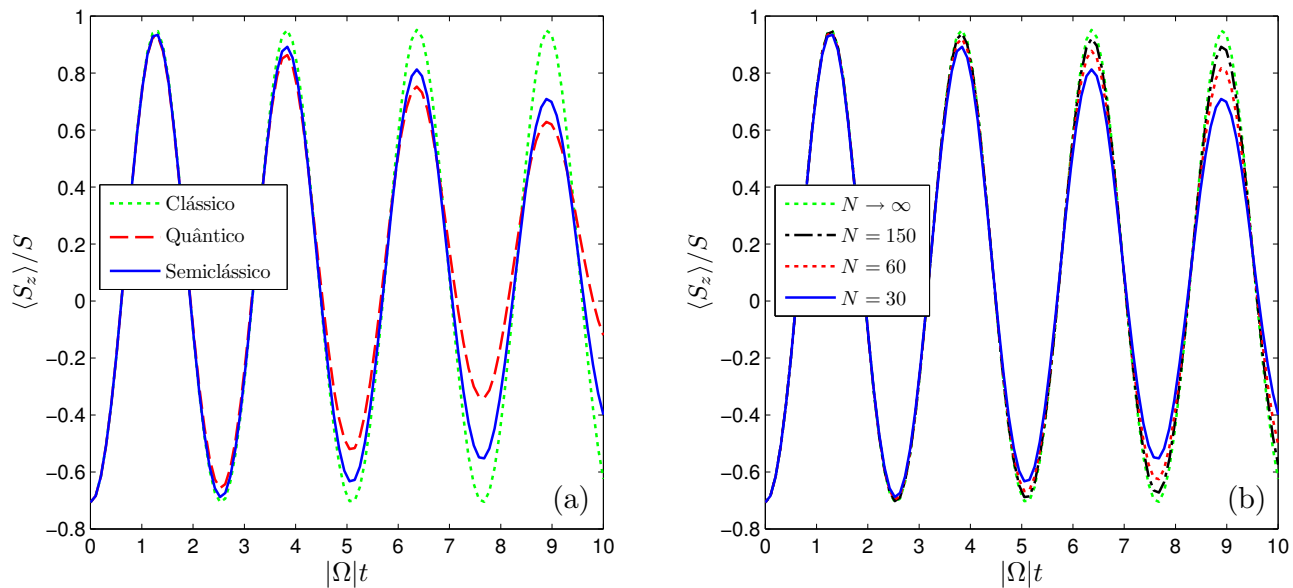


Figura 4.1: Dinâmica clássica, quântica e semiclassica para a média do operador de desbalanço populacional. Em todas as curvas consideramos $\Omega = -1$, $\chi = -1$ e estado inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)} = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{\text{SU}(2)}$. Os resultados semiclassicos decorrem da fórmula (4.9) na representação de estados coerentes de $\text{SU}(2)$. (a) Número de partículas fixo em $N = 30$. (b) Propagação semiclassica para diversos valores de N . O limite $N \rightarrow \infty$ corresponde à aproximação clássica.

$\text{SU}(2)$, o método semiclassico demonstra razoável acordo quantitativo com os cálculos quânticos exatos. Ou seja, mesmo para um número relativamente pequeno de partículas, a propagação semiclassica exhibe precisão bastante superior à abordagem exclusivamente clássica.

O comportamento dinâmico de $\langle S_z \rangle / S$ em função do número total de bósons condensados está exemplificado na figura 4.1.b, na qual utilizamos novamente o estado inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)} = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{\text{SU}(2)}$ e os parâmetros $\Omega = -1$ e $\chi = -1$. A propagação semiclassica na representação de $\text{SU}(2)$ foi realizada para 30, 60 e 150 partículas, com valor limitante $\lambda = 10$ e aproximadamente 500 condições iniciais em cada caso.

As equações de movimento (4.25) não possuem dependência no número total de bósons condensados. Portanto, todas as soluções clássicas $z(t)$ e $\bar{z}(t)$, incluindo a trajetória principal, são independentes do valor escolhido para N . A partir deste resultado, podemos mostrar que a *média clássica por partícula* de qualquer observável linear nos geradores de $\text{SU}(3)$ também não depende do parâmetro N . Consequentemente, a aproximação clássica para $\langle S_z \rangle / S$ representa um limite macroscópico exato, em concordância com as proposições do apêndice B.

Na figura 4.1.b, com o intuito de ilustrar o limite $N \rightarrow \infty$ para a dinâmica das médias semiclassicas, rerepresentamos a aproximação clássica para o desbalanço populacional. Observe que os resultados semiclassicos convergem rapidamente à curva clássica para valores crescentes de N . Por esta razão, esperamos que a abordagem clássica demonstre elevada precisão para poucas centenas de partículas, o que constitui um cenário compatível com os experimentos usuais em condensação bosônica^{93;94}. Contudo, considerando longos períodos de propagação

ou efeitos não-lineares intensos, os métodos semiclássicos devem inevitavelmente superar a fidelidade dos cálculos clássicos em relação à solução quântica.

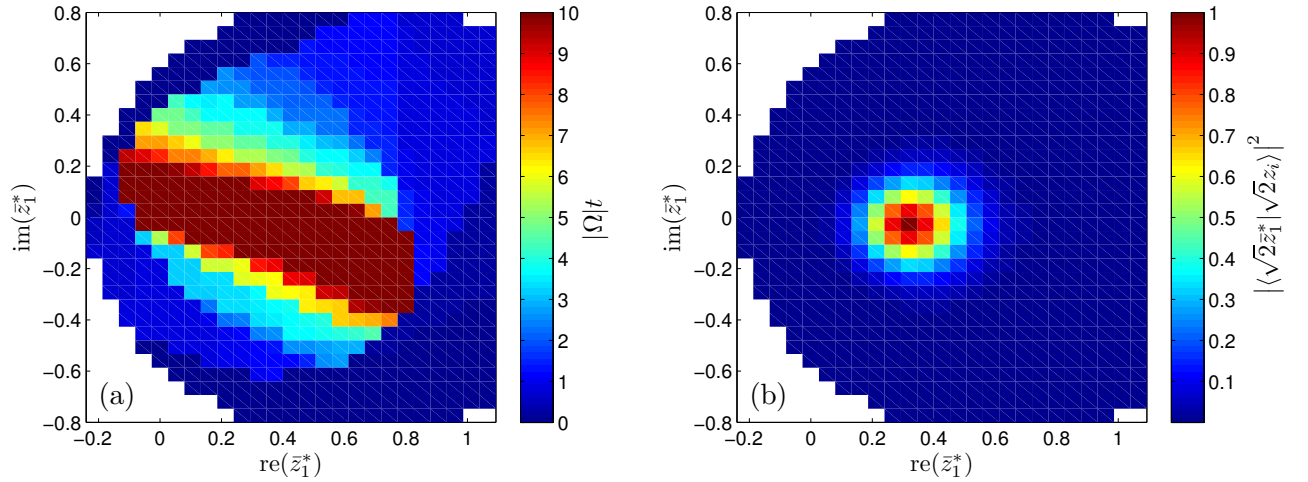


Figura 4.2: (a) Diagrama de condições iniciais para a propagação semiclássica mostrada na figura 4.1.a. O período de contribuição está determinado pelo filtro heurístico com valor limitante $\lambda = 10$. (b) Representação $Q(\sqrt{2}\bar{z}_1, \sqrt{2}\bar{z}_1^*)$ para o estado coerente inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)}$.

A figura 4.2.a mostra o diagrama de trajetórias contribuintes para a aproximação semiclássica exibida pela figura 4.1.a. Cada quadrado colorido no gráfico corresponde a uma condição inicial $\bar{z}_1(t_i)$ utilizada na avaliação numérica da integral (4.9). O código de cores indica o tempo total de contribuição para cada trajetória clássica, em conformidade com a aplicação do filtro heurístico (4.11) para $\lambda = 10$.

De acordo com a figura 4.2.a, as trajetórias com contribuições mais significativas à propagação semiclássica possuem condições iniciais \bar{z}_1^* centradas em torno de $z_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \tan \frac{\pi}{8} \approx 0.29$. Ou seja, as soluções clássicas próximas à trajetória principal apresentam elevada relevância no cálculo da expressão (4.9).

Como evidenciado pela figura 4.2.b, a condição $\bar{z}_1^* = z_i$ maximiza o valor da representação $Q(\sqrt{2}\bar{z}_1, \sqrt{2}\bar{z}_1^*) = |\langle \sqrt{2}\bar{z}_1^* | \sqrt{2}z_i \rangle|^2$. Portanto, o estado coerente inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)}$ está localizado na mesma região do espaço de fase associada com as contribuições dominantes à aproximação semiclássica.

O espaço de fase simples correspondente aos estados coerentes de $\text{SU}(2)$ possui identificação inequívoca com uma superfície esférica⁵⁸. Consequentemente, podemos parametrizar os estados (4.28) em função de coordenadas angulares:

$$\sqrt{2}z_1 = e^{-i\varphi} \tan \frac{\theta}{2}. \quad (4.32)$$

Na equação anterior, as quantidades θ e φ possuem definição similar aos ângulos esféricos usuais, de forma que $\theta \in [0, \pi]$ e $\varphi \in [0, 2\pi)$. Aplicando a transformação (4.32) sobre a expressão

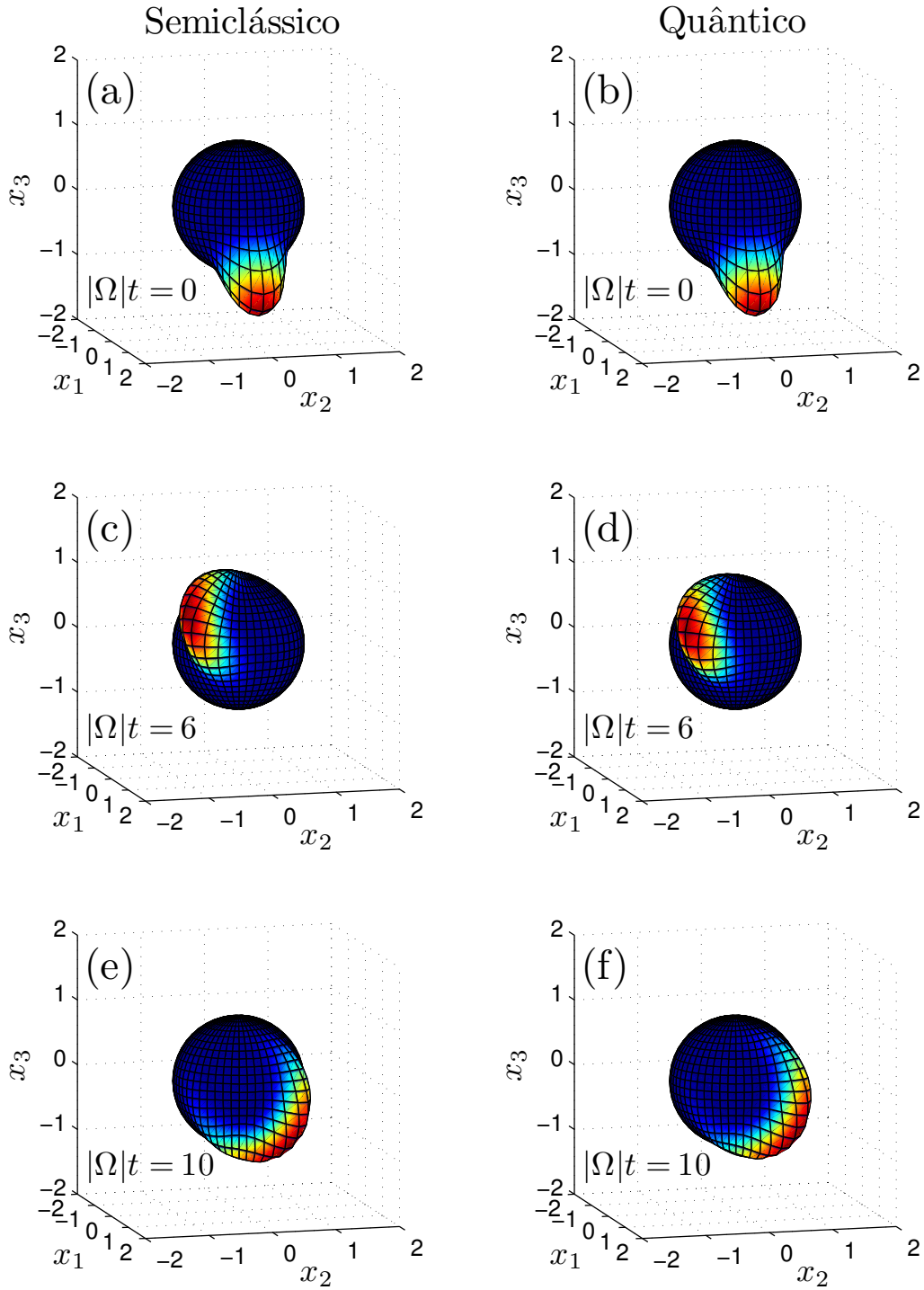


Figura 4.3: Representação Q do condensado sobre a esfera unitária. Os resultados mostrados correspondem aos mesmos parâmetros e estado inicial da figura 4.1.a. Os gráficos (a), (c) e (e) exibem a função Q semiclássica em três instantes de tempo distintos, ao passo que a solução quântica exata possui exposição análoga em (b), (d) e (f).

(4.14), podemos elaborar uma representação do condensado sobre a esfera unitária:

$$\begin{aligned}x_1 &= [Q(\theta, \varphi) + 1] \sin \theta \cos \varphi, \\x_2 &= [Q(\theta, \varphi) + 1] \sin \theta \sin \varphi, \\x_3 &= -[Q(\theta, \varphi) + 1] \cos \theta.\end{aligned}\tag{4.33}$$

Note que, por conveniência, escolhemos a origem da variável θ no semi-eixo x_3 negativo. Na figura 4.3, mostramos a comparação entre as representações Q resultantes da evolução semiclássica e quântica apresentadas anteriormente pela figura 4.1.a. Os gráficos 4.3.a e 4.3.b exibem a função Q para o estado coerente inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)}$, cuja descrição deve possuir formato idêntico em ambas as abordagens ao sistema dinâmico.

Nos instantes de tempo $|\Omega|t = 6$ e $|\Omega|t = 10$, observamos que o estado apresenta-se alongado sobre a região do espaço de fase percorrida pela trajetória principal. Diferentemente da aproximação clássica, a fórmula (4.9) possibilita a deformação da função Q durante a evolução temporal do condensado, em concordância com a solução quântica. Evidentemente, o alargamento do estado sobre a esfera unitária está relacionado com a redução na amplitude das oscilações em $\langle S_z \rangle / S$. Os gráficos 4.3.c-4.3.f também evidenciam a grande semelhança entre as representações decorrentes dos cálculos quântico e semiclássico.

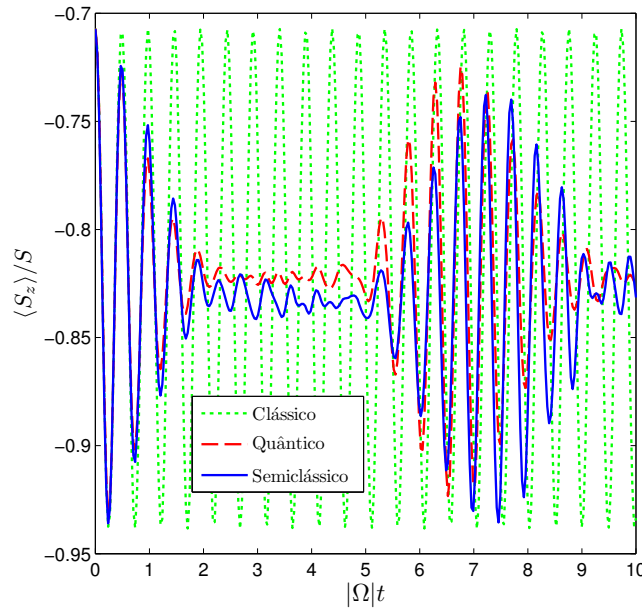


Figura 4.4: Média normalizada de S_z em função do tempo, considerando as abordagens clássica, quântica e semiclássica para o estado coerente inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)} = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{\text{SU}(2)}$. As taxas de tunelamento e colisão assumem respectivamente os valores $\Omega = -1$ e $\chi = -8$, enquanto o número total de partículas está fixado em $N = 30$. Para a propagação semiclássica, utilizamos a expressão (4.9) na representação dos estados coerentes de $\text{SU}(2)$.

Em geral, as equações de movimento (4.25) apresentam mudanças significativas de comportamento para diferentes magnitudes da quantidade χ/Ω ^{92;95}, uma vez que esta combinação de

parâmetros está diretamente associada com a intensidade relativa entre os termos lineares e quadráticos do Hamiltoniano (4.23)ⁱⁱⁱ.

As figuras 4.1 e 4.3 exemplificam a evolução temporal do condensado para valores relativamente pequenos χ/Ω . Neste caso, as propriedades dinâmicas do modelo são predominantemente determinadas pelos termos lineares do Hamiltoniano.

De maneira completamente distinta, a figura 4.4 mostra a média normalizada de S_z para um regime fortemente não-linear. Os resultados clássico, quântico e semiclássico decorrem do estado inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle_{\text{SU}(2)} = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{\text{SU}(2)}$, para $N = 30$, $\Omega = -1$ e $\chi = -8$. Na aproximação semiclássica, realizamos a integração numérica da fórmula (4.9) com 18234 condições iniciais e valor limitante $\lambda = 18$, considerando a representação dos estados coerentes de SU(2).

Analogamente ao regime de dominância linear, observe que a amplitude de $\langle S_z \rangle / S$ permanece constante durante toda a propagação clássica. Por outro lado, os resultados quântico e semiclássico exibem sucessivos *colapsos* e *ressurgimentos* nas oscilações do desbalanço populacional. Em conformidade com os conceitos introduzidos no apêndice B, a intensificação do termos quadráticos implica em uma maior discrepância entre a aproximação clássica e a solução exata, devido à emergência de fenômenos exclusivamente quânticos. Portanto, a figura 4.4 demonstra que a abordagem semiclássica possui a capacidade de descrever precisamente as características quânticas fundamentais de um sistema não-linear.

No entanto, comparando os cálculos numéricos referentes às figuras 4.1 e 4.4, notamos que o incremento da quantidade χ/Ω resulta em um rápido crescimento no número de trajetórias necessárias para uma aplicação adequada da aproximação semiclássica. Como esperado, a presença de não-linearidades intensas causa uma redução significativa na eficiência computacional da expressão (4.9).

Na figura 4.5, mostramos o diagrama de trajetórias contribuintes para o resultado semiclássico da figura 4.4. Observe que apenas uma pequena parcela das condições iniciais possui período de contribuição comparável ao intervalo total de propagação. Semelhantemente ao exemplo anterior de aplicação do filtro heurístico, as soluções clássicas com maior participação na aproximação semiclássica estão localizadas nas proximidades da trajetória principal. Entretanto, note que o contorno da região relevante ao cálculo da integral (4.9) não apresenta formato trivial. Esta característica do método semiclássico dificulta a elaboração de técnicas eficientes para a amostragem de condições iniciais, pois a determinação do domínio adequado para a integração numérica exige a resolução antecipada das equações clássicas de movimento.

A figura 4.6 exibe uma comparação entre as representações Q quântica e semiclássica, na qual consideramos os mesmos parâmetros e estado inicial da figura 4.5. Neste caso, a descrição do condensado no instante de tempo $|\Omega|t = 0$ coincide com os resultados mostrados pelos gráficos 4.3.a e 4.3.b. Em $|\Omega|t = 1.8$, observamos que a função Q apresenta-se alongada sobre a região da superfície esférica correspondente à trajetória principal. Esta *delocalização* sobre o espaço de fase é responsável pelo colapso nas oscilações de $\langle S_z \rangle / S$.

Em $|\Omega|t = 3.1$, notamos que o alargamento da distribuição progride para o fenômeno de *auto-interferência*, o qual resulta na formação de uma superposição entre dois estados localiza-

ⁱⁱⁱDe acordo com as identidades (2.55), os termos lineares e quadráticos de um Hamiltoniano arbitrário em relação aos geradores de SU(n) correspondem respectivamente a produtos bilineares e biquadráticos nos operadores bosônicos de criação e aniquilação.

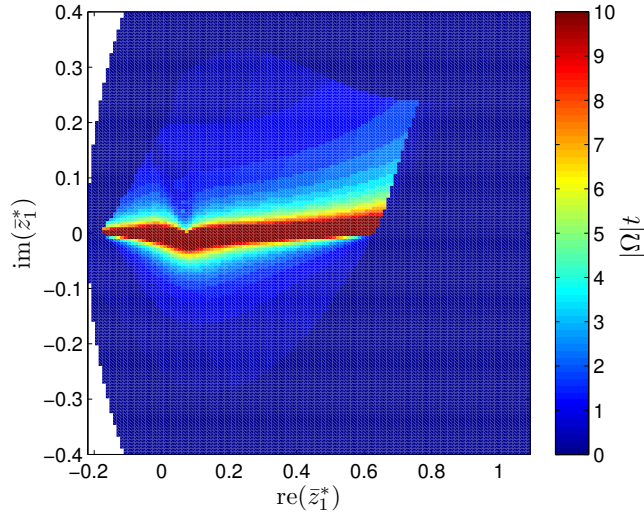


Figura 4.5: Diagrama de condições iniciais para a aproximação semiclássica exibida pela figura 4.4. As trajetórias clássicas possuem tempo total de contribuição estabelecido pelo filtro heurístico (4.11) para $\lambda = 18$.

dos sobre a esfera unitária. No instante de tempo $|\Omega|t = 6.8$, vemos que a representação do condensado converge novamente para uma única localização no espaço de fase. Este comportamento de *relocalização* está associado ao ressurgimento das oscilações na figura 4.5.

Por fim, devemos ressaltar que as diferenças entre as descrições quânticas e semiclássicas exibidas na figura 4.6 são visivelmente pequenas. Ou seja, a aproximação (4.9) possui precisão suficiente para caracterizar efeitos quânticos emblemáticos, como a delocalização e a relocalização da função Q sobre a superfície esférica.

Aproximação Semiclássica com Estados Coerentes de SU(3)

Embora as aproximações semiclássicas com estados coerentes de SU(2) tenham demonstrado excelente concordância com os resultados quânticos, os estados coerentes de SU(3) constituem a representação naturalmente apropriada à dinâmica estabelecida pelo Hamiltoniano (4.23).

Na figura 4.7.a, exemplificamos a utilização dos estados coerentes de SU(3) na abordagem semiclássica à evolução temporal de $\langle S_z \rangle / S$, considerando $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -1$ e estado coerente inicial parametrizado por $z_1 = z_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \tan \frac{\pi}{8}$. Para a integração numérica da expressão (4.9), empregamos 18989 condições iniciais uniformemente distribuídas sobre o subespaço gerado pelas variáveis \bar{z} . As trajetórias clássicas possuem intervalos de contribuição determinados pela desigualdade (4.11) com valor limitante $\lambda = 8$.

Como esperado, os resultados decorrentes da propagação semiclássica com estados coerentes de SU(3) apresentam precisão superior aos cálculos análogos na representação de SU(2). De acordo com a discussão introdutória da presente subseção, as divergências entre estas duas aproximações possuem origem nos estados com ocupação média $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle$ diferente de zero.

Com o objetivo de verificar afirmação anterior, a figura 4.7.b exibe a evolução temporal para

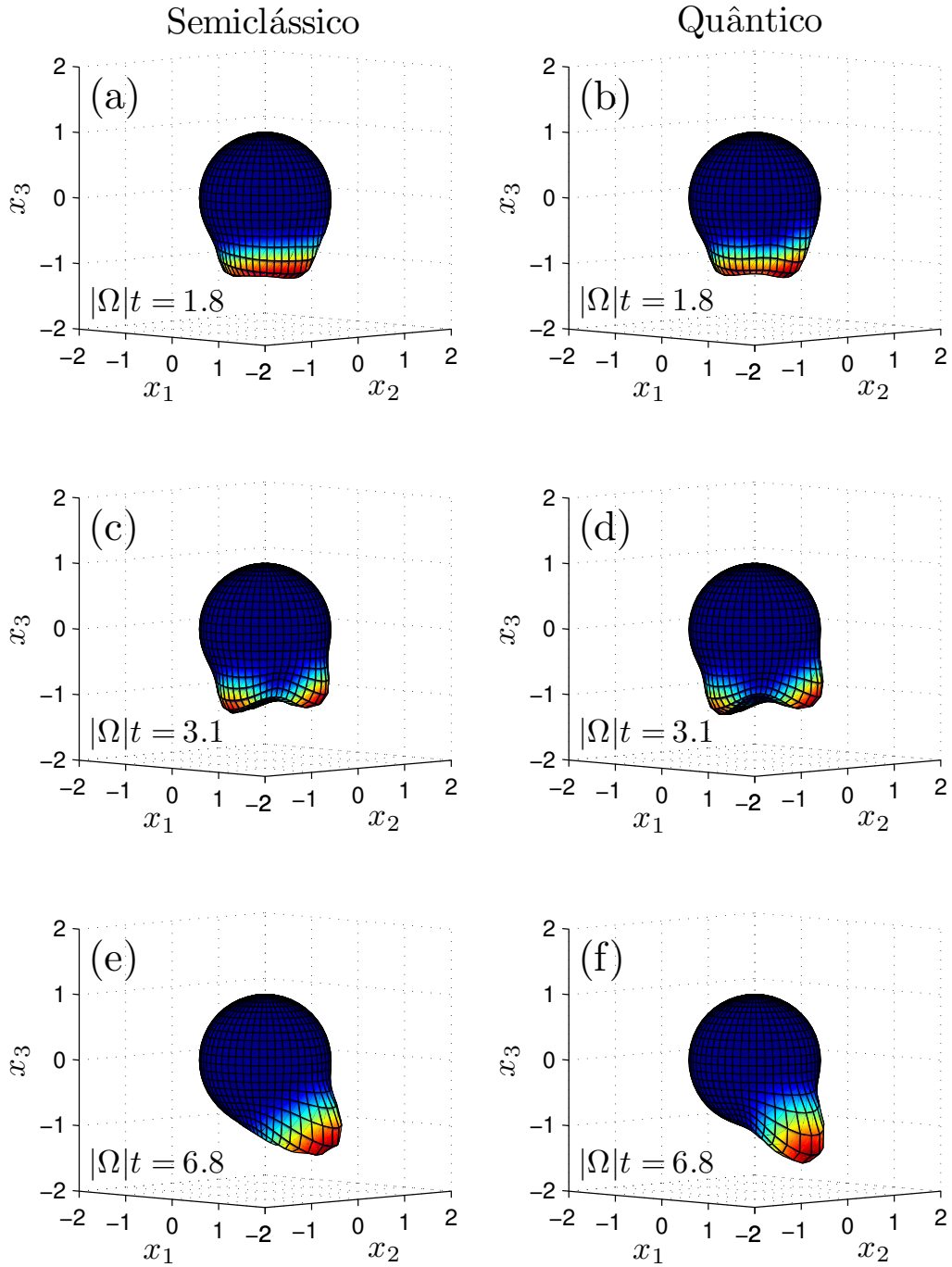


Figura 4.6: Representação Q sobre a esfera unitária correspondente aos resultados da figura 4.5. Os gráficos (a), (c) e (e) mostram a descrição semiclássica do condensado nos três instantes de tempo escolhidos. Com o objetivo de estabelecer uma comparação direta, exibimos a solução quântica exata em (b), (d) e (f).

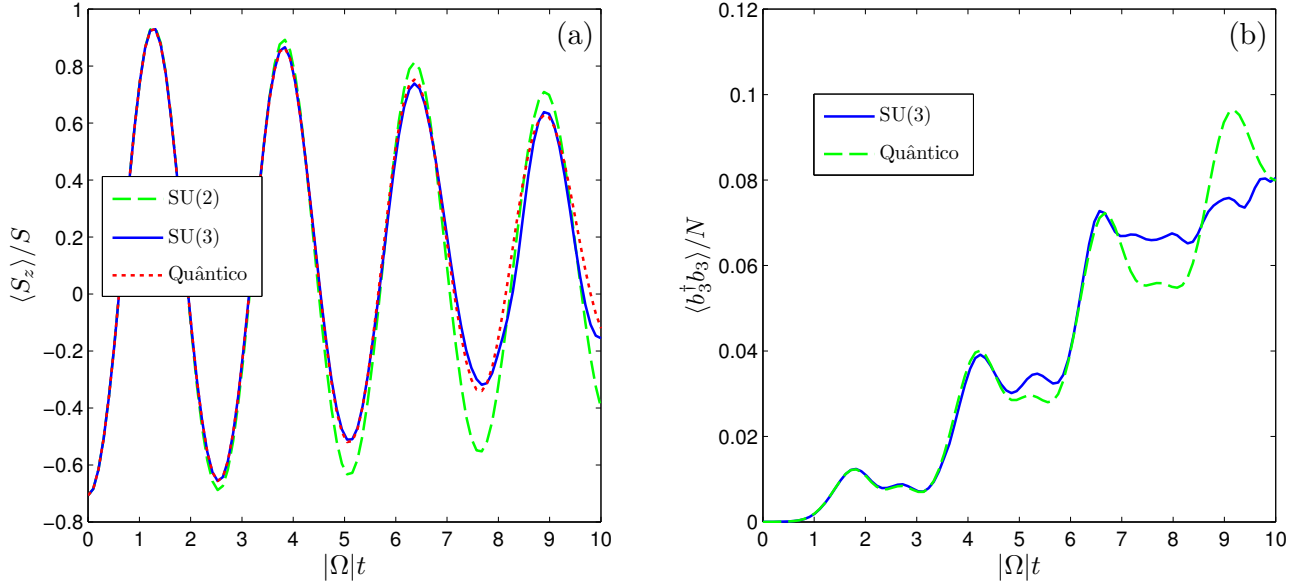


Figura 4.7: Resultados quânticos e semiclássicos para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -1$ e estado coerente inicial parametrizado por $z_1 = z_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \tan \frac{\pi}{8}$. Apenas para propósitos comparativos, exibimos novamente o cálculo semiclássico da figura 4.1.a, correspondente aos estados coerentes de SU(2). Para a aproximação semiclássica com estados coerentes de SU(3), utilizamos 18989 condições iniciais e valor limitante $\lambda = 8$. (a) Média normalizada do desbalanço populacional. (b) Ocupação média por partícula referente ao operador $b_3^\dagger b_3$.

a média normalizada do operador $b_3^\dagger b_3$. Observe que, em concordância com a solução quântica, o resultado semiclássico na representação de SU(3) mostra um evidente crescimento de $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle$ durante o período de propagação considerado. Entretanto, vemos também que o valor máximo da ocupação média não ultrapassa a décima parte do número total de partículas.

Portanto, podemos concluir que grande parte da imprecisão atribuída à aproximação semiclássica na figura 4.1.a está relacionada com a restrição clássica (4.26a), uma vez que a abordagem análoga com os estados coerentes de SU(3) possui correspondência praticamente exata com os resultados quânticos. Contudo, os pequenos valores alcançados pela quantidade $\langle b_3^\dagger b_3 \rangle / N$ justificam o significativo êxito da propagação semiclássica na representação de SU(2) em comparação com a solução clássica.

Com o intuito de quantificar a qualidade da aproximação semiclássica no espaço de fase duplicado, a figura 4.8 apresenta o cálculo da fidelidade entre a solução quântica exata e o estado (4.9), considerando somente a representação em termos dos estados coerentes de SU(3). Como referência para a avaliação dos resultados semiclássicos, também exibimos os valores de \mathcal{F} associados à identidade (B.18a), na qual encontramos a definição fundamental para a propagação clássica. Evidentemente, de maneira a preservar o vínculo com as aplicações anteriores dos métodos aproximativos clássico e semiclássico, selecionamos os mesmos parâmetros e estado inicial utilizados nas figuras 4.1.a e 4.7.

Note que, diferentemente do resultado clássico, a dinâmica semiclássica conserva o valor

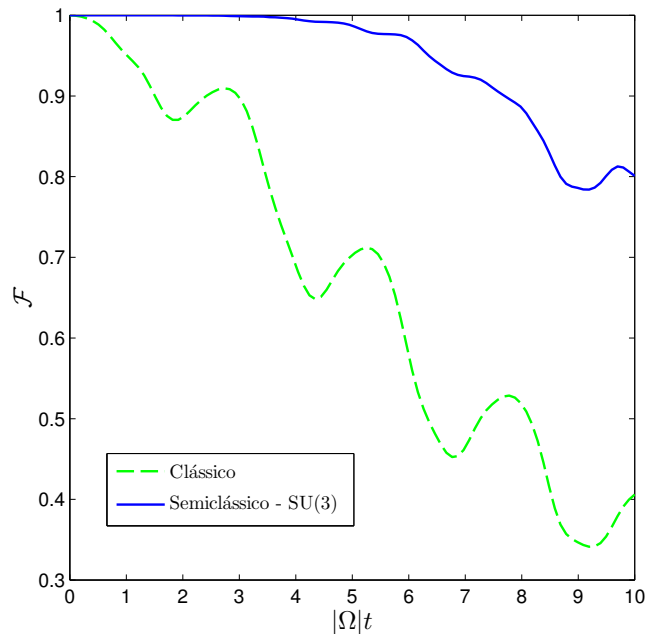


Figura 4.8: Fidelidade das aproximações clássica e semiclássica em relação à solução quântica exata. Para a propagação semiclássica, consideramos a representação constituída pelos estados coerentes de $SU(3)$. Os valores de parâmetros e a escolha do estado inicial coincidem com os resultados apresentados pela figura 4.7.

máximo de \mathcal{F} em um amplo subintervalo do período total de propagação. Este contraste entre as duas abordagens representa uma consequência direta da delocalização do condensado sobre o espaço de fase. Como exemplificado pelas figuras 4.3 e 4.6, os métodos semiclássicos possuem a capacidade de descrever o alargamento das distribuições quânticas. De modo completamente oposto, a aproximação clássica consiste simplesmente em restringir a evolução temporal do sistema aos estados maximamente localizados.

Na parte final do intervalo de propagação, vemos que o cálculo semiclássico perde uma fração razoável de sua fidelidade. Este comportamento ocorre simultaneamente com uma rigorosa restrição no domínio efetivo de integração para a fórmula (4.9). Ou seja, devido à contínua remoção de trajetórias pelo filtro heurístico (4.11), apenas uma pequena parcela de condições iniciais participa na avaliação numérica da aproximação semiclássica para longos períodos de evolução temporal. Portanto, a redução de qualidade dos resultados semiclássicos está refletida na disseminação das trajetórias espúrias sobre o espaço de fase duplicado.

4.2 Operador de Evolução Semiclássica

Dentre todos os métodos dinâmicos estabelecidos pela teoria semiclássica, o propagador de Herman-Kluk^{66;67} ocupa provavelmente a posição de maior destaque. Em razão de sua simples utilização e razoável precisão, este resultado constitui um elemento fundamental em diversas

aplicações de interesse físico, particularmente na investigação de sistemas moleculares¹⁻⁸, caóticos¹⁰ e abertos^{11;14;15}.

Nesta seção, apresentaremos a generalização do propagador de Herman-Kluk para grupos dinâmicos arbitrários. Como evidenciado pelos exemplos do capítulo 2, a extensão de métodos semiclássicos ao conceito amplo de estados coerentes introduz diversas possibilidades de aplicação teórica, incluindo o tratamento de sistemas bosônicos e de partículas com spin.

4.2.1 Resultado

Empregando o propagador (3.2), podemos elaborar uma aproximação semiclássica para o operador $U(t_f, t_i)$, cuja solução quântica formal está definida pela identidade (4.3). Em termos das grandezas clássicas estabelecidas na seção 3.1, o *operador semiclássico de evolução temporal* recebe a seguinte formulação:

$$U_{sc}(t_f, t_i) = \int d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) |z(t_f)\rangle\langle z(t_i)| \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \times e^{\frac{i}{\hbar}[S(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] + \Lambda(z^*(t_f), z(t_i))}. \quad (4.34)$$

Analogamente ao propagador semiclássico, o resultado anterior também possui uma componente não-exponencial, a qual designamos simplesmente como o *pré-fator* desta nova aproximação:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) &= \left\{ \left[\frac{\det g(z^*(t_f), z(t_f))}{\det g(z^*(t_i), z(t_i))} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \\ &= \left[\frac{\det g(z^*(t_f), z(t_f))}{\det g(z^*(t_i), z(t_i))} \right]^{\frac{1}{4}} [\det M_{11}(t_f, t_i)]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Na segunda linha desta última equação, utilizamos a expressão (A.2) para relacionar o pré-fator $\tilde{\mathcal{C}}$ com seu respectivo bloco da matriz tangente. Em conformidade com a notação adotada nas identidades (4.34) e (4.35), observe que o operador de evolução semiclássica está determinado por uma integral sobre condições iniciais no espaço de fase simples. Ou seja, as trajetórias clássicas constituintes de $U_{sc}(t_f, t_i)$ representam as soluções do sistema dinâmico (3.3) sob a restrição $\bar{z}(t) = z^*(t)$. Então, com a intenção de explicitar o subespaço invariante apropriado ao formulário introduzido na presente subseção, reescrevemos as equações clássicas de movimento^{iv}:

$$\dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \xi^T(z^*, z) \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z^*}, \quad (4.36a)$$

$$\dot{z}^* = \frac{i}{\hbar} \xi(z^*, z) \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z}. \quad (4.36b)$$

^{iv}Originalmente, o método de Herman-Kluk utiliza o símbolo de Weyl como regra de classicalização para o operador Hamiltoniano. De forma distinta, perceba que o operador de evolução semiclássica está definido em termos do símbolo normalmente ordenado $\mathcal{H}(z^*, z) = \langle z|H|z \rangle$.

Considerando as potenciais aplicações do operador de evolução semiclássica, devemos ressaltar que a expressão (4.34) não está sujeita às mesmas complicações técnicas do propagador (3.2). Em primeiro lugar, note que a aproximação $U_{sc}(t_f, t_i)$ constitui uma representação a valores iniciais. Portanto, a resolução das equações (4.36) não exhibe as dificuldades usualmente decorrentes da busca por trajetórias clássicas sob condições de contorno.

Em princípio, como consequência da restrição ao espaço de fase simples, o cálculo de $U_{sc}(t_f, t_i)$ não exige a utilização de métodos específicos para a eliminação de trajetórias espúrias. A condição $\bar{z}(t) = z^*(t)$ implica em valores reais para a ação corrigida ($S + I$), de maneira que o fator exponencial no operador de evolução semiclássica simboliza apenas a multiplicação por uma fase^v. Logo, as soluções do sistema (4.36) são incapazes de produzir variações bruscas no valor absoluto do integrando apresentado pela fórmula (4.34), excetuando o comportamento do pré-fator \tilde{C} .

A redução no número de variáveis dinâmicas independentes e a ausência de trajetórias espúrias representam vantagens evidentes da aproximação (4.34) em relação ao resultado (4.9). Em contrapartida, a duplicação dos graus de liberdade oferece possibilidades únicas para a descrição aproximativa da mecânica quântica, uma vez que as equações (3.3) possuem maior diversidade de soluções em comparação com suas simplificações (4.36). Por esta razão, esperamos que a elevada complexidade da propagação semiclássica no espaço de fase duplicado esteja refletida em uma capacidade superior para a representação de fenômenos intrinsecamente quânticos. Este assunto será explorado detalhadamente no capítulo 5.

4.2.2 Dedução

A demonstração do resultado (4.34) representa a generalização para estados coerentes arbitrários da formulação semiclássica originalmente desenvolvida por Martín-Fierro e Llorente⁹⁶. Esta abordagem particular ao propagador de Herman-Kluk manifesta claramente o caráter assintótico da aproximação $U_{sc}(t_f, t_i)$, pois fundamenta-se completamente no método do ponto de sela⁶³.

Na subseção 4.1.1, com a inserção de uma única resolução da identidade no propagador quântico, conseguimos evitar a imposição de condições temporais mistas sobre a aproximação semiclássica. A realização deste procedimento também possibilitou a fatoração do estado final na equação (4.4). Além disto, observe que a integral (4.9) possui seu domínio estabelecido sobre apenas metade do espaço de fase duplicado, com referência a um único instante de tempo. Todos estes resultados constituem uma motivação natural para a investigação das propriedades correspondentes à introdução de duas resoluções da identidade na construção de uma representação a valores iniciais. Como primeiro passo neste desenvolvimento, inserimos a

^vSobre o espaço de fase simples, o termo de contorno Γ possui valor imaginário puro. Por este motivo, a ação corrigida ($S + I$) apresenta valor estritamente real somente quando combinada ao termo de normalização, uma vez que as quantidades Γ e Λ se cancelam mutuamente sob a restrição $\bar{z}(t) = z^*(t)$.

expressão (2.21) em ambos os lados da definição (4.3):

$$\begin{aligned} U(t_f, t_i) &= \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle \langle \bar{z}^*(t_f)| U(t_f, t_i) |z(t_i)\rangle \langle z(t_i)| \\ &= \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle \langle z(t_i)| K(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Portanto, podemos reescrever o operador de evolução temporal em termos de uma integral dupla sobre propagadores quânticos. Em seguida, substituindo a solução exata da quantidade K pelo resultado semiclássico (3.2), obtemos uma aproximação preliminar para a equação (4.37):

$$U(t_f, t_i) \approx \int d\mu(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) |\bar{z}^*(t_f)\rangle \langle z(t_i)| K_{sc}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i). \quad (4.38)$$

Observe que, diferentemente da expressão (4.9), a aproximação anterior está determinada por um integral sobre todo o espaço de fase duplicado, considerando dois instantes de tempos distintos. Ou seja, todos os valores de $\bar{z}^*(t_f)$ e $z(t_i)$ fornecem trajetórias clássicas relevantes na reconstrução do operador de evolução temporal^{vi}.

A expressão (4.38), em seu formato atual, possui capacidade imediata de aplicação no tratamento dinâmico de modelos quânticos. No entanto, em comparação com o resultado (4.9), a aproximação de $U(t_f, t_i)$ apresenta um elevado número de dimensões em seu domínio de integração, o que implica em uma dificuldade adicional para a realização de cálculos explícitos.

Aplicando o método do ponto de sela em apenas uma parte das variáveis de integração, podemos simplificar a fórmula semiclássica para o operador $U(t_f, t_i)$ de maneira consistente com as aproximações do capítulo 3. Com este objetivo, utilizamos as identidades (2.22) e (3.2) na decomposição dos fatores constituintes da equação (4.38):

$$\begin{aligned} U(t_f, t_i) &\approx \int \frac{d\bar{z}(t_f) d\bar{z}^*(t_f)}{(2\pi i)^d} \frac{dz^*(t_i) dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l)^2 |\bar{z}^*(t_f)\rangle \langle z(t_i)| \\ &\quad \times \det [g(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))] \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] + \Lambda(\bar{z}(t_f), z(t_i)) \right\}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Neste momento, realizamos uma deformação no domínio de integração, com o propósito de promover a independência das variáveis $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$ em relação aos valores de $\bar{z}^*(t_f)$ e $z^*(t_i)$. Durante este procedimento, semelhante à duplicação do espaço de fase apresentada na seção 3.1, o domínio de integração é transferido do espaço \mathbb{C}^{2d} para uma hipersuperfície com $2d$ dimensões complexas no espaço ampliado \mathbb{C}^{4d} . Além disto, devemos assumir que esta hipersuperfície de integração vincule o par de variáveis $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$ separadamente de $\bar{z}^*(t_f)$ e $z^*(t_i)$. Então,

^{vi}A princípio, como discutido na subseção 4.1.2, o espaço de fase duplicado admite a existência de trajetórias clássicas com contribuições incorretas ao cálculo do propagador semiclássico. Contudo, a resolução explícita do sistema (3.3) geralmente precede a discriminação dos resultados desprovidos de significado físico.

inserindo estas hipóteses na expressão (4.39), obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}
U(t_f, t_i) &\approx \int \frac{d\bar{z}^*(t_f)dz^*(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l) |\bar{z}^*(t_f)\rangle \{z(t_i)| \int \frac{d\bar{z}(t_f)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l) \\
&\times \det [g(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))] \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [F(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\}.
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Note que os estados não-normalizados $|\bar{z}^*(t_f)\rangle$ e $\{z(t_i)|$ foram extraídos da integral interna. Esta manipulação possui função indispensável para a execução independente das integrais em $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$. Na identidade (4.40), definimos um novo expoente para o integrando da aproximação:

$$\frac{i}{\hbar} F(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) = \frac{i}{\hbar} S(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) - f(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f)) - f(z^*(t_i), z(t_i)). \tag{4.41}$$

Os pontos críticos da quantidade F , em relação às variáveis $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$, determinam os valores estacionários relevantes ao método do ponto de sela. Desta forma, supomos que a correção I e o pré-fator \mathcal{C} variam lentamente na região do domínio de integração com contribuição significativa do integrando. Esta hipótese possui fundamentação bastante consistente, uma vez que as grandezas I e \mathcal{C} decorrem diretamente da resolução explícita do propagador reduzido, o qual representa uma aproximação de segunda ordem em relação à ação clássica.

Como prescrito pelo método do ponto de sela, procedemos com a expansão do expoente (4.41) até segunda ordem em torno de seus valores estacionários^{vii}:

$$F \approx F_s + \frac{1}{2} \delta^2 F_s, \quad \delta F_s = 0. \tag{4.42}$$

Com o auxílio das identidades (3.46c) e (3.46d), calculamos as primeiras derivadas da expressão (4.41):

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial \bar{z}(t_f)} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial \bar{z}(t_f)} - \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)} \\
&= \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)} - \frac{\partial f(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)},
\end{aligned} \tag{4.43a}$$

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial z(t_i)} &= \frac{\partial S}{\partial z(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)} \\
&= \frac{\partial f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)}.
\end{aligned} \tag{4.43b}$$

^{vii}O subíndice s indica as quantidades calculadas sobre os pontos críticos do expoente F . Entretanto, sempre que o significado de uma expressão não sofrer prejuízo diante de seu contexto, omitiremos esta notação.

De acordo com estas últimas equações, a condição $\delta F = 0$ implica nas seguintes relações:

$$z^*(t_i) = \bar{z}(\bar{z}_s(t_f), z_s(t_i); t_i) = \bar{z}(t_i), \quad (4.44a)$$

$$\bar{z}^*(t_f) = z(\bar{z}_s(t_f), z_s(t_i); t_f) = z(t_f), \quad (4.44b)$$

as quais definem implicitamente os valores estacionários $\bar{z}_s(t_f)$ e $z_s(t_i)$. Então, empregando os resultados (3.47), determinamos as segundas derivadas da função F :

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f)^2} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{z}(t_f)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)^2} \\ &= \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)^2} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f)^2}, \end{aligned} \quad (4.45a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \quad (4.45b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} = \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (4.45c)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i)^2} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial z(t_i)^2} - \frac{\partial^2 f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)^2} \\ &= \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)^2} + \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} - \frac{\partial^2 f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)^2}. \end{aligned} \quad (4.45d)$$

Sob a aplicação das restrições (4.44), as quantidades anteriores adquirem os seguintes valores:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f)^2} = g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (4.46a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} = g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \quad (4.46b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} = g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (4.46c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i)^2} = g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)}. \quad (4.46d)$$

Agora, substituindo a expansão (4.42) na equação (4.40), obtemos uma nova aproximação

para o operador de evolução temporal:

$$\begin{aligned}
U(t_f, t_i) &\approx \int \frac{dz(t_f)d\bar{z}(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l) \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \\
&\times |z(t_f)\rangle\langle \bar{z}^*(t_i)| \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [F(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\} \\
&\times \int \frac{d\bar{z}(t_f)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \right],
\end{aligned} \tag{4.47}$$

na qual incorporamos a notação prescrita pelas identidades (4.44). Além disto, introduzimos as variações $\delta\bar{z}(t_f) = \bar{z}(t_f) - \bar{z}_s(t_f)$ e $\delta z(t_i) = z(t_i) - z_s(t_i)$. Observe que, juntamente com a aplicação do método do ponto de sela à integral interna, empregamos a aproximação (3.71) em um único fator $\kappa(l)$ dentre as duas constantes de normalização encontradas na equação (4.40). Este procedimento possui consistência com os resultados da seção 3.2, pois cada integração realizada para um instante de tempo no propagador reduzido está associada com uma imposição individual sobre o valor de $\kappa(l)$.

Na expressão (4.47), definimos a matriz de segundas derivadas do expoente F sobre os valores estacionários:

$$\begin{aligned}
W &= \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f)^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial^2 F}{\partial z(t_i)^2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} & g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} & g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) & 0 \\ 0 & g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.48}$$

Neste momento, torna-se conveniente a introdução da seguinte transformação sobre as variáveis de integração:

$$\beta = -i \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix}. \tag{4.49}$$

Utilizando a identidade anterior, podemos resolver imediatamente a integral Gaussiana re-

presentada na equação (4.47):

$$\begin{aligned}
\mathcal{I} &= \int \frac{d\bar{z}(t_f)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \right] \\
&= \int \frac{i^d d\beta}{(2\pi)^d} \exp \left[-\frac{1}{2} \beta W \beta \right] = i^d [\det W]^{-\frac{1}{2}} \\
&= i^d \left\{ \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left\{ \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Note que, neste último resultado, aplicamos a notação compacta para determinantes Jacobianos^{viii}. Com a substituição explícita das expressões (3.9) e (4.50) na equação (4.47), reescrevemos o operador de evolução temporal:

$$\begin{aligned}
U(t_f, t_i) &\approx \int \frac{dz(t_f)d\bar{z}(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l) \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] |z(t_f)\rangle \langle \bar{z}^*(t_i)| \\
&\times \sum_{\text{traj.}} \left\{ \left[\frac{\det g(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\det g(\bar{z}(t_f), z(t_f))} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial\bar{z}(t_i)}{\partial\bar{z}(t_f)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [F(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\} \\
&\times \left\{ \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{4.51}$$

A avaliação da integral (4.51) está sujeita à identificação das trajetórias clássicas determinadas pelas condições de contorno $z(t_f)$ e $\bar{z}(t_i)$. Entretanto, de maneira semelhante às identidades (4.6) e (4.7), podemos converter a aproximação do operador $U(t_f, t_i)$ em uma legítima representação a valores iniciais. Para esta finalidade, realizamos uma transformação sobre metade das variáveis de integração restantes:

$$\sum_{\text{traj.}} dz(t_f) = \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} dz(t_i), \tag{4.52}$$

na qual indicamos que o somatório sobre os conjuntos de trajetórias determinadas pelas mesmas condições de contorno deve desaparecer durante a transição para uma integral sobre valores iniciais. Considerando o fator adicional introduzido pela transformação (4.52), podemos utilizar as propriedades fundamentais dos determinantes Jacobianos para a simplificação parcial da

^{viii}A notação adotada para determinantes Jacobianos encontra-se detalhada nos comentários anteriores ao capítulo 1.

expressão (4.51):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} \left\{ \det \left[\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right]^{-\frac{1}{2}} \\
&= \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} \left[\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \frac{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} \left[\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \left[\frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} \right]^{\frac{1}{2}} = \left\{ \det \left[\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Os resultados (4.52) e (4.53) possibilitam uma significativa reformulação para o operador de evolução temporal:

$$\begin{aligned}
U(t_f, t_i) &\approx \int d\mu(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \left\{ \left[\frac{\det g(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\det g(\bar{z}(t_i), z(t_i))} \right]^{\frac{1}{2}} \det \left[\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \\
&\times |z(t_f)\rangle \langle \bar{z}^*(t_i)| \exp \left[\frac{1}{2} f(z^*(t_f), z(t_f)) + \frac{1}{2} f(\bar{z}(t_i), \bar{z}^*(t_i)) \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\} \\
&\times \exp [-f(\bar{z}(t_f), z(t_f)) - f(\bar{z}(t_i), z(t_i))].
\end{aligned} \tag{4.54}$$

A identidade anterior possui aplicação somente após a especificação de um domínio de integração para as variáveis $\bar{z}(t_i)$ e $z(t_i)$. Com a realização da integral (4.50), eliminamos metade das variáveis de integração correspondentes à expressão (4.39). Consequentemente, o cálculo da aproximação (4.54) exige a determinação de uma hipersuperfície com d dimensões complexas. As condições necessárias para a avaliação de $U(t_f, t_i)$ são naturalmente satisfeitas pela seguinte restrição:

$$\bar{z}(t_i) = z^*(t_i). \tag{4.55}$$

De acordo com as equações de movimento (3.3), a identidade (4.55) implica diretamente em $\bar{z}(t) = z^*(t)$. Portanto, a escolha realizada para o domínio de integração resulta em uma aproximação semiclássica com contribuição exclusiva das trajetórias clássicas no espaço de fase simples.

Por fim, substituindo expressão (4.55) na integral (4.54), obtemos imediatamente a definição fundamental para o operador semiclássico de evolução temporal, apresentado inicialmente pela equação (4.34).

4.2.3 Aplicação: Revisitando o Condensado em Poço Triplo

Como exemplo de aplicação para o operador de evolução semiclássica, utilizaremos novamente o Hamiltoniano (4.23), correspondente ao modelo simplificado para um condensado de

Bose-Einstein em um potencial de poço triplo. Desta forma, podemos realizar uma comparação direta entre as aproximações (4.9) e (4.34).

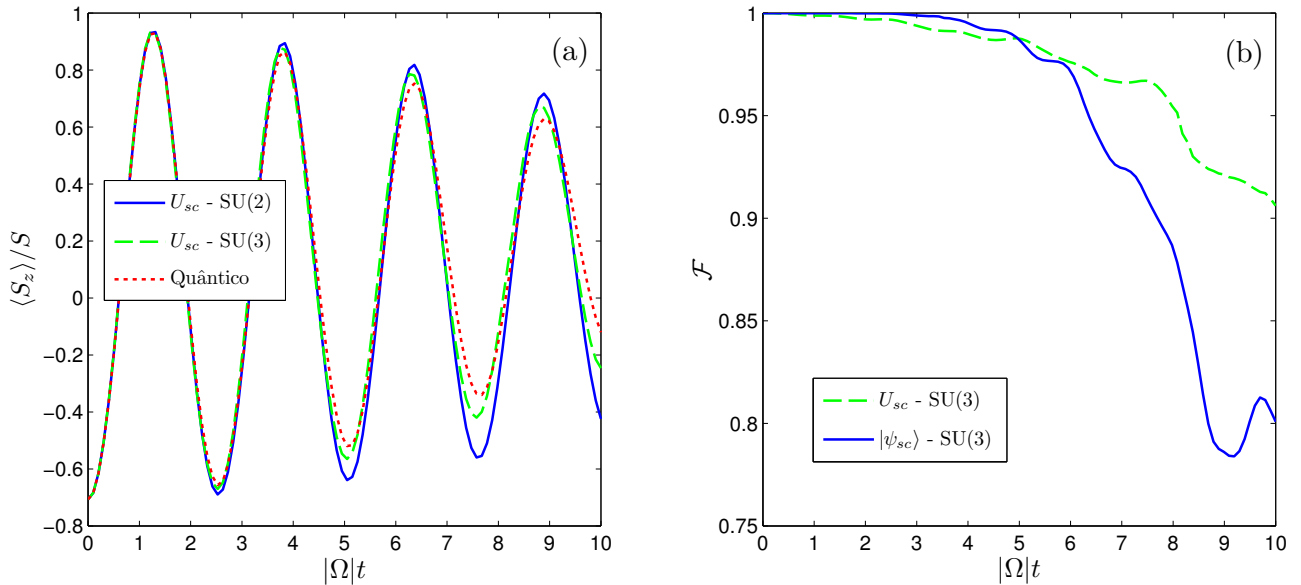


Figura 4.9: (a) Evolução temporal quântica e semiclassical para a média normalizada do operador de desbalanço populacional. Os resultados semiclassicos decorrem da expressão (4.34) na representação dos estados coerentes de SU(2) e SU(3). (b) Medida de fidelidade em relação à solução quântica exata. Considerando apenas os cálculos referentes ao grupo SU(3), analisamos comparativamente o operador de evolução semiclassical e a aproximação (4.9).

Na figura 4.9.a, exibimos as dinâmicas quântica e semiclassical da quantidade $\langle S_z \rangle / S$, considerando duas aplicações distintas da fórmula (4.34). Em analogia com a figura 4.1.a, realizamos os cálculos para $N = 30$, $\Omega = -1$, $\chi = -1$ e estado coerente inicial $|\sqrt{2}z_i\rangle = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle_{\text{SU}(2)}$.

Como discutido na subseção 4.1.1, a identidade (4.28) possibilita a utilização dos estados coerentes de SU(2) na formulação de aproximações específicas para a dinâmica semiclassical sob a restrição (4.26a). Com o objetivo de exemplificar esta simplificação, a figura 4.9.a apresenta o cálculo do desbalanço populacional referente ao operador de evolução semiclassical na representação de SU(2). Neste caso, analogamente à figura 4.2.a, empregamos 712 condições iniciais distribuídas uniformemente em torno do parâmetro $z_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \tan \frac{\pi}{8}$. No entanto, diferentemente dos resultados da subseção 4.1.4, todos os valores iniciais correspondem a trajetórias clássicas com período de contribuição equivalente ao intervalo total de propagação. Ou seja, devido à condição (4.55), a expressão (4.34) não exige a aplicação de métodos para a remoção de trajetórias espúrias^{ix}.

^{ix}Conforme mencionado na subseção 4.1.2, podemos facilitar a convergência numérica do operador U_{sc} com a exclusão de soluções clássicas excepcionalmente instáveis. Contudo, este procedimento não está correlacionado com a ocorrência de trajetórias espúrias sobre o espaço de fase duplicado. Além disto, na elaboração dos resultados exibidos pela figura 4.9, a implementação de técnicas para o condicionamento da integral (4.34) não foi necessária.

Semelhantemente à propagação semiclássica da figura 4.8, o operador U_{sc} na representação dos estados coerentes de $SU(3)$ resulta da integração numérica sobre 18989 valores iniciais. Como evidenciado pela figura 4.9.a, as duas realizações da aproximação (4.34) reproduzem o comportamento quântico do desbalanço populacional médio com razoável precisão. Evidentemente, como consequência da restrição ao espaço de Hilbert, o operador de evolução semiclássica para o grupo dinâmico $SU(3)$ demonstra clara superioridade em comparação ao resultado análogo para $SU(2)$. Entretanto, devemos enfatizar que o cálculo semiclássico para $SU(2)$ apresenta algumas vantagens interessantes, como a reduzida dimensionalidade das equações clássicas movimento e a considerável diminuição no número de trajetórias necessárias para a convergência do método aproximativo.

A fim de estabelecer uma comparação quantitativa entre as aproximações (4.9) e (4.34), a figura 4.9.b mostra o cálculo dinâmico para a medida de fidelidade (4.22), considerando somente a representação com estados coerentes de $SU(3)$. As escolhas de parâmetros e estado inicial são idênticas à figura 4.9.a.

Observe que, na porção inicial do período de propagação, a similaridade entre a solução quântica e a expressão (4.9) apresenta-se superior ao resultado análogo para o operador de evolução semiclássica. No entanto, este cenário exhibe uma notável inversão na segunda metade do intervalo de tempo. Como esperado, o contínuo descarte de trajetórias no espaço de fase duplicado está refletido em uma rápida degradação da fidelidade. De maneira completamente distinta, a aproximação (4.34) demonstra uma lenta perda de qualidade, uma vez que o número de soluções clássicas contribuintes não sofre variações durante a evolução temporal do modelo.

4.3 Reobtenção do Propagador Semiclássico

Na seção anterior, utilizamos o propagador semiclássico na construção de uma aproximação para o operador de evolução temporal. Devido ao formato particular desta demonstração, poderíamos acreditar que a fórmula (4.34) representa um resultado secundário, decorrente da expressão fundamental (3.2) pela aplicação do método do ponto de sela. No entanto, esta conclusão está equivocada, pois as quantidades K_{sc} e U_{sc} possuem uma conexão bilateral. Com o intuito de comprovar esta afirmação, realizamos uma nova abordagem aproximativa ao propagador quântico:

$$\begin{aligned}
K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx \langle z_f | U_{sc}(t_f, t_i) | z_i \rangle \\
&= \int d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) \langle z_f | z(t_f) \rangle \langle z(t_i) | z_i \rangle \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\} \\
&\quad \times \exp \left[-\frac{1}{2} f(z^*(t_f), z(t_f)) - \frac{1}{2} f(z^*(t_i), z(t_i)) \right],
\end{aligned} \tag{4.56}$$

na qual empregamos explicitamente a definição (3.8) para o termo de normalização. Como preparação para os desenvolvimentos futuros, estabelecemos a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} \langle z_f | z(t_f) \rangle \langle z(t_i) | z_i \rangle &= \exp \left[f(z_f^*, z(t_f)) - \frac{1}{2} f(z_f^*, z_f) - \frac{1}{2} f(z^*(t_f), z(t_f)) \right] \\ &\times \exp \left[f(z^*(t_i), z_i) - \frac{1}{2} f(z^*(t_i), z(t_i)) - \frac{1}{2} f(z_i^*, z_i) \right]. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Substituindo este último resultado na equação (4.56), obtemos uma expressão alternativa para a aproximação do propagador:

$$\begin{aligned} K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx \exp [\Lambda(z_f^*, z_i)] \int d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{F}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Na identidade anterior, em antecipação ao método do ponto de sela, definimos um novo expoente para o integrando:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \tilde{F}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) &= \frac{i}{\hbar} S(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + f(z_f^*, z(t_f)) + f(z^*(t_i), z_i) \\ &- f(z^*(t_f), z(t_f)) - f(z^*(t_i), z(t_i)). \end{aligned} \quad (4.59)$$

Em conformidade com caráter funcional da quantidade \tilde{F} , realizamos a seguinte transformação sobre as variáveis de integração:

$$dz^*(t_i) = \frac{\partial(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial(z^*(t_f), z(t_i))} dz^*(t_f). \quad (4.60)$$

Como consequência desta última manipulação, o domínio de integração sobre o espaço de fase simples torna-se descrito pela relação $z^*(t_f) = z^*(z^*(t_i), z(t_i); t_f)$. Em seguida, utilizando a expressão (4.60), reescrevemos a equação (4.58):

$$\begin{aligned} K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx \exp [\Lambda(z_f^*, z_i)] \int \frac{dz^*(t_f) dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \kappa(l) \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \\ &\times \frac{\partial(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial(z^*(t_f), z(t_i))} \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{F}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Neste momento, com a intenção de resolver analiticamente a integral (4.61), podemos aplicar diversas aproximações suplementares. Como uma primeira abordagem, em oposição ao procedimento adotado na próxima seção, expandimos a função \tilde{F} em torno de seus valores estacionários^x:

$$\tilde{F} = \tilde{F}_s + \frac{1}{2} \delta^2 \tilde{F}_s, \quad \delta \tilde{F}_s = 0. \quad (4.62)$$

^xDe agora em diante, utilizaremos o subíndice s para denotar as quantidades calculadas sobre os valores estacionários do expoente \tilde{F} . No entanto, de maneira semelhante à subseção 4.2.2, esta notação será convenientemente omitida quando não houver prejuízo à compreensão dos resultados.

Com a implementação da identidade anterior, correspondente à prescrição usual para o método do ponto de sela, supomos que as outras componentes no integrando do propagador, como a correção I , o pré-fator \tilde{C} e a métrica $g(z^*(t_i), z(t_i))$, variam lentamente nas regiões relevantes do domínio de integração. Ou seja, estas quantidades serão aproximadas diretamente pelo cálculo de seus valores sobre os pontos estacionários.

Então, com o auxílio das equações (3.46c) e (3.46d), obtemos as primeiras derivadas do expoente \tilde{F} :

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial z^*(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z^*(t_i)} \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)} \\ &\quad - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z^*(t_f)} + \frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} + \frac{\partial f(z^*(t_i), z_i)}{\partial z^*(t_i)} \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)} \\ &= \left[\frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} \\ &\quad + \left[\frac{\partial f(z^*(t_i), z_i)}{\partial z^*(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z^*(t_i)} \right] \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)}, \end{aligned} \quad (4.63a)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z(t_i)} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial z(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z^*(t_i)} \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)} \\ &\quad - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i)} + \frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} + \frac{\partial f(z^*(t_i), z_i)}{\partial z^*(t_i)} \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)} \\ &= \left[\frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ &\quad + \left[\frac{\partial f(z^*(t_i), z_i)}{\partial z^*(t_i)} - \frac{\partial f(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial z^*(t_i)} \right] \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)}. \end{aligned} \quad (4.63b)$$

Portanto, a identidade $\delta \tilde{F} = 0$ implica imediatamente nas seguintes relações:

$$z_s(t_i) = z_i, \quad (4.64a)$$

$$z_s^*(t_f) = z_f^*. \quad (4.64b)$$

Observe que os resultados anteriores são idênticos às condições de contorno (3.16). Consequentemente, devido às restrições impostas pelo método do ponto de sela, a existência de soluções clássicas está novamente subordinada à duplicação do espaço de fase. Por esta razão, precisamos reintroduzir a mudança de notação (3.33), de modo a indicar explicitamente a inclusão dos valores estacionários por uma deformação no domínio de integração. Em concordância com estas ponderações, devemos substituir as identidades (4.63) pela descrição (3.5).

A partir das equações (4.63), calculamos as segundas derivadas da função \tilde{F} em notação

apropriada ao espaço de fase duplicado:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f)^2} &\approx \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} \\ &+ \left(\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z_i)}{\partial \bar{z}(t_i)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \right] \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \\ &- \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \end{aligned} \quad (4.65a)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} &\approx \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ &+ \left(\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z_i)}{\partial \bar{z}(t_i)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \right] \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \\ &- \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_f)} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \end{aligned} \quad (4.65b)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} &\approx \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} \\ &+ \left(\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z_i)}{\partial \bar{z}(t_i)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \right] \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} \\ &- \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \end{aligned} \quad (4.65c)$$

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i)^2} &\approx \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)^2} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ &+ \left(\frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \right)^T \left[\frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z_i)}{\partial \bar{z}(t_i)^2} - \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial \bar{z}(t_i)^2} \right] \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \\ &- \frac{\partial^2 f(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_i)} \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)}, \end{aligned} \quad (4.65d)$$

Na obtenção destas últimas expressões, desprezamos as derivadas dos elementos da matriz \mathbb{T} , definidos pela identidade (A.5). De acordo com as equações (3.47), os blocos de \mathbb{T} são proporcionais às segundas derivadas da ação clássica. Portanto, uma derivação adicional destas quantidades implica em correções de mesma ordem da terceira variação da ação, as quais devem ser removidas por consistência com as aproximações semiclássicas (3.48) e (4.42).

Inserindo as condições (3.5) nos resultados (4.65), obtemos as grandezas necessárias no

cálculo da expansão (4.62):

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f)^2} \approx -g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (4.66a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} \approx -g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \quad (4.66b)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} \approx -g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)}, \quad (4.66c)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i)^2} \approx -g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)}. \quad (4.66d)$$

Sob a duplicação do espaço de fase, aplicamos a aproximação (4.62) sobre a identidade (4.61):

$$\begin{aligned} K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx e^{\Lambda(z_f^*, z_i)} \sum_{\text{traj.}} \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \tilde{\mathcal{C}}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{F}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \right] \right\} \\ &\times \int \frac{d\bar{z}(t_f) dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta \bar{z}(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{W} \begin{pmatrix} \delta \bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Na equação anterior, reutilizamos a definição para os desvios em relação aos valores estacionários, os quais denotamos por $\delta \bar{z}(t_f) = \bar{z}(t_f) - \bar{z}_s(t_f)$ e $\delta z(t_i) = z(t_i) - z_s(t_i)$. Note que a expansão da função \tilde{F} foi acompanhada pela aproximação $\kappa(l) \approx 1$, cuja validade está associada ao limite $l \gg 1$. Além disto, uma vez que as condições (3.5) podem corresponder a múltiplas trajetórias clássicas, introduzimos um somatório sobre todas as contribuições ao método do ponto de sela.

Por conveniência de notação na identidade (4.67), definimos a matriz de segundas derivadas do expoente \tilde{F} :

$$\begin{aligned} \tilde{W} &= \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f)^2} & \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial \bar{z}(t_f) \partial z(t_i)} \\ \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i) \partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i)^2} \end{pmatrix} \\ &\approx - \begin{pmatrix} g^T(\bar{z}(t_f), z(t_f)) & 0 \\ 0 & g(\bar{z}(t_i), z(t_i)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Analogamente ao resultado (4.50), a transformação (4.49) possibilita a resolução imediata

da integral Gaussiana no propagador (4.67):

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{I}} &= \int \frac{d\bar{z}(t_f)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{W} \begin{pmatrix} \delta\bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \right] \\
&= \int \frac{i^d d\beta}{(2\pi)^d} \exp \left[-\frac{1}{2} \beta \tilde{W} \beta \right] = i^d \left[\det \tilde{W} \right]^{-\frac{1}{2}} \\
&\approx i^d \left\{ \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}} \\
&= \left\{ \det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))] \det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Reunindo os determinantes Jacobianos encontrados nas equações (4.35), (4.67) e (4.69), podemos realizar a seguinte simplificação:

$$\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \left[\frac{\partial(z(t_f), \bar{z}(t_i))}{\partial(z(t_i), \bar{z}(t_i))} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_f))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right]^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{4.70}$$

Finalmente, empregando as expressões (4.69) e (4.70), reobtemos a formulação (3.2) para o propagador semiclássico:

$$\begin{aligned}
K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx \sum_{\text{traj.}} \left\{ \frac{\det [g(\bar{z}(t_i), z(t_i))]}{\det [g(\bar{z}(t_f), z(t_f))]} \right\}^{\frac{1}{4}} \left\{ \frac{\partial(\bar{z}(t_i), z(t_i))}{\partial(\bar{z}(t_f), z(t_i))} \right\}^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \times e^{\frac{i}{\hbar} [\tilde{F}(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] + \Lambda(z_f^*, z_i)} \\
&= \sum_{\text{traj.}} \mathcal{C}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) e^{\frac{i}{\hbar} [S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + I(z_f^*, z_i; t_f, t_i)] + \Lambda(z_f^*, z_i)} \\
&= K_{sc}(z_f^*, z_i; t_f, t_i).
\end{aligned} \tag{4.71}$$

Note que, nesta última identidade, utilizamos a definição (4.59) para demonstrar a igualdade entre a função \tilde{F} e a ação clássica sob as condições (4.64). A obtenção do resultado (4.71) possui interpretação exatamente oposta à subseção 4.2.2, na qual estabelecemos uma aproximação para o operador de evolução temporal como consequência de manipulações sobre o propagador semiclássico. Portanto, as aproximações U_{sc} e K_{sc} estão bidirecionalmente associadas por uma aplicação do método do ponto de sela.

4.4 Propagador Clássico Corrigido

Na seção anterior, utilizamos a expansão (4.62) como uma abordagem aproximativa para a resolução analítica da integral (4.61). Em decorrência deste procedimento, reobtivemos todas as complicações inerentes ao cálculo do propagador semiclássico, como a imposição de condições de contorno e a consequente duplicação do espaço de fase.

Com a intenção de elaborar uma representação a valores iniciais, precisamos renunciar à exigência de extremização para o expoente \tilde{F} . Como alternativa para a avaliação da expressão (4.58), podemos realizar uma aproximação de segunda ordem do funcional (4.59) em torno da trajetória principal, a qual está completamente determinada por condições iniciais. Esta nova formulação semiclássica recebe a designação de *propagador clássico corrigido*, em razão de suas semelhanças com o resultado (B.20).

Devido à escolha da trajetória principal como referência para a aproximação semiclássica, o propagador clássico corrigido também apresenta algumas similaridades em relação ao método das Gaussianas derretidas^{68;97}. Contudo, estes dois resultados teóricos diferem em diversos aspectos fundamentais, como a utilização do conceito generalizado de estados coerentes e a representação selecionada para o estado final na amplitude de transição.

4.4.1 Resultado

Considerando um segundo procedimento de aproximação para o cálculo analítico da expressão (4.61), obtemos o propagador clássico corrigido:

$$K_{cc}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \langle z_f | z(t_f) \rangle \mathcal{C}(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i) \exp [P(z_f^*, z_i; t_f, t_i) + \Lambda(z^*(t_f), z_i)] \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i)] \right\}. \quad (4.72)$$

Devemos ressaltar que a equação anterior estabelece uma genuína representação a valores iniciais, uma vez que todas as funções constituintes do propagador clássico corrigido estão definidas sobre a trajetória principal, a qual está especificada exclusivamente pelas condições (4.20).

Diferentemente do propagador semiclássico, o resultado (4.72) não exhibe um somatório sobre diversas contribuições clássicas, pois as equações (3.3) possuem resolução inequívoca sob condições iniciais. Além disto, de maneira a compensar a discrepância entre os valores de $z^*(t_f)$ e z_f^* , o propagador clássico corrigido introduz o *termo de interpolação*:

$$P(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = \frac{1}{2}(z_f^* - z^*(t_f))g^T(z^*(t_f), z(t_f))\frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)}(z_f^* - z^*(t_f)) \\ = \frac{1}{2}(z_f^* - z^*(t_f))g^T(z^*(t_f), z(t_f))M_{12}(t_f, t_i)M_{22}^{-1}(t_f, t_i)(z_f^* - z^*(t_f)). \quad (4.73)$$

Note que, na segunda linha desta última identidade, utilizamos as relações (A.5) e (A.8a) para descrever a quantidade P em termos dos blocos da matriz tangente. Como discutido no apêndice A, os valores de M_{12} e M_{22} constituem a solução do sistema dinâmico (A.2) com condições iniciais especificadas pela equação (A.3).

4.4.2 Dedução

Na presente subseção, apresentaremos a demonstração da fórmula semiclássica (4.72). Para esta finalidade, utilizaremos um procedimento semelhante à investigação original de Gross-

mann sobre a correspondência entre o propagador de Herman-Kluk e o método das Gaussianas derretidas¹¹.

Em substituição à aproximação (4.62), podemos avaliar analiticamente a integral (4.61) com a expansão do funcional \tilde{F} em torno da trajetória principal^{xi}:

$$\tilde{F} \approx \tilde{F}_p + \delta\tilde{F}_p + \frac{1}{2}\delta^2\tilde{F}_p. \quad (4.74)$$

Paralelamente à aproximação sobre o expoente \tilde{F} , assumiremos novamente que as outras grandezas no integrando da expressão (4.61) variam lentamente na região relevante do domínio de integração. Ou seja, as quantidades clássicas excluídas da prescrição (4.74) serão aproximadas simplesmente por seus valores sobre a trajetória principal. Além disto, com o objetivo de preservar a consistência entre os diferentes métodos semiclássicos durante a realização de integrais, aplicaremos também a hipótese $\kappa(l) \approx 1$.

Empregando os resultados (4.63), calculamos prontamente os valores das primeiras derivadas de \tilde{F} sobre a trajetória principal:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)} = \left[\frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)}, \quad (4.75a)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z(t_i)} = \left[\frac{\partial f(z_f^*, z(t_f))}{\partial z(t_f)} - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}. \quad (4.75b)$$

Observe que a aproximação (4.74) coincide grosseiramente com a equação (4.62) para $z_p^*(t_f) \approx z_f^*$. Neste caso específico, esperamos que a expansão em torno da trajetória principal exiba precisão comparável ao método do ponto de sela, excetuando a possível multiplicidade de contribuições clássicas sob imposição explícita de condições de contorno.

Portanto, em analogia ao resultado (4.71), podemos supor que a expressão (4.74) fornece uma aproximação semiclássica satisfatória somente quando o extremo final da trajetória principal atinge valores próximos ao ponto crítico (4.64b). Introduzindo estas considerações sobre as identidades (4.75), realizamos uma expansão de primeira ordem no parâmetro z_f^* em torno de $z_p^*(t_f)$:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)} &\approx \left[\frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} + (z_f^* - z^*(t_f)) \frac{\partial^2 f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z^*(t_f) \partial z(t_f)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} \\ &= (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)}, \end{aligned} \quad (4.76a)$$

^{xi}As funções calculadas sobre a trajetória principal são indicadas pelo subíndice p . No entanto, de maneira análoga às seções anteriores, esta notação será omitida quando sua ausência não provocar ambiguidades.

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z(t_i)} &\approx \left[\frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} + (z_f^* - z^*(t_f)) \frac{\partial^2 f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z^*(t_f) \partial z(t_f)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z(t_f)} \right] \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\
&= (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}.
\end{aligned} \tag{4.76b}$$

Agora, empregando a restrição das equações (4.65) sobre o espaço de fase simples, calculamos as segundas derivadas do expoente \tilde{F} sobre a trajetória principal:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)^2} \approx -g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)}, \tag{4.77a}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z^*(t_f) \partial z(t_i)} \approx -g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)}, \tag{4.77b}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i) \partial z^*(t_f)} \approx -g(z^*(t_i), z(t_i)) \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)}, \tag{4.77c}$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i)^2} \approx -g(z^*(t_i), z(t_i)) \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)}. \tag{4.77d}$$

Nas identidades anteriores, de maneira consistente com as aproximações semiclássicas do capítulo 3, conservamos apenas os termos de grandeza semelhante à segunda variação da ação. Por esta razão, os resultados (4.77) são obtidos com a simples substituição do parâmetro z_f^* pelo valor de $z_p^*(t_f)$, enquanto as equações (4.76) decorrem de uma expansão de primeira ordem. Como justificativa adicional para estas manipulações, observe que as expressões (4.76) e (4.77) possuem correspondência exata com as relações (4.63) e (4.65) no caso de estados coerentes canônicos.

Com o intuito de simplificar a notação, reescrevemos as segundas derivadas do expoente \tilde{F} em notação matricial:

$$\begin{aligned}
\tilde{W} &= \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)^2} & \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z^*(t_f) \partial z(t_i)} \\ \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i) \partial z^*(t_f)} & \frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial z(t_i)^2} \end{pmatrix} \\
&\approx - \begin{pmatrix} g^T(z^*(t_f), z(t_f)) & 0 \\ 0 & g(z^*(t_i), z(t_i)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)} & \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.78}$$

Note que esta última identidade possui a mesma forma da equação (4.68), obtida para um trajetória extrema do funcional \tilde{F} . Entretanto, diferentemente da seção 4.3, o resultado (4.78) está restrito ao espaço de fase simples.

Então, inserindo a expansão (4.74) na expressão (4.61), obtemos a seguinte identidade:

$$\begin{aligned}
K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx e^{\Lambda(z_f^*, z_i)} \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(z^*(t_i), z(t_i))}{\partial(z^*(t_f), z(t_i))} \tilde{\mathcal{C}}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\tilde{F}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \right] \right\} \\
&\times \int \frac{dz^*(t_f) dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{W} \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \right] \\
&\times \exp \left[\begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{V} \right],
\end{aligned} \tag{4.79}$$

na qual introduzimos a notação para os desvios em relação à trajetória principal, simbolizados por $\delta z^*(t_f) = z^*(t_f) - z_p^*(t_f)$ e $\delta z(t_i) = z(t_i) - z_p(t_i)$. Na equação anterior, definimos também o vetor de primeiras derivadas da função \tilde{F} :

$$\tilde{V} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z^*(t_f)} \\ \frac{\partial \tilde{F}}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} \\ (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix}. \tag{4.80}$$

Semelhantemente à expressão (4.49), podemos resolver a integral Gaussiana (4.79) com uma simples transformação de variáveis:

$$\tilde{\beta} - \tilde{\gamma} = -i \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix}. \tag{4.81}$$

A quantidade $\tilde{\gamma}$ representa um vetor constante, cujo valor ainda não está determinado. Em consequência da mudança de variáveis, o expoente do integrando na aproximação (4.79) adquire o seguinte formato:

$$-\frac{1}{2}(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma})\tilde{W}(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma}) + i(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma})\tilde{V} = -\frac{1}{2}\tilde{\beta}\tilde{W}\tilde{\beta} + \tilde{\beta}\tilde{W}\tilde{\gamma} - \frac{1}{2}\tilde{\gamma}\tilde{W}\tilde{\gamma} + i\tilde{\beta}\tilde{V} - i\tilde{\gamma}\tilde{V} \tag{4.82}$$

Nesta última identidade, em concordância com a definição (4.78), empregamos a propriedade $\tilde{W}^T = \tilde{W}$. Como próximo passo na avaliação da integral Gaussiana, estabelecemos a exigência de cancelamento entre os termos lineares em $\tilde{\beta}$:

$$\tilde{\beta}\tilde{W}\tilde{\gamma} + i\tilde{\beta}\tilde{V} = 0. \tag{4.83}$$

Deste modo, obtemos imediatamente o valor do vetor constante:

$$\tilde{\gamma} = -i\tilde{W}^{-1}\tilde{V}. \tag{4.84}$$

Em seguida, realizamos a substituição do resultado anterior na equação (4.82):

$$-\frac{1}{2}(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma})\tilde{W}(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma}) + i(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma})\tilde{V} = -\frac{1}{2}\tilde{\beta}\tilde{W}\tilde{\beta} - \frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V}. \tag{4.85}$$

Ou seja, assumindo que a matriz \tilde{W} é invertível, podemos reformular o expoente do propagador (4.79) como um termo quadrático em $\tilde{\beta}$ acrescido de uma constante. Portanto, de maneira análoga ao resultado (4.69), realizamos a integração Gaussiana referente à expansão (4.74):

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{I}}_i &= \int \frac{dz^*(t_f)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \exp \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{W} \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta z^*(t_f) & \delta z(t_i) \end{pmatrix} \tilde{V} \right] \\
&= e^{-\frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V}} \int \frac{i^d d\tilde{\beta}}{(2\pi)^d} \exp \left[-\frac{1}{2}\tilde{\beta}\tilde{W}\tilde{\beta} \right] = i^d \left[\det \tilde{W} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V} \right) \\
&\approx i^d \left\{ \det [g(z^*(t_f), z(t_f))] \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(z(t_f), z^*(t_i))}{\partial(z^*(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V} \right) \\
&= \left\{ \det [g(z^*(t_f), z(t_f))] \det [g(z^*(t_i), z(t_i))] \frac{\partial(z^*(t_i), z(t_f))}{\partial(z^*(t_f), z(t_i))} \right\}^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V} \right).
\end{aligned} \tag{4.86}$$

Com o auxílio desta última equação, reescrevemos a aproximação (4.79):

$$\begin{aligned}
K(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &\approx \exp [\Lambda(z_f^*, z_i)] \mathcal{C}(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + I(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i)] \right\} \\
&\quad \times \exp \left[f(z_f^*, z(t_f)) - f(z^*(t_f), z(t_f)) - \frac{1}{2}\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V} \right].
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Observe que, de forma semelhante à equação (4.70), reduzimos todos os determinantes Jacobianos a um único fator, o qual está inserido na quantidade \mathcal{C} . Em conclusão à presente dedução, podemos realizar uma última simplificação sobre o resultado (4.87). Com este propósito, efetuamos a inversão formal da matriz \tilde{W} :

$$\begin{aligned}
\tilde{W}^{-1} &\approx - \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z^*(t_f)} & \frac{\partial z^*(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} g^T(z^*(t_f), z(t_f)) & 0 \\ 0 & g(z^*(t_i), z(t_i)) \end{pmatrix}^{-1} \\
&= - \begin{pmatrix} \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z(t_f)} & \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z^*(t_i)} \\ \frac{\partial z(t_i)}{\partial z(t_f)} & \frac{\partial z(t_i)}{\partial z^*(t_i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^T(z^*(t_f), z(t_f)) & 0 \\ 0 & \xi(z^*(t_i), z(t_i)) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.88}$$

Com a utilização conjunta das expressões (4.80) e (4.88), podemos elaborar a seguinte relação matricial:

$$\begin{aligned}
\tilde{V}\tilde{W}^{-1}\tilde{V} &\approx - \begin{pmatrix} z_f^* - z^*(t_f) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} \right)^T g(z^*(t_f), z(t_f))(z_f^* - z^*(t_f)) \\ \left(\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \right)^T g(z^*(t_f), z(t_f))(z_f^* - z^*(t_f)) \end{pmatrix} \\
&= - (z_f^* - z^*(t_f)) \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix}^T g(z^*(t_f), z(t_f))(z_f^* - z^*(t_f)) \\
&= - (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} (z_f^* - z^*(t_f)).
\end{aligned} \tag{4.89}$$

Finalmente, substituindo o resultado anterior na aproximação (4.87), obtemos as equações (4.72) e (4.73), nas quais definimos o propagador clássico corrigido.

Note que os propagadores (4.72) e (B.20) possuem diversas características em comum, uma vez que ambas abordagens aproximativas resultam de uma mesma trajetória clássica no espaço de fase simples, a qual está determinada exclusivamente por condições iniciais. Contudo, devido à presença adicional das quantidades semiclássicas \mathcal{C} , I e P , podemos interpretar o propagador clássico corrigido como um aprimoramento da formulação desenvolvida no apêndice A, em comparação com a dinâmica quântica exata.

4.4.3 Correspondência com o Propagador Semiclássico

Nas seções anteriores, demonstramos que os propagadores semiclássico e clássico corrigido decorrem de diferentes aproximações sobre a expressão (4.58), a qual está fundamentada no operador semiclássico de evolução temporal. Portanto, podemos esperar a existência de uma conexão direta entre os resultados (4.71) e (4.72). Com a finalidade de comprovar esta expectativa, utilizamos as relações (3.46d) e (3.47a) no desenvolvimento de uma expansão específica da ação clássica:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &= \frac{i}{\hbar}S(z_f^*, z_i; t_f, t_i) - f(z_f^*, z(t_f)) + f(z_f^*, z(t_f)) \\
&\approx \frac{i}{\hbar}S(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i) + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i)}{\partial z^*(t_f)} (z_f^* - z^*(t_f)) \\
&\quad + \frac{i}{2\hbar} (z_f^* - z^*(t_f)) \frac{\partial^2 S(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i)}{\partial z^*(t_f)^2} (z_f^* - z^*(t_f)) \\
&\quad - f(z^*(t_f), z(t_f)) - \frac{\partial f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z^*(t_f)} (z_f^* - z^*(t_f)) \\
&\quad - \frac{1}{2} (z_f^* - z^*(t_f)) \frac{\partial^2 f(z^*(t_f), z(t_f))}{\partial z^*(t_f)^2} (z_f^* - z^*(t_f)) + f(z_f^*, z(t_f)) \\
&= \frac{i}{\hbar}S(z^*(t_f), z_i; t_f, t_i) - f(z^*(t_f), z(t_f)) + f(z_f^*, z(t_f)) \\
&\quad + \frac{1}{2} (z_f^* - z^*(t_f)) g^T(z^*(t_f), z(t_f)) \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_f)} (z_f^* - z^*(t_f)).
\end{aligned} \tag{4.90}$$

Na segunda linha desta última equação, realizamos uma expansão de segunda ordem do parâmetro z_f^* em torno do extremo final da trajetória principal, o qual indicamos simplesmente por $z^*(t_f)$. Entretanto, observe que este procedimento de aproximação não foi aplicado sobre terceiro termo à direita do primeiro sinal de igualdade.

Com a substituição da expressão (4.90) na identidade (4.71), o propagador semiclássico adquire formato idêntico à equação (4.72), exceto pela presença do sinal somatório sobre trajetórias clássicas. No entanto, com o objetivo de remover esta divergência, podemos assumir que a trajetória principal está suficientemente próxima de uma solução clássica com contribuição

dominante ao cálculo de $K_{sc}(z_f^*, z_i; t_f, t_i)$. Neste caso particular, os propagadores semiclássico e clássico corrigido apresentam correspondência completa, uma vez que podemos eliminar o sinal somatório com razoável precisão.

Devemos enfatizar que a discussão anterior não representa uma dedução alternativa para o propagador clássico corrigido, pois o desenvolvimento premeditado da equação (4.90) possui evidente dependência no conhecimento preliminar dos resultados da subseção 4.4.2.

4.4.4 Aplicação: Condensado em Poço Duplo

Como exemplo de aplicação para o propagador clássico corrigido, utilizaremos o seguinte Hamiltoniano^{xii}:

$$H = \Omega \sum_{j \neq k} a_j^\dagger a_k + \frac{\chi}{(N-1)} \sum_{j=1}^2 (a_j^\dagger)^2 a_j^2. \quad (4.91)$$

Note que o Hamiltoniano anterior corresponde a uma simplificação do modelo apresentado na subseção 4.1.4. Ou seja, o operador (4.91) descreve a dinâmica de um condensado de Bose-Einstein em um potencial de aprisionamento com dois poços simétricos^{98;99}.

Analogamente à identidade (4.23), os parâmetros Ω e χ representam respectivamente as taxas de tunelamento e colisão bosônica. Os operadores a_j^\dagger e a_j estão associados com a criação e aniquilação de bósons no estado de partícula única $|u_j\rangle$, o qual definimos como o estado fundamental da aproximação harmônica em torno do j -ésimo mínimo do potencial de aprisionamento, para $j = 1, 2$.

De acordo com as relações (2.26), o Hamiltoniano (4.91) comuta com o operador de número total de partículas, apresentado pela equação (2.52). Portanto, sem qualquer perda de generalidade, podemos restringir a análise dinâmica do condensado ao espaço \mathbb{B}_N^2 , o qual está caracterizado por um valor fixo para o número total de bósons N . Como consequência desta discussão, em comparação com os resultados da subseção 2.2.3, observe que podemos utilizar os estados coerentes de $SU(2)$ na formulação semiclássica do modelo de poço duplo.

Então, substituindo a expressão (2.59) na definição (3.4) para $n = 2$, obtemos a Hamiltoniana clássica efetiva para o sistema condensado:

$$\mathcal{H}(\bar{z}, z) = \Omega N \frac{z + \bar{z}}{1 + \bar{z}z} + \chi N \frac{\bar{z}^2 z^2 + 1}{(1 + \bar{z}z)^2}. \quad (4.92)$$

Em seguida, inserindo o resultado anterior nas identidades (3.3), encontramos as equações clássicas de movimento:

$$\dot{z} = -i\Omega(1 - z^2) - 2i\chi \frac{z(\bar{z}z - 1)}{1 + \bar{z}z}, \quad (4.93a)$$

$$\dot{\bar{z}} = i\Omega(1 - \bar{z}^2) + 2i\chi \frac{\bar{z}(\bar{z}z - 1)}{1 + \bar{z}z}. \quad (4.93b)$$

^{xii}Na presente subseção, consideraremos novamente um sistema de unidades determinado pela relação $\hbar = 1$.

Embora as equações (4.92) e (4.93) estejam descritas em notação apropriada ao espaço de fase duplicado, devemos ressaltar que o cálculo do propagador clássico corrigido exige apenas a avaliação destas expressões sob a restrição $\bar{z} = z^*$.

Como sugerido na subseção 4.4.2, o propagador clássico corrigido não produz resultados satisfatórios quando o extremo final da trajetória principal difere significativamente da condição (4.64b). De fato, no caso dos estados coerentes de SU(2), os cálculos numéricos indicam que a expressão (4.72) apresenta divergências para valores elevados da quantidade $|z_f^* - z(t_f)|$. Com o intuito de eliminar esta complicação, realizamos uma modificação sobre o termo de interpolação:

$$\tilde{P}(z_f^*, z_i; t_f, t_i) = P(z_f^*, z_i; t_f, t_i) \exp \left\{ -\kappa(l) \det[g(z^*(t_f), z(t_f))] \frac{|z_f - z(t_f)|^2}{2\pi\tilde{\lambda}^2} \right\}. \quad (4.94)$$

Ou seja, substituindo a expressão (4.73) por esta última definição, podemos assegurar que o termo de interpolação não fornecerá contribuições expressivas ao cálculo do propagador clássico corrigido para valores substancialmente distintos das variáveis $z^*(t_f)$ e z_f^* . Observe que, com a introdução de um fator exponencial na função \tilde{P} , estabelecemos uma restrição gradual sobre a região do espaço de fase com atuação efetiva da quantidade P . A extensão deste efeito limitante está determinada pelo parâmetro $\tilde{\lambda}$, cuja escolha de valor possui a finalidade de remover as inconsistências na aproximação semiclássica.

Por construção, as funções \tilde{P} e P exibem valores idênticos para $z^*(t_f) = z_f^*$. Em caso contrário, note que procuramos adaptar a definição (4.94) à curvatura natural do espaço de fase, uma vez que o argumento do fator exponencial apresenta formato funcional planejado em analogia à expressão (2.22). Deste modo, em concordância com os resultados da seção C.1, esperamos que extensão efetiva da restrição sobre o termo de interpolação permaneça aproximadamente constante durante a evolução temporal da trajetória principal.

Na figura 4.10, em comparação com o resultado quântico exato, exibimos a distribuição $Q(z^*, z; t)$ referente ao propagador clássico corrigido, considerando $N = 100$, $\Omega = -1$, $\chi = -1$, $\tilde{\lambda} = \frac{1}{2}$ e estado coerente inicial parametrizado por $z_i = \tan \frac{\pi}{8}$. Note que, de maneira similar à identidade (4.32), empregamos a superfície de uma esfera unitária como representação para o espaço de fase simples:

$$z = e^{-i\varphi} \tan \frac{\theta}{2} \quad (4.95)$$

Na equação anterior, as variáveis angulares assumem os valores $\theta \in [0, \pi]$ e $\varphi \in [0, 2\pi)$. A inserção da transformação (4.95) na definição (4.14) possibilita a descrição do sistema condensado em termos das coordenadas x_1 , x_2 e x_3 , conforme indicado pelas identidades (4.33).

As figuras 4.10.a e 4.10.b indicam a completa equivalência entre as condições iniciais para os cálculos semiclássico e quântico. Nos instantes de tempo $|\Omega|t = 2.5$ e $|\Omega|t = 11$, observe que o propagador clássico corrigido apresenta-se ligeiramente alongado na direção da trajetória principal. Contudo, esta aproximação não possui a capacidade de reproduzir detalhadamente a intensa delocalização da distribuição quântica. Como justificativa para a ampla diferença entre as duas abordagens dinâmicas, devemos destacar a grande simplicidade da expressão (4.72), uma vez que esta formulação semiclássica está fundamentada na avaliação de uma única trajetória no espaço de fase simples. Em decorrência desta característica particular, os valores relevantes da quantidade $|K_{cc}|^2$ demonstram elevada concentração em torno da coordenada

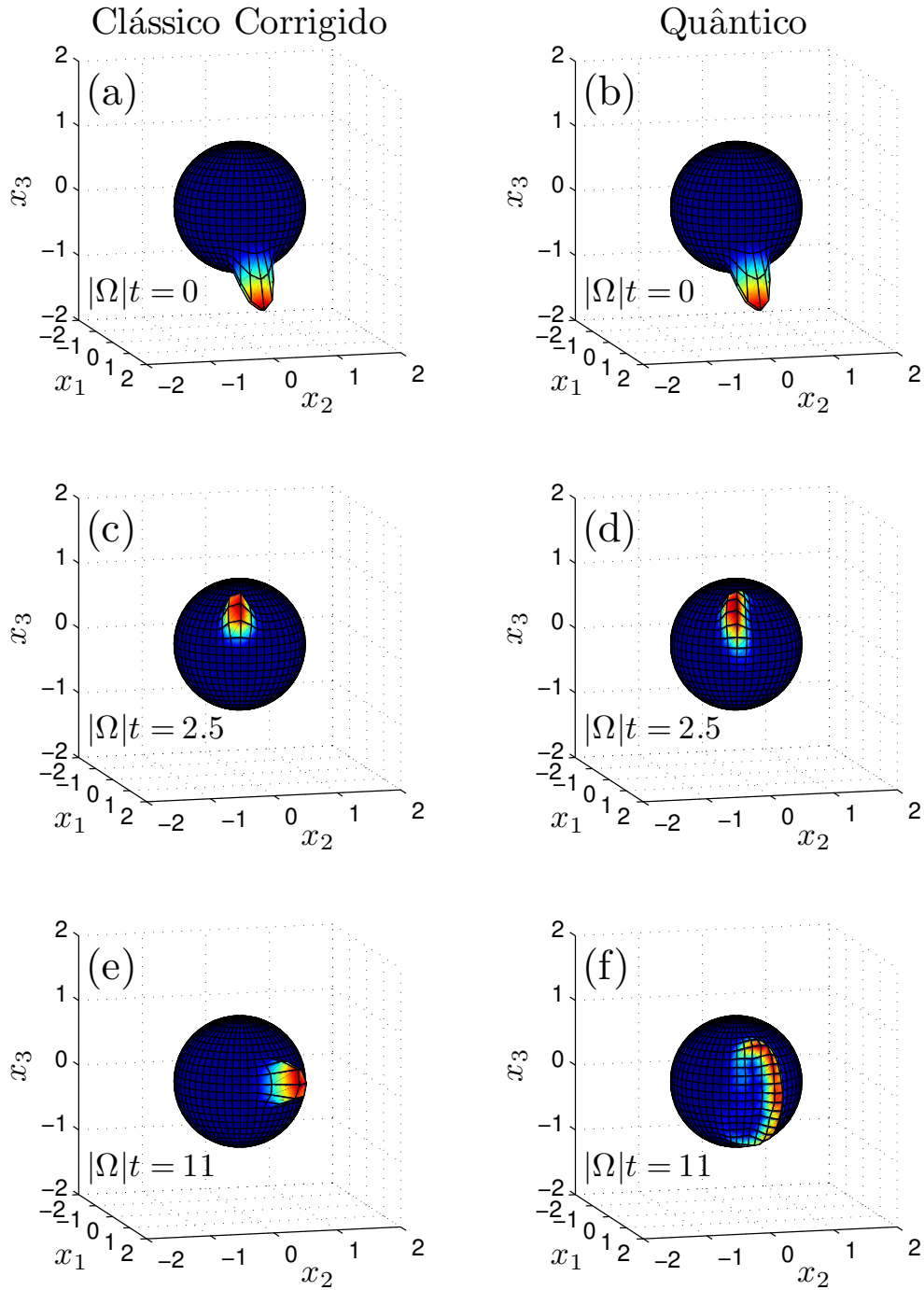


Figura 4.10: Distribuição Q sobre a esfera unitária para o condensado em poço duplo. Os resultados (a), (c) e (e) correspondem a uma aplicação do propagador clássico corrigido na representação dos estados coerentes de $SU(2)$. Os gráficos (b), (d) e (f) representam a dinâmica quântica exata nos mesmos instantes de tempo do cálculo aproximativo. Em ambas abordagens, a evolução temporal do estado coerente inicial $|z_i\rangle = |\tan \frac{\pi}{8}\rangle$ está determinada pelos parâmetros $N = 100$, $\Omega = -1$ e $\chi = -1$.

$z(t_f)$. Além disto, devido à redução efetiva no alcance do termo de interpolação, a modificação (4.94) promove um decréscimo adicional na delocalização da representação Q sobre a superfície esférica.

Com a intenção de comparar diretamente as expressões (4.72) e (B.20), a figura 4.11 exibe a fidelidade destes métodos aproximativos em relação à dinâmica quântica exata. Como esperado, o propagador clássico corrigido apresenta resultados consistentemente superiores à abordagem clássica.

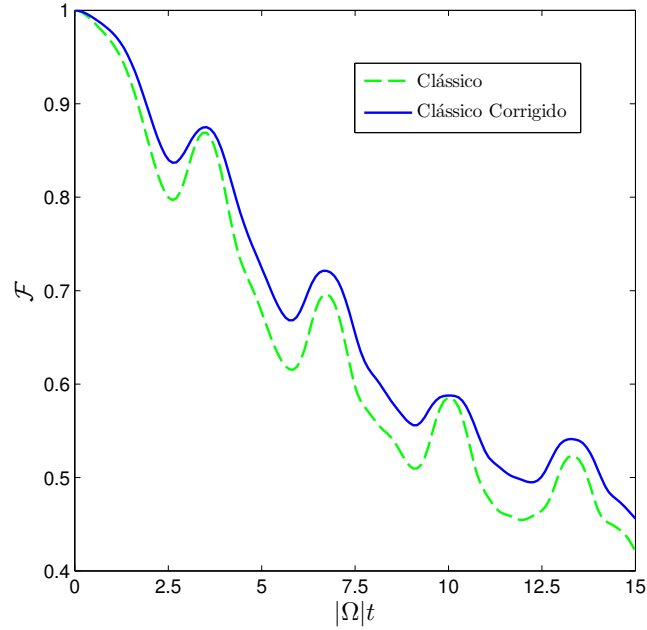


Figura 4.11: Fidelidade dos propagadores (4.72) e (B.20) em relação ao cálculo quântico exato. Os parâmetros do Hamiltoniano e o estado coerente inicial foram escolhidos em correspondência com os resultados da figura 4.10.

Entretanto, devemos lembrar que o incremento de precisão do propagador clássico corrigido representa uma compensação para seu maior custo computacional, uma vez que o cálculo da aproximação (4.72), diferentemente da fórmula (B.20), exige a determinação dos blocos M_{12} e M_{22} da matriz tangente.

Capítulo 5

Dinâmica Semiclássica no Espaço de Fase Duplicado: A Emergência de Fenômenos Quânticos

No capítulo anterior, desenvolvemos duas formulações integrais bastante distintas para a aproximação semiclássica. Embora ambos resultados constituam legítimas representações a valores iniciais, as expressões (4.9) e (4.34) diferem drasticamente na origem de suas contribuições clássicas. Ou seja, em contraste com a propagação semiclássica correspondente à duplicação dos graus de liberdade clássicos, o operador de evolução semiclássica está determinado exclusivamente por trajetórias no espaço de fase simples.

Incontestavelmente, a elaboração da fórmula (4.9) representa a eliminação de diversas dificuldades técnicas no cálculo do propagador semiclássico. No entanto, em comparação com o resultado (4.34), a aproximação semiclássica no espaço duplicado apresenta duas evidentes complicações. Primeiramente, a duplicação dos graus de liberdade clássicos implica em um significativo aumento do custo computacional para a resolução das equações de movimento. Além disto, não podemos considerar o filtro heurístico como uma solução definitiva para o problema de remoção das trajetórias espúrias, uma vez que não existe um procedimento determinístico para uma escolha precisa do valor da constante λ .

Diante dos obstáculos introduzidos pela duplicação do espaço de fase, poderíamos concluir prematuramente que a aproximação (4.9) possui apenas desvantagens em relação ao operador de evolução semiclássica. Contudo, em determinadas situações, as trajetórias clássicas no espaço duplicado exibem características únicas, as quais podemos interpretar como uma manifestação direta de fenômenos exclusivamente quânticos. Portanto, a elevada simplicidade na utilização da expressão (4.34) corresponde a uma compensação pelo descarte de possíveis correções quânticas.

Como objetivo principal do presente capítulo, exemplificaremos as afirmações enunciadas no último parágrafo. Entretanto, com o intuito de promover uma simplificação nas discussões posteriores, limitaremos nossos resultados aos estados coerentes canônicos. Adicionalmente, consideraremos que o sistema físico de interesse é composto por um modo bosônico isolado, de maneira que o espaço de fase simples possua uma única dimensão complexa.

5.1 Variáveis Canônicas no Espaço de Fase Duplicado

Em concordância com as identidades (2.32) e (4.36), reescrevemos as equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase simples em formato específico para os estados coerentes canônicos:

$$\dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z^*}, \quad (5.1a)$$

$$\dot{z}^* = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*, z)}{\partial z}. \quad (5.1b)$$

Então, com o propósito de reformular as expressões anteriores em termos de variáveis reais, introduzimos as seguintes transformações:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{\zeta} + i \frac{\zeta p}{\hbar} \right), \quad (5.2a)$$

$$z^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{\zeta} - i \frac{\zeta p}{\hbar} \right), \quad (5.2b)$$

nas quais a constante ζ simboliza um parâmetro real arbitrário com dimensão de comprimento. Observe que as novas variáveis dinâmicas q e p estão diretamente relacionadas com as partes real e imaginária da coordenada complexa z . Além disto, em oposição ao caráter adimensional da variável z , as quantidades q e p possuem respectivamente dimensões de comprimento e momento linear. Aplicando as transformações (5.2) sobre as identidades (5.1), obtemos as equações clássicas de movimento em notação real:

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial p}, \quad (5.3a)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}(q, p)}{\partial q}. \quad (5.3b)$$

Note que, por conveniência, a função composta $\mathcal{H}(z^*(q, p), z(q, p))$ foi denotada simplesmente por $\mathcal{H}(q, p)$. Como esperado, as transformações (5.2) estabelecem a correspondência entre as expressões complexas (5.1) e as equações canônicas de Hamilton^{100;101}. Alternativamente, podemos interpretar as identidades (5.1) como o formato canônico das equações de Hamilton em notação complexa, uma vez que as relações (5.2) preservam a métrica do espaço de fase como uma matriz diagonal e constante.

Analogamente às expressões (5.1), podemos particularizar as equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase duplicado com a substituição da métrica (2.32) nas identidades (3.3):

$$\dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}}, \quad (5.4a)$$

$$\dot{\bar{z}} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z}. \quad (5.4b)$$

De acordo com a prescrição (3.33), o resultado (5.4) representa a continuação analítica das equações (5.1). A realização deste procedimento sobre as transformações (5.2) fornece as seguintes identidades:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{q}}{\zeta} + i \frac{\zeta \bar{p}}{\hbar} \right), \quad (5.5a)$$

$$\bar{z} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{q}}{\zeta} - i \frac{\zeta \bar{p}}{\hbar} \right), \quad (5.5b)$$

nas quais introduzimos as variáveis complexas \bar{q} e \bar{p} . Embora as equações de movimento nos espaços de fase simples e duplicado constituam sistemas dinâmicos distintos, as expressões (5.1) e (5.4) possuem formato completamente idêntico. Por esta razão, as transformações (5.5) resultam precisamente em uma versão complexificada das identidades (5.3). Ou seja, com a substituição das variáveis dinâmicas q e p pelas quantidades complexas \bar{q} e \bar{p} , as equações canônicas de Hamilton descrevem corretamente a evolução temporal sob a duplicação dos graus de liberdade clássicos.

Portanto, as transformações (5.5) possibilitam uma investigação canônica das propriedades dinâmicas do sistema duplicado em termos de valores complexos para a posição e o momento linear. Contudo, a utilização de grandezas clássicas complexas não permite uma comparação direta e intuitiva entre os diferentes métodos de propagação semiclássica. Com a intenção de reduzir esta dificuldade, apresentamos uma nova mudança de variáveis:

$$z = \alpha_1 + i\alpha_2^*, \quad (5.6a)$$

$$\bar{z} = \alpha_1^* + i\alpha_2. \quad (5.6b)$$

Nas equações anteriores, as quantidades α_1 e α_2 simbolizam um conjunto alternativo de variáveis complexas. Observe que, como consequência da transformação (5.6), a restrição $\bar{z} = z^*$ possui total equivalência com o subespaço $\alpha_2 = 0$. Neste caso, a variável α_1 corresponde a uma parametrização natural para o espaço de fase simples.

Note que as quantidades α_1^* e α_2^* possuem participação explícita na construção das identidades (5.6). Consequentemente, estas equações não constituem uma transformação analítica nas variáveis α_1 e α_2 . Por este motivo, a inclusão das grandezas z^* e \bar{z}^* torna-se necessária para a inversão das operações (5.6). Então, como preparação para os desenvolvimentos futuros, escrevemos a seguinte expressão matricial:

$$\begin{pmatrix} z \\ \bar{z} \\ z^* \\ \bar{z}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & i \\ 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

A partir desta última relação, calculamos imediatamente a transformação inversa:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -i & i & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ \bar{z} \\ z^* \\ \bar{z}^* \end{pmatrix} = \mathcal{R}^{-1} \begin{pmatrix} z \\ \bar{z} \\ z^* \\ \bar{z}^* \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

De maneira semelhante à identidade (5.7), podemos reformular as equações de movimento (5.4) com a introdução das variáveis z^* e \bar{z}^* :

$$\begin{pmatrix} \dot{z} \\ \dot{\bar{z}} \\ \dot{z}^* \\ \dot{\bar{z}}^* \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \\ \frac{\partial \mathcal{H}^*(\bar{z}, z)}{\partial z^*} \\ \frac{\partial \mathcal{H}^*(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^*} \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Como evidenciado na expressão anterior, a evolução temporal das variáveis z^* e \bar{z}^* não está determinada pela mesma função Hamiltoniana correspondente às quantidades z e \bar{z} . Ou seja, devido à operação de conjugação complexa, obtemos dois valores distintos para a Hamiltoniana clássica efetiva, os quais estão representados pelas grandezas $\mathcal{H}(\bar{z}, z)$ e $\mathcal{H}^*(\bar{z}, z)$.

Com a finalidade de simplificar a aplicação da transformação (5.7) sobre as equações clássicas de movimento, podemos reescrever a expressão (5.9) em termos de uma única função Hamiltoniana. Dentre as possíveis opções para a realização deste objetivo, efetuamos a seguinte escolha:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}(\bar{z}^*, z^*, \bar{z}, z) &= \frac{1}{2} [\mathcal{H}(\bar{z}, z) + \mathcal{H}^*(\bar{z}, z)] \\ &= \frac{1}{2} [\mathcal{H}(\bar{z}, z) + \mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*)] \\ &= \text{re}[\mathcal{H}(\bar{z}, z)]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Observe que, na identidade anterior, introduzimos a relação $\mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*) = \mathcal{H}^*(\bar{z}, z)$ como indicação explícita para a Hamiltoniana clássica com dependência exclusiva nas variáveis z^* e \bar{z}^* . De maneira geral, as quantidades $\mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*)$ e $\mathcal{H}(\bar{z}^*, z^*)$ não representam funções coincidentes, uma vez que suas expansões em séries de potências não exibem coeficientes com valores restritos aos números reaisⁱ.

Inserindo a definição (5.10) na identidade (5.9), obtemos uma nova formulação para as equações clássicas de movimento no espaço de fase duplicado:

$$\begin{pmatrix} \dot{z} \\ \dot{\bar{z}} \\ \dot{z}^* \\ \dot{\bar{z}}^* \end{pmatrix} = \frac{2i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial z} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \bar{z}} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial z^*} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \bar{z}^*} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial z} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \bar{z}} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial z^*} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \bar{z}^*} \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Durante a elaboração deste último resultado, utilizamos as condições de analiticidade das

ⁱDe fato, podemos mostrar que $\mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*) = \mathcal{H}(z^*, \bar{z}^*)$.

funções Hamiltonianas complexas:

$$\frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z^*} = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}^*} = 0, \quad (5.12a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*)}{\partial z} = \frac{\partial \mathcal{H}'(\bar{z}^*, z^*)}{\partial \bar{z}} = 0. \quad (5.12b)$$

Neste momento, com o auxílio das relações matriciais (5.7) e (5.8), realizamos a substituição das variáveis dinâmicas na equação (5.11):

$$\begin{pmatrix} \dot{\alpha}_1 \\ \dot{\alpha}_2 \\ \dot{\alpha}_1^* \\ \dot{\alpha}_2^* \end{pmatrix} = \mathcal{R}^{-1} \mathcal{M} (\mathcal{R}^{-1})^T \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_1} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_2} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_1^*} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_2^*} \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_1} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_2} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_1^*} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \alpha_2^*} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Portanto, como consequência natural da transformação (5.6), a parte real da função $\mathcal{H}(\bar{z}, z)$ torna-se a geratriz exclusiva da evolução temporal clássica sobre o espaço duplicado. Desta maneira, recuperamos parcialmente os conceitos usuais da mecânica clássica, uma vez que as equações de movimento estão determinadas por uma Hamiltoniana com valor estritamente real. Além disto, em comparação com as identidades (5.1), note que a expressão (5.13) possui formato idêntico às equações canônicas de Hamilton em notação complexaⁱⁱ, considerando um sistema com dois graus de liberdade.

Em analogia à transformação (5.2), podemos executar a seguinte decomposição das variáveis canônicas α_1 e α_2 :

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\zeta} & 0 & i\frac{\zeta}{\hbar} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\zeta} & 0 & i\frac{\zeta}{\hbar} \\ \frac{1}{\zeta} & 0 & -i\frac{\zeta}{\hbar} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\zeta} & 0 & -i\frac{\zeta}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

na qual q_1 , q_2 , p_1 e p_2 representam um conjunto de coordenadas reais para o espaço de fase duplicado. Observe que, com o intuito de preservar a correspondência entre as diferentes parametrizações do subespaço $\alpha_2 = 0$, as identidades (5.2) e (5.14) apresentam o mesmo valor para a constante ζ .

Finalmente, aplicando a transformação (5.14) sobre a expressão (5.13), obtemos as equações canônicas de Hamilton sobre o espaço duplicado em notação real:

$$\begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{p}_1 \\ \dot{p}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial q_1} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial q_2} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial p_1} \\ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial p_2} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

ⁱⁱComo alternativa à definição (5.10), poderíamos descrever a dinâmica clássica das variáveis α_1 e α_2 com a parte imaginária da função Hamiltoniana $\mathcal{H}(\bar{z}, z)$. Neste caso, diferentemente da identidade (5.13), as equações de movimento não apresentariam formato canônico.

5.2 Caracterização de Fenômenos Quânticos no Espaço de Fase Duplicado

Como discutido no apêndice B, as equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase simples constituem um limite exato para a dinâmica quântica de um estado coerente inicial. Ou seja, considerando a situação descrita pela expressão (B.2), os resultados quânticos referentes ao operador H apresentam total equivalência com as soluções clássicas relativas à função Hamiltoniana $\mathcal{H}(z^*, z) = \langle z|H|z \rangle$.

No entanto, com o distanciamento em relação à condição limítrofe (B.2), a aproximação clássica torna-se incapaz de reproduzir corretamente diversos fenômenos fundamentais da mecânica quântica. Além disto, esperamos que os métodos semiclássicos determinados exclusivamente por trajetórias clássicas sobre o espaço de fase simples, como o propagador clássico-corrigido e o operador de evolução semiclássica, também apresentem dificuldades na descrição de alguns efeitos quânticos típicos, para os quais não podemos encontrar comportamento análogo nas equações (5.1).

Por outro lado, a duplicação do espaço de fase promove um aumento significativo na variedade de soluções para as equações clássicas de movimento, uma vez que as trajetórias externas ao subespaço invariante $\alpha_2 = 0$ podem exibir propriedades físicas bastante peculiares em comparação com os resultados da aproximação clássica. Portanto, a propagação semiclássica no espaço duplicado possui um conjunto ampliado de recursos para a descrição dos fenômenos específicos da mecânica quântica.

Nas próximas subseções, identificaremos diversas características particulares das trajetórias clássicas no espaço de fase duplicado. Neste contexto, introduziremos dois conceitos relevantes na discussão das possíveis conexões entre a duplicação dos graus de liberdade clássicos e alguns aspectos centrais da dinâmica quântica.

5.2.1 Trajetórias Tunelantes

Com o objetivo de satisfazer as necessidades específicas da seção 5.3, restringiremos momentaneamente nossa análise aos operadores Hamiltonianos com o seguinte formato:

$$H(\hat{q}, \hat{p}) = T(\hat{p}) + V(\hat{q}), \quad (5.16)$$

no qual $T(\hat{p})$ e $V(\hat{q})$ correspondem respectivamente aos operadores de energia cinética e potencial. Então, considerando uma partícula com massa $m = 1$, escrevemos explicitamente o termo cinético do Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} T(\hat{p}) &= \frac{\hat{p}^2}{2} \\ &= \frac{1}{4} \left(2a^\dagger a + 1 - a^{\dagger 2} - a^2 \right). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Nesta última equação, com o propósito de simplificar a execução dos cálculos posteriores,

empregamos uma versão modificada das identidades (2.37):

$$\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a), \quad (5.18a)$$

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a). \quad (5.18b)$$

Observe que, nas expressões anteriores, realizamos uma escolha particular para o sistema de unidades, o qual está parcialmente determinado pelas relações $\hbar = 1$ e $\zeta = 1$. Em seguida, utilizando os resultados (2.27), (2.31) e (5.17), obtemos prontamente o termo cinético da Hamiltoniana clássica efetiva:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\bar{z}, z) &= \langle z | \hat{T} | z \rangle \Big|_{z^* = \bar{z}} \\ &= \frac{1}{4} (2\bar{z}z + 1 - \bar{z}^2 - z^2) \\ &= \frac{p_1^2}{2} - \frac{p_2^2}{2} + \frac{1}{4} - ip_1 p_2 \\ &= \mathcal{T}(p_1, p_2). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Portanto, a quantidade \mathcal{T} exibe dependência funcional exclusiva nos momentos canônicos p_1 e p_2 . Por esta razão, na última linha da equação (5.19), efetuamos uma mudança de notação sobre os argumentos da energia cinética complexa.

Como evidenciado pelas identidades (5.13), a parte imaginária da função Hamiltoniana $\mathcal{H}(\bar{z}, z)$ não é estritamente necessária para a construção das equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase duplicado. Consequentemente, podemos limitar nossa discussão à parte real da expressão (5.19):

$$\tilde{\mathcal{T}}(p_1, p_2) = \text{re} [\mathcal{T}(p_1, p_2)] = \frac{p_1^2}{2} - \frac{p_2^2}{2} + \frac{1}{4}. \quad (5.20)$$

Note que, sob a restrição $\alpha_2 = 0$, a energia cinética real representa uma função quadrática do momento p_1 com limitante inferior correspondente à quantidade $\tilde{\mathcal{T}}(0, 0) = \frac{1}{4}$, a qual podemos interpretar como uma energia de ponto zero. Ou seja, sobre o espaço de fase simples, o resultado (5.20) possui todas as propriedades esperadas para a aproximação clássica do operador (5.17). No entanto, devido à duplicação dos graus de liberdade clássicos, a função $\tilde{\mathcal{T}}(p_1, p_2)$ não apresenta valores estritamente superiores à constante $\tilde{\mathcal{T}}(0, 0)$. Como consequência desta característica distintiva das trajetórias clássicas no espaço duplicado, torna-se relevante a formulação do seguinte conceito:

Definição 1 (Trajetórias tunelantes). Se uma trajetória no espaço de fase duplicado satisfaz a desigualdade $p_2^2(t) > p_1^2(t)$, então esta solução clássica apresenta tunelamento no instante de tempo t .

Objetivando uma melhor compreensão da definição 1, precisamos examinar o operador de energia potencial com maiores detalhes. Para esta finalidade, introduzimos a representação de posição do estado coerente canônico:

$$\langle \tilde{q}|z\rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{\tilde{q}^2}{2} + \sqrt{2}\tilde{q}z - \frac{1}{2}z(z+z^*)\right], \quad (5.21)$$

na qual $|\tilde{q}\rangle$ simboliza o auto-estado do operador \hat{q} com autovalor \tilde{q} . Com o auxílio da identidade (5.21), realizamos a seguinte manipulação sobre o termo potencial da Hamiltoniana clássica efetiva:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\bar{z}, z) &= \langle z|V(\hat{q})|z\rangle_{z^*=\bar{z}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{q} V(\tilde{q}) |\langle \tilde{q}|z\rangle|^2 \Big|_{z^*=\bar{z}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{q} V(\tilde{q}) \exp\left[-\tilde{q}^2 + \sqrt{2}\tilde{q}(\bar{z}+z) - \frac{1}{2}(\bar{z}+z)^2\right] \\ &= \mathcal{V}(\bar{z}+z). \end{aligned} \quad (5.22)$$

De acordo com a expressão anterior, o potencial complexo \mathcal{V} possui dependência funcional exclusiva na soma de seus argumentos. Em decorrência desta propriedade, na última linha da equação (5.22), estabelecemos uma evidente mudança de notação. Então, empregando as transformações (5.7) e (5.14), podemos executar modificações adicionais sobre o termo potencial clássico:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\bar{z}+z) &= \mathcal{V}(\alpha_1 + \alpha_1^* + i(\alpha_2 + \alpha_2^*)) \\ &= \mathcal{V}(\sqrt{2}(q_1 + iq_2)) \\ &= \mathcal{V}(q_1, q_2). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Como esperado, o potencial clássico efetivo representa uma função exclusiva das posições q_1 e q_2 . Ao final da identidade (5.23), em analogia com o resultado (5.19), efetuamos uma nova reformulação nos argumentos do termo potencial complexo, com a intenção de denotar explicitamente a dependência nas variáveis canônicas reais.

Com a utilização conjunta das equações (5.20) e (5.23), podemos escrever uma expressão geral para a parte real da função Hamiltoniana efetiva:

$$\tilde{\mathcal{H}}(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2} - \frac{p_2^2}{2} + \tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2) + \frac{1}{4}, \quad (5.24)$$

na qual introduzimos a relação $\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2) = \text{re}[\mathcal{V}(q_1, q_2)]$. Como consequência imediata do resultado (5.24), note que a inequação $\tilde{\mathcal{H}}(q_1, 0, p_1, 0) \geq \mathcal{V}(q_1, 0) + \frac{1}{4}$ é válida em todo o domínio das variáveis q_1 e p_1 . Ou seja, para um ponto arbitrário de uma trajetória clássica no espaço de fase simples, a energia total não exibe valor inferior ao termo potencial acrescido da constante $\tilde{\mathcal{T}}(0, 0)$. Esta característica da restrição $\alpha_2 = 0$ corresponde à incapacidade da aproximação clássica em perfurar a superfície de potencial.

Contudo, nos casos indicados pela definição 1, a Hamiltoniana $\tilde{\mathcal{H}}(q_1, q_2, p_1, p_2)$ apresenta valores inferiores à soma entre o potencial $\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2)$ e a energia cinética de ponto zero. Portanto, as trajetórias no espaço duplicado são capazes de transpor as fronteiras energéticas impostas pelo termo potencial clássico.

Por fim, substituindo a expressão (5.24) na identidade (5.15), podemos formular equações diferenciais de segunda ordem para as posições canônicas:

$$\ddot{q}_1 = -\frac{\partial \tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2)}{\partial q_1}, \quad (5.25a)$$

$$\ddot{q}_2 = \frac{\partial \tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2)}{\partial q_2}. \quad (5.25b)$$

Em conformidade com os conceitos usuais da mecânica Newtoniana, observe que a aceleração da variável q_1 possui sentido contrário à derivada do potencial real. Esta relação bastante familiar representa o resultado esperado para a aproximação clássica do Hamiltoniano (5.16) sobre o espaço de fase simples.

Entretanto, na direção da coordenada q_2 , a aceleração apresenta sinal idêntico à derivada de $\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2)$. Esta propriedade incomum da equação (5.25b) resulta no comportamento contra-intuitivo das trajetórias clássicas no espaço duplicado, as quais serão extensivamente exemplificadas na seção 5.3.

5.2.2 Comportamento Não-clássico

Com o propósito de compreender mais um aspecto não-trivial do sistema clássico duplicado, considere as seguintes condições de contorno:

$$\alpha_1(t_i) = \alpha_1^i, \quad (5.26a)$$

$$\alpha_1(t_f) = \alpha_1^f. \quad (5.26b)$$

De maneira geral, as trajetórias clássicas sobre o subespaço invariante $\alpha_2 = 0$ não possuem a capacidade de satisfazer as restrições (5.26) para valores arbitrários dos parâmetros α_1^i e α_1^f . Neste caso, a resolução das equações de movimento constitui um problema sobredeterminado, uma vez que a expressão (5.13) resulta em uma única equação diferencial complexa independente de primeira ordem para duas condições de contorno. Em outras palavras, as soluções das identidades (5.1) não estabelecem todas as possíveis conexões entre as coordenadas do espaço de fase simples.

Com a duplicação dos graus de liberdade, a sobredeterminação do sistema dinâmico clássico é completamente eliminada. Embora a existência de uma solução ainda não esteja garantida, a resolução simultânea das equações (5.13) e (5.26) torna-se realizável em uma ampla variedade de situaçõesⁱⁱⁱ. Ou seja, com a exclusão da restrição $\alpha_2 = 0$, as trajetórias clássicas produzem

ⁱⁱⁱDe acordo com os teoremas fundamentais para equações diferenciais ordinárias, a existência de uma solução para o sistema dinâmico (5.13) está assegurada sob a imposição de valores iniciais¹⁰². Portanto, como condição para a resolução das equações de movimento no espaço duplicado sob as restrições (5.26), o parâmetro α_1^f deve pertencer à imagem da função $\alpha_1(t_f) = \alpha_1(\alpha_1(t_i), \alpha_2(t_i); t_f)$ para $\alpha_1(t_i) = \alpha_1^i$.

novas conexões entre os valores da coordenada α_1 .

Em concordância com a definição (5.6), a variável dinâmica α_1 representa a projeção sobre o espaço de fase simples correspondente a uma solução arbitrária da equação (5.13). No entanto, como uma consequência particular do raciocínio apresentado no parágrafo anterior, note que os valores de $\alpha_1(t)$ referentes a uma trajetória no subespaço $\alpha_2(t) \neq 0$ não estão sujeitos às separatrizes de movimento do sistema dinâmico (5.1). Esta propriedade possui elevada relevância na comparação entre as diferentes abordagens semiclássicas. Por esta razão, introduzimos o seguinte conceito:

Definição 2 (Comportamento não-clássico). Se a projeção $\alpha_1(t)$ de uma trajetória no espaço duplicado cruza uma separatriz de movimento associada à dinâmica no subespaço $\alpha_2 = 0$, então esta solução do sistema (5.13) exibe *comportamento não-clássico*.

As trajetórias descritas pela definição 2, quando observadas no espaço de fase simples, exibem características totalmente incompatíveis com resultados da aproximação clássica. Consequentemente, esperamos que o comportamento não-clássico apresente contribuições irrelevantes aos cálculos semiclássicos no limite (B.2).

Contudo, nos exemplos examinados pela próxima seção, mostraremos que o comportamento não-clássico possui uma consistente relação com a construção de abordagens aproximativas para fenômenos estritamente quânticos. Este resultado representa uma conciliação entre o conceito usual de trajetória e alguns efeitos inerentes à mecânica quântica^{iv}.

5.3 Aplicações

Nas subseções 5.2.1 e 5.2.2, apresentamos duas propriedades singulares das soluções clássicas sobre o espaço de fase duplicado. Embora estas características não possuam analogia na propagação clássica, ainda precisamos demonstrar que as definições 1 e 2 indicam trajetórias importantes para uma aproximação precisa da dinâmica quântica. Com este intuito, analisaremos detalhadamente o exemplo específico de um *potencial Gaussiano*.

5.3.1 Potencial Gaussiano

Em conformidade com as equações (5.16) e (5.17), introduzimos o operador Hamiltoniano correspondente a um potencial Gaussiano para um sistema com um único grau de liberdade:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{V_0}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{\hat{q}^2}{2\sigma^2}\right). \quad (5.27)$$

Nesta última expressão, as quantidades σ e V_0 simbolizam respectivamente os parâmetros de largura e altura do termo potencial. Nas subseções posteriores, investigaremos a dinâmica imposta pelo Hamiltoniano (5.27) em dois casos bastante distintos, os quais designaremos como barreira ($V_0 > 0$) e poço ($V_0 < 0$) Gaussianos.

^{iv}Diferentemente das integrais de caminho¹⁰³, a propagação semiclássica no espaço duplicado utiliza apenas trajetórias contínuas em sua descrição da dinâmica quântica.

Neste momento, utilizando os resultados (5.19) e (5.22), escrevemos explicitamente a Hamiltoniana clássica efetiva para a partícula no potencial Gaussiano:

$$\mathcal{H}(\bar{z}, z) = \frac{1}{4} (2\bar{z}z + 1 - \bar{z}^2 - z^2) + \frac{V_0}{\sqrt{\pi(2\sigma^2 + 1)}} \exp\left[-\frac{(\bar{z} + z)^2}{2(2\sigma^2 + 1)}\right]. \quad (5.28)$$

Em seguida, substituindo a expressão (5.28) nas identidades (5.4), obtemos as equações clássicas de movimento sobre o espaço de fase duplicado:

$$\dot{z} = \frac{i}{2}(\bar{z} - z) + \frac{iV_0}{\sqrt{\pi(2\sigma^2 + 1)}} \frac{(\bar{z} + z)}{(2\sigma^2 + 1)} \exp\left[-\frac{(\bar{z} + z)^2}{2(2\sigma^2 + 1)}\right], \quad (5.29a)$$

$$\dot{\bar{z}} = \frac{i}{2}(\bar{z} - z) - \frac{iV_0}{\sqrt{\pi(2\sigma^2 + 1)}} \frac{(\bar{z} + z)}{(2\sigma^2 + 1)} \exp\left[-\frac{(\bar{z} + z)^2}{2(2\sigma^2 + 1)}\right]. \quad (5.29b)$$

A partir dos resultados (5.28) e (5.29), podemos calcular diretamente todas as grandezas clássicas necessárias para a aplicação de métodos semiclássicos, como a Lagrangiana (3.6b), o termo de correção (3.7) e as equações diferenciais (A.3). Entretanto, não exibiremos a forma específica destas quantidades para o potencial Gaussiano, pois esta exposição não acrescenta informações indispensáveis para a presente discussão.

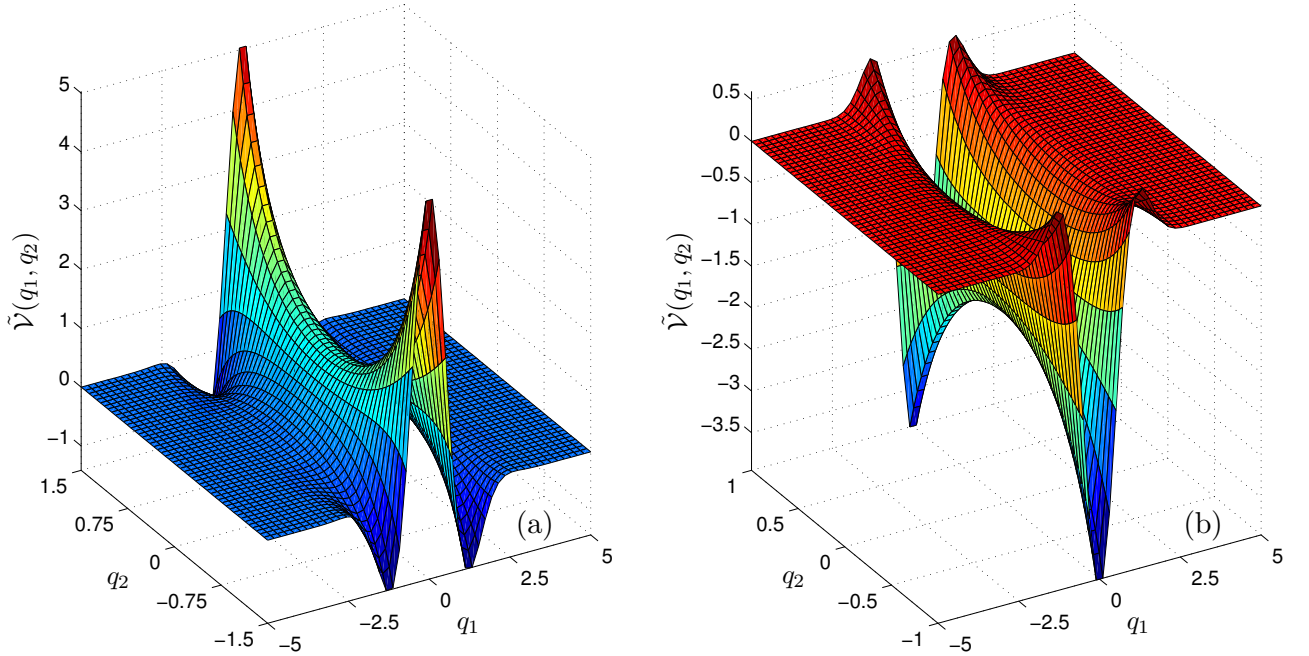


Figura 5.1: Parte real do potencial Gaussiano clássico sobre o espaço de configuração duplicado. (a) Barreira Gaussiana com parâmetros $\sigma = \frac{1}{2}$ e $V_0 = 2\sqrt{2\pi\sigma^2}$. (b) Poço Gaussiano para $\sigma = \frac{1}{4}$ e $V_0 = -5\sqrt{2\pi\sigma^2}$.

Como evidenciado pelas identidades (5.25), podemos compreender a dinâmica sobre o *espaço de configuração duplicado* como uma consequência exclusiva da parte real do potencial clássico

efetivo. Então, aplicando as transformações (5.7) e (5.14) sobre o termo potencial da expressão (5.28), encontramos prontamente a seguinte função real:

$$\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2) = \frac{V_0}{\sqrt{\pi(2\sigma^2 + 1)}} \exp\left[-\frac{(q_1^2 - q_2^2)}{(2\sigma^2 + 1)}\right] \cos\left[\frac{2q_1 q_2}{(2\sigma^2 + 1)}\right]. \quad (5.30)$$

Na figura 5.1, exibimos dois exemplos para a superfície do potencial $\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2)$. Os gráficos 5.1.a e 5.1.b representam respectivamente a barreira e o poço Gaussianos, considerando os mesmos parâmetros posteriormente utilizados nas subseções 5.3.2 e 5.3.3.

5.3.2 Barreira Gaussiana

Como primeiro exemplo para a dinâmica semiclássica do Hamiltoniano (5.27), analisaremos o caso de uma barreira Gaussiana com parâmetros $\sigma = \frac{1}{2}$ e $V_0 = 2\sqrt{2\pi\sigma^2}$. Além disto, com a intenção de descrever a incidência de uma partícula sobre o lado esquerdo do potencial, empregaremos o estado coerente $|z_i\rangle = |-3 + i\rangle$ como condição inicial no instante de tempo $t_i = 0$.

De maneira a promover uma comparação adequada entre os diferentes métodos semiclássicos, as fórmulas (4.9) e (4.34) foram calculadas com distribuições equivalentes para suas respectivas variáveis de integração. Ou seja, na avaliação numérica de ambas abordagens aproximativas, utilizamos 15757 valores iniciais uniformemente dispostos em torno do parâmetro complexo z_i .

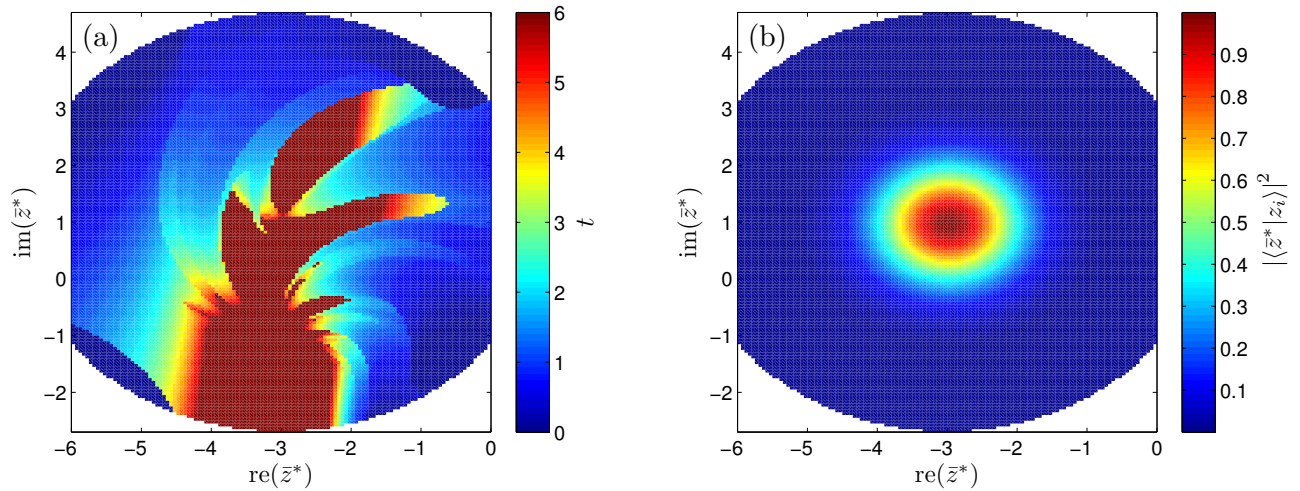


Figura 5.2: (a) Diagrama de condições iniciais para propagação semiclássica no espaço de fase duplicado. O período de contribuição das trajetórias clássicas está determinado pelo filtro heurístico (4.11) com valor limitante $\lambda = 5$. (b) Distribuição $Q(\bar{z}, \bar{z}^*)$ para o estado coerente inicial $|z_i\rangle = |-3 + i\rangle$.

Na figura 5.2.a, mostramos o diagrama de condições iniciais para a propagação semiclássica no espaço de fase duplicado. Analogamente aos resultados apresentados na subseção 4.1.4, o

código de cores indica o período total de contribuição para cada trajetória clássica, considerando uma aplicação do filtro heurístico (4.11) com valor limitante $\lambda = 5$.

Observe que as condições iniciais com maiores intervalos de contribuição constituem uma região com formato bastante não-trivial. Além disto, note a existência de transições abruptas entre zonas com períodos de contribuição substancialmente distintos. Deste modo, concluímos que a amostragem de trajetórias para a integração numérica da fórmula (4.9) representa uma tarefa de elevada complexidade, para a qual o filtro heurístico demonstra satisfatória eficiência.

A figura 5.2.b exibe a representação $Q(\bar{z}, \bar{z}^*)$ para o estado coerente inicial. Em comparação com o gráfico 5.2.a, verificamos que a função $Q(\bar{z}, \bar{z}^*)$ apresenta seus valores mais significativos em uma região com contribuição persistente à propagação semiclássica. No entanto, a recíproca desta última afirmação não é estritamente verdadeira, uma vez que podemos encontrar elevados períodos de contribuição para condições iniciais $\bar{z}(t_i)$ com considerável distanciamento em relação ao parâmetro z_i .

De acordo com a subseção 4.1.3, a trajetória principal estabelece uma aproximação clássica para a evolução temporal do estado coerente inicial $|z_i\rangle$. Como consequência desta definição, a abordagem clássica ao Hamiltoniano (5.27) está limitada ao espaço de fase simples.

Sob a restrição $\alpha_2 = 0$, as soluções das equações de movimento (5.29) apresentam apenas dois padrões distintos de comportamento, como mostrado pela figura 5.3. Em uma primeira situação, para $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1) < \mathcal{H}(0, 0)$, a energia cinética de uma trajetória clássica atinge seu valor limitante inferior $\mathcal{T}(0, 0)$ em único instante de tempo. Este regime dinâmico, correspondente à reflexão da partícula pela barreira Gaussiana, está presente nas regiões (I) e (III) do espaço de fase simples.

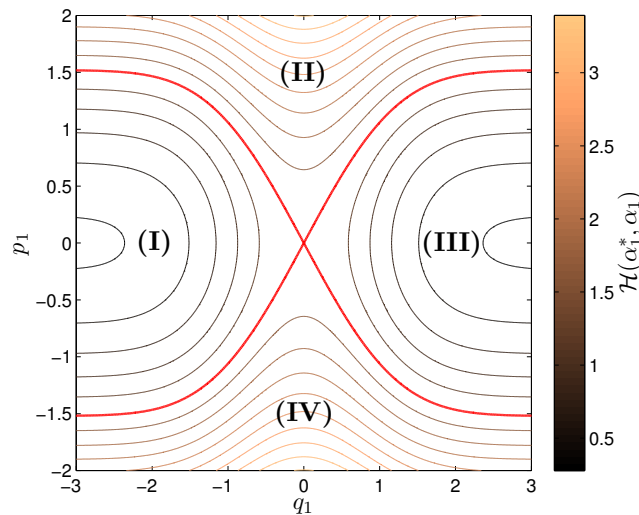


Figura 5.3: Curvas de contorno sobre o espaço de fase simples para a Hamiltoniana clássica efetiva. A separatriz de movimento, indicada pela linha vermelha, está associada com a energia $\mathcal{H}(0, 0)$. Os numerais (I), (II), (III) e (IV) simbolizam as regiões dinamicamente isoladas da propagação clássica.

Para $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1) > \mathcal{H}(0, 0)$, a energia cinética de uma trajetória clássica possui valor superior

a $\mathcal{T}(0, 0)$ para todos os instantes de tempo. Neste segundo caso, representado pelas regiões (II) e (IV), a partícula percorre todos os valores da coordenada real q_1 , pois não há reflexão pela barreira Gaussiana.

A trajetória principal está contida na região (I) do subespaço $\alpha_2 = 0$, uma vez que $\text{re}(z_i) < 0$ e $\mathcal{H}(z_i^*, z_i) < \mathcal{H}(0, 0)$. Então, com o objetivo de estabelecer uma referência para a análise dos resultados semiclássicos, podemos determinar o *ponto de retorno* z_r da aproximação clássica. Por definição, a coordenada z_r representa um valor singular de $z_p(t)$, no qual a energia cinética equivale ao limitante inferior $\mathcal{T}(0, 0)$. Portanto, em concordância com a identidade (5.2a), a quantidade z_r deve possuir o seguinte formato:

$$z_r = \frac{q_r}{\sqrt{2}}, \quad (5.31)$$

no qual q_r simboliza a *posição canônica de retorno clássico*. Devido à conservação de energia, podemos formular uma relação algébrica para a coordenada z_r :

$$\mathcal{H}(z_i^*, z_i) = \mathcal{H}(z_r^*, z_r). \quad (5.32)$$

Com o auxílio das equações (5.28), (5.31) e (5.32), obtemos uma expressão analítica para a posição de retorno:

$$q_r = -\sqrt{(2\sigma^2 + 1) \ln \left\{ \frac{V_0}{\sqrt{(2\sigma^2 + 1)\pi} \left[\mathcal{H}(z_i^*, z_i) - \frac{1}{4} \right]} \right\}}. \quad (5.33)$$

Note que, na identidade anterior, assumimos que a partícula incide sobre o lado esquerdo da barreira Gaussiana. Considerando os valores escolhidos previamente para os parâmetros σ , V_0 e z_i , a expressão (5.33) resulta em $q_r \approx -0.46$.

Na figura 5.4, exibimos a evolução temporal para o módulo ao quadrado da função de onda na representação de posição. Desta maneira, realizamos a comparação das aproximações semiclássicas (4.9) e (4.34) com o resultado quântico exato, o qual está simbolizado pelo estado $|\psi_q\rangle$. Além disto, com o intuito de evidenciar as limitações da propagação clássica, indicamos graficamente o valor da posição de retorno.

O instante de tempo $t = 0$ está associado à representação do estado coerente inicial $|z_i\rangle$, cuja descrição analítica decorre imediatamente da equação (5.21). Posteriormente, para pequenos intervalos de propagação, o sistema apresenta dinâmica semelhante a uma partícula livre, pois a função de onda localizada está suficientemente distante da barreira Gaussiana.

Em $t = 1.64$, observamos o início da interação entre a partícula e a barreira de potencial, uma vez que a função de onda sofre as primeiras alterações em seu formato Gaussiano. Neste momento, percebemos também pequenas diferenças entre as abordagens aproximativas e o resultado exato.

Para $t = 2.18$ e $t = 2.91$, encontramos a partícula nos instantes intermediários de sua interação com a barreira Gaussiana. Nestes dois casos, torna-se evidente que a aproximação $|\psi_{sc}\rangle$ possui precisão bastante superior ao operador U_{sc} na reprodução da dinâmica quântica.

No instante $t = 4.06$, o estado $|\psi_q\rangle$ demonstra uma nítida divisão em três porções espacialmente localizadas. Para $\tilde{q} < q_r$, a função de onda exata apresenta duas parcelas resultantes

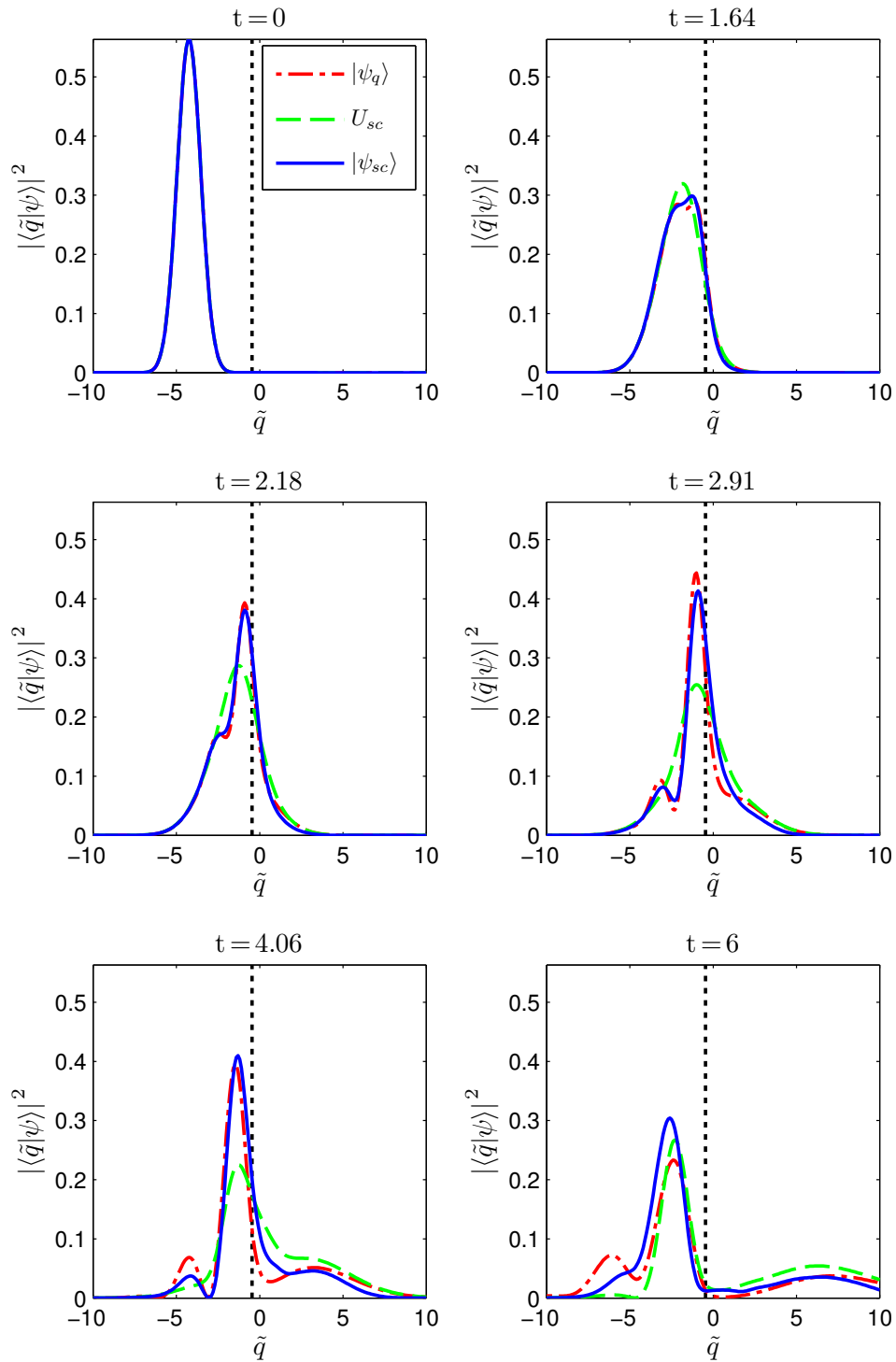


Figura 5.4: Módulo ao quadrado da função de onda na representação de posição para vários instantes de tempo. Comparação entre o resultado quântico exato (vermelho traço-pontilhado), o operador de evolução semiclassical (verde tracejado) e a propagação no espaço duplicado (azul sólido). A linha vertical tracejada indica a posição de retorno clássico.

da reflexão pela barreira Gaussiana. No intervalo $\tilde{q} > q_r$, observamos a fração transmitida do sistema quântico. Note que, diferentemente da propagação no espaço duplicado, o operador de evolução semiclássica foi incapaz de descrever a parte com menor amplitude do pacote de onda refletido.

Como mostrado para o instante de tempo $t = 6$, o estágio final do processo de espalhamento corresponde ao afastamento das frações refletida e transmitida da função de onda em relação à barreira de potencial. Em particular, para $\tilde{q} > q_r$, perceba que a quantidade $|\langle \tilde{q} | \psi \rangle|^2$ exibe valores superiores para o operador de evolução semiclássica em comparação aos outros dois tratamentos dinâmicos.

Na figura 5.5.a, em conformidade com a equação (4.22), mostramos a evolução temporal para a medida de fidelidade entre o resultado quântico exato e as aproximações semiclássicas. Como esperado, os valores de $\mathcal{F}(t)$ representam uma confirmação quantitativa de nossas conclusões anteriores, motivadas originalmente pela figura 5.4. Ou seja, em comparação com o operador de evolução semiclássica, a propagação no espaço duplicado apresenta maior precisão na descrição da solução quântica.

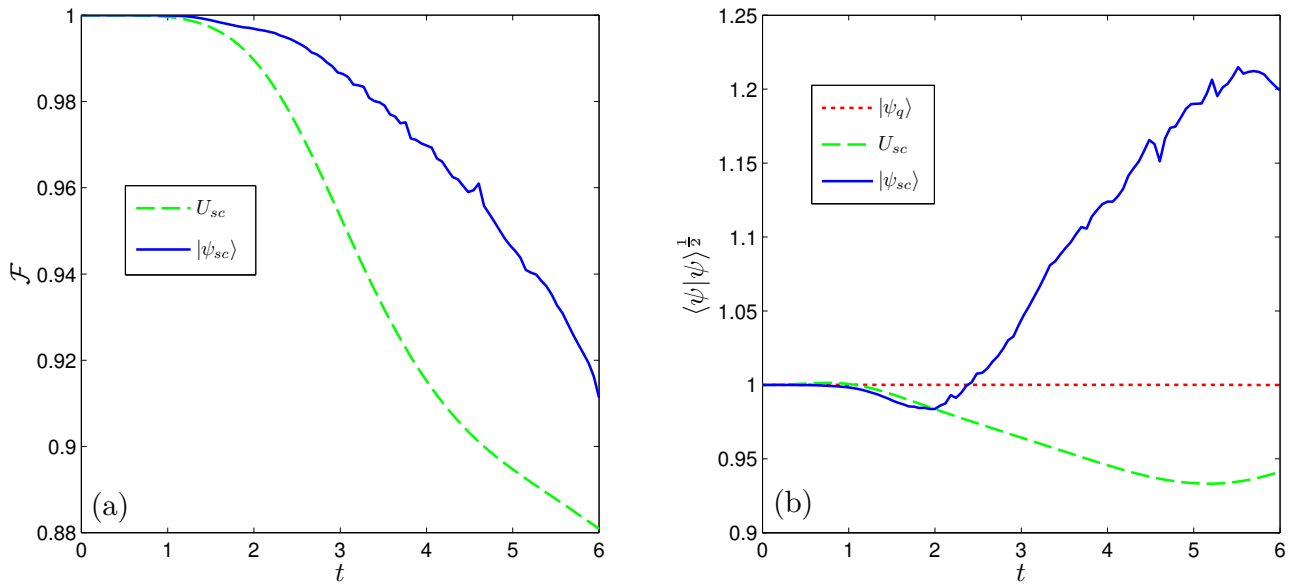


Figura 5.5: (a) Medida de fidelidade entre a solução quântica exata e as aproximações semiclássicas. (b) Norma do vetor de estado estabelecida pela avaliação numérica das fórmulas (4.9) e (4.34). Como referência para a comparação das abordagens aproximativas, apresentamos também os resultados numéricos relativos à dinâmica quântica.

Conforme mencionado no capítulo 4, as identidades (4.9) e (4.34) não constituem operações unitárias sobre um estado inicial, excetuando as situações especiais de equivalência entre as aproximações semiclássicas e a dinâmica quântica exata. Portanto, em uma etapa posterior à aplicação dos métodos de propagação semiclássica, torna-se necessária a normalização dos resultados para cada instante de tempo.

A figura 5.5.b exibe a norma do vetor de estado produzida pelos diferentes procedimentos

de evolução temporal. De maneira geral, a quantidade $\langle \psi | \psi \rangle^{\frac{1}{2}}$ representa um indicador de qualidade para os resultados semiclássicos, uma vez que a precisão de uma aproximação está diretamente relacionada com sua capacidade de preservar a norma do sistema. Observe que, como consequência da eliminação de trajetórias pelo filtro heurístico, a propagação semiclássica no espaço duplicado demonstra variações bruscas no valor de sua norma.

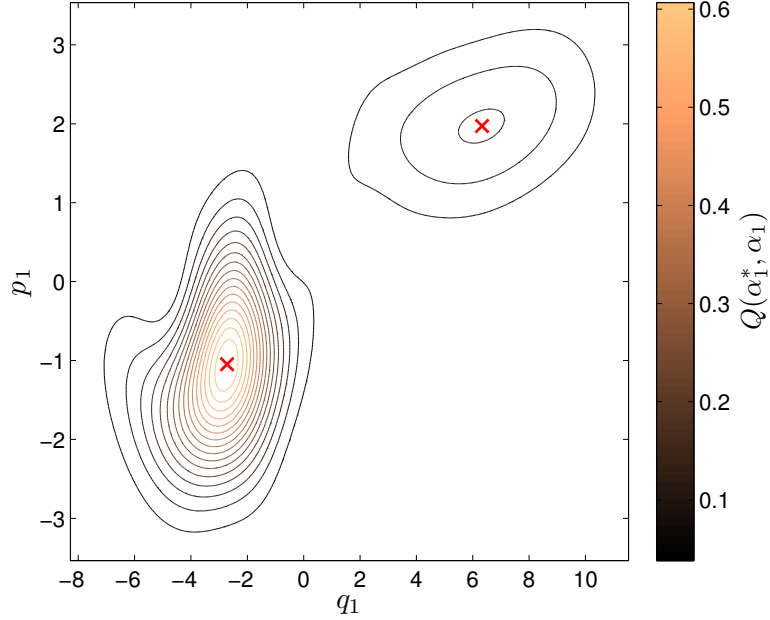


Figura 5.6: Curvas de contorno para a representação $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ no instante de tempo $t = 6$, considerando apenas os resultados da propagação semiclássica no espaço de fase duplicado. As cruces vermelhas indicam as coordenadas dos máximos locais, cujos valores complexos são $z_m^r \approx -1.92 - 0.74i$ e $z_m^t \approx 4.48 + 1.39i$.

Como discutido na subseção 4.1.3, a definição (4.14) possibilita a representação de um estado quântico sobre o espaço de fase simples. Com o auxílio deste resultado, na figura 5.6, apresentamos a distribuição $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ resultante da aproximação semiclássica (4.9) para o instante de tempo $t = 6$. Note que, como preparação para os desenvolvimentos futuros, utilizamos a notação introduzida pelas transformações (5.6) e (5.14).

De maneira semelhante à função de onda na representação de posição, observe que a função $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ exibe uma evidente fragmentação sobre o espaço de fase simples no instante final de propagação. A primeira porção, correspondente à reflexão da partícula pela barreira Gaussiana, possui seu máximo local na coordenada complexa z_m^r . Por outro lado, a quantidade z_m^t representa a localização do valor extremo para a parte transmitida da aproximação semiclássica.

Neste momento, com a intenção de compreender a origem semiclássica dos fenômenos de transmissão e reflexão pelo potencial Gaussiano, precisamos determinar uma regra de ordenamento para a relevância de uma trajetória no cálculo da propagação no espaço duplicado. Para esta finalidade, definimos que a contribuição de uma solução clássica à aproximação no ponto

z_f corresponde a uma função crescente do valor absoluto da seguinte grandeza:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \langle z_f | \bar{z}^*(t_f) \rangle \kappa(l) \det [g(\bar{z}(t_f), \bar{z}^*(t_f))] |\det [M_{22}(t_f, t_i)]|^2 K'_{sc}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i) \\ &= \langle z_f | \bar{z}^*(t_f) \rangle |M_{22}(t_f, t_i)|^2 K'_{sc}(\bar{z}(t_f), z_i; t_f, t_i). \end{aligned} \quad (5.34)$$

A quantidade \mathcal{G} representa a projeção do integrando da fórmula (4.9) sobre o estado coerente $|z_f\rangle$. Na segunda linha da equação (5.34), utilizamos os resultados (2.33) e (2.35) na formulação de uma expressão específica para os estados coerentes canônicos em sistemas com um único grau de liberdade.

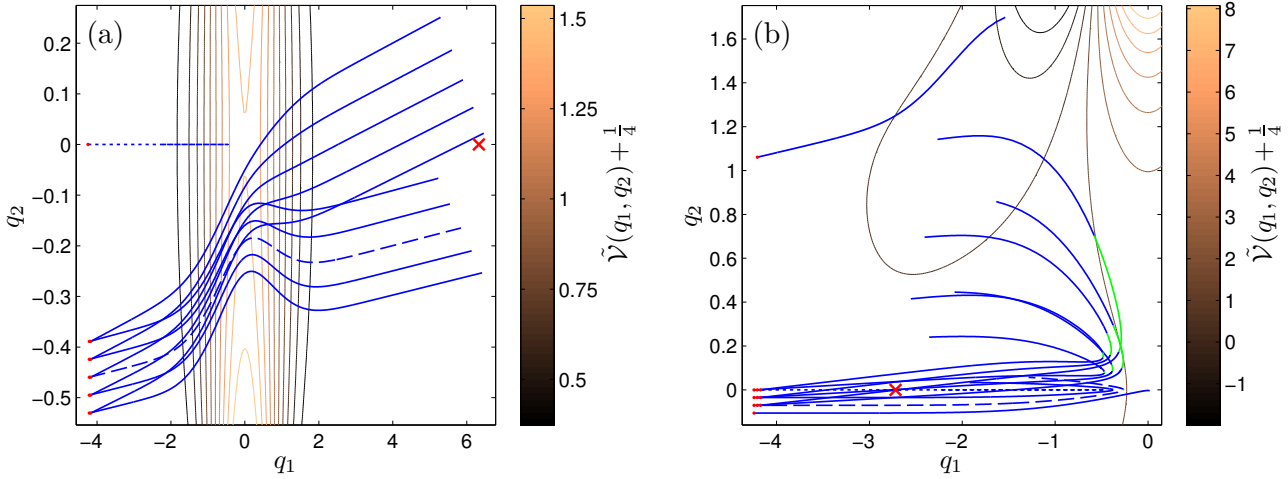


Figura 5.7: Projeção sobre o espaço de configuração duplicado para as trajetórias com maior relevância ao cálculo da aproximação (4.9) nos pontos: (a) z_m^t e (b) z_m^r . As coordenadas dos extremos da função $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ no instante de tempo $t = 6$ estão representadas pelas cruces vermelhas em seus respectivos gráficos. Apenas para comparação com as contribuições dominantes, a trajetória principal está simbolizada pela curva pontilhada. A linha tracejada denota a solução clássica com valor máximo da quantidade $|\mathcal{G}|$. Os trechos em verde indicam a ocorrência de tunelamento, em concordância com a definição 1. Os pontos vermelhos correspondem às posições iniciais das trajetórias clássicas. Como referência para a localização da barreira Gaussiana, apresentamos as curvas de contorno para a quantidade $\tilde{\mathcal{V}}(q_1, q_2) + \frac{1}{4}$.

Na figura 5.7.a, exibimos as projeções sobre o espaço de configuração duplicado das dez trajetórias com maior contribuição à propagação semiclássica no ponto $z_f = z_m^t$ para o instante de tempo final $t_f = 6$. Em particular, a solução clássica com valor máximo de $|\mathcal{G}|$ está simbolizada pela curva tracejada.

Note que as soluções clássicas dominantes não possuem trechos tunelantes, os quais seriam indicados por segmentos verdes. Ou seja, nos instantes de tempo contidos no intervalo de propagação, as trajetórias com maior relevância à porção transmitida da aproximação semiclássica não se enquadram na definição 1. Deste modo, concluímos que o tunelamento não representa um efeito importante para a descrição semiclássica da transmissão pela barreira Gaussiana, considerando os valores escolhidos para os parâmetros σ e V_0 .

A figura 5.7.b apresenta as soluções clássicas com os dez maiores valores da quantidade $|\mathcal{G}|$ para $z_f = z_m^f$. Novamente, a trajetória com máxima contribuição à propagação semiclássica está indicada pela linha tracejada.

Observe que grande parte das trajetórias dominantes possui uma seção tunelante na região de intensa interação com a barreira Gaussiana. Conseqüentemente, o tunelamento está diretamente associado com os instantes intermediários do intervalo de propagação, nos quais a função de onda está concentrada nas proximidades da posição de retorno clássico. Neste caso, de acordo com as figuras 5.4 e 5.5.a, a aproximação (4.9) demonstra precisão bastante superior à expressão (4.34). Portanto, as soluções tunelantes desempenham uma importante função na reprodução adequada das características de uma reflexão quântica.

Como interpretação suplementar para os resultados da figura 5.7.b, podemos compreender as contribuições tunelantes nas vizinhanças da posição q_r como uma analogia semiclássica para um fenômeno típico da mecânica quântica, correspondente à penetração parcial de um pacote de onda em uma barreira de potencial finita.

Nas figuras 5.4 e 5.7.a, encontramos dois sólidos indícios para identificar a transmissão da partícula pela barreira Gaussiana como uma efeito de origem estritamente clássica. Primeiramente, notamos que o operador de evolução semiclássica, o qual está fundamentado exclusivamente sobre o espaço de fase simples, exhibe valores superiores à solução quântica exata para a probabilidade de observação do sistema no intervalo $\tilde{q} > q_r$. Em seguida, verificamos que as trajetórias tunelantes não demonstram contribuição relevante à aproximação (4.9) na porção transmitida da função Q .

A aproximação clássica não possui a capacidade de descrever a transmissão pela barreira de potencial, uma vez que a trajetória principal está localizada na região (I) do espaço de fase simples. No entanto, com a exceção da situação limítrofe (B.1), o estado coerente inicial $|z_i\rangle$ apresenta incertezas não-nulas em seus valores médios de posição e momento linear. Por esta razão, a utilização de uma abordagem clássica baseada em uma única trajetória pode não representar um comparação apropriada com as soluções quânticas e semiclássicas. Neste contexto, introduzimos a *propagação clássico-estatística*, cuja definição e discussão detalhada está presente no apêndice C.

A propagação clássico-estatística constitui uma formulação aproximativa para a evolução temporal quântica, decorrente da generalização do teorema de Liouville para grupos dinâmicos arbitrários. De maneira alternativa, podemos interpretar as identidades (C.18-C.20) como a união do caráter estatístico inerente à mecânica quântica com o comportamento dinâmico clássico sobre o espaço de fase simples.

Com o objetivo de promover uma comparação quantitativa entre as diferentes abordagens dinâmicas à barreira Gaussiana, definimos a *medida de transmissão*:

$$\mathcal{P}_t = \int_{q_1 > q_r} \frac{d^2\alpha_1}{\pi} Q(\alpha_1^*, \alpha_1). \quad (5.35)$$

A quantidade \mathcal{P}_t representa a fração da função Q encontrada em posições inacessíveis para a trajetória principal. Note que, exceto no caso da aproximação clássico-estatística, a medida de transmissão não possui significado físico correspondente à probabilidade de observação da

partícula para $q_l > q_r$, pois a representação Q não constitui uma genuína distribuição de probabilidade quântica sobre o espaço de fase simples^v.

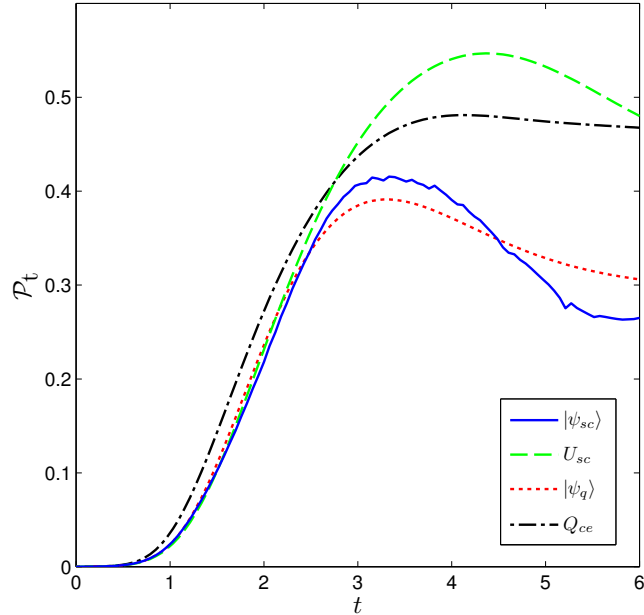


Figura 5.8: Evolução temporal para a medida de transmissão. A propagação clássico-estatística está simbolizada pela função Q_{ce} .

Na figura 5.8, mostramos a evolução temporal da medida de transmissão para quatro diferentes abordagens dinâmicas. Como esperado, a função \mathcal{P}_t apresenta valor praticamente nulo no instante de tempo inicial, uma vez que a representação Q do estado coerente $|z_i\rangle$ exhibe intensa localização em torno da posição $\sqrt{2} \operatorname{re}(z_i) = -3\sqrt{2}$.

Excetuando os instantes de tempo iniciais, observe que a aproximação clássico-estatística demonstra transmissão estritamente superior à solução quântica em todo o intervalo de propagação. De maneira complementar, podemos concluir que a dinâmica clássica sobre o espaço de fase simples não fornece uma descrição completa para os efeitos quânticos de reflexão por uma barreira Gaussiana.

Em contraste com os resultados do operador U_{sc} , note que a aproximação semiclássica no espaço duplicado exhibe transmissão consistente com os cálculos quânticos exatos na metade final do intervalo de propagação. Ou seja, as trajetórias tunelantes promovem mecanismos de reflexão ausentes no espaço de fase simples, os quais justificam os valores reduzidos da medida \mathcal{P}_t em comparação com as fórmulas (4.34) e (C.20).

A figura 5.9.a apresenta a projeção sobre o espaço de fase simples das soluções clássicas com

^vDevido à não-comutatividade dos operadores \hat{q} e \hat{p} , torna-se impossível a construção de uma distribuição de probabilidade conjunta para posição e momento linear dentro do contexto da mecânica quântica. Além disto, diferentemente da função de Wigner⁸⁸, a representação Q não resulta em distribuições marginais corretas nos subespaços de configuração e momento.

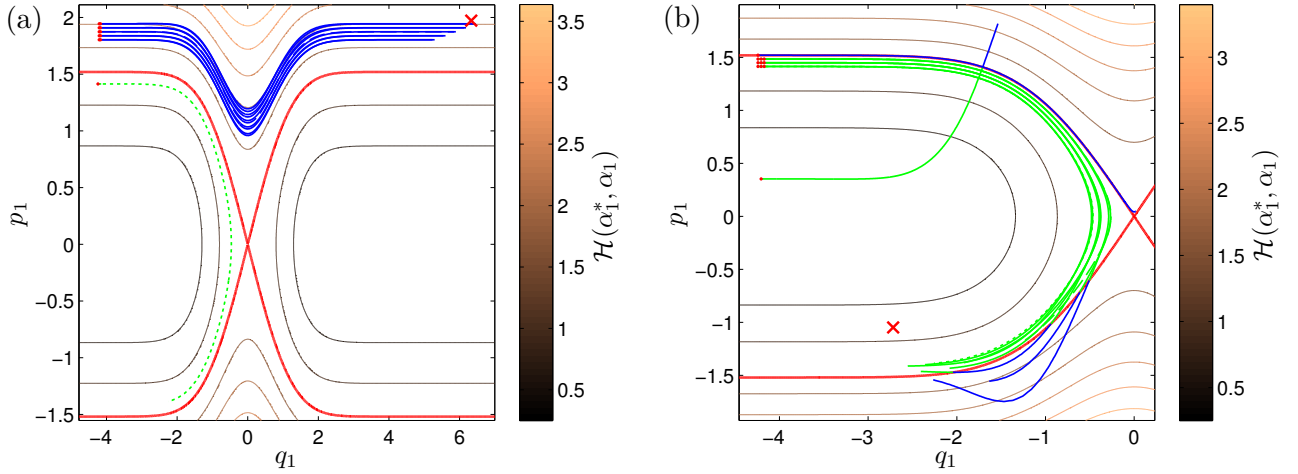


Figura 5.9: Projeção sobre o espaço de fase simples das trajetórias com maior contribuição ao cálculo da aproximação (4.9) nos pontos: (a) z_m^t e (b) z_m^r . As cruces vermelhas indicam a localização dos extremos da função $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ no instante de tempo $t = 6$. A curva tracejada simboliza a solução clássica com valor máximo da quantidade $|\mathcal{G}|$. Somente para comparação, a trajetória principal está representada pela linha pontilhada. Como descrição para a dinâmica clássica no subespaço $\alpha_2 = 0$, exibimos as curvas de contorno para a função Hamiltoniana $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1)$. A separatriz de movimento corresponde à linha vermelha com energia $\mathcal{H}(0, 0)$. Os segmentos azuis e verdes evidenciam a passagem das trajetórias por regiões dinamicamente isoladas em relação à propagação clássica. Os pontos vermelhos denotam as coordenadas iniciais das soluções clássicas.

os dez maiores valores da quantidade $|\mathcal{G}|$ para $z_f = z_m^t$ e $t_f = 6^{\text{vi}}$. Com o propósito de favorecer uma comparação direta entre as trajetórias dominantes e a dinâmica clássica no subespaço invariante $\alpha_2 = 0$, exibimos também as curvas de contorno para a Hamiltoniana $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1)$. A separatriz de movimento está simbolizada pela linha vermelha.

Com o auxílio da figura 5.3, perceba que a porção transmitida da aproximação (4.9) possui suas contribuições dominantes restritas à região (II) do espaço de fase simples. Como previsto, a transmissão pela barreira Gaussiana representa um efeito de origem clássica, uma vez que as trajetórias relevantes à propagação no espaço duplicado apresentam o mesmo comportamento das soluções clássicas utilizadas nas aproximações (B.20) e (C.20).

Na figura 5.9.b, mostramos as projeções sobre o subespaço $\alpha_2 = 0$ para as dez trajetórias com maior contribuição ao cálculo da fórmula (4.9) no ponto $z_f = z_m^r$, correspondente ao máximo local para a parte refletida da função Q no instante final do intervalo de propagação.

Como consequência intuitiva da aproximação semiclássica, observe que grande parte das soluções clássicas dominantes estão limitadas à região (I) do espaço de fase simples, na qual encontramos os aspectos característicos da reflexão pela barreira Gaussiana. Entretanto, em concordância com a definição 2, note também que algumas trajetórias exibem evidente comportamento não-clássico. Os cruzamentos da separatriz constituem uma nova evidência semiclás-

^{vi}As figuras 5.7 e 5.9 mostram projeções distintas para as mesmas trajetórias.

sica para a ocorrência de fenômenos inacessíveis em uma abordagem estritamente clássica, os quais demonstram significativa importância para a descrição precisa da reflexão quântica pelo potencial repulsivo.

5.3.3 Poço Gaussiano

O segundo exemplo para o tratamento semiclássico do Hamiltoniano (5.27) corresponde a um poço Gaussiano com parâmetros $\sigma = \frac{1}{4}$ e $V_0 = -5\sqrt{2\pi}\sigma^2$. Em analogia com a subseção anterior, com o intuito de representar a incidência de uma partícula sobre o lado esquerdo do potencial, utilizaremos o estado $|z_i\rangle = |-2 + i\rangle$ como condição inicial.

A avaliação numérica das fórmulas (4.9) e (4.34) foi realizada com 62777 trajetórias clássicas, considerando valores iniciais uniformemente distribuídos nos domínios de integração pertinentes a cada abordagem aproximativa. No caso da propagação semiclássica no espaço de fase duplicado, as soluções clássicas foram submetidas ao filtro heurístico (4.11) com parâmetro limitante $\lambda = 5$.

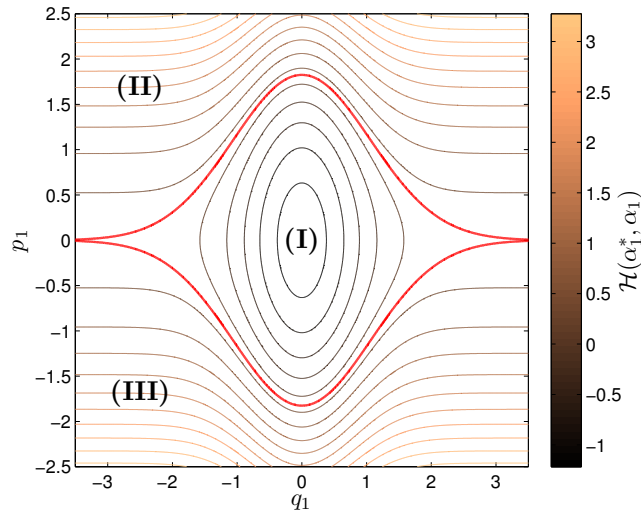


Figura 5.10: Curvas de contorno sobre o subespaço $\alpha_2 = 0$ para a Hamiltoniana clássica efetiva. A separatriz de movimento, simbolizada em vermelho, possui energia total equivalente ao termo cinético de ponto zero $\mathcal{T}(0, 0) = \frac{1}{4}$. Os numerais (I), (II) e (III) indicam as regiões dinamicamente isoladas da aproximação clássica.

Na figura 5.10, exibimos as curvas de contorno para a Hamiltoniana clássica efetiva no espaço de fase simples. A linha vermelha representa a separatriz de movimento, cuja energia total corresponde ao valor de ponto zero $\mathcal{T}(0, 0) = \frac{1}{4}$.

Note que as soluções clássicas apresentam dois comportamentos excludentes. Na região (I), para $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1) < \mathcal{T}(0, 0)$, as trajetórias estão confinadas ao interior do poço Gaussiano. Por outro lado, para $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1) > \mathcal{T}(0, 0)$, encontramos o regime dinâmico correspondente à transmissão da partícula pelo potencial atrativo. Nesta situação, as órbitas abertas estão presentes nas regiões (II) e (III) do subespaço invariante $\alpha_2 = 0$.

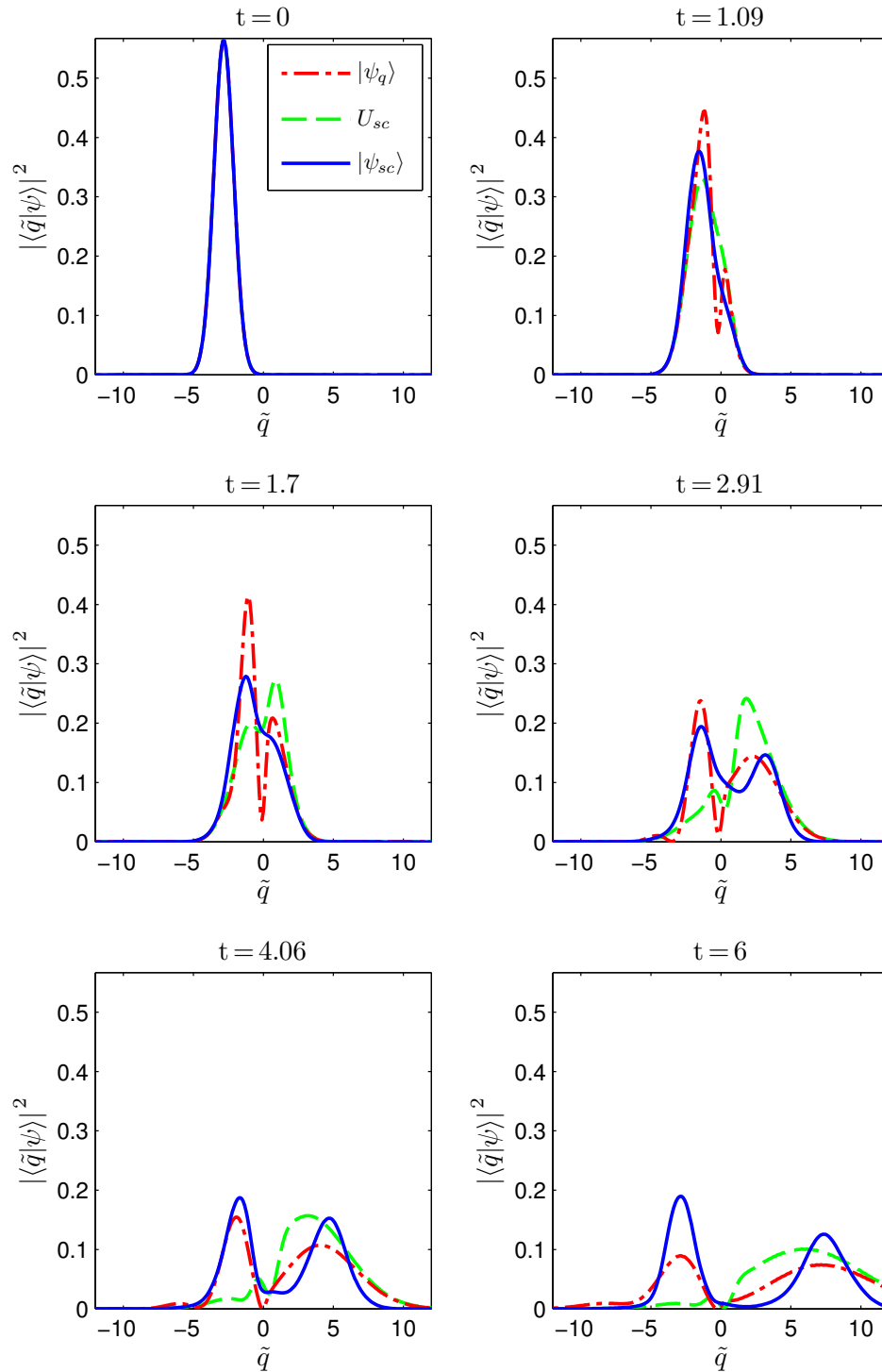


Figura 5.11: Evolução temporal para o valor absoluto ao quadrado da função de onda na representação de posição. Comparação entre a solução quântica exata (vermelho traço-pontilhado), o operador de evolução semiclassical (verde tracejado) e a propagação no espaço duplicado (azul sólido).

De acordo com a definição (4.20), a trajetória principal pertence à região (II) do espaço de fase simples, uma vez que $\mathcal{H}(z_i^*, z_i) > \mathcal{T}(0, 0)$ e $\text{im}(z_i) > 0$. Conseqüentemente, o propagador clássico (B.20) resulta na transmissão completa da partícula pelo poço Gaussiano.

A figura 5.11 mostra o módulo ao quadrado da função de onda na representação de posição para diversos instantes de tempo. Em $t = 0$, observamos uma descrição do estado coerente inicial $|z_i\rangle$. Como consequência da equação (5.21), a quantidade $|\langle \tilde{q} | z_i \rangle|^2$ corresponde a uma distribuição Gaussiana com média $\sqrt{2} \text{re}(z_i)$ e variância $\frac{1}{2}$.

No instante de tempo $t = 1.09$, note que a solução quântica apresenta algumas evidentes diferenças em relação às aproximações semiclássicas. Em particular, perceba que a função de onda exata exibe o princípio de uma cisão nas proximidades da posição $\tilde{q} = 0$. Para $t = 1.7$ e $t = 2.91$, observe que as abordagens semiclássicas também demonstram o início de um processo de divisão em duas porções espacialmente localizadas.

Os instantes de tempo $t = 4.06$ e $t = 6$ correspondem ao estágio final da interação entre a partícula e o potencial Gaussiano. Neste caso, note que os três tratamentos dinâmicos resultam na completa separação do pacote de onda em parte refletida ($\tilde{q} < 0$) e transmitida ($\tilde{q} > 0$). Entretanto, em comparação com os resultados $|\psi_q\rangle$ e $|\psi_{sc}\rangle$, torna-se nítido que o operador de evolução semiclássica apresenta valores demasiadamente baixos para o módulo ao quadrado da função de onda no intervalo $\tilde{q} < 0$. Ou seja, a aproximação (4.34) não possui a capacidade de reproduzir corretamente a reflexão quântica pelo poço Gaussiano, considerando as escolhas realizadas para o estado inicial e os parâmetros do Hamiltoniano.

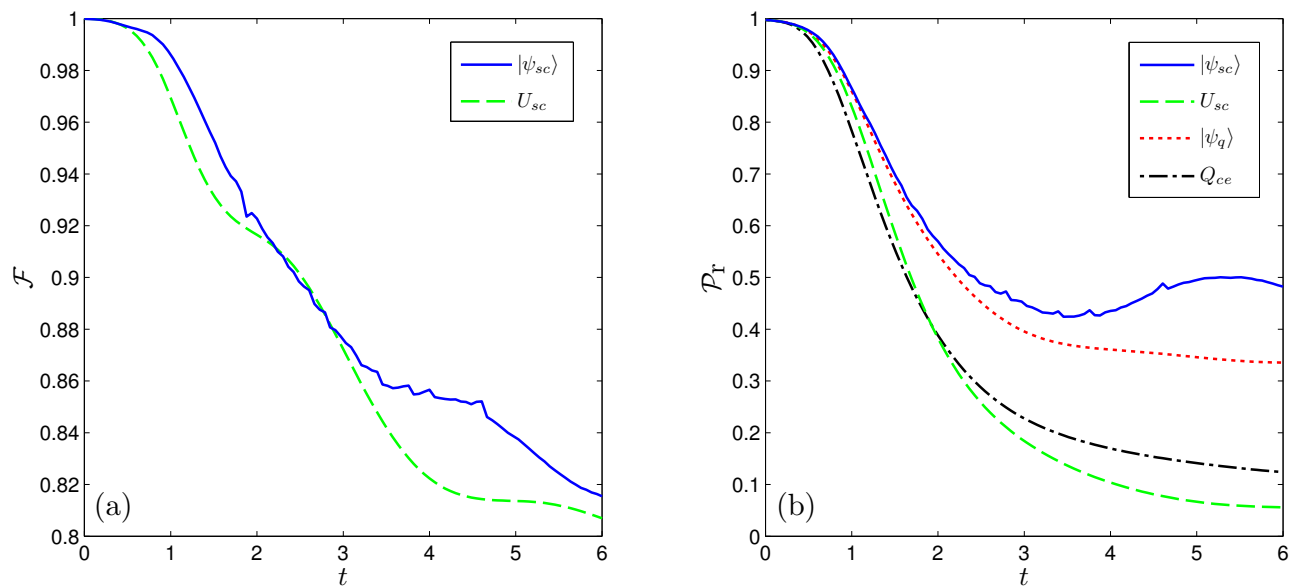


Figura 5.12: (a) Fidelidade das aproximações (4.9) e (4.34) em relação aos cálculos quânticos exatos. (b) Evolução temporal para a medida de transmissão. A função Q_{ce} representa a propagação clássico-estatística.

De maneira a promover uma avaliação quantitativa para a precisão dos resultados semiclássicos, a figura 5.12.a exibe a fidelidade entre a solução quântica e as abordagens aproximativas.

Como esperado, em grande parte do intervalo de propagação, a fórmula (4.9) fornece valores de $\mathcal{F}(t)$ razoavelmente superiores aos cálculos análogos para o operador U_{sc} .

Na metade final do período total de propagação, a superioridade da aproximação semiclássica no espaço duplicado representa uma clara consequência da inaptidão do operador (4.34) em descrever a reflexão pelo potencial atrativo. Deste modo, podemos inferir que a duplicação dos graus de liberdade clássicos possibilita a inclusão de correções quânticas indisponíveis sob a restrição $\alpha_2 = 0$. Com a finalidade de estabelecer novas evidências para a fundamentação das afirmações anteriores, introduzimos a *medida de reflexão*:

$$\mathcal{P}_r = \int_{q_1 < 0} \frac{d^2\alpha_1}{\pi} Q(\alpha_1^*, \alpha_1). \quad (5.36)$$

A função \mathcal{P}_r corresponde à fração da distribuição Q encontrada na região de reflexão da partícula pelo poço Gaussiano, em conformidade com os resultados apresentados pela figura 5.11. Contudo, nos instantes iniciais e intermediários do intervalo de propagação, os valores de \mathcal{P}_r devem exibir contribuições expressivas da porção incidente do pacote de onda. Consequentemente, apenas ao final do processo de espalhamento pelo potencial atrativo, podemos considerar a medida \mathcal{P}_r como uma quantificação exclusiva da reflexão.

A figura 5.12.b apresenta a evolução temporal da medida de reflexão para diversas abordagens dinâmicas. No instante de tempo inicial, observe que a quantidade \mathcal{P}_r apresenta seu valor máximo, uma vez que a distribuição Q do estado incidente $|z_i\rangle$ representa uma função fortemente localizada em torno da posição $\sqrt{2}z_i = -2\sqrt{2}$.

Note que, com a exceção do instante de tempo inicial, a propagação clássico-estatística resulta em valores de \mathcal{P}_r estritamente inferiores à solução quântica. Devido à variância não-nula da distribuição Q para o estado inicial $|z_i\rangle$, a aproximação (C.20) possui uma pequena parcela de contribuições clássicas significativas provenientes da região (III) do subespaço $\alpha_2 = 0$. Estas trajetórias com momento linear negativo constituem a única origem da reflexão clássico-estatística. Portanto, os valores relativamente elevados da medida \mathcal{P}_r no tratamento quântico exato devem decorrer parcialmente de efeitos dinâmicos inacessíveis às equações de movimento (5.1).

Como mostrado na figura 5.12.b, a reflexão resultante da propagação no espaço duplicado exibe valores ainda superiores aos cálculos quânticos, ao passo que o operador de evolução semiclássica apresenta comportamento semelhante à aproximação clássico-estatística. Desta forma, concluímos que as trajetórias no subespaço $\alpha_2 \neq 0$ representam um recurso semiclássico necessário para a descrição dos fenômenos quânticos associados com o incremento nos valores da medida \mathcal{P}_r em relação às abordagens dinâmicas sobre o espaço de fase simples.

Na figura 5.13, de modo semelhante à subseção anterior, apresentamos as curvas de contorno para a função $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ correspondente aos resultados da aproximação (4.9) no instante de tempo $t = 6$. Em concordância com a função de onda na representação de posição, observe que a distribuição Q está dividida em duas porções espacialmente localizadas, cujos valores máximos possuem coordenadas complexas $z_m^t \approx 5.22 + 1.09i$ e $z_m^r \approx -2.09 - 0.40i$.

A quantidade z_m^t corresponde à localização do valor extremo para a parte transmitida da aproximação semiclássica. Em contrapartida, a constante complexa z_m^r representa a coordenada do máximo local para a porção refletida da função Q .

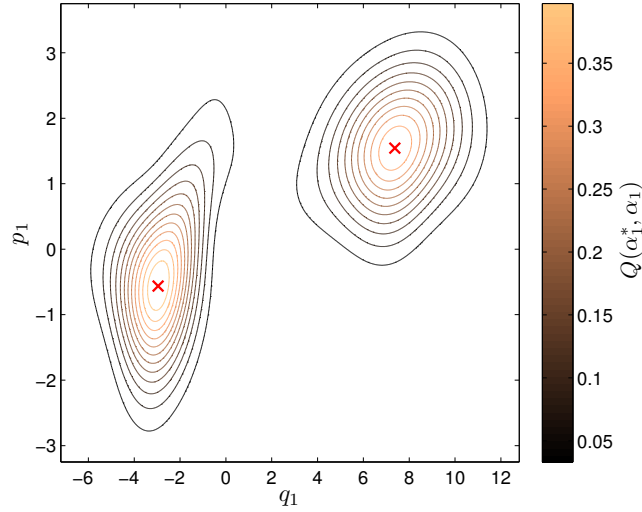


Figura 5.13: Representação $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ para a aproximação (4.9) no instante de tempo $t = 6$. As cruzes vermelhas simbolizam as coordenadas dos máximos locais, cujos valores complexos são $z_m^t \approx 5.22 + 1.09i$ e $z_m^r \approx -2.09 - 0.40i$.

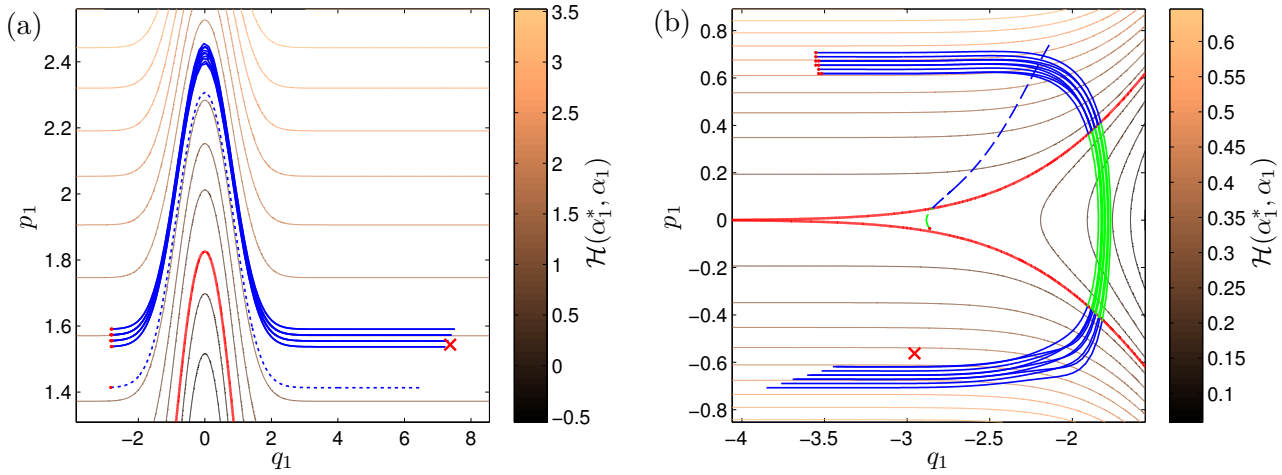


Figura 5.14: Projeção sobre o subespaço $\alpha_2 = 0$ das trajetórias com maior contribuição à avaliação da fórmula (4.9) nos pontos: (a) z_m^t e (b) z_m^r . Os extremos locais da distribuição $Q(\alpha_1^*, \alpha_1)$ no instante de tempo $t = 6$ estão indicados pelas cruzes vermelhas em seus respectivos gráficos. A curva tracejada simboliza a solução clássica com o valor máximo da quantidade $|\mathcal{G}|$. Apenas para comparação, a linha pontilhada descreve a trajetória principal. A dinâmica clássica no espaço de fase simples está representada pelas curvas de contorno para a função Hamiltoniana $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1)$. A linha vermelha corresponde à separatriz de movimento. Os segmentos azuis e verdes evidenciam a passagem das trajetórias por regiões dinamicamente isoladas em relação à propagação clássica. Os pontos vermelhos denotam as coordenadas iniciais das soluções clássicas.

A figura 5.14.a mostra as projeções sobre o espaço de fase simples das dez trajetórias com maior contribuição ao cálculo da aproximação (4.9) no ponto $z_f = z_m^t$ para o instante de tempo final $t_f = 6$. Em comparação com as soluções clássicas dominantes, exibimos também as curvas de contorno para a função Hamiltoniana $\mathcal{H}(\alpha_1^*, \alpha_1)$. Além disto, com a utilização de uma linha vermelha, destacamos novamente a localização da separatriz de movimento.

Observe que, de acordo com a nomenclatura introduzida pela figura 5.10, as projeções das trajetórias dominantes estão restritas à região (II) do espaço de fase simples. Portanto, durante o período de propagação considerado, as soluções clássicas responsáveis pela porção transmitida da aproximação semiclássica possuem comportamento totalmente compatível com dinâmica no subespaço invariante $\alpha_2 = 0$. Neste caso, torna-se evidente que a transmissão pelo poço Gaussiano corresponde a um fenômeno de procedência estritamente clássica, uma vez que a duplicação dos graus de liberdade não estabelece contribuições significativas com características ausentes na avaliação das fórmulas (B.20) e (C.20).

Na figura 5.14.b, exibimos as projeções sobre o subespaço $\alpha_2 = 0$ para as dez soluções clássicas com os maiores valores da quantidade $|\mathcal{G}|$ no ponto $z_f = z_m^r$. Com o auxílio da definição 2, note que todas as trajetórias dominantes apresentam comportamento não-clássico. Adicionalmente, perceba que grande parte destas contribuições descreve o percurso esperado para uma partícula sob reflexão. Ou seja, a porção refletida da aproximação (4.9) está fundamentada em efeitos dinâmicos completamente inexistentes na elaboração das abordagens (4.34), (B.20) e (C.20), as quais não demonstram a capacidade de reproduzir satisfatoriamente a magnitude dos valores observados para o fenômeno quântico de repulsão pelo poço Gaussiano.

Capítulo 6

Conclusão

No capítulo 2, realizamos uma revisão sucinta do conceito generalizado de estados coerentes. Neste contexto, ressaltamos diversos aspectos importantes na elaboração de métodos semiclássicos, como a utilização de uma parametrização analítica sobre o espaço complexo. Além disto, com a intenção de estabelecer uma clara conexão entre a fundamentação matemática e algumas situações usuais na mecânica quântica, apresentamos três exemplos de elevado interesse físico, designados por estados coerentes canônicos, de spin e de $SU(n)$.

O primeiro resultado importante de nosso trabalho está presente no capítulo 3, no qual elaboramos uma dedução detalhada do propagador semiclássico na representação de estados coerentes. Durante o desenvolvimento desta formulação generalizada para o elemento fundamental da teoria semiclássica, obtivemos várias expressões intermediárias com significativa relevância para a discussão da correspondência clássico-quântica em um espaço de fase com topologia arbitrária. Em particular, destacamos as equações de movimento (3.3), o funcional de ação (3.6), a integral de caminho (3.37) e as relações (3.46).

Como evidenciado no início do capítulo 4, o propagador semiclássico exhibe uma série de complicações técnicas, as quais dificultam substancialmente a aplicação direta da fórmula (3.2). Grande parte destes obstáculos decorre da imposição de condições de contorno sobre as equações clássicas de movimento, uma vez que a resolução conjunta das identidades (3.3) e (3.5) apresenta elevado custo computacional, especialmente em sistemas não-lineares e multidimensionais.

Com o objetivo de eliminar os problemas recorrentes na propagação semiclássica, introduzimos o conceito de representação a valores iniciais. Ou seja, desenvolvemos novas formulações semiclássicas determinadas exclusivamente por condições iniciais. Deste modo, adquirimos simplificações expressivas na construção de aplicações concretas para a teoria semiclássica.

Na seção 4.1, com a demonstração da fórmula (4.9), apresentamos o método de propagação semiclássica a valores iniciais no espaço de fase duplicado. Este resultado representa uma generalização para grupos dinâmicos arbitrários de uma aproximação semiclássica constituída apenas por trajetórias decorrentes de condições iniciais. Adicionalmente, a expressão (4.9) exhibe as características singulares introduzidas pela duplicação dos graus de liberdade clássicos.

Entretanto, como consequência adversa da dinâmica semiclássica sobre o espaço duplicado, a utilização correta da equação (4.9) está sujeita a elaboração de procedimentos eficientes para a remoção de trajetórias espúrias. Portanto, o filtro heurístico possui parcial responsabilidade

pelo êxito dos cálculos aproximativos mostrados nas subseções 4.1.4, 5.3.2 e 5.3.3, um vez que a desigualdade (4.11) demonstrou satisfatória competência na identificação das contribuições inadequadas à propagação semiclássica.

O operador de evolução semiclássica, discutido na seção 4.2, corresponde a uma segunda formulação a valores iniciais na representação de estados coerentes. No entanto, diferentemente do resultado (4.9), a integral (4.34) está definida em termos de trajetórias clássicas no espaço de fase simples.

Considerando um modelo simplificado para a dinâmica de um condensado de Bose-Einstein em um potencial de poço triplo, avaliamos a precisão das aproximações (4.9) e (4.34) em comparação com resultados quânticos exatos. Neste caso, utilizando os estados coerentes de $SU(2)$ e $SU(3)$, mostramos que as abordagens semiclássicas exibem elevada fidelidade em relação à solução quântica, mesmo para um número relativamente pequeno de partículas condensadas.

Ao final do capítulo 4, introduzimos uma terceira representação a valores iniciais, designada por propagador clássico corrigido. Este método aproximativo possui a trajetória principal como única contribuição clássica, em completa analogia com o tratamento dinâmico estabelecido pelo apêndice B. Como exemplificado na subseção 4.4.4, a fórmula (4.72) apresenta resultados com precisão consistentemente superior à abordagem clássica descrita pela expressão (B.20).

A aproximação no espaço de fase duplicado demonstra duas relevantes desvantagens em relação ao operador semiclássico de evolução temporal. Primeiramente, a duplicação dos graus de liberdade clássicos implica em um substancial aumento do custo computacional para a resolução das equações de movimento. Além disto, a ocorrência de trajetórias espúrias pode dificultar consideravelmente a realização da integral (4.9). Contudo, no capítulo 5, mostramos que a dinâmica semiclássica no espaço duplicado possui a capacidade de reproduzir fenômenos quânticos inacessíveis à fórmula (4.34).

Como primeiro passo na discussão das soluções clássicas subjacentes à expressão (4.9), reescrevemos as equações de movimento sobre o espaço duplicado em função de variáveis canônicas, considerando apenas o caso específico dos estados coerentes (2.31). Desta forma, identificamos a quantidade $\alpha_1(t)$ como a projeção de uma trajetória clássica arbitrária sobre o espaço de fase simples.

Em seguida, restringindo nosso interesse aos operadores Hamiltonianos com o formato indicado pelas equações (5.16) e (5.17), demonstramos que a energia cinética clássica sobre o espaço de fase duplicado não está limitada inferiormente. Como consequência desta propriedade, definimos o conceito de trajetória tunelante.

Na subseção 5.3.2, verificamos que as soluções clássicas tunelantes produzem importantes contribuições à descrição semiclássica da interação entre uma partícula e uma barreira Gaussiana. Entretanto, observamos também que o tunelamento não possui participação direta na transmissão do pacote de onda pelo potencial repulsivo, considerando a escolha realizada para a condição inicial e os parâmetros do Hamiltoniano.

De acordo com os argumentos da subseção 5.2.2, as trajetórias no espaço duplicado podem exibir propriedades dinâmicas completamente incompatíveis com as soluções clássicas confinadas ao subespaço invariante $\alpha_2 = 0$. Em particular, as projeções $\alpha_1(t)$ podem apresentar intersecções com as separatrizes de movimento contidas no espaço de fase simples. Esta característica constitui a definição operacional de comportamento não-clássico.

Como mostrado na subseção 5.3.3, as trajetórias com comportamento não-clássico possibilitam uma descrição consistente para o efeito quântico de reflexão por um poço Gaussiano. Por outro lado, as abordagens aproximativas fundamentadas sobre o subespaço $\alpha_2 = 0$ não possuem a capacidade de reproduzir adequadamente a repulsão parcial do pacote de onda pelo potencial atrativo.

Apêndice A

Definições Matriciais

Neste apêndice, apresentamos algumas definições relevantes à dinâmica de pequenos deslocamentos em torno de uma trajetória clássica. Em geral, as matrizes apresentadas neste contexto constituem elementos importantes na construção de fórmulas semiclássicas.

Primeiramente, realizando a linearização das identidades (3.3), encontramos as equações de movimento para os *desvios clássicos*:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} \delta \dot{z}(t) \\ \delta \dot{\bar{z}}(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{z}}{\partial z} & \frac{\partial \dot{z}}{\partial \bar{z}} \\ \frac{\partial \dot{\bar{z}}}{\partial z} & \frac{\partial \dot{\bar{z}}}{\partial \bar{z}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z(t) \\ \delta \bar{z}(t) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \right] & -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\xi^T(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \right] \\ \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial z} \left[\xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \right] & \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left[\xi(\bar{z}, z) \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{z}, z)}{\partial z} \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z(t) \\ \delta \bar{z}(t) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} R_{11}(t) & R_{12}(t) \\ R_{21}(t) & R_{22}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z(t) \\ \delta \bar{z}(t) \end{pmatrix} = \mathbb{R}(t) \begin{pmatrix} \delta z(t) \\ \delta \bar{z}(t) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Equivalentemente, poderíamos ter obtido o resultado anterior com a extremização do funcional $\delta^2 S$, considerando especificamente a expressão descrita pela identidade (3.61). Portanto, as variáveis $\delta \bar{z}(t)$ e $\delta z(t)$ representam as trajetórias extremas correspondentes às variações arbitrárias $\bar{\eta}(t)$ e $\eta(t)$.

Em seguida, definimos a matriz tangente $\mathbb{M}(t_f, t_i)$ como a transformação linear entre os desvios clássicos calculados nos instantes de tempo inicial e final:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} \delta z(t_f) \\ \delta \bar{z}(t_f) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} M_{11}(t_f, t_i) & M_{12}(t_f, t_i) \\ M_{21}(t_f, t_i) & M_{22}(t_f, t_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z(t_i) \\ \delta \bar{z}(t_i) \end{pmatrix} = \mathbb{M}(t_f, t_i) \begin{pmatrix} \delta z(t_i) \\ \delta \bar{z}(t_i) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial z(t_i)} & \frac{\partial \bar{z}(t_f)}{\partial \bar{z}(t_i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z(t_i) \\ \delta \bar{z}(t_i) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Alternativamente, podemos obter a matriz tangente como solução de um sistema de equações diferenciais sujeito a condições iniciais. Com este intuito, escolhendo $t = t_f$, substituímos a expressão (A.2) em ambos os lados da identidade (A.1):

$$\frac{d\mathbb{M}(t_f, t_i)}{dt_f} = \mathbb{R}(t_f)\mathbb{M}(t_f, t_i). \quad (\text{A.3})$$

Note que o vetor de variações clássicas iniciais foi eliminado durante a formulação desta última equação. Agora, reescrevendo a definição (A.2) para o caso particular $t_f = t_i$, encontramos as condições iniciais necessárias para a determinação de \mathbb{M} :

$$\mathbb{M}(t_i, t_i) = \mathbb{1}. \quad (\text{A.4})$$

Contudo, devemos lembrar que a matriz \mathbb{R} é calculada sobre uma trajetória clássica, a qual resulta geralmente da imposição de valores iniciais ou condições de contorno sobre as identidades (3.3). Portanto, embora a equação de movimento para a matriz tangente esteja explicitamente determinada por uma condição inicial, o cálculo correspondente de \mathbb{R} pode depender implicitamente de valores temporais mistos.

Em geral, os resultados fundamentados em trajetórias clássicas sujeitas a condições de contorno, como o propagador semiclássico, são compostos por quantidades com dependência funcional nas variáveis $\bar{z}(t_f)$ e $z(t_i)$. Neste caso, torna-se conveniente a definição de uma terceira matriz, que relaciona as variações nos extremos independentes da trajetória com os desvios clássicos referentes às extremidades restantes:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \delta z(t_f) \\ \delta \bar{z}(t_i) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} T_{11}(t_f, t_i) & T_{12}(t_f, t_i) \\ T_{21}(t_f, t_i) & T_{22}(t_f, t_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} = \mathbb{T}(t_f, t_i) \begin{pmatrix} \delta \bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial \bar{z}(t_f)} & \frac{\partial \bar{z}(t_i)}{\partial z(t_i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \bar{z}(t_f) \\ \delta z(t_i) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

No entanto, em formulações determinadas por valores iniciais, as variáveis independentes relevantes são $\bar{z}(t_i)$ e $z(t_i)$. Logo, em diversas situações usualmente associadas a uma transformação do caráter funcional de uma grandeza clássica, precisamos reformular as derivadas constituintes de \mathbb{T} em termos dos blocos de matriz \mathbb{M} . Com este propósito, reescrevemos a expressão (A.2) da seguinte maneira:

$$\delta z(t_f) = M_{11}\delta z(t_i) + M_{12}\delta \bar{z}(t_i), \quad (\text{A.6a})$$

$$\delta \bar{z}(t_f) = M_{21}\delta z(t_i) + M_{22}\delta \bar{z}(t_i). \quad (\text{A.6b})$$

Então, supondo que o bloco M_{22} é invertível, reorganizamos os desvios clássicos no formato indicado pela identidade (A.5):

$$\delta z(t_f) = M_{12}M_{22}^{-1}\delta \bar{z}(t_f) + (M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21})\delta z(t_i), \quad (\text{A.7a})$$

$$\delta \bar{z}(t_i) = M_{22}^{-1}\delta \bar{z}(t_f) - M_{22}^{-1}M_{21}\delta z(t_i). \quad (\text{A.7b})$$

Deste modo, as relações entre as matrizes \mathbb{T} e \mathbb{M} tornam-se evidentes:

$$T_{11} = M_{12}M_{22}^{-1}, \quad (\text{A.8a})$$

$$T_{12} = M_{11} - M_{12}M_{22}^{-1}M_{21}, \quad (\text{A.8b})$$

$$T_{21} = M_{22}^{-1}, \quad (\text{A.8c})$$

$$T_{22} = -M_{22}^{-1}M_{21}. \quad (\text{A.8d})$$

Por fim, observe que as definições apresentadas neste apêndice para as matrizes \mathbb{R} , \mathbb{M} e \mathbb{T} estão descritas em notação apropriada ao espaço de fase duplicado. Entretanto, as expressões análogas para o espaço de fase simples correspondem a uma imediata particularização das equações (A.1), (A.2) e (A.5) sob a restrição $\bar{z}(t) = z^*(t)$.

Apêndice B

Propagação Clássica

A *propagação clássica* representa uma aproximação elementar da dinâmica quântica, na qual a evolução do sistema é reformulada em termos de uma única trajetória clássica sob condições iniciais. Apesar de sua extrema simplicidade, este método apresenta resultados precisos em diversas situações fisicamente relevantes. Em particular, a aproximação clássica coincide exatamente com a mecânica quântica no limite identificado pela seguinte expressão:

$$\hbar \rightarrow 0. \tag{B.1}$$

De maneira rigorosa, o limite anterior exprime um abuso de linguagem, uma vez que \hbar simboliza uma constante fundamental da natureza, cujo valor permanece sempre finito. Contudo, interpretando \hbar como uma escala de ação, podemos compreender o verdadeiro significado físico da propagação clássica. Ou seja, o *limite clássico* corresponde ao regime em que a ação clássica exibe valores infinitamente superiores à referência estabelecida pela constante de Planck:

$$\frac{|S|}{\hbar} \rightarrow \infty. \tag{B.2}$$

De acordo com a teoria de estados coerentes, vários grupos dinâmicos possuem naturalmente um *parâmetro de classicalidade*⁹⁰, o qual indica explicitamente a motivação física subjacente à expressão (B.2). Por exemplo, diversos sistemas quânticos apresentam comportamento clássico para elevado número total de partículas N . Neste caso, o limite clássico equivale ao *regime macroscópico*¹⁰⁴:

$$N \rightarrow \infty. \tag{B.3}$$

Observe que os estados coerentes de $SU(n)$, introduzidos na subseção (2.2.3), estão associados à uma ampla classe de Hamiltonianos com limite clássico determinado pela prescrição (B.3).

No presente apêndice, apresentaremos uma simples dedução do propagador clássico, baseada na aplicação do princípio variacional sobre o funcional de ação (3.6a). O método aproximativo resultante desta demonstração é utilizado no capítulo 4, como um critério de avaliação para as implementações da teoria semiclássica.

A partir da definição (3.6b), apropriada ao espaço de fase duplicado, podemos reescrever a Lagrangiana em função dos estados coerentes não-normalizados:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}L(\dot{\bar{z}}, \dot{z}, \bar{z}, z; t) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{\partial f(\bar{z}, z)}{\partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\bar{z}, z) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial \ln\{\bar{z}^*|z\}}{\partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \ln\{\bar{z}^*|z\}}{\partial z} \dot{z} - \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{\{\bar{z}^*|z\}} \left[\frac{\partial\{\bar{z}^*|z\}}{\partial \bar{z}} \dot{\bar{z}} - \{\bar{z}^*| \frac{\partial|z\}}{\partial z} \dot{z} \right] - \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \\
&= \frac{1}{2} \frac{\{\dot{\bar{z}}^*|z\} - \{\bar{z}^*|\dot{z}\}}{\{\bar{z}^*|z\}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \\
&= \frac{i}{\hbar} L(\{\dot{\bar{z}}^*|, |\dot{z}\}, \{\bar{z}^*|, |z\}; t).
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Então, substituindo a equação anterior na identidade (3.6a), encontramos uma nova expressão para o funcional de ação:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}S(\bar{z}(t_f), z(t_i); t_f, t_i) &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(\{\dot{\bar{z}}^*|, |\dot{z}\}, \{\bar{z}^*|, |z\}; t) dt \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \Gamma(\{\bar{z}^*(t_f)|, |z(t_f)\}, \{\bar{z}^*(t_i)|, |z(t_i)\}) \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} \frac{\{\dot{\bar{z}}^*|z\} - \{\bar{z}^*|\dot{z}\}}{\{\bar{z}^*|z\}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \right] dt \\
&\quad + \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_f)|z(t_f)\} + \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_i)|z(t_i)\}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Analogamente à subseção 3.2.2, a extremização do funcional de ação deve resultar nas equações clássicas de movimento. Com o intuito de compreender aspectos adicionais da teoria, repetimos estes cálculos na notação introduzida pela expressão (B.5):

$$\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial L}{\partial |z\}} \delta|z\} + \frac{\partial L}{\partial |\dot{z}\}} \delta|\dot{z}\} + \delta\{\bar{z}^*| \frac{\partial L}{\partial \{\bar{z}^*|}} + \delta\{\dot{\bar{z}}^*| \frac{\partial L}{\partial \{\dot{\bar{z}}^*|}} \right] dt \\
&\quad + \delta\{\bar{z}^*(t_i)| \frac{\partial \Gamma}{\partial \{\bar{z}^*(t_i)|}} + \frac{\partial \Gamma}{\partial |z(t_f)\}} \delta|z(t_f)\} \\
&= \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \left[\frac{\partial L}{\partial |z\}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial |\dot{z}\}} \right) \right] \delta|z\} + \delta\{\bar{z}^*| \left[\frac{\partial L}{\partial \{\bar{z}^*|}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \{\dot{\bar{z}}^*|}} \right) \right] \right\} dt \\
&\quad + \left[\frac{\partial L}{\partial |\dot{z}\}} \delta|z\} \right]_{t_i}^{t_f} + \left[\delta\{\bar{z}^*| \frac{\partial L}{\partial \{\dot{\bar{z}}^*|}} \right]_{t_i}^{t_f} + \delta\{\bar{z}^*(t_i)| \frac{\partial \Gamma}{\partial \{\bar{z}^*(t_i)|}} + \frac{\partial \Gamma}{\partial |z(t_f)\}} \delta|z(t_f)\}.
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Note que, diferentemente da equação (3.41), não consideramos variações sobre o intervalo de tempo. Além disto, em concordância com as condições temporais mistas (3.5), a extremização de S está sujeita às seguintes restrições:

$$\delta|z(t_i)\rangle = 0, \quad (\text{B.7a})$$

$$\delta\{\bar{z}^*(t_f)| = 0. \quad (\text{B.7b})$$

Observe que nenhuma condição é imposta sobre os estados $\{\bar{z}^*(t_i)|$ e $|z(t_f)\rangle$. Empregando a equação (B.4), calculamos as derivadas da Lagrangiana indicadas pela equação (B.6):

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial |z\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\{\dot{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle} - \frac{1}{2} \frac{(\{\dot{z}^*|z\rangle - \{\bar{z}^*|\dot{z}\})\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H}{\{\bar{z}^*|z\rangle} + \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\rangle\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2}, \quad (\text{B.8a})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial \{\bar{z}^*|} = -\frac{1}{2} \frac{|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle} - \frac{1}{2} \frac{(\{\dot{z}^*|z\rangle - \{\bar{z}^*|\dot{z}\})|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{H|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle} + \frac{i}{\hbar} \frac{\{\bar{z}^*|H|z\rangle|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2}, \quad (\text{B.8b})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial \{\dot{z}^*|} = \frac{1}{2} \frac{|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle}, \quad (\text{B.8c})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \{\dot{z}^*|} \right) = \frac{1}{2} \frac{|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle} - \frac{1}{2} \frac{(\{\dot{z}^*|z\rangle + \{\bar{z}^*|\dot{z}\})|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2}, \quad (\text{B.8d})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial L}{\partial |z\rangle} = -\frac{1}{2} \frac{\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle}, \quad (\text{B.8e})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial |z\rangle} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\{\dot{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle} + \frac{1}{2} \frac{(\{\dot{z}^*|z\rangle + \{\bar{z}^*|\dot{z}\})\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle^2}. \quad (\text{B.8f})$$

Em seguida, determinamos as derivadas necessárias do termo de contorno:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial \{\bar{z}^*(t_i)|} = \frac{1}{2} \frac{|z(t_i)\rangle}{\{\bar{z}^*(t_i)|z(t_i)\rangle}, \quad (\text{B.9a})$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Gamma}{\partial |z(t_f)\rangle} = \frac{1}{2} \frac{\{\bar{z}^*(t_f)|}{\{\bar{z}^*(t_f)|z(t_f)\rangle}. \quad (\text{B.9b})$$

Inserindo as expressões (B.7-B.9) na equação (B.6), reescrevemos a primeira variação do funcional de ação:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \left[\{\dot{z}^*| - \frac{i}{\hbar} \{\bar{z}^*|H - \frac{\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle} \left(\{\dot{z}^*|z\rangle - \frac{i}{\hbar} \{\bar{z}^*|H|z\rangle \right) \right] \frac{\delta|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\delta\{\bar{z}^*|}{\{\bar{z}^*|z\rangle} \left[-|z\rangle - \frac{i}{\hbar} H|z\rangle + \left(\{\bar{z}^*|\dot{z}\rangle + \frac{i}{\hbar} \{\bar{z}^*|H|z\rangle \right) \frac{|z\rangle}{\{\bar{z}^*|z\rangle} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Nesta última identidade, perceba que os termos de superfície resultantes da integração por partes são cancelados naturalmente pelas quantidades provenientes da função Γ . Sob a suposição de variações independentes em $\{\bar{z}^*(t)|$ e $|z(t)\}$, a condição $\delta S = 0$ implica nas seguintes equações clássicas de movimento:

$$|\dot{z}\rangle = -\frac{i}{\hbar}H|z\rangle + \left(\frac{\{\bar{z}^*|\dot{z}\} + \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \right) |z\rangle, \quad (\text{B.11a})$$

$$\{\dot{\bar{z}}^*| = \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*|H + \left(\frac{\{\dot{\bar{z}}^*|z\} - \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*|H|z\}}{\{\bar{z}^*|z\}} \right) \{\bar{z}^*|. \quad (\text{B.11b})$$

Embora os resultados anteriores possuam um aspecto relativamente complicado, podemos simplificá-los sob uma transformação conveniente das variáveis dinâmicas:

$$|z(t)\rangle = \exp \left[\int_{t_i}^t \frac{\{\bar{z}^*(t')|\dot{z}(t')\} + \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*(t')|H|z(t')\}}{\{\bar{z}^*(t')|z(t')\}} dt' \right] \{\bar{z}^*(t_i)|z(t_i)\}^{\frac{1}{2}} |\psi_c(t)\rangle, \quad (\text{B.12a})$$

$$\{\bar{z}^*(t)| = \exp \left[- \int_t^{t_f} \frac{\{\dot{\bar{z}}^*(t')|z(t')\} - \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*(t')|H|z(t')\}}{\{\bar{z}^*(t')|z(t')\}} dt' \right] \{\bar{z}^*(t_f)|z(t_f)\}^{\frac{1}{2}} \langle \phi_c(t)|. \quad (\text{B.12b})$$

Aplicando a definição dos estados $|\psi_c(t)\rangle$ e $\langle \phi_c(t)|$, reformulamos as equações (B.11):

$$|\dot{\psi}_c\rangle = -\frac{i}{\hbar}H|\psi_c\rangle, \quad (\text{B.13a})$$

$$\langle \dot{\phi}_c| = \frac{i}{\hbar}\langle \phi_c|H. \quad (\text{B.13b})$$

Portanto, sob uma simples mudança de fase global e normalização, as equações clássicas de movimento adquirem forma idêntica à equação de Schrödinger. No entanto, as expressões (B.13) geralmente não possuem significado coincidente com as identidades análogas encontradas no contexto quântico usual, uma vez que o espaço acessível à dinâmica dos estados $|\psi_c\rangle$ e $\langle \phi_c|$ pode diferir consideravelmente do espaço de Hilbert \mathbb{H}_l , introduzido na seção 2.1.

De maneira geral, o espaço de estados parametrizado pelos vetores complexos z e \bar{z} representa um subconjunto não-linear do espaço \mathbb{H}_l . Ou seja, os estados coerentes (2.17) constituem apenas uma fração dos estados quânticos disponíveis à evolução temporal do sistema físico.

Como consequência direta das transformações (B.12), a restrição espacial dos estados $|z\rangle$ e $\{\bar{z}^*|$ é completamente transferida para as identidades (B.13). Apesar desta limitação fundamental, podemos interpretar as quantidades $|\psi_c\rangle$ e $\langle \phi_c|$ como soluções aproximadas para a equação de Schrödinger. Com o objetivo de facilitar a comparação destes resultados com as fórmulas desenvolvidas no capítulo 4, reescrevemos os expoentes das expressões (B.12) em função de

grandezas clássicas familiares:

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^t \frac{\{\bar{z}^*(t')|\dot{z}(t')\} + \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*(t')|H|z(t')\}}{\{\bar{z}^*(t')|z(t')\}} dt' &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t L(\dot{\bar{z}}, \dot{z}, \bar{z}, z; t') dt' \\ &+ \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\} - \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_i)|z(t_i)\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} S(\bar{z}(t), z(t_i); t, t_i) + \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\}, \end{aligned} \quad (\text{B.14a})$$

$$\begin{aligned} -\int_t^{t_f} \frac{\{\dot{\bar{z}}^*(t')|z(t')\} - \frac{i}{\hbar}\{\bar{z}^*(t')|H|z(t')\}}{\{\bar{z}^*(t')|z(t')\}} dt' &= -\frac{i}{\hbar} \int_t^{t_f} L(\dot{\bar{z}}, \dot{z}, \bar{z}, z; t') dt' \\ &- \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_f)|z(t_f)\} + \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} S(\bar{z}(t_f), z(t); t_f, t) + \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\}. \end{aligned} \quad (\text{B.14b})$$

Com o auxílio das identidades anteriores, descrevemos as soluções quânticas aproximadas em termos dos estados coerentes não-normalizados:

$$|\psi_c(t)\rangle = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{z}(t), z(t_i); t, t_i) - \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\} - \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_i)|z(t_i)\} \right] |z(t)\rangle, \quad (\text{B.15a})$$

$$\langle\phi_c(t)| = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{z}(t_f), z(t); t_f, t) - \ln\{\bar{z}^*(t)|z(t)\} - \frac{1}{2} \ln\{\bar{z}^*(t_f)|z(t_f)\} \right] \{\bar{z}^*(t)|. \quad (\text{B.15b})$$

Observe que, devido ao acoplamento entre as equações diferenciais (B.11a) e (B.11b), os estados $|\psi_c(t)\rangle$ e $\langle\phi_c(t)|$ estão indiretamente determinados por condições de contorno. Em notação apropriada aos desenvolvimentos do presente apêndice, as identidades (3.5) recebem a seguinte descrição:

$$|z(t_i)\rangle = |z_i\rangle, \quad (\text{B.16a})$$

$$\{\bar{z}^*(t_f)| = \{z_f|. \quad (\text{B.16b})$$

Neste momento, visando uma formulação definitiva para a propagação clássica, precisamos eliminar a ambiguidade na escolha de um estado para o sistema, uma vez que a simples aplicação do princípio variacional não estabelece qualquer distinção física entre $|\psi_c\rangle$ e $\langle\phi_c|$. Com o propósito de remover esta indeterminação, podemos realizar a restrição das trajetórias clássicas ao espaço de fase simples:

$$\bar{z}(t) = z^*(t). \quad (\text{B.17})$$

Como discutido no capítulo 3, as condições (B.16) e (B.17) são geralmente conflitantes na construção do propagador semiclássico. Contudo, no contexto da aproximação clássica, podemos elaborar uma interpretação totalmente distinta para a imposição de valores temporalmente mistos.

Diferentemente do elemento matricial (3.1), a evolução de um estado quântico exige a especificação de condições sobre um único instante de tempo. Portanto, durante o cálculo das expressões (B.15), apenas uma entre as equações (B.16) torna-se necessária na determinação da trajetória clássica, enquanto a outra possui valor automaticamente estabelecido pela identidade (B.17).

Considerando a restrição ao espaço de fase simples, as equações (B.11a) e (B.11b) tornam-se estritamente equivalentes, exceto por uma evidente operação de conjugação Hermitiana. Consequentemente, as identidades (B.13) adquirem também conteúdo físico redundante. Deste modo, o estado físico correspondente à aproximação clássica possui escolha inequívoca.

Entretanto, mesmo sob a condição (B.17), as expressões (B.15a) e (B.15b) não estão relacionadas simplesmente por uma conjugação. As diferenças entre estas duas equações foram intencionalmente introduzidas nas transformações (B.12), de maneira que o estado $|\psi_c(t)\rangle$ exibisse características adequadas para uma propagação a valores iniciais, ao passo que $\langle\phi_c(t)|$ apresentasse propriedades análogas em relação a valores finais.

Com a intenção de enfatizar a funcionalidade de cada fórmula, reescrevemos os resultados (B.15) em notação apropriada ao espaço de fase simples:

$$|\psi_c(t)\rangle = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(z^*(t), z(t_i); t, t_i) + \Lambda(z^*(t), z(t_i)) \right] |z(t)\rangle, \quad (\text{B.18a})$$

$$\langle\phi_c(t)| = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(z^*(t_f), z(t); t_f, t) + \Lambda(z^*(t_f), z(t)) \right] \langle z(t)|. \quad (\text{B.18b})$$

De forma semelhante às identidades anteriores, podemos aplicar a restrição (B.17) sobre as equações de movimento (B.11):

$$|\dot{z}\rangle = -\frac{i}{\hbar} H|z\rangle + \left(\frac{\{z|\dot{z}\} + \frac{i}{\hbar}\{z|H|z\}}{\{z|z\}} \right) |z\rangle, \quad (\text{B.19a})$$

$$\{\dot{z}| = \frac{i}{\hbar}\{z|H + \left(\frac{\{\dot{z}|z\} - \frac{i}{\hbar}\{z|H|z\}}{\{z|z\}} \right) \{z|. \quad (\text{B.19b})$$

Devemos ressaltar que a resolução destas últimas equações está condicionada a uma escolha entre dois procedimentos completamente excludentes. Se optarmos pelo cálculo da expressão (B.18a) como aproximação clássica, então as identidades (B.19) estão sujeitas exclusivamente aos valores iniciais (B.16a). No entanto, para a construção da fórmula (B.18b), precisamos encontrar a solução clássica determinada somente pelos valores finais (B.16b).

Finalmente, objetivando uma comparação direta entre a equação (B.18a) e os resultados da seção 4.4, definimos o *propagador clássico*:

$$\begin{aligned} K_c(z_f^*, z_i; t_f, t_i) &= \langle z_f | \psi_c(t_f) \rangle \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(z^*(t_f), z(t_i); t_f, t_i) + \Lambda(z^*(t_f), z(t_i)) \right] \langle z_f | z(t_f) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

De acordo com os argumentos apresentados anteriormente, a única trajetória constituinte de K_c está inequivocamente especificada pela condição inicial $z(t_i) = z_i$. Logo, a solução clássica

$z(t)$ não depende do valor selecionado para o parâmetro z_f . Note que o estado $\langle z_f |$, introduzido apenas para os propósitos comparativos da identidade (B.20), não possui relação com a expressão (B.16b), pois a quantidade $\bar{z}^*(t_f) = z(t_f)$ não representa uma variável independente na avaliação de $|\psi_c(t_f)\rangle$.

Como conclusão à análise da aproximação clássica, indicamos as três situações de equivalência entre o propagador K_c e a solução quântica exata:

1. Sob a aplicação do limite (B.2), a aproximação (B.20) descreve corretamente a dinâmica quântica decorrente de um estado coerente inicial^{51;90}.
2. Para escolhas específicas do grupo dinâmico, a parametrização (2.17) pode cobrir completamente o espaço de Hilbert, exceto pela arbitrariedade na fase global e normalização. Neste caso, a identidade (B.18a) simboliza precisamente uma solução formal para a equação de Schrödinger. Como exemplo, observe que podemos representar qualquer estado em um espaço n -dimensional no formato indicado pela equação (2.56), considerando $N = 1$.
3. De acordo com o mapa exponencial (2.1), os Hamiltonianos pertencentes à álgebra \mathfrak{g} correspondem a operadores de evolução temporal contidos em G . Portanto, aplicando a propriedade de clausura do grupo dinâmico sobre a definição (2.10), concluímos que os Hamiltonianos lineares nos elementos da álgebra produzem apenas deslocamentos dentro do conjunto de estados coerentes, excluindo novamente uma possível diferença de fase global e normalização. Ou seja, para $H \in \mathfrak{g}$, a dinâmica quântica de um estado coerente inicial torna-se restrita ao subespaço parametrizado pela expressão (2.17).

Apêndice C

Propagação Clássico-Estatística

C.1 Conservação de Volumes em Sistemas Hamiltonianos

Por definição, as operações do espaço quociente G/S não produzem alterações sobre o valor da medida de integração (2.22)⁵¹. Nesta seção, demonstraremos que $d\mu(z^*, z)$ também permanece invariante sob as transformações impostas pela dinâmica clássica.

Considere que, no instante de tempo t_f , uma trajetória clássica no espaço de fase simples está descrita pelas variáveis $z^*(t_f)$ e $z(t_f)$. De maneira geral, podemos interpretar as quantidades $z^*(t_f)$ e $z(t_f)$ como funções de suas condições iniciais no instante t_i :

$$z(t_f) = z(z^*(t_i), z(t_i); t_f), \quad (\text{C.1a})$$

$$z^*(t_f) = z^*(z^*(t_i), z(t_i); t_f). \quad (\text{C.1b})$$

As equações anteriores constituem uma relação entre dois conjuntos distintos de variáveis dinâmicas. Ou seja, analogamente aos vetores $z^*(t_f)$ e $z(t_f)$, os parâmetros $z^*(t_i)$ e $z(t_i)$ também representam soluções das equações clássicas de movimento. Portanto, podemos escrever identidades matriciais com formato idêntico para ambas as descrições da trajetória clássica:

$$\begin{pmatrix} \frac{dz(t_i)}{dt_i} \\ \frac{dz^*(t_i)}{dt_i} \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_i), z(t_i)) \\ \xi(z^*(t_i), z(t_i)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z^*(t_i)} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.2a})$$

$$\begin{pmatrix} \frac{dz(t_f)}{dt_f} \\ \frac{dz^*(t_f)}{dt_f} \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_f), z(t_f)) \\ \xi(z^*(t_f), z(t_f)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2b})$$

Observe que a Hamiltoniana clássica \mathcal{H} pode possuir dependência temporal explícita. As identidades (C.1) possibilitam a construção de uma matriz Jacobiana para a transformação entre os dois conjuntos de variáveis:

$$\mathbb{M}(t_f, t_i) = \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} & \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_i)} \\ \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z(t_i)} & \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z^*(t_i)} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.3})$$

De acordo com a definição (A.2), a expressão anterior corresponde à restrição da matriz tangente ao espaço de fase simples. Considerando um intervalo temporal constante Δt , podemos estabelecer a seguinte identidade entre os dois instantes de tempo apresentados nas equações (C.1-C.3):

$$t_f = t_i + \Delta t. \quad (\text{C.4})$$

Então, interpretando t_i como uma função de t_f , calculamos as derivadas totais das expressões (C.1) em relação ao instante de tempo final:

$$\frac{dz(t_f)}{dt_f} = \left[\frac{\partial z(t_f)}{\partial z(t_i)} \frac{dz(t_i)}{dt_i} + \frac{\partial z(t_f)}{\partial z^*(t_i)} \frac{dz^*(t_i)}{dt_i} \right] \frac{dt_i}{dt_f} + \frac{\partial z(t_f)}{\partial t_f}, \quad (\text{C.5a})$$

$$\frac{dz^*(t_f)}{dt_f} = \left[\frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z(t_i)} \frac{dz(t_i)}{dt_i} + \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial z^*(t_i)} \frac{dz^*(t_i)}{dt_i} \right] \frac{dt_i}{dt_f} + \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial t_f}. \quad (\text{C.5b})$$

Em seguida, empregando as equações (C.2a), (C.3) e (C.4), reescrevemos estes últimos resultados em notação matricial:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{dz(t_f)}{dt_f} \\ \frac{dz^*(t_f)}{dt_f} \end{pmatrix} &= \frac{i}{\hbar} \mathbb{M}(t_f, t_i) \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_i), z(t_i)) \\ \xi(z^*(t_i), z(t_i)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z^*(t_i)} \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial t_f} \\ \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial t_f} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Devido à dependência temporal explícita da Hamiltoniana, precisamos considerar que esta quantidade pode apresentar diferentes valores para pontos distintos da trajetória clássica. Por esta razão, torna-se necessária a introdução de uma relação auxiliar:

$$\mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i) = \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f) - h(z^*(t_f), z(t_f); t_f), \quad (\text{C.7})$$

na qual $h(z(t_f), z(t_f); t_f)$ representa uma função indeterminada até o presente momento. A partir da equação (C.7), podemos estabelecer uma conexão entre as derivadas da Hamiltoniana nos dois conjuntos de variáveis dinâmicas:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z(t_i)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_i), z(t_i); t_i)}{\partial z^*(t_i)} \end{pmatrix} = \mathbb{M}^T(t_f, t_i) \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix} - \mathbb{M}^T(t_f, t_i) \begin{pmatrix} \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

Substituindo o resultado anterior na identidade (C.6), obtemos uma nova expressão para as

equações clássicas de movimento:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{dz(t_f)}{dt_f} \\ \frac{dz^*(t_f)}{dt_f} \end{pmatrix} &= \frac{i}{\hbar} \mathbb{M} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_i), z(t_i)) \\ \xi(z^*(t_i), z(t_i)) & 0 \end{pmatrix} \mathbb{M}^T \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \mathbb{M} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_i), z(t_i)) \\ \xi(z^*(t_i), z(t_i)) & 0 \end{pmatrix} \mathbb{M}^T \begin{pmatrix} \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial t_f} \\ \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial t_f} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Como consequência da completa equivalência entre equações (C.2b) e (C.9), podemos identificar prontamente as seguintes relações:

$$\mathbb{M} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_i), z(t_i)) \\ \xi(z^*(t_i), z(t_i)) & 0 \end{pmatrix} \mathbb{M}^T = \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_f), z(t_f)) \\ \xi(z(t_f), z(t_f)) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.10a})$$

$$\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t_f), z(t_f)) \\ \xi(z^*(t_f), z(t_f)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z(t_f)} \\ \frac{\partial h(z^*(t_f), z(t_f); t_f)}{\partial z^*(t_f)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial z(t_f)}{\partial t_f} \\ \frac{\partial z^*(t_f)}{\partial t_f} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.10b})$$

Note que a identidade (C.10a) representa uma prescrição para a evolução temporal clássica da matriz $\xi(z^*, z)$, ao passo que o resultado (C.10b) estabelece um sistema de equações diferenciais para a determinação da função $h(z^*, z; t)$. Como próximo passo na demonstração, introduzimos uma nova expressão auxiliar:

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} 0 & -\xi^T(z^*(t), z(t)) \\ \xi(z^*(t), z(t)) & 0 \end{pmatrix} &= [\det \xi(z^*(t), z(t))]^2 \\ &= [\det g(z^*(t), z(t))]^{-2}. \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Então, empregando a equação anterior na manipulação da identidade (C.10a), obtemos a seguinte relação entre determinantes:

$$[\det \mathbb{M}(t_f, t_i)]^2 = \left[\frac{\det g(z^*(t_i), z(t_i))}{\det g(z^*(t_f), z(t_f))} \right]^2. \quad (\text{C.12})$$

Considerando a situação particular $t_f = t_i$, observe que a definição (C.3) adquire o valor $\mathbb{M}(t_i, t_i) = \mathbb{1}$. Conseqüentemente, as quantidades entre colchetes em ambos os lados da equação (C.12) são exatamente idênticas para $\Delta t = 0$. Assumindo a continuidade temporal destas grandezas sob a dinâmica clássica, podemos realizar uma significativa simplificação na expressão para o determinante da matriz tangente:

$$\det \mathbb{M}(t_f, t_i) = \frac{\det g(z^*(t_i), z(t_i))}{\det g(z^*(t_f), z(t_f))}. \quad (\text{C.13})$$

Aplicando o resultado anterior sobre a identidade (2.22), podemos relacionar as medidas de integração calculadas sobre uma única trajetória clássica em dois instantes de tempo distintos:

$$\begin{aligned}
d\mu(z^*(t_f), z(t_f)) &= \kappa(l) \det[g(z^*(t_f), z(t_f))] \frac{dz^*(t_f)dz(t_f)}{(2\pi i)^d} \\
&= \kappa(l) \det[g(z^*(t_f), z(t_f))] \det[\mathbb{M}(t_f, t_i)] \frac{dz^*(t_i)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \\
&= \kappa(l) \det[g(z^*(t_i), z(t_i))] \frac{dz^*(t_i)dz(t_i)}{(2\pi i)^d} \\
&= d\mu(z^*(t_i), z(t_i)).
\end{aligned} \tag{C.14}$$

Portanto, o elemento de integração $d\mu(z^*, z)$ permanece inalterado pela evolução temporal clássica. Esta propriedade garante a *conservação de volumes em sistemas Hamiltonianos generalizados*. Ou seja, considerando um domínio de integração $\mathcal{D}(t_i)$, podemos estabelecer imediatamente a seguinte identidade:

$$\int_{\mathcal{D}(t_i)} d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) = \int_{\mathcal{D}(t_f)} d\mu(z^*(t_f), z(t_f)), \tag{C.15}$$

na qual $\mathcal{D}(t_f)$ representa o domínio de integração constituído pela evolução temporal dos pontos inicialmente localizados na região $\mathcal{D}(t_i)$, em conformidade com a transformação (C.1). A equação (C.15) corresponde a uma versão generalizada do teorema de Liouville^{100;101}.

C.2 Formulação Clássico-Estatística

Considere uma distribuição clássica de probabilidade sobre o espaço de fase simples, a qual simbolizaremos pela função densidade $\rho(z^*, z)$. Por definição, esta quantidade possui as seguintes características:

$$\rho(z^*, z) \geq 0, \tag{C.16a}$$

$$\int d\mu(z^*, z) \rho(z^*, z) = 1. \tag{C.16b}$$

No instante de tempo t , o produto $\rho(z^*(t), z(t); t)d\mu(z^*(t), z(t))$ representa a probabilidade de observação do sistema clássico dentro de um elemento infinitesimal de volume em torno do ponto $z(t)$ no espaço de fase. Em concordância com esta interpretação, podemos utilizar a transformação de variáveis (C.1) para descrever a relação entre as probabilidades em dois pontos distintos de uma trajetória clássica:

$$\rho(z^*(t_i), z(t_i); t_i)d\mu(z^*(t_i), z(t_i)) = \rho(z^*(t_f), z(t_f); t_f)d\mu(z^*(t_f), z(t_f)). \tag{C.17}$$

Em decorrência do resultado (C.15), a equação anterior corresponde a um identidade direta entre as funções densidade:

$$\rho(z^*(t_i), z(t_i); t_i) = \rho(z^*(t_f), z(t_f); t_f). \tag{C.18}$$

Esta última expressão possibilita a construção da função $\rho(z^*(t_f), z(t_f); t_f)$ para qualquer instante de tempo t_f , considerando que a densidade de probabilidade inicial e as trajetórias clássicas sobre o espaço de fase simples são previamente conhecidas.

No capítulo 5, com o objetivo de realizar a distinção entre os fenômenos intrinsecamente quânticos e os efeitos clássico-estatísticos, exibimos a comparação entre os métodos de propagação semiclássica e os resultados emergentes da identidade (C.18). A avaliação consistente destas diferentes abordagens ao sistema dinâmico está condicionada a uma escolha adequada para a distribuição inicial de probabilidade clássica.

De maneira geral, o princípio de incerteza não permite a formulação de uma genuína distribuição quântica de probabilidade sobre o espaço de fase, uma vez que os geradores de G/S não apresentam relações de comutação identicamente nulas. Entretanto, de acordo com as identidades (4.14) e (4.17), as condições (C.16) são precisamente satisfeitas pela representação $Q(z^*, z; t)$. Além disto, no limite indicado pela expressão (B.1), a dinâmica das funções $\rho(z^*, z; t)$ e $Q(z^*, z; t)$ são descritas exatamente pelas mesmas equações de movimento^{105;106}.

Como evidenciado pela discussão anterior, as propriedades da representação $Q(z^*, z; t)$ qualificam esta distribuição como um análogo quântico para a quantidade $\rho(z^*, z; t)$. Consequentemente, com o intuito de promover uma análise comparativa entre os resultados quânticos e clássico-estatísticos, podemos convencionar o seguinte valor inicial para a função densidade clássica:

$$\rho(z^*, z; t_i) = Q(z^*, z; t_i). \quad (\text{C.19})$$

Esta conexão entre as condições iniciais sugere a interpretação da função $\rho(z^*, z; t)$ como uma *aproximação clássico-estatística* para a representação $Q(z^*, z; t)$:

$$Q(z^*, z; t) \approx Q_{ce}(z^*, z; t) = \rho(z^*, z; t). \quad (\text{C.20})$$

Observe que, nesta última equação, introduzimos uma notação alternativa para a densidade de probabilidade clássica. Deste modo, indicamos explicitamente a utilização conjunta das identidades (C.18) e (C.19) na formulação de uma abordagem aproximativa para a dinâmica quântica.

Bibliografia

- [1] W. H. Miller. *J. Phys. Chem. A*, 105:2942–2955, 2001.
- [2] M. Thoss and H. Wang. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 55:299–332, 2004.
- [3] K. G. Kay. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 56:255–280, 2005.
- [4] W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, 125:132305, 2006.
- [5] R. Saha and M. Ovchinnikov. *J. Chem. Phys.*, 126:064312, 2007.
- [6] C. Harabati and K. G. Kay. *J. Chem. Phys.*, 127:084104, 2007.
- [7] J. M. Moix and E. Pollak. *Phys. Rev. E*, 79:062507, 2009.
- [8] C.-M. Goletz, F. Grossmann, and S. Tomsovic. *Phys. Rev. E*, 80:031101, 2009.
- [9] S. Tomsovic and E. J. Heller. *Phys. Rev. Lett.*, 67:664–667, 1991.
- [10] K. G. Kay. *J. Chem. Phys.*, 101:2250–2260, 1994.
- [11] F. Grossmann. *J. Chem. Phys.*, 125:014111, 2006.
- [12] W. Koch, F. Großmann, J. T. Stockburger, and J. Ankerhold. *Phys. Rev. Lett.*, 100:230402, 2008.
- [13] J. M. Moix and E. Pollak. *J. Chem. Phys.*, 129:064515, 2008.
- [14] C.-M. Goletz and F. Grossmann. *J. Chem. Phys.*, 130:244107, 2009.
- [15] C.-M. Goletz, W. Koch, and F. Grossmann. *Chem. Phys.*, 375:227–233, 2010.
- [16] J. H. Van Vleck. *Proc. Natl. Acad. Sci. (U.S.A.)*, 14:178–188, 1928.
- [17] J. R. Klauder. *Phys. Rev. D*, 19:2349–2356, 1979.
- [18] Y. Weissman. *J. Chem. Phys.*, 76:4067–4079, 1982.
- [19] Y. Weissman. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 16:2693–2701, 1983.
- [20] D. Huber and E. J. Heller. *J. Chem. Phys.*, 87:5302–5311, 1987.

- [21] D. Huber, E. J. Heller, and R. G. Littlejohn. *J. Chem. Phys.*, 89:2003–2014, 1988.
- [22] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch, and B. Schellhaas. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34:7227–7286, 2001.
- [23] C. Braun and A. Garg. *J. Math. Phys.*, 48:032104, 2007.
- [24] S. Adachi. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 195:45–93, 1989.
- [25] A. Rubin and J. R. Klauder. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 241:212–234, 1995.
- [26] A. Shudo and K. S. Ikeda. *Phys. Rev. Lett.*, 74:682–685, 1995.
- [27] A. Shudo and K. S. Ikeda. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4151–4154, 1996.
- [28] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar, and M. Baranger. *Phys. Rev. E*, 69:066204, 2004.
- [29] M. A. M. de Aguiar, M. Baranger, L. Jaubert, F. Parisio, and A. D. Ribeiro. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 38:4645–4664, 2005.
- [30] H. G. Solari. *J. Math. Phys.*, 28:1097–1102, 1987.
- [31] V. R. Vieira and P. D. Sacramento. *Nucl. Phys. B*, 448:331–354, 1995.
- [32] E. A. Kochetov. *J. Math. Phys.*, 36:4667–4679, 1995.
- [33] M. Stone, K.-S. Park, and A. Garg. *J. Math. Phys.*, 41:8025–8049, 2000.
- [34] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar, and A. F. R. T. Piza. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 39:3085–3097, 2006.
- [35] C. Braun and A. Garg. *J. Math. Phys.*, 48:102104, 2007.
- [36] E. A. Kochetov. *J. Math. Phys.*, 36:1666–1672, 1995.
- [37] E. A. Kochetov. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 31:4473–4492, 1998.
- [38] A. M. Perelomov. *Commun. Math. Phys.*, 26:222–236, 1972.
- [39] R. Gilmore. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 74:391–463, 1972.
- [40] M. A. M. de Aguiar, S. A. Vitiello, and A. Grigolo. *Chem. Phys.*, 370:42–50, 2010.
- [41] E. Schrödinger. *Naturwiss.*, 14:664–666, 1926.
- [42] R. J. Glauber. *Phys. Rev. Lett.*, 10:84–86, 1963.
- [43] R. J. Glauber. *Phys. Rev.*, 130:2529–2539, 1963.
- [44] R. J. Glauber. *Phys. Rev.*, 131:2766–2788, 1963.

- [45] J. R. Klauder. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 11:123–168, 1960.
- [46] J. R. Klauder. *J. Math. Phys.*, 4:1055–1058, 1963.
- [47] J. R. Klauder. *J. Math. Phys.*, 4:1058–1073, 1963.
- [48] E. C. G. Sudarshan. *Phys. Rev. Lett.*, 10:277–279, 1963.
- [49] B. C. Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: an Elementary Introduction*. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [50] M. Hamermesh. *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1962.
- [51] W.-M. Zhang, D. H. Feng, and R. Gilmore. *Rev. Mod. Phys.*, 62:867–927, 1990.
- [52] A. M. Perelomov. *Generalized Coherent States and their Applications*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [53] E. Onofri. *J. Math. Phys.*, 16:1087–1089, 1975.
- [54] P. Kramer and M. Saraceno. *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 1981.
- [55] J. W. Negele and H. Orland. *Quantum Many-Particle Systems*. Westview Press, 1998.
- [56] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
- [57] R. Gilmore. *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*. John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [58] F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore, and H. Thomas. *Phys. Rev. A*, 6:2211–2237, 1972.
- [59] H. J. Lipkin. *Lie Groups for Pedestrians*. North-Holland, Amsterdam, 1965.
- [60] R. Gilmore, C. M. Bowden, and L. M. Narducci. *Phys. Rev. A*, 12:1019–1031, 1975.
- [61] L. C. dos Santos and M. A.M. de Aguiar. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 39:13465–13482, 2006.
- [62] T. F. Viscondi and M. A. M. de Aguiar. *J. Math. Phys.*, 52:052104, 2011.
- [63] N. G. de Bruijn. *Asymptotic Methods in Analysis*. North-Holland, Amsterdam, 1958.
- [64] W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, 53:3578–3587, 1970.
- [65] W. H. Miller. *Adv. Chem. Phys.*, 25:69–177, 1974.
- [66] M. F. Herman and E. Kluk. *Chem. Phys.*, 91:27–34, 1984.

- [67] E. Kluk, M. F. Herman, and H. L. Davis. *J. Chem. Phys.*, 84:326–334, 1986.
- [68] E. J. Heller. *J. Chem. Phys.*, 62:1544–1555, 1975.
- [69] E. J. Heller. *J. Chem. Phys.*, 75:2923–2931, 1981.
- [70] E. J. Heller. *J. Chem. Phys.*, 94:2723–2729, 1991.
- [71] K. G. Kay. *J. Chem. Phys.*, 100:4377–4392, 1994.
- [72] K. G. Kay. *J. Chem. Phys.*, 100:4432–4445, 1994.
- [73] K. G. Kay. *J. Chem. Phys.*, 107:2313–2328, 1997.
- [74] E. Pollak and J. Shao. *J. Phys. Chem. A*, 107:7112–7117, 2003.
- [75] S. Zhang and E. Pollak. *Phys. Rev. Lett.*, 91:190201, 2003.
- [76] D. H. Zhang and E. Pollak. *Phys. Rev. Lett.*, 93:140401, 2004.
- [77] S. Zhang and E. Pollak. *J. Chem. Phys.*, 121:3384–3392, 2004.
- [78] K. G. Kay. *Chem. Phys.*, 322:3–12, 2006.
- [79] E. Martín-Fierro and J. M. G. Llorente. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 40:1065–1096, 2007.
- [80] M. Thoss and G. Stock. *Phys. Rev. A*, 59:64–79, 1999.
- [81] T. Suzuki. *Nucl. Phys. A*, 398:557–596, 1983.
- [82] T. F. Viscondi and M. A. M. de Aguiar. *J. Chem. Phys.*, 134:234105, 2011.
- [83] V. S. Filinov. *Nucl. Phys. B*, 271:717–725, 1986.
- [84] N. Makri and W. H. Miller. *Chem. Phys. Lett.*, 139:10–14, 1987.
- [85] M. F. Herman. *Chem. Phys. Lett.*, 275:445–452, 1997.
- [86] H. Wang, D. E. Manolopoulos, and W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, 115:6317–6326, 2001.
- [87] M. Spanner, V. S. Batista, and P. Brumer. *J. Chem. Phys.*, 122:084111, 2005.
- [88] M. Hillery, R. F. O’Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner. *Phys. Rep.*, 106:121–167, 1984.
- [89] M. O. Scully and M. S. Zubairy. *Quantum Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [90] W.-M. Zhang and D. H. Feng. *Phys. Rep.*, 252:1–100, 1995.

- [91] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [92] T. F. Viscondi and K. Furuya. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 44:175301, 2011.
- [93] A. J. Leggett. *Rev. Mod. Phys.*, 73:307–356, 2001.
- [94] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [95] T. F. Viscondi, K. Furuya, and M. C. de Oliveira. *Europhys. Lett.*, 90:10014, 2010.
- [96] E. Martín-Fierro and J. M. G. Llorente. *Chem. Phys.*, 322:13–22, 2006.
- [97] M. S. Child, P. Sherratt, and Y. K. Sturdy. *J. Phys. Chem. A*, 108:8860–8865, 2004.
- [98] T. F. Viscondi, K. Furuya, and M. C. de Oliveira. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 324:1837–1846, 2009.
- [99] T. F. Viscondi, K. Furuya, and M. C. de Oliveira. *Phys. Rev. B*, 80:013610, 2009.
- [100] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1980.
- [101] M. A. M. de Aguiar. *Tópicos de Mecânica Clássica*. Livraria da Física, São Paulo, 2011.
- [102] V. I. Arnold. *Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [103] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [104] L. G. Yaffe. *Rev. Mod. Phys.*, 54:407–435, 1982.
- [105] F. Trimborn, D. Witthaut, and H. J. Korsch. *Phys. Rev. A*, 77:043631, 2008.
- [106] F. Trimborn, D. Witthaut, and H. J. Korsch. *Phys. Rev. A*, 79:013608, 2009.