

TESE DE MESTRADO

PROPAGAÇÃO SEMICLÁSSICA EM SISTEMAS
CAÓTICOS

Fernando Nicacio

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro, 2006

Tese de Mestrado submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
sob orientação do Pesquisador **Dr. Raúl Oscar Vallejos**
para a obtenção do título de Mestre em Física por
Fernando Nicacio.

2006

A minha mãe, Celma.

Agradecimentos

À pessoa a quem essa tese é dedicada, presente em todos os momentos, sempre com as melhores palavras de apoio ou de consolo, devo muito mais que o carinho, o amor incondicional e a atenção.

Raúl, ao longo desta tese, exauriu todos os significados dicionarizáveis da palavra orientar. Foi e continuará sendo um prazer tê-lo como orientador e amigo.

O carinho das famílias foi indispensável, a nova que chegou com seu Zé e a velha. Muito devo ao primo Maurão, que nada sabe de física, mas muito sabe da vida e fez questão de ensinar e a Márvio, o primo que se fez irmão.

Agradeço aos “sadios e grimpantes” - Daniel e Bruna - pela avalanche de alegria e o amor gratuito.

De nada valeria este trabalho sem a companhia, confiança, apoio e sobretudo, a amizade indelével e inabalável de Flávio Gordon, Renata Magioli, Leandro B.A. Daniel Ratão, Daniel Frasão e Patrícia Rangel.

A todos aqueles que vieram pela faculdade e entraram para o coração, devo a companhia e a amizade durante e depois dos anos de Fundão. A lista é extensa, contudo, não posso esquecer de Maria Borba, Graziela, Maria João, Tatá, Magno e Fábio Dinis.

Alguns talvez eu devesse “desagradecer”, este trabalho se concluiu apesar de deles, porém, nestes dois anos me deram alguns dos momentos de maior descontração e amizade sincera: Bruno Rainho, Wailã, Silva, Dudu, Rodrigo e Família “Baleias” Cardoso.

Seria impossível realizar este trabalho sem os amigos do grupo de caos do CBPF: Raphael (David), João Paulo, Rômulo, Alfredo Ozório, Fabrício Toscano, Olivier Brodier. Obrigado pelos conselhos, dúvidas e dívidas.

Aos camaradas de pós-graduação, André Gavinni, Rafael Perez, Érico Goulart,

Fabrcio Amaral, Carolina Cronenberg e Antnio Augusto (Baiano), agradeo a companhia, solcitude, diversao e os dois anos agradabilssimos de CBPF.

Àqueles aos quais eu chamo de mestres - Clóvis Wotzasek, Marta Feijó, Mônica Bahiana, Takeshi Kodama e Itzak Roditi - deixo uma frase de Khaliu Gibran Khaliu, dito poeta dos loucos: “O mestre que caminha à sombra do tempo, rodeado de discpulos, não dá de sua sabedoria, mas sim de sua fé e sua ternura”.

Mário Basílio de Matos foi quem primeiro me revelou as belezas do Caos. A amiga e professora Teresa Stuchi, sempre alegre e presente, continua a me desvendar os mistérios do espaço de fase.

E por final, ao povo brasileiro, que em nenhum momento questionou o patrocínio deste trabalho por via da CAPES/CNPQ.

É tamanha minha dívida com todos aqui citados, que ousou subverter a frase de Guimarães Rosa que diz: “a colheita é comum, mas o capinar é sozinho” e escrever: a colheita é sozinha, mas o capinar é comum.

Resumo

Neste trabalho constrói-se um propagador semiclássico para evolução da função de Wigner de um estado quântico sob a dinâmica estroboscópica do oscilador harmônico chutado. Para tanto, recorre-se à teoria de Littlejohn de operadores de Heisenberg e metapléticos associados à quantização das transformações canônicas do espaço de fase.

Decompõe-se um estado inicial em pacotes coerentes, evoluindo-os computacionalmente um a um pela dinâmica linearizada na vizinhança do centro do pacote. A função de Wigner do estado propagado é, por fim, reconstruída e comparada com o resultado da evolução exata.

Para um estado inicial gaussiano, analisamos o método de decomposição e as estruturas clássicas subjacentes ao esqueleto da função de Wigner.

Abstract

In this thesis, the semiclassical propagator to the evolution of the Wigner's function of a quantum state under the stroboscopic dynamic of kicked harmonic oscillator is constructed. With this in mind, Littlejohn's theory on Heisenberg and metaplectic operators, which describe the quantization of canonical transformations in phase space, is employed.

The initial state is decomposed into coherent packages which evolve one by one through the linearized dynamics in the vicinity of the package's center. Finally, the Wigner function of the propagated state is reconstructed and compared with the exact result.

For gaussian initial state, the decomposition method and the associated classical structures of Wigner function are analysed.

Conteúdo

Resumo	vi
Abstract	vii
Introdução	xiii
1 Dinâmica Clássica	1
1.1 Sistemas Hamiltonianos	1
1.2 Matrizes Simpléticas	4
1.3 Seções de Poincaré e Órbitas Periódicas	7
1.4 Caos e Oscilador chutado	9
1.4.1 Sistema chutado	10
1.4.2 Seções Estroboscópicas	14
1.4.3 Dinâmica Linearizada	18
2 Dinâmica Semiclássica	22
2.1 Sistema Quântico	23
2.2 Mecânica Quântica no Espaço de Fase	25
2.2.1 Operadores de Heisenberg	26
2.2.2 Estados Coerentes	29
2.2.3 Operadores Metapléticos	32
2.3 Formalismo de Weyl-Wigner	39

2.3.1	Função de Wigner	41
2.3.2	Função de Wigner de Estados Coerentes	42
3	Propagação de Pacotes de Onda	45
3.1	Propagadores	46
3.1.1	Propagação Clássica	46
3.1.2	Propagação Semiclássica	50
3.2	Propagação da Função de Wigner	52
3.3	Hamiltoniana $\hat{H} := Kp^3$	54
4	Superposição Discreta de Pacotes	65
4.1	Decomposição em Estados Coerentes	66
4.2	Discretização	68
4.3	Métodos Numéricos	69
5	Simulações Numéricas	74
5.1	Evolução Clássica do O.H.C.	74
5.1.1	Evolução do Centro dos Pacotes	75
5.2	Evolução Quântica do O.H.C.	78
5.3	Evolução Semiclássica do O.H.C.	80
5.3.1	Propagador Semiclássico do O.H.C.	81
5.3.2	Algoritmo de Propagação Semiclássica	83
5.3.3	Decomposição e Propagação	85
5.4	Cáusticas da Função de Wigner	88
5.5	Análise da Aproximação Semiclássica	91
5.5.1	Unitariedade	91
5.5.2	Secções da Função de Wigner	93
5.5.3	Não-gaussianidade	97

<i>CONTEÚDO</i>	x
6 Conclusão	103
A Relações entre Operadores	107
B Elemento de Matriz do Operador Metaplético	111
C Derivada Temporal do Propagador Semiclássico	115
Bibliografia	119

Lista de Figuras

1.1	Autovalores de Matrizes Simpléticas	9
1.2	Retrato de Fase para uma Condição Inicial do OHC	14
1.3	Gráficos Estroboscópicos do OHC	16
1.4	Gráficos Estroboscópicos - Redes Estocásticas	17
1.5	Pontos Fixos do OHC - Soluções Transcendentais	19
1.6	Variedade Instável	20
3.1	Função de Airy	55
3.2	Função de Airy e Potencial Linear	60
3.3	Propagador Clássico e Quântico	62
3.4	Função de Wigner - Hamiltoniana Cúbica	63
4.1	Truncamento da Integral - Função $f(\alpha, \beta)$	70
4.2	Reconstrução da Função de Onda	71
4.3	Erro da Discretização	72
5.1	Propagação Clássica	76
5.2	Propagação Clássica Linearizada	78
5.3	Propagação Quântica da Função de Wigner	80
5.4	Propagação Semiclássica da Função de Wigner	89

5.5	Cáustica da Função de Wigner de um Pacote Coerente sob a Dinâmica do OHC	91
5.6	Secção Longitudinal da Função de Wigner para a Segunda Aplicação do Mapa OHC.	93
5.7	Secção Longitudinal, $q = -2$, da Função de Wigner para a Terceira Aplicação do Mapa OHC.	95
5.8	Secção Longitudinal, $q = -1.5$, da Função de Wigner para a Terceira Aplicação do Mapa OHC.	96
5.9	Assimetria e curtose para a Segunda Aplicação do Mapa do OHC . . .	98
5.10	Assimetria e Curtose para a Terceira Aplicação do Mapa do OHC . . .	99
5.11	Centros de Cordas nas Secções Longitudinais da Função de Wigner . .	100

Introdução

“Chaos is the score upon which reality is written.”

Henry Miller - *Tropic of Cancer*

A Teogonia, poema pré-filosófico de Hesíodo (800 a.c.), um dos alicerces do pensamento ocidental, inicia com a frase “Realmente antes de tudo existiu o Caos...”. Do modo intencional como pronuncia a palavra caos, o poeta inspirado pelas Musas, deusas do canto e da memória, traz não só a concepção do mundo pré-organizado como estabelece uma origem fixa para os deuses, seres animados e ainda os inanimados. A acepção grega para a palavra Caos é abismo — desconhecido e inalcançável — massa amorfa com poder incipiente de criação¹. Tantas outras cosmogonias além da grega, dos hebreus aos iorubas, relatam o início da ordem provinda da desordem, algo subjacente, incógnito e latente à espera de precipitação.

Os gregos que conceberam o início desordenado também concebem a linguagem da ordem. Pitágoras (571-497 a.c.), talvez seu maior entusiasta, defende a matemática como a linguagem geométrica da natureza sob a égide dos princípios lógicos edificadas posteriormente pelos sistemáticos, Sócrates (470-399 a.c.), Platão (428-348 a.c.) e Aristóteles (348-322 a.c.). É no período sistemático onde os conceitos de ciência e inteligibilidade são criados². A natureza é então desvelada, conjugam-se linguagem e pensamento, matemática e ciência.

¹T. Bulfinch, *A Idade da Fábula: Histórias de Deuses e Heróis*, Trad. D. Jardim (Ediouro, Rio de Janeiro, 6a. ed., 1999)

²U. Padovani e L. Castagnola, *História da Filosofia* (Melhoramentos, São Paulo, 13a. ed., 1974)

Caos e Mecânica Clássica

Ao longo dos séculos, a busca da ordem na natureza é empreendida pelo homem. Dos naturalistas pré-socráticos aos cientistas modernos, a ciência é construída como expressão máxima da razão e da ordem natural. Os movimentos harmoniosos keplerianos regem as órbitas planetárias, os referenciais galileanos revelam a simetria subjacente do movimento, as forças newtonianas garantem o determinismo da dinâmica e quiçá da consciência.

A união dos fundamentos da física teórica com a matemática pujante e criteriosa culmina nos trabalhos iniciados por³ P. L. M. de Maupertuis (1698-1759), estendidos por L. Euler (1707-1783) e J.L. Lagrange (1736-1813) e elegantemente reformulados por W. R. Hamilton (1805-1865) e K. G. J. Jacobi (1804-1851), constituindo o principal artefato da ciência: a descrição minuciosa do movimento, a glória da organização e da ordem — o espaço de fase.

O império da ordem não durou nem meio século. Em uma publicação extensa de três volumes, intitulada “*Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Celeste*”, o último universalista da matemática, o francês J. H. Poincaré (1854-1912) descreve o comportamento imprevisível das órbitas do famigerado problema de três corpos, alvo de estudo de grandes cientistas, ironicamente os responsáveis pela estrutura concisa e organizada da mecânica clássica. Pioneiro no que hoje conhecemos pelo nome de sistemas dinâmicos, Poincaré desestruturou o *status quo ante* da física utilizando métodos topológicos no estudo da dinâmica no espaço de fase.

“Chaos is come again”⁴. A dinâmica futura, sensível à ligeira diferença inicial, torna o espaço de fase um mar de desordem: situações quase idênticas se tornam

³R. Abraham e J.E. Marsden, *Foundations of Mechanics* (Benjamin/Cummings Pub. Comp., Amsterdã, 2a. ed., 1978)

⁴W. Shakespeare, *Othello*, cena III, ato iii.

insólitas, a desorganização é infundável. Não obstante, o comportamento não é alheio ao determinismo — o conhecimento do estado anterior continua permitindo a conclusão do posterior e vice-versa, e ainda ilhas de regularidade padecem contíguas à vastidão desorganizada. Não só Poincaré deu luz às vicissitudes do movimento, como sarcasticamente todos os métodos interpostos por ele permitiram uma compreensão absoluta sobre os movimentos presos à ordem, ditos integráveis que constituem a minoria absoluta dos sistemas naturais.

Mecânica Quântica e Semiclássica

O final do século XIX e início do XX foram pródigos em turbulências científicas: não só o caos, mas o advento da mecânica quântica também abalou os pilares científicos⁵. A história da mecânica quântica é atribulada e cheia de sobressaltos — conjecturas esquisitas, acidentes em laboratórios e muitos equívocos⁶ — *ad augusta per angusta*. Contudo a mecânica quântica, hoje, é uma teoria tão bem estabelecida quanto a clássica, e dispõe de alta precisão experimental, apesar de percalços teóricos, que ainda hoje fazem dela alvo de acalorados debates sobre sua consistência e também da interpretação de seus resultados⁷.

Duas décadas e meia após a hipótese de quantização da radiação de M. Planck (1858-1947), E. Schroedinger (1887-1961) deduz, baseado nos princípios da analogia ótico-mecânica e nas ondas de matéria de L. de Broglie, a equação que leva seu nome e que rege a dinâmica do mundo microscópico. A aliança da equação de ondas materiais com a perspicácia de N. Bohr (1885-1962), W. Pauli (1900-1958), P. M.

⁵*Noblesse oblige*, também a relatividade.

⁶H. M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica 4 - Ótica, Relatividade, Física Quântica* (Edgard Blücher, São Paulo, 1998); J. A. Wheeler e W. H. Zurek (Eds.) *Quantum theory and Measurement* - Princeton Series in Physics (Princeton Univ. Press, Princeton 1983).

⁷R. Omnès, *The Interpretation of Quantum Mechanics* (Princeton Univ. Press, Princeton, 1994)

Dirac (1902-1984), W. Heisenberg (1901-1976) e outros, finalmente, estabelece a mecânica quântica como a conhecemos hoje. Agora sim, o determinismo newtoniano foi por água abaixo e deu lugar ao indeterminismo quântico: a dinâmica governada por densidades de probabilidade.

A velha teoria quântica, mais que uma teoria, foi um amalgama de hipóteses semi-empíricas e conceitos clássicos para compreensão da dinâmica microscópica. Bohr propôs o primeiro modelo semiclássico para a modelagem de um átomo: discretizando as energias de um elétron orbitando em torno do núcleo, conseguiu reproduzir os resultados espectroscópicos para o átomo de hidrogênio. A evolução dos métodos de Bohr obteve o apogeu com a famosa fórmula de quantização de Bohr-Sommerfeld.

A generalização da fórmula de Bohr-Sommerfeld surge posteriormente com os métodos assintóticos de onda curta⁸, ou, como se chamou na física, método WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin). O método WKB⁹ consiste em construir uma função de onda semiclássica para um toro unidimensional no espaço de fase, que aplicada na equação de Schroedinger resulta na equação clássica de Hamilton-Jacobi no limite em que a constante de Planck é pequena comparada com a ação do sistema e ainda nos rende a quantização de Bohr-Sommerfeld. Para toros de dimensões maiores que um, a extensão do método WKB é conhecida como quantização EBK (Einstein, Brillouin, Keller)¹⁰.

Em 1932 E.P. Wigner (1902-1995) desenvolveu um método eficaz de calcular correções quânticas a estatística clássica, porém, apesar da eficácia estatística, atualmente as funções de Wigner¹¹ são utilizadas para transportar a mecânica quântica

⁸V. Arnold, *Métodos Matemáticos da Mecânica Clássica* (Mir Moscovo, Moscou, 1987)

⁹J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Pub. Com., Nova Iorque, 1994)

¹⁰A.M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems – Chaos and Quantization* (Cambridge U. P., Cambridge, 1988).

¹¹A.M. Ozorio de Almeida, Phys. Rep. **295**, 256 (1998) – *The Weyl Representation in Classical and Quantum Mechanics*.

para o espaço de fase, transformando operadores densidades quânticos em pseudo-distribuições clássicas. M.V. Berry realizou as aproximações WKB para o operador densidade¹² e deu início ao estudo das estruturas clássicas subjacentes à função de Wigner, trabalho completado posteriormente por A.M. Ozório de Almeida¹³.

Caos Quântico

Os sistemas classicamente caóticos não possuem o espaço de fase folheados em toros. É natural questionar como obter, então, as quantizações desses sistemas, já que o método EBK tem como princípio associar uma função de onda a um toro clássico. Outra questão importante é como embutir as não-linearidades num sistema quântico, já que por natureza a equação dinâmica de Schroedinger é linear. A resposta para estas questões está no princípio da correspondência de Bohr¹⁴ que afirma que sob algumas condições podemos associar as dinâmicas quântica e clássica. As aproximações semiclássicas já comentadas, mesmo as mais ingênuas, apresentam bons resultados no limite de grandes números quânticos ou ainda quando a constante de Planck é muito menor que as ações características do sistema. Ou seja, a teoria semiclássica, sob refúgio do princípio da correspondência, de fato é a teoria de quantização dos sistemas clássicos integráveis. Sob a mesma perspectiva, M.C. Gutzwiller utilizou as técnicas desenvolvidas por J. Van Vleck¹⁵ para a obtenção do propagador semiclássico¹⁶ e criou a fórmula do traço de propagadores, que associa amplitudes e fases quânticas com as órbitas periódicas do sistema, seja ele caótico

¹²M.V. Berry, Phil. Trans. R. Soc. **287**, 237-271 (1977) – *Semi-Classical Mechanics in Phase Space: A Study of Wigner's Function*.

¹³A.M. Ozorio de Almeida, *Op.cit.*

¹⁴A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Kluwer Acad. Pub., Nova Iorque, 2002)

¹⁵J.H. Van Vleck, Proc. Nat. Acad. Sci USA **14**, 178-188, 1928 – *The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*.

¹⁶M.C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **12**, 343-358 (1971) – *Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions* e *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, Berlim, 1990).

ou integrável.

Uma alternativa ao método de Guzwiller¹⁷ é a quantização lagrangiana¹⁸. Remonta-se a E. J. Heller a idéia de propagar estados gaussianos¹⁹: a linearização da hamiltoniana em torno da trajetória do centro do pacote, faz com que a evolução mantenha a forma coerente dos pacotes. R.G. Littlejohn em 1990 formulou a teoria de Heller mais precisamente²⁰, estendendo-a para qualquer pacote de onda. E ainda, construiu o propagador semiclássico em termos das quantizações das transformações canônicas lineares, transformações que preservam o primeiro invariante integral de Poincaré, a área simplética, e, por conseguinte levam planos lagrangianos em lagrangianos.

Caos Quântico Experimental

O interesse no limite semiclássico da mecânica quântica renasce no final do século XX graças à evolução tecnológica que permitiu alto grau de controle experimental sobre o mundo microscópico. Destacam-se entre esses experimentos as armadilhas de íons²¹ desenvolvidas por W. Paul.

Essas armadilhas geram um potencial confinante para os íons através de campos eletromagnéticos que podem ser controlados para que o íon aprisionado execute um movimento oscilatório harmônico em uma dimensão. A interação do íon oscilante

¹⁷M.C. Gutzwiller, *Op. cit.*

¹⁸R.G. Littlejohn, *Phys. Rep.* **138**, 193-291 (1986) – *The Semiclassical Evolution of Wave Packets*; M. Gosson, *Maslov Classes, Metaplectic Representation and Lagrangian Quantization* (Akademik Verlag, 1997 - Mathematical Research, vol. 95).

¹⁹E.J. Heller, *J. Chem. Phys.* **62**, 4, 1544-1555 (1975) – *Time Dependent Approach to Semiclassical Dynamics*.

²⁰R.G. Littlejohn, *Op. cit.*

²¹W. Paul, *Rev. Mod. Phys.* **62**(3), 531-540 (1990) – *Eletromagnetic Traps for Charged and Neutral Particles*.

com um laser ressonante²² altera o movimento do centro de massa do íon periodicamente através de pulsos. Esse sistema é o equivalente quântico de um oscilador clássico chutado.

Tendo em vista o caos do sistema clássico pode-se estudar o regime semiclássico deste sistema, onde o limite zero da constante de Planck é fabricado pela simples alteração de um parâmetro de controle característico do sistema, denominado parâmetro de Lamb-Dicke.

Esta Tese

Este trabalho tem como objetivo discutir a aproximação semiclássica de Littlejohn para a propagação de pacotes de onda²³. Escolhemos como sistema de teste o oscilador harmônico chutado por ser um sistema quântico com análogo clássico de vasto estudo na literatura.

De forma geral, a propagação semiclássica é realizada decompondo um estado inicial num conjunto de pacotes coerentes, a dinâmica não-linear de propagação é aproximada pela dinâmica linearizada em torno da trajetória clássica do centro de cada pacote e então, a evolução do estado inicial é reconstituída pela evolução linear do conjunto de pacotes coerentes. Este é o processo pelo qual podemos construir um propagador semiclássico para o estado inicial baseado na quantização da evolução canônica linear dos pacotes.

No primeiro capítulo desta tese, encontram-se a descrição padrão da dinâmica clássica hamiltoniana baseada nas transformações canônicas, seguido do estudo do comportamento caótico direcionado ao oscilador chutado. No segundo, apresenta-se a formulação semiclássica de quantização das transformações canônicas, que é res-

²²S.A. Gardiner, J.I. Cirac and P. Zoller, Phys. Rev. Let. **79**(24) 4790-4793, 1997 – *Quantum Chaos in an Ion Trap: The Delta-Kicked Harmonic Oscillator*.

²³R.G. Littlejohn, *Op. cit.*

ponsável pela forma do propagador semiclássico explicitada no capítulo decorrente. Além disso, neste capítulo descrevemos a dinâmica de propagação de distribuições clássicas, funções de onda e da função de Wigner.

O quarto capítulo desenvolve o método de decomposição numérica de funções de onda em termos de pacotes gaussianos, para que no quinto apresentemos os resultados da propagação semiclássica numérica para um estado inicial coerente evoluído pelo oscilador harmônico chutado.

Capítulo 1

Dinâmica Clássica

Classicismo: “Doutrina ou tendência [...] que tem como características [...] a noção das proporções, o gosto das composições equilibradas, a busca da harmonia das formas e idealização da realidade.”

Dicionário Houaiss

O estudo da dinâmica após Poincaré pluraliza as características do movimento clássico revelando comportamentos outrora ignorados. Sobre a dinâmica hamiltoniana de sistemas clássicos, sustenta-se o desenvolvimento deste trabalho.

Este capítulo tem como objetivo descrevê-la sumariamente, esclarecer a notação para o decorrer do trabalho, introduzir os conceitos pertinentes à dinâmica caótica, estabelecer a dicotomia dos sistemas dinâmicos: caos e integrabilidade, analisar e compilar alguns resultados para o sistema que nos é particularmente interessante.

1.1 Sistemas Hamiltonianos

Os sistemas dinâmicos *hamiltonianos* correspondem a uma classe muito restrita dos sistemas dinâmicos gerais, porém não menos importante. Um sistema hamiltoniano de n graus de liberdade é um conjunto de $2n$ equações diferenciais parciais da

forma:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (1.1)$$

onde $H := H(q, p, t)$ é designado de campo *Hamiltoniano*, e é uma função diferenciável definida para as $2n + 1$ variáveis $(q, p, t) \in \mathbb{U}$, tal que,

$$\mathbb{U} \subset \Xi \times \mathbb{T}^*\Xi \times \mathbb{T}.$$

Chama-se Ξ de *espaço configuracional* do sistema, ou seja, o conjunto das possíveis configurações do sistema, $\mathbb{T}^*\Xi$ de *espaço cotangente* ao espaço configuracional e $\mathbb{T} \subset \mathbb{R}$ de intervalo de tempo. E ainda $q \in \Xi$ de *posição*, $p \in \mathbb{T}^*\Xi$ de *momento* e t de *tempo*. O conjunto dos pontos $(q, p) \in \Xi \times \mathbb{T}^*\Xi$ é chamado de *espaço de fase* do sistema e $(q, p, t) \in \Xi \times \mathbb{T}^*\Xi \times \mathbb{T}$ de *espaço de fase estendido*[2]. Aqui identificaremos o trio $\Xi \times \mathbb{T}^*\Xi \times \mathbb{T}$ com $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$.

Uma *solução* desse sistema, $\varphi(q_0, p_0, t)$, é uma função vetorial que satisfaz ao sistema de equações (1.1) e a condição inicial $(q_0, p_0) = \varphi(q_0, p_0, 0)$ [1, 20].

Estética e praticamente é conveniente tratarmos o par (q, p) de forma entuviada, com efeito, chamamos $z := (q, p)$, $H(q, p) =: H(z)$ e reescrevemos as eqs.(1.1) como

$$\dot{z} := \frac{dz}{dt} = \mathbf{J} \cdot \frac{\partial H}{\partial z}, \quad (1.2)$$

onde a matriz $\mathbf{J}_{2n \times 2n}$ é definida por

$$\mathbf{J} := \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

e \mathbb{I} é a matriz identidade $n \times n$; é importante salientar que o transposto de \mathbf{J} é dado por $\mathbf{J}^\top = \mathbf{J}^{-1} = -\mathbf{J}$.

A *Aproximação por Órbitas Adjacentes*, ou abreviadamente AOA, é profícua para os sistemas hamiltonianos, pois permite caracterizar o comportamento de deslocamentos, *i.e.* distâncias entre pontos, no espaço de fase.

O fluxo hamiltoniano gera, a partir da condição inicial z_0 , a órbita $z(t)$. Outra condição inicial próxima gera uma órbita adjacente, ou seja, se $z_0 := z'_0 + \delta z_0$, em princípio a órbita gerada pelo fluxo pode ser escrita como: $z(t) := z'(t) + \delta z(t)$. Como as órbitas $z'(t)$ e $z(t)$ são criadas pela evolução hamiltoniana, a função $\delta z(t)$ pode ser também determinada. Expandindo a hamiltoniana $H(z)$ em torno da *órbita de referência* $z'(t)$,

$$\begin{aligned} H(z) &:= H(z' + \delta z) \\ &\simeq H(z') + \delta z(t) \cdot \left. \frac{\partial H}{\partial z} \right|_{z'} + \frac{1}{2} \delta z(t) \cdot \left. \frac{\partial^2 H}{\partial z \partial z} \right|_{z'} \delta z(t) + \dots, \end{aligned} \quad (1.4)$$

e levando em conta a eq.(1.2), podemos escrever a expansão para \dot{z} :

$$\dot{z} = \mathbf{J} \left. \frac{\partial H}{\partial z} \right|_{z'(t)} + \mathbf{J} \mathcal{H}_{z'(t)} \delta z(t) + O(\delta z^2),$$

em que o primeiro termo é identificado como $\dot{z}(z', t)$ e o segundo é composto pela matriz *hessiana* avaliada em $z = z'(t)$.

Se definirmos $\delta \dot{z} := \dot{z}(z, t) - \dot{z}(z', t)$, então em primeira ordem:

$$\delta \dot{z} = \mathbf{J} \mathcal{H}_{z'(t)} \delta z(t).$$

A solução formal desta equação é dada por

$$\delta z(t) = \mathbf{T} \exp \left[\int_0^t \mathbf{J} \mathcal{H}_{z'(\tau)} d\tau \right] \delta z_0, \quad (1.5)$$

onde \mathbf{T} é o operador de ordenamento temporal e, como consequência direta, a matriz $\mathbf{S}_t := \exp \left[\int_0^t \mathbf{J} \mathcal{H}_{z'(\tau)} d\tau \right]$ obedece à mesma equação de movimento que δz :

$$\dot{\mathbf{S}}_t = \mathbf{J} \mathcal{H}_{z'(t)} \mathbf{S}_t. \quad (1.6)$$

As equações (1.5) e (1.7) são as equações da dinâmica linearizada na AOA.

O caso particular de uma hamiltoniana quadrática em z , e.g. $H(z) = z.Gz$, torna a expansão (1.4) exata e a matriz hessiana independente de t , $\mathcal{H}_{z'} = G$. Assim, $\mathbf{S}(t)$ é expressa como

$$\mathbf{S}(t) = \exp[\mathbf{J} \mathcal{H}_z t]$$

e pode ser representada pela expansão em série de potências de $e^{\mathbf{J}\mathcal{H}_z t}$, desde que ela exista.

1.2 Matrizes Simpléticas

A aparição espontânea da matriz \mathbf{J} na estrutura da mecânica hamiltoniana deixa de ser apenas um argumento estético se convenientemente observarmos a estrutura do que definiremos agora como o *Parênteses de Poisson*:

$$\{Z_1(z), Z_2(z)\} := \sum_{i,j=0}^n \frac{\partial Z_1}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial Z_2}{\partial z_j}, \quad (1.7)$$

onde Z_1 e Z_2 são funções arbitrárias diferenciáveis de z . Uma transformação de variáveis é *canônica* se o parêntesis de Poisson é invariante, ou seja, de acordo com a definição acima, se $Z_i = Z_i(z)$ é uma mudança de coordenadas e

$$\{Z_i, Z_j\} = \sum_{k,l=0}^n \frac{\partial Z_i}{\partial z_k} J_{kl} \frac{\partial Z_j}{\partial z_l} = J_{ij},$$

então Z_i é canônica, portanto, a forma de \mathbf{J} garante a estrutura hamiltoniana intrínseca do sistema.

Antes de mais nada é necessário definir o chamado *produto simplético* (\wedge) entre dois vetores $2n$ -dimensionais quaisquer¹ $u := (u_1^q, u_2^q, \dots, u_n^q, u_1^p, u_2^p, \dots, u_n^p)^\top$ e $v := (v_1^q, v_2^q, \dots, v_n^q, v_1^p, v_2^p, \dots, v_n^p)^\top$, tal como

$$u \wedge v := (\mathbf{J}u) \cdot v, \quad (1.8)$$

onde o produto (\cdot) se refere ao produto escalar convencional e \mathbf{J} é definida em (1.3). Notemos que a operação (\wedge) é bilinear, tal como o produto escalar, e anti-simétrica,

¹O uso dos sobrescritos p e q nas componentes dos vetores, referem-se obviamente aos eixos do espaço de fase.

$u \wedge v = -u \cdot (\mathbf{J}v) = -v \wedge u$. Reescrevendo (1.8) em termos das componentes desses vetores,

$$(\mathbf{J}u) \cdot v = \sum_{j=1}^n [u_j^p v_j^q - u_j^q v_j^p], \quad (1.9)$$

vemos o porquê de tal alcunha: o termo entre colchetes é a projeção da *área simplética* entre os dois vetores nos n planos conjugados (q, p) do espaço de fase, ou o *primeiro invariante de Poincaré*, pois, supondo agora que esses dois vetores evoluam sob a ação do fluxo hamiltoniano (1.5), então,

$$\frac{d}{dt}(u \wedge v) = (\mathbf{J}\dot{u}) \cdot v + (\mathbf{J}u) \cdot \dot{v} = -(\mathcal{H}u) \cdot v + u \cdot (\mathcal{H}v) = 0, \quad (1.10)$$

onde usamos a equação de Hamilton (1.2), e as propriedades de \mathbf{J} .

Denotaremos, a partir de agora, o conjunto das matrizes $2n \times 2n$ sobre o corpo dos reais por $M_{2n \times 2n}(\mathbb{R})$. Uma matriz $\mathbf{K} \in M_{2n \times 2n}(\mathbb{R})$ é dita *simplética* se e somente se

$$\mathbf{K}^T \mathbf{J} \mathbf{K} = \mathbf{J}. \quad (1.11)$$

O conjunto de todas as matrizes simpléticas em $M_{2n \times 2n}(\mathbb{R})$ é denotado por $Sp(2n, \mathbb{R})$.

Amparados na seção anterior, em especial na equação (1.5), notamos que

$$\mathbf{S}_{ij}(t) := \frac{\partial z_i(t)}{\partial z_{0j}}, \quad (1.12)$$

ou seja, a evolução temporal gera uma transformação canônica e a matriz $\mathbf{S}(t)$ é uma matriz simplética², pois de acordo com (1.5) e (1.10), temos que se $u(t) = \mathbf{S}(t)u_0$ e $v(t) = \mathbf{S}(t)v_0$, então,

$$u(t) \wedge v(t) = [\mathbf{J}\mathbf{S}(t)u_0] \cdot [\mathbf{S}(t)v_0] = \mathbf{J}v \cdot u \implies \mathbf{S}(t)^T \mathbf{J} \mathbf{S}(t) = \mathbf{J},$$

que é exatamente a condição de simplecticidade (1.11) !

²Definido dessa maneira resguardamo-nos de eventuais confusões, porém num contexto geral os termos *canônico* e *simplético* são sinônimos.

A estrutura de $z = (q, p)$, onde q e p são vetores n -dimensionais, insinua a partição de qualquer matriz em $Sp(2n, \mathbb{R})$ em 4 blocos de matrizes em $M_{n \times n}(\mathbb{R})$:

$$S := \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

donde a condição (1.11) impõe que

$$\begin{aligned} AD^T - BC^T &= \mathbb{I}, \\ AB^T &= BA^T, \\ CD^T &= DC^T \end{aligned} \quad (1.14)$$

e ainda que

$$S^{-1} := \begin{pmatrix} D^T & -B^T \\ -C^T & A^T \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Em tempo, vamos explicitar que o conjunto das matrizes simpléticas, $Sp(2n, \mathbb{R})$, obedece às três condições que definem a estrutura algébrica de um grupo, ou seja,

- (i) Clausura: se $S_1, S_2 \in Sp(2n, \mathbb{R}) \implies S_3 = S_1 S_2 \in Sp(2n, \mathbb{R})$;
- (ii) Identidade: $\exists \mathbb{I} \in Sp(2n, \mathbb{R})$ tal que $\implies \mathbb{I} S = S \mathbb{I} = S, \forall S \in Sp(2n, \mathbb{R})$;
- (iii) Inversa: $\forall S \in Sp(2n, \mathbb{R}), \exists | S^{-1} \in Sp(2n, \mathbb{R})$ tal que $S^{-1} S = S S^{-1} = \mathbb{I}$.

Para demonstrar as três proposições acima basta substituir $S = S_1 S_2$, $S = \mathbb{I}$ e S^{-1} em (1.11) respectivamente para (i), (ii) e (iii) e ainda para (iii) utilizar as propriedades (1.14) e (1.15).

1.3 Seções de Poincaré e Órbitas Periódicas

Apesar da $2n$ -dimensionalidade do espaço de fase, o fluxo para uma hamiltoniana independente do tempo, $H(z)$, evolui em uma hipersuperfície de dimensão $(2n - 1)$, pois que H é uma integral primeira das equações de movimento (1.2).

Pode-se reduzir, ainda, em outra dimensão o estudo do fluxo no espaço de fase, utilizando a *seção de Poincaré*. Esta seção é um hiperplano $(2n - 1)$ -dimensional escolhido transversalmente ao fluxo, de forma que o estudo do fluxo contínuo se reduz ao de um mapa discreto em uma superfície de dimensão $(2n - 2)$. O mapa que registra as interseções das órbitas com esse plano é chamado *mapa de Poincaré*.

As órbitas periódicas do fluxo, ou seja, órbitas que retornam ao mesmo ponto do espaço de fase depois de um tempo finito, são pontos periódicos do mapa de Poincaré.

O fluxo hamiltoniano é timbrado pelo adjetivo canônico das equações de movimento. O comportamento das órbitas no espaço de fase reflete a simplecticidade da matriz S_t em (1.5). Por exemplo, para a dinâmica em torno de uma órbita periódica, os autovalores aparecem sempre em pares tais que seu produto é a unidade, *i.e.*, (γ, γ^{-1}) [2], o que garante a conservação do volume (Teorema de Liouville). O *teorema integral de Poincaré-Cartan* [20] demonstra também a simplecticidade do mapa de Poincaré, \mathcal{P} , *i.e.*, $P^T \mathbf{J} P = \mathbf{J}$, onde P é a matriz jacobiana de \mathcal{P} .

A taxonomia dos fluxos corresponde aos possíveis autovalores de P que determinam características específicas para evolução das órbitas. A diagonalização gera, portanto, quatro possibilidades para o retrato de fase do sistema linearizado em torno das órbitas periódicas: rotação, dinâmica hiperbólica, parabólica e loxodrômica.

A figura 1.1 mostra três opções para o comportamento da dinâmica do sistema em torno de uma órbita. No gráfico a) é encontrada a disposição dos autovalores no círculo unitário complexo. b) autovalores reais distintos, e. g. $(\gamma_2, \gamma_2^{-1})$, geram dinâmicas hiperbólicas entorno de pontos de sela; c) autovalores imaginários, e. g.

($\gamma_1 = \exp(+i\omega), \gamma_1^* = \exp(-i\omega)$), geram rotações em torno de pontos elípticos com frequência angular ω e c) autovalores reais de módulo 1, *i.e.* ($\gamma_3 = 1, \gamma_3 = 1$) ou ($\gamma_4 = -1, \gamma_4 = -1$), tem-se cisalhamentos para pontos parabólicos. Os autovetores em b) são reais e estão representados pelos eixos (p, q) , em c) os autovetores são generalizados, ou seja, pertencem a complexificação da matriz simplética[2] e são representados pelos eixos (p, q) no espaço de fase real, para c) só existe um autovetor representado pela reta $(0, q)$. O quarto caso dos autovalores corresponde aos loxodrômicos, que aparecem em dois pares, e. g. ($\gamma_5 = \exp(k + i\omega), \gamma_5^{-1} = \exp(-k - i\omega)$) e ($\gamma_6 = \exp(-k + i\omega), \gamma_6^{-1} = \exp(k - i\omega)$), apenas em espaços de dimensão maior ou igual a quatro e correspondem a uma contração ou dilatação acompanhadas de uma rotação em torno de pontos de fonte ou sumidouros dependendo do sinal de k .

Dinâmicas não-lineares podem ser compreendidas, ao menos estruturalmente, por vias da dinâmica linear e seus subterfúgios topológicos [20, 11, 1] dos quais são notáveis os teoremas de *Hartman-Großman* e *da retificação*, o famigerado *KAM* e o *teorema de Poincaré-Birkhoff*.

Dessarte, a evolução das órbitas no espaço de fase para hamiltonianas não-quadráticas em z podem ser associadas localmente as linearizadas. Em regiões suficientemente distantes de pontos singulares, retificamos o fluxo tubular pelo teorema da retificação. Para as regiões que contém tais pontos, associamos o fluxo não-linear ao linear de acordo com a equivalência topológica garantida pelo teorema de Hartman-Großman, desde que os autovalores da matriz simplética nesse ponto não sejam imaginários puros. Para o caso de autovalores imaginários puros recorre-se aos teoremas KAM e de Poincaré-Birkhoff, que associam a dinâmica não-integrável à integrável.

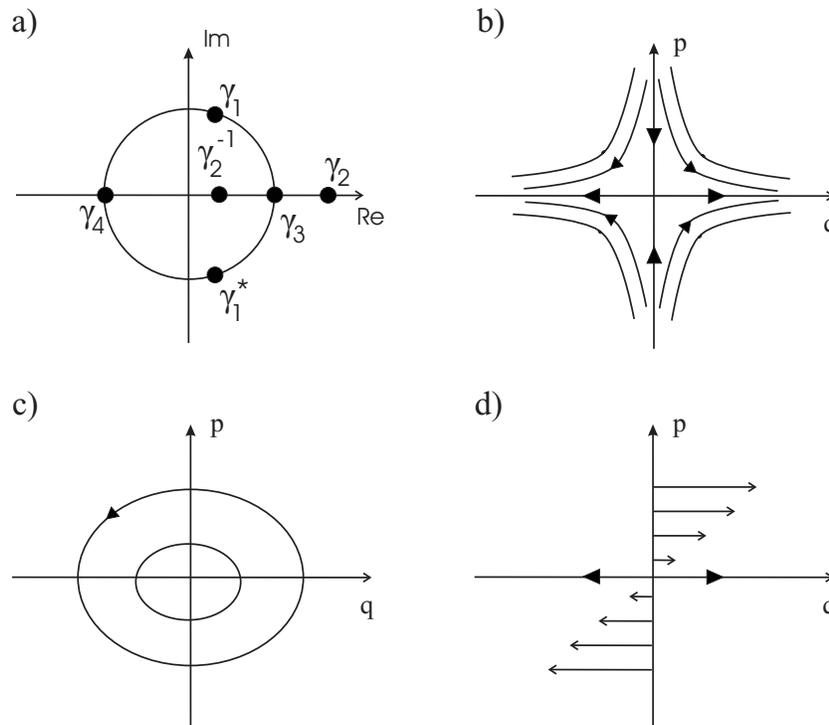


Figura 1.1: Autovalores das matrizes simpléticas e comportamento das órbitas do espaço de fase em torno de um ponto. a) Disposição dos autovalores no círculo unitário complexo, b) autovalores $(\gamma_2, \gamma_2^{-1})$: ponto de sela, c) autovalores (γ_1, γ_1^*) : ponto elíptico e d) autovalores (γ_3, γ_3) : ponto parabólico.

1.4 Caos e Oscilador chutado

A presença do caos nos sistemas dinâmicos se manifesta principalmente na sensibilidade às condições iniciais [12]. Dois pontos do espaço de fase, z_1 e z_2 , separados por uma distância $d(z_1, z_2, t_0)$, em um instante posterior $t_0 + \Delta t$, se encontrarão separados por $d(z_1, z_2, t_0 + \Delta t) \propto \exp(\lambda \Delta t)$, onde λ é o maior *expoente de Lyapunov*. A sensibilidade de um sistema está determinada pela positividade de λ , podendo se afirmar, então, que a existência de ao menos um expoente de Lyapunov positivo é garantia de uma dinâmica caótica.

Poincaré observou tal fato³ em seus estudos sobre a estabilidade do sistema solar. A transformação epistemológica provinda de suas observações torna insuficiente a mecânica clássica outrora apenas integrável.

Em contraste, um sistema de n graus de liberdade é tido como *integrável* se possuir n constantes de movimento, $\{h_i(q, p); i = 1, \dots, n\}$, independentes e em involução. As constantes são ditas independentes se os campos vetoriais, $\{\nabla h_i; i = 1, \dots, n\}$, gerados por estas constantes são linearmente independentes ponto a ponto do espaço de fase. Entende-se por *involução* a anulação dos n^2 colchetes de Poisson, definidos em (1.7), entre as n funções.

Qualquer trajetória de um sistema integrável está contida em uma superfície n dimensional, denominada *lagrangiana*, no espaço de fase, resultante da interseção dos n planos definidos por $\frac{\partial h_i}{\partial t}(q, p) = 0$. Essas superfícies possuem n circuitos irredutíveis [2, 20], ou seja, são toros n -dimensionais.

De forma geral, sistemas não-lineares são responsáveis pela caoticidade da dinâmica, e sistemas integráveis pela linearidade e regularidade. Prosaicamente, os sistemas integráveis constituem, de fato, a minoria absoluta dos sistemas dinâmicos, porém, sua compreensão serve como alicerce para o entendimento dos demais.

1.4.1 Sistema chutado

Em geral sistemas delta-chutados são vastamente utilizados para o estudo do caos. O pioneiro é o rotor chutado, intimamente ligado ao mapa de Chirikov-Taylor ou mapa “padrão” [8]. A transfiguração do sistema chutado num mapa se faz utilizado a *seção de Poincaré estroboscópica* [27] do sistema de equações dinâmicas, que será construída explicitamente para o caso do *Oscilador Harmônico Chutado*

³ “It may happen that small differences in the initial conditions produce very great ones in the final phenomena. A small error in the former will produce an enormous error in the latter. Prediction becomes impossible, and we have the fortuitous phenomenon.” - H. Poincaré, *Science and Method* (T. Nelson and Sons, Londres, 1914)

(OHC).

A hamiltoniana do OHC é definida como:

$$H := \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\nu^2q^2 + A \cos(kq) \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta(t - \tau), \quad (1.16)$$

e descreve a dinâmica de um oscilador harmônico simples, perturbado periodicamente por um chute instantâneo de amplitude $A \cos(kq)$.

Sistemas integráveis, quando perturbados, apresentam geralmente o regime de *caos fraco* [27, 16], ou dinâmica mista. Em tais sistemas existe uma transição suave do comportamento regular para o caótico através da quebra das separatrizes no espaço de fase e a consequente formação da camada estocástica em torno destas, conforme o aumento da intensidade da perturbação. Tal transição é propiciada pela convivência no espaço de fase, neste cenário, de dinâmicas hiperbólicas e elípticas e suas recorrentes bifurcações.

As órbitas de um sistema integrável, indexadas por suas variáveis de ângulo-ação – $(J, \theta(J))$, apresentam respostas à perturbação chamadas de *ressonâncias não-lineares* que ocorrem quando a frequência $\nu(J)$ da órbita é ressonante com a da perturbação, ν_c , ou seja, existem inteiros j, l tais que $j\nu(J) - l\nu_c = 0$. As *zonas de ressonância* são vizinhanças dos pontos onde a condição de ressonâncias é satisfeita. Um toro não-ressonante é um toro fora das zonas de ressonâncias. A teoria de perturbação convencional diverge para os toros não-ressonantes devido à aparição espontânea de pequenos denominadores [20, 27].

O teorema KAM [20, 27, 16] garante que sob perturbações suficientemente pequenas em um sistema integrável, a maioria das órbitas não-ressonantes sobrevivem, desde que resguardada a “não-degenerescência” da função $\nu(J)$, ou seja,

$$\left| \frac{\partial^2 H_0(J)}{\partial J_k \partial J_l} \right| \neq 0.$$

Exatamente a restrição às órbitas não-degeneradas torna o sistema OHC pecu-

liar. Realizando a transformação de variáveis [13]

$$q = \sqrt{\frac{2J}{m\nu}} \sin \theta \quad e \quad p = \sqrt{2m\nu J} \cos \theta$$

para o oscilador harmônico, passamos das coordenadas de espaço de fase, (q, p) , às de *ângulo-ação*, (J, θ) , e encontramos $H_0(J) = \nu J$ como o hamiltoniano do oscilador harmônico não perturbado. Claramente a condição de não-degenerescência é frustrada para H_0 . Para quaisquer condições iniciais, as órbitas têm exatamente a mesma frequência de rotação no espaço de fase. Se tratarmos o termo delta chutado do OHC como uma perturbação em H_0 , a expansão perturbativa não converge, portanto a passagem para o caos não é descrita como a de um sistema KAM.

Para hamiltoniana do OHC, as equações de movimento são

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{p}{m} \\ \frac{dp}{dt} &= -m\nu^2 q + Ak \sin(kq) \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta(t - \tau\tau). \end{aligned}$$

A natureza infinitesimal do chute nos permite integrar as equações de movimento em dois estágios distintos. Primeiro trataremos a evolução sob a ação instantânea do chute durante um intervalo de tempo infinitesimal, e depois consideraremos a evolução do oscilador harmônico simples.

Integrando, então, as equações de movimento sob o τ -ésimo chute:

$$\begin{aligned} \int_{q_t^-}^{q_t^+} dq &= \int_{\tau\tau-\epsilon}^{\tau\tau+\epsilon} \frac{p}{m} dt, \\ \int_{p_t^-}^{p_t^+} dp &= \int_{\tau\tau-\epsilon}^{\tau\tau+\epsilon} \left[-m\nu^2 q + Ak \sin(kq) \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \delta(t - \tau\tau) \right] dt. \end{aligned}$$

No limite $\epsilon \rightarrow 0$, obtemos o mapa:

$$\begin{aligned} q_t^+ &= q_t^-, \\ p_t^+ &= p_t^- + Ak \sin(kq_t^-). \end{aligned}$$

Os pares $(q_{\mathfrak{t}}^+, p_{\mathfrak{t}}^+)$ e $(q_{\mathfrak{t}}^-, p_{\mathfrak{t}}^-)$ referem-se aos valores de (q, p) imediatamente antes e depois do \mathfrak{t} -ésimo chute.

Entre dois chutes consecutivos, $\mathfrak{t}\tau < t < (\mathfrak{t} + 1)\tau$, o sistema evolui harmonicamente com frequência ν :

$$\begin{aligned} q(t) &= q(0) \cos(\nu t) + \frac{p(0)}{m\nu} \sin(\nu t), \\ p(t) &= -m\nu q(0) \sin(\nu t) + p(0) \cos(\nu t). \end{aligned}$$

O intervalo de tempo entre tais chutes é τ , portanto a evolução do oscilador, que se inicia imediatamente após o chute, gera uma rotação horária no espaço de fase de um ângulo $\nu\tau$ até o chute subsequente, o que justifica a escolha das condições iniciais da parte oscilatória como $q(0) = q_{\mathfrak{t}}^+$ e $p(0) = p_{\mathfrak{t}}^+$.

Assumindo, sem perda de generalidade, que no instante inicial o sistema começa a evoluir com um chute, escrevemos a evolução completa como o mapa:

$$\begin{aligned} q_{\mathfrak{t}+1}^+ &= \cos(\nu\tau)q_{\mathfrak{t}}^+ + \frac{1}{m\nu} \sin(\nu\tau)p_{\mathfrak{t}}^+ + \frac{Ak}{m\nu} \sin(\nu\tau) \sin(kq_{\mathfrak{t}}^+), \\ p_{\mathfrak{t}+1}^+ &= -m\nu \sin(\nu\tau)q_{\mathfrak{t}}^+ + \cos(\nu\tau)p_{\mathfrak{t}}^+ + Ak \cos(\nu\tau) \sin(kq_{\mathfrak{t}}^+). \end{aligned}$$

A partir de agora os índices \pm serão omitidos, pois que os índices \mathfrak{t} e $\mathfrak{t}+1$ casualmente já indicam a posterioridade ou a anterioridade do chute respectivamente.

Realizando uma mudança linear de coordenadas no par de equações do OHC, podemos escrevê-las de modo adimensional. Fazendo $q \mapsto kq, p \mapsto k(m\nu)^{-1}p$ e ainda definindo $K := \frac{k^2 A}{m\nu}$ obtém-se o mapa:

$$\begin{aligned} q_{\mathfrak{t}+1} &= \cos(\nu\tau)q_{\mathfrak{t}} + \sin(\nu\tau) [p_{\mathfrak{t}} + K \sin(q_{\mathfrak{t}})], \\ p_{\mathfrak{t}+1} &= -\sin(\nu\tau)q_{\mathfrak{t}} + \cos(\nu\tau) [p_{\mathfrak{t}} + K \sin(q_{\mathfrak{t}})], \end{aligned} \quad (1.17)$$

que será representado simbolicamente por

$$z_{\mathfrak{t}+1} = \widetilde{M}(z_{\mathfrak{t}}).$$

A evolução de uma condição inicial, escolhida aleatoriamente, com a aplicação sucessiva mapa (1.17) pode ser vista na figura 1.2. O ponto 1 representa a condição inicial, os chutes são representados com linhas retas e as rotações por curvas.

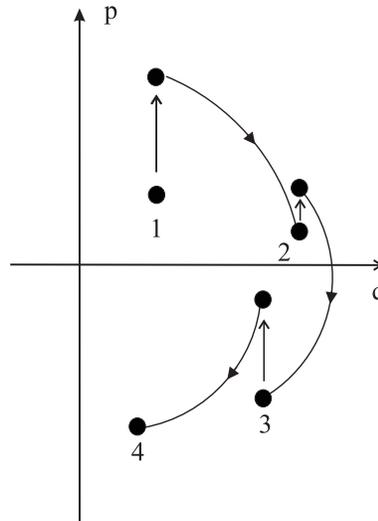


Figura 1.2: Uma condição inicial (ponto 1) evoluída com o mapa OHC para $K = 2$ e $\nu\tau = \frac{\pi}{3}$; as linhas retas representam chutes, enquanto as curvas rotações.

O processo congênito descrito para a obtenção das equações de movimento para o OHC é a construção da dinâmica estroboscópica. O mapa não linear do OHC representa a evolução dos pontos no espaço de fase estendido calculados nas seções de Poincaré tomadas em $t = (t + 1)\tau$.

1.4.2 Seções Estroboscópicas

O mapa (1.17) é interessante para o estudo do caos devido à diversidade de comportamentos exibidos para variações dos seus parâmetros, τ , ν e K .

A razão entre as frequências, ν e $\nu_c := \frac{2\pi}{\tau}$, determinam a estrutura do espaço de fase. No caso de uma razão irracional, apesar de não se tratar de um sistema KAM, manifesta características muito similares: a presença de toros não-ressonantes implica na quasi-periodicidade das trajetórias, ou seja, num tempo finito todas retornam a uma vizinhança de uma trajetória anterior, como no caso integrável; o espaço de fase é folheado por toros não ressonantes envoltos por mares caóticos. Já no caso de uma razão racional, onde a frequência do chute é ressonante com a do oscilador, temos um espaço de fase dividido em células, formando redes periódicas ou quasi-periódicas imersas no espaço de fase caótico, por menor que seja a perturbação. Ambos os casos são tratados em [27, 17]; em [27] encontra-se um estudo do comportamento das ressonâncias do sistema e a precipitação do caos tão bem como o surgimento das redes estocásticas, já [17] trata alguns casos particulares para o sistema OHC.

O valor de K determina a força dos chutes — a intensidade da não-linearidade. K é um *parâmetro bifurcativo*, ou seja, existe um transiente entre os regimes regular e o caótico controlado por essa variável. Tais transições ocorrem em valores especiais dessa variável, em [27] são apresentados métodos para sua obtenção.

Num sistema KAM, a formação da rede estocástica ocorre a partir da quebra de separatrizes e a formação de uma camada estocástica entorno destas. O sistema OHC não possui tais trajetórias, mesmo assim ocorre tal quebra para um conjunto de toros que é governada pela sensibilidade do sistema com relação à variação de K . Na figura 1.3 são expostos alguns valores de K e o respectivo mapa de Poincaré do OHC: para os valores $K \leq 1$ há caos, porém o processo de difusão não é acentuado e os toros permanecem quase intocáveis, a intensidade dos chutes não afeta consideravelmente a dinâmica regular do sistema. Para valores $K > 1$ as irregularidades começam a emergir no espaço de fase. Para valores próximos de $K = 1.75$ a camada estocástica começa a ser formada e se inicia o processo de difusão [27]. Para $K = 2$

a difusão já é acentuada no regime de *caos fraco*, que se caracteriza pela convivência de dinâmicas hiperbólicas e elípticas. O regime de *caos forte* ocorre para valores $K \gg 1$ e é descrito pela presença única de pontos hiperbólicos [16].

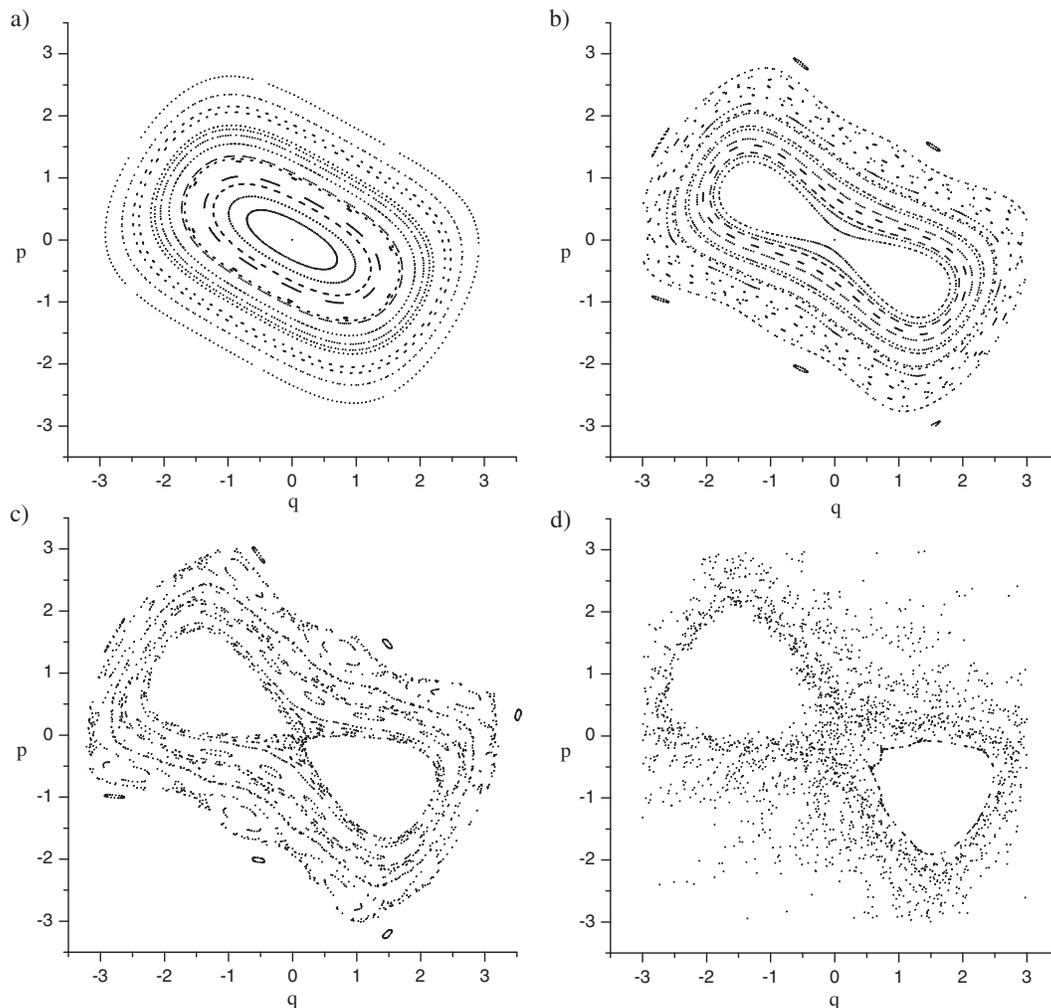


Figura 1.3: Seções de Poincaré estroboscópicas para o OHC com $\nu\tau = \frac{\pi}{3}$, 4 condições iniciais, 100 iterações e a) $K = 1$, b) $K = 1.5$, c) $K = 1.75$ e d) $K = 2$.

O tipo de rede estocástica presente na seção de Poincaré do OHC depende do valor de K , já que esse parâmetro exerce influência no processo de difusão e da relação

de ressonância do sistema. A figura 1.4 mostra a forma da rede para dois valores da razão $\frac{\nu}{\nu_c}$, o gráfico a) corresponde à rede estocástica gerada pela célula da figura 1.3-d). Para $\nu\tau = \pi/3$ tem-se uma rede hexagonal e para $\nu\tau = \pi/2$, uma rede quadrada.

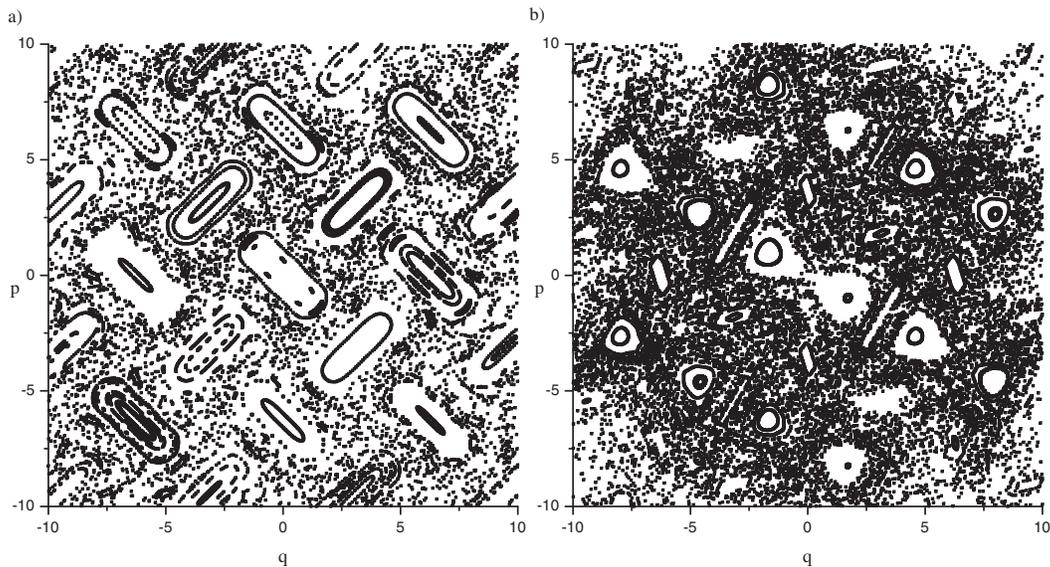


Figura 1.4: Redes Estocásticas com $K = 2$, 500 iterações e a) $\nu\tau = \frac{\pi}{2}$, b) $\nu\tau = \frac{\pi}{3}$.

A variedade de comportamentos exibidos para diferentes valores dos parâmetros do sistema torna a dinâmica rica e interessante para o estudo do caos. Existe um número infindável de trabalhos sobre este sistema, algumas referências são encontradas em [27, 17]. Nos próximos capítulos quantizaremos semiclassicamente o mapa do OHC, e compararemos com a evolução quântica realizada em [25, 7]. Por motivos computacionais e outros já mencionados estes autores optaram por um grupo particular de parâmetros do OHC, são eles $K = 2$ e $\nu\tau = \frac{\pi}{3}$, cuja dinâmica pode ser observada nas figuras 1.3 e 1.4.

1.4.3 Dinâmica Linearizada

Após a apresentação de algumas características do OHC, passemos à dinâmica linearizada para entendermos localmente o comportamento do sistema entorno dos seus pontos fixos.

Os *pontos fixos* de um mapa, isto é, pontos que sob a aplicação do mapa permanecem inalterados, são importantes para a análise da estabilidade do sistema. O estudo da dinâmica entorno desses pontos revela, então, o comportamento do sistema nesta região que contribui para a compreensão geral das órbitas do mapa.

Para o sistema de equações (1.17), os pontos fixos $Z = (Q, P)$ são calculados por

$$Z = \widetilde{M}(Z),$$

cujas soluções são determinadas pelo par de equações

$$\begin{aligned} Q &= \frac{K \sin(\nu\tau)}{2[1 - \cos(\nu\tau)]} \sin Q \\ P &= -\frac{K \sin Q}{2}, \end{aligned}$$

que constitui um sistema de equações transcendentais. Graficamente as soluções podem ser representadas pelo conjunto de pontos formado pela interseção de uma reta com coeficiente angular $a := \frac{2[1 - \cos(\nu\tau)]}{K \sin(\nu\tau)}$ e uma senóide. Valores de a geram soluções distintas para (Q, P) , alterando não só o número de pontos fixos como também sua localização. As nuances das soluções corroboram com as distintas dinâmicas para valores de K e $\nu\tau$. Na figura 1.3 pode-se ver a existência de um ponto fixo, $(0, 0)$, elíptico em a) e b), sua transmutação para hiperbólico em c) e d) e a criação de dois outros pontos elípticos simétricos em b), c) e d).

O caso de interesse, $K = 2$, $\nu\tau = \frac{\pi}{3}$ e então $a = \sqrt{3}$, pode ser visto na figura 1.5. Existem três pontos fixos, um claramente é $(0, 0)$ os outros dois são obtidos numericamente iguais a $(1.71, -0.99)$, $(-1.71, 0.99)$.

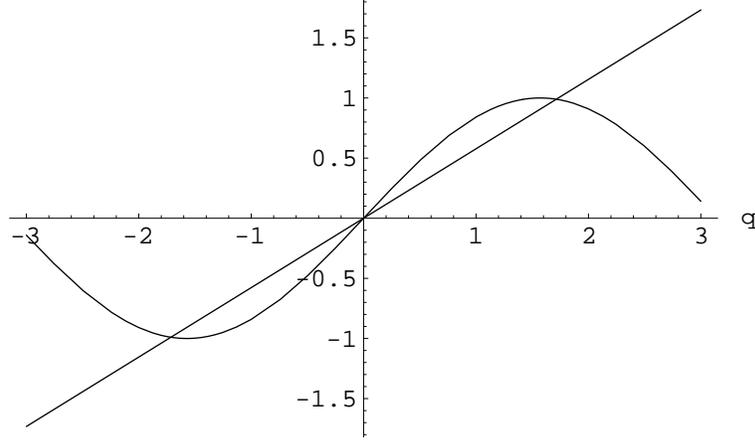


Figura 1.5: Solução para equação transcendental com $a = \sqrt{3}$.

A aproximação AOA descreve a linearização da dinâmica em torno de uma órbita. Aqui a expansão da hamiltoniana é trocada pela do mapa. Para um mapa $\tilde{N}(z_t)$ e um ponto fixo Z ,

$$z_{t+1} := \tilde{N}(z_t) = \tilde{N}(Z) + \nabla_z \tilde{N}(Z)(z_t - Z) + \dots \implies \delta Z_{t+1} \approx \frac{\partial \tilde{N}}{\partial z_t}(Z) \delta Z_t,$$

e a dinâmica linearizada se torna completamente determinada pela matriz jacobiana $\nabla_z \tilde{M}(Z)$.

Para o mapa OHC,

$$\nabla_z \tilde{M}(Q, P) = \begin{pmatrix} \cos \nu\tau + K \sin(\nu\tau) \cos(P) & \sin(\nu\tau) \\ -\sin \nu\tau + K \cos(\nu\tau) \cos(P) & \cos(\nu\tau) \end{pmatrix},$$

os autovalores de $\nabla_z \tilde{M}$ corroboram com a figura 1.3-d) e são hiperbólico e elípticos para os três pontos fixos $Z = (Q, P)$ descritos dois parágrafos acima.

Os autovetores da matriz jacobiana associada ao ponto hiperbólico são $v_{\lambda_1} \approx (0.99, 0.07)$ com autovalor $\lambda_1 \approx 2.3$ e $v_{\lambda_2} \approx (-0.43, 0.90)$ com $\lambda_2 \approx 0.44$, ou seja, uma direção de expansão e outra de contração respectivamente, onde $\lambda_1 \lambda_2 = 1$.

No caso dos pontos elípticos só nos interessa verificar que os autovalores associados são imaginários e os autovetores são complexos com partes reais iguais.

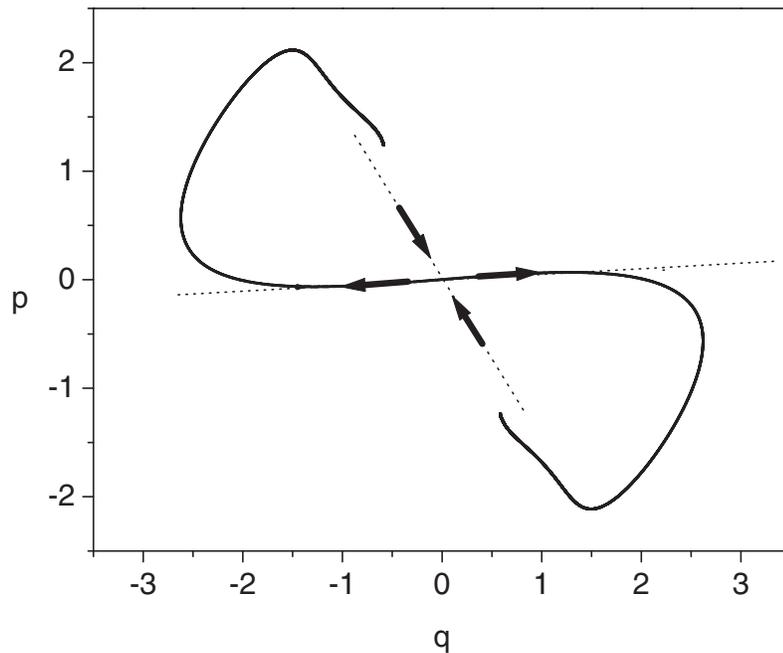


Figura 1.6: Variedade instável e autovetores do mapa OHC.

A figura 1.6 mostra a *variedade instável* do ponto hiperbólico da origem e os autovetores correspondentes. Esta variedade é tangente ao autovetor relativo à expansão. A dobra da variedade indica o ponto elíptico e ainda nota-se claramente a formação de um *ponto homoclínico*, ou seja, o encontro da variedade instável que se dobra com a estável – assinatura inata dos sistemas caóticos [11, 12, 16, 20, 27]. A simetria de reflexão é latente nesta figura; pode ser notada também na figura 1.3-d) e ocorre devido à simetria do mapa OHC (1.17), pois, $\widetilde{M}(-z_t) = -\widetilde{M}(z_t)$.

Capítulo 2

Dinâmica Semiclássica

“Este saber, tão inacessível e temível, o louco detém em sua parvoíce inocente. Enquanto o homem racional e sábio só percebe desse saber algumas figuras fragmentárias - e por isso mais inquietantes-, o louco o carrega inteiro em uma esfera intacta: essa bola de cristal, que para todos está vazia, a seus olhos está cheia de um saber invisível.”

Michel Foucault - *História da Loucura*

A tentativa de entender a espinha dorsal da teoria quântica culmina com sua união com a mecânica clássica. Conceitos outrora disjuntos, como espaços de fase e espaços de Hilbert, passam a integrar uma nova teoria, a qual damos o nome de mecânica semiclassical.

A teoria semiclassical, aqui sobrelevada, procura equivalentes quânticos das operações sobre o espaço de fase clássico. E ainda, mesmo na mecânica quântica, onde os operadores de posição e momento não comutam, busca-se um grupo de estados no espaço de Hilbert que unifique coordenadas e momentos, como na mecânica clássica.

Na primeira seção deste capítulo, apresentamos uma breve discussão sobre mecânica quântica, apenas para citar os conceitos necessários para introduzirmos

a dinâmica semiclássica na segunda seção. A segunda é dedicada a quantização das transformações canônicas lineares, começando pelos operadores de Heisenberg, ou de translação seguidos dos metapléticos. Incluímos também uma seção sobre os estados coerentes e outra sobre as funções de Wigner.

O propagador semiclássico, que será descrito no próximo capítulo, é construído como um produto de operadores metapléticos e de translações.

2.1 Sistema Quântico

Um *Espaço de Hilbert* \mathfrak{H} é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos, normado e completo. Denotaremos por $|\psi\rangle$ um vetor desse espaço.

O conjunto dos operadores, ou *endomorfismos* sobre um espaço de Hilbert, $\text{End}_{\mathbb{C}}(\mathfrak{H})$, é definido como o conjunto das transformações lineares, tais que, se $\hat{\mathcal{O}} \in \text{End}_{\mathbb{C}}(\mathfrak{H})$, então,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}} &: \mathfrak{H} \longrightarrow \mathfrak{H} \\ &: |\psi\rangle \longmapsto |\phi\rangle. \end{aligned}$$

Alguns elementos notáveis de $\text{End}_{\mathbb{C}}(\mathfrak{H})$ são aqueles que possuem *subespaços invariantes*¹ unidimensionais. Os autovetores destes operadores formam um conjunto completo ortonormal, ou uma *base*, para o espaço de Hilbert do sistema em estudo.

Trataremos aqui, especificamente, três bases distintas, a de posição $|q_0\rangle$, a de momento $|p_0\rangle$ e a hamiltoniana $|E_n\rangle$, com $q_0, p_0 \in \mathbb{R}$ e $E_n \in \mathbb{R}$, ou \mathbb{N} dependendo do tipo de estado, não-ligado ou ligado respectivamente. Os endomorfismos responsáveis pelas bases de posição e momento obedecem à regra de comutação

¹Um subespaço invariante, \mathfrak{V} , sob a ação de um operador $\mathcal{O} \in \text{End}_{\mathbb{C}}(\mathfrak{H})$, é um subespaço vetorial de \mathfrak{H} , tal que, $\forall |\psi\rangle \in \mathfrak{V}$, $\hat{\mathcal{O}} |\psi\rangle \in \mathfrak{V}$; os subespaços, \mathfrak{H} e \emptyset são denominados subespaços invariantes triviais.

canônica,

$$[\hat{q}, \hat{p}] := i\hbar\mathbb{I},$$

que pode ser colocada na forma coletiva definida na seção 1.1 como:

$$[\hat{z}_i, \hat{z}_j] := i\hbar J_{ij}, \quad (2.1)$$

onde J_{ij} são os elementos de matriz de (1.3) e $\hat{z} := (\hat{q}, \hat{p})$, com \hat{q} e \hat{p} são vetores n -dimensionais.

O estado $|\psi(t_0)\rangle \in \mathfrak{H}$ é conectado temporalmente ao estado $|\psi(t)\rangle \in \mathfrak{H}$ se sua evolução é descrita por

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (2.2)$$

com $\hat{U}(t)$ unitário dado por

$$\hat{U}(t, t_0) := e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}, \quad (2.3)$$

onde \hat{H} é o operador hamiltoniano (que supomos independente do tempo). O operador $\hat{U}(t, t_0)$ comumente referido como *operador de evolução temporal*, aqui será referido como propagador². O estado $|\psi(t)\rangle$ em (2.2) obedece, então, a *equação de Schrödinger*,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (2.4)$$

Da equação de Schrödinger deduz-se a equação de autovalor para o endomorfismo hamiltoniano,

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

com

$$|\psi(t)\rangle := \sum_{n=0}^{+\infty} C_n e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |E_n\rangle$$

²O tratamento cêrceo nos diz que o propagador, na realidade, é o elemento de matriz de posição deste operador, ou seja, $\langle q' | \hat{U}(t, t_0) | q'' \rangle$.

e ainda $C_n := \langle E_n | \psi_0 \rangle$ que é a densidade de probabilidade de encontrarmos o estado $|\psi_0\rangle$ com energia E_n representada em termos do produto escalar dos vetores $|\psi_0\rangle$ e $|E_n\rangle$ segundo a notação de Dirac [22].

É importante ressaltar a possibilidade de escrevermos a evolução temporal de um sistema quântico diferente da descrita acima conhecida como quadro de Schrödinger; dentre diversos modos, ressaltemos o quadro de Heisenberg, onde os estados quânticos ou vetores de um espaço de Hilbert não evoluem temporalmente, mas sim os operadores:

$$\hat{U}(t - t_0)^\dagger \hat{O}(t_0) \hat{U}(t - t_0) := \hat{O}(t).$$

Uma outra classe de operadores necessária para este trabalho é a de translações, que em geral não possuem subespaços invariantes não-triviais. Escrevemo-los como:

$$\mathbb{T}_{\xi_q} := e^{-\frac{i}{\hbar} \xi_q \hat{p}} \quad \text{e} \quad \mathbb{T}_{\xi_p} := e^{\frac{i}{\hbar} \xi_p \hat{q}}, \quad (2.5)$$

de modo que a atuação destes em autoestados de coordenada e momento se resume em

$$\mathbb{T}_{\xi_q} |q\rangle := |q + \xi_q\rangle \quad \text{e} \quad \mathbb{T}_{\xi_p} |p\rangle := |p + \xi_p\rangle. \quad (2.6)$$

Equivalente ao quadro de Heisenberg para evolução temporal, podemos escrever

$$\mathbb{T}_{\xi_q}^\dagger \hat{q} \mathbb{T}_{\xi_q} = \hat{q} + \xi_q \quad \text{e} \quad \mathbb{T}_{\xi_p}^\dagger \hat{p} \mathbb{T}_{\xi_p} = \hat{p} + \xi_p. \quad (2.7)$$

Em face do exposto, o operador \hat{p} é o gerador das translações espaciais, assim como \hat{q} , o é para a base de momentos.

2.2 Mecânica Quântica no Espaço de Fase

A partir de agora, construir-se-á a dinâmica quântica sob a égide do espaço de fase clássico.

Iniciaremos, então, esta discussão definindo o que é conhecido na literatura por operadores de Heisenberg e passaremos aos operadores metapléticos com o propósito de elucidar alguns dos conceitos fundamentais para a descrição semiclássica da propagação de funções de onda.

2.2.1 Operadores de Heisenberg

A hamiltoniana

$$H(z, \xi) = \frac{z \wedge \xi}{\tau} \quad (2.8)$$

gera, no espaço de fase, nada além do que translações rígidas, ou seja, de acordo com a equação de Hamilton (1.2) pode se ver claramente que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}z(t) &= \mathbf{J} \frac{\partial}{\partial z} H(z, \xi) \\ &=: \mathbf{J} \nabla_z H(z, \xi) \\ &= (1/\tau) \mathbf{J} \nabla_z [\mathbf{J}z \cdot \xi] \\ &= \xi/\tau, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde $\xi := (\xi_q, \xi_p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ é chamada de *corda* no espaço de fase e τ é uma constante.

Como em todo processo de quantização canônico, transforma-se a hamiltoniana clássica na correspondente quântica simplesmente pela troca das coordenadas do espaço de fase (q, p) pelo par de operadores (\hat{q}, \hat{p}) . Faremos a substituição $z \mapsto \hat{z} := (\hat{q}, \hat{p})$ e, de acordo com a equação (2.8), escrevemos a evolução temporal como

$$\hat{U}(t) := \mathsf{T}_\xi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar\tau} \hat{z} \wedge \xi t}. \quad (2.10)$$

Para um dado intervalo de tempo t , um vetor de estado se transforma, de acordo com (2.10), como

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar\tau} \hat{z} \wedge \xi t} |\psi_0\rangle$$

A fim de obtermos a função de onda nas representações de posição e momento, vamos usar a fórmula de *Baker-Hausdorff*

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-1/2[A,B]},$$

se $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$; para o operador (2.10), temos

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_\xi(t) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} \hat{z} \wedge \xi t\right] \\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} t(\hat{p}\xi_q - \hat{q}\xi_p)\right] \\ &= \exp\left[\frac{i}{2\hbar\tau^2} t^2 \xi_q \xi_p\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} t \xi_q \hat{p}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar\tau} t \xi_p \hat{q}\right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde além da fórmula de Baker-Hausdorff, usamos a equação (1.9). Então, temos para a função de onda na base de coordenadas:

$$\begin{aligned} \psi(q, t) &= \left\langle q \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} \hat{z} \wedge \xi t\right] \right| \psi_0 \right\rangle \\ &= \left\langle q \left| \exp\left[\frac{i}{2\hbar\tau^2} t^2 \xi_q \xi_p\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} t \xi_q \hat{p}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar\tau} t \xi_p \hat{q}\right] \right| \psi_0 \right\rangle \\ &= \exp\left[\frac{i}{2\hbar\tau^2} t^2 \xi_q \xi_p\right] \left\langle q - \xi_q t/\tau \left| \exp\left[\frac{i}{\hbar\tau} t \xi_p \hat{q}\right] \right| \psi_0 \right\rangle \\ &= \exp\left[-\frac{i}{2\hbar\tau^2} t^2 \xi_q \xi_p + \frac{i}{\hbar\tau} t \xi_p q\right] \left\langle q - \xi_q t/\tau \left| \psi_0 \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

vemos claramente que a função de onda $\langle q - \xi_q t/\tau | \psi_0 \rangle$ é a função $\psi(q, t)$ no instante de tempo inicial, porém com a posição continuamente deslocada pela evolução temporal a uma taxa de t/τ . No momento procuramos equivalentes quânticos da translação clássica no espaço de fase, dada por (2.8), então se tomarmos $t/\tau = 1$ na eq.(2.12) obteremos o resultado puramente translacional, escrito como

$$\psi_\xi(q) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} \xi_q \xi_p + \frac{i}{\hbar} \xi_p q\right] \psi(q - \xi_q). \quad (2.13)$$

Para a função de onda na base dos momentos, realizamos o mesmo cálculo,

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(p, t) &= \left\langle p \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar\tau} \hat{z} \wedge \xi t\right] \right| \psi_0 \right\rangle \Big|_{t/\tau=1} \\
&= \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \xi_q \xi_p - \frac{i}{\hbar} \xi_q p\right] \langle p - \xi_p | \psi_0 \rangle \\
&= : \tilde{\psi}_\xi(p).
\end{aligned} \tag{2.14}$$

A partir de agora redefiniremos os operadores de translação $\mathbb{T}_\xi(t)$ para $t = \tau$ em (2.11) como

$$\mathbb{T}_\xi := \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{z} \wedge \xi\right]. \tag{2.15}$$

Os operadores de translação, \mathbb{T}_ξ , são conhecidos como *operadores de Heisenberg* e o conjunto desses operadores forma o denominado *Grupo de Heisenberg*. A patente não-comutatividade desses operadores atribui a esse grupo uma peculiaridade, ou seja, a composição de dois operadores de Heisenberg dada por [21]

$$\mathbb{T}_{\xi_1} \mathbb{T}_{\xi_2} = \mathbb{T}_{\xi_1 + \xi_2} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \xi_1 \wedge \xi_2\right] \tag{2.16}$$

carrega uma fase embutida, conhecida em teoria de grupos por *cociclo* – fato que demonstra a influência do caminho tomado ao transladarmos uma função de onda pelo espaço de fase; argumentos mais detalhados, assim como as regras de composição de mais de 2 operadores, podem ser vistos em [21] e [18].

Neste último parágrafo exploramos algumas propriedades importantes do operador de Heisenberg. Tomando os elementos de matriz da equação (2.15), temos

$$\langle q | \mathbb{T}_\xi | q' \rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \xi_p \cdot \left(q' + \frac{\xi_q}{2}\right)\right] \delta(q' + \xi_q - q). \tag{2.17}$$

Com este resultado podemos obter a relação de completude dos operadores, basta

integrarmos o produto $\langle \mathbf{q}' | \mathbb{T}_\xi^\dagger | \mathbf{q}'' \rangle \langle q' | \mathbb{T}_\xi | q'' \rangle$ em todo o espaço de fase[18], com efeito,

$$\begin{aligned}
& \int d\xi \langle \mathbf{q}' | \mathbb{T}_\xi^\dagger | \mathbf{q}'' \rangle \langle q' | \mathbb{T}_\xi | q'' \rangle = \\
& = \int d\xi_p d\xi_q \left[e^{\frac{i}{\hbar} \xi_p (\frac{\xi_q}{2} - q'')} + \frac{i}{\hbar} \xi_p (q'' + \frac{\xi_q}{2}) \right] \delta(q'' - \xi_q - q') \delta(q'' + \xi_q - q') \\
& = \int d\xi_p d\xi_q \left[e^{\frac{i}{\hbar} \xi_p (q'' + \xi_q - q')} \delta(q'' - \xi_q - q') \delta(q'' + \xi_q - q') \right] \\
& = \int d\xi_p \left[e^{\frac{i}{\hbar} \xi_p (q' - q'')} \delta(q'' - q' + q'' - q') \right] \quad \therefore \\
& \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d\xi \langle \mathbf{q}' | \mathbb{T}_\xi^\dagger | \mathbf{q}'' \rangle \langle q' | \mathbb{T}_\xi | q'' \rangle = \delta(q' - q'') \delta(q'' - q'). \tag{2.18}
\end{aligned}$$

Outra propriedade trata da ortogonalidade desses operadores[18], ou seja,

$$\text{Tr} \left[\mathbb{T}_{\xi_1}^\dagger \mathbb{T}_{\xi_2} \right] = (2\pi\hbar)^n \delta(\xi_1 - \xi_2), \tag{2.19}$$

cuja dedução é trivial, apenas utilizamos (2.16).

2.2.2 Estados Coerentes

Não obstante as dificuldades com a não-comutatividade dos operadores de Heisenberg, é interessante construir uma base no espaço de Hilbert que concilie, como na seção 1.1, as de coordenada e momento.

Dado um estado arbitrário $|0\rangle$ com valores médios de posição e momento nulos, denominado *estado fiducial* [18], podemos construir um conjunto de estados $|z\rangle$ normalizados que obedecem à

$$|z\rangle := \mathbb{T}_z |0\rangle. \tag{2.20}$$

O valor esperado do operador $\hat{z} = (\hat{q}, \hat{p})$ no estado $|z\rangle$, $\langle \hat{z} \rangle = \langle z | \hat{z} | z \rangle$, pode ser escrito como: $\langle \hat{z} \rangle = \langle 0 | \mathbb{T}_z^\dagger \hat{z} \mathbb{T}_z | 0 \rangle$. De acordo com (2.7), então,

$$\langle \hat{z} \rangle = \langle z | \hat{z} | z \rangle = \langle 0 | (\hat{z} + z) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{z} | 0 \rangle + z. \tag{2.21}$$

Como por definição $\langle 0|\hat{z}|0\rangle = 0$, os estados $|z\rangle$ representam funções de onda centradas nos pontos $z = (q, p)$ do espaço de fase.

A família de estados $|z\rangle$, além das características acima, sustenta uma relação de completitude³ de sua base em um espaço de Hilbert. Utilizando as relações de completitude para a base de auto-estados de posição, de acordo com [18] temos

$$\begin{aligned}\int dz |z\rangle\langle z| &= \int dz \mathbb{T}_z^\dagger |0\rangle\langle 0| \mathbb{T}_z \\ &= \int dz dq_1 dq_2 dq_3 dq_4 [|q_1\rangle\langle q_1| \mathbb{T}_z^\dagger |q_2\rangle\langle q_2| 0\rangle\langle 0| q_3\rangle\langle q_3| \mathbb{T}_z |q_4\rangle\langle q_4|],\end{aligned}$$

e agora a (2.18),

$$\begin{aligned}&= (2\pi\hbar)^n \int dq_1 dq_2 dq_3 dq_4 [\langle q_2|0\rangle\langle 0|q_3\rangle |q_1\rangle\langle q_4| \delta(q_1 - q_4)\delta(q_3 - q_2)] \\ &= (2\pi\hbar)^n \int dq_1 dq_2 \langle q_2|0\rangle\langle 0|q_2\rangle |q_1\rangle\langle q_1|,\end{aligned}$$

como $\| |0\rangle \| = 1$,

$$= (2\pi\hbar)^n \int dq_1 |q_1\rangle\langle q_1| \quad \therefore$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dz |z\rangle\langle z| = \mathbb{I}. \quad (2.22)$$

Esta é relação de completitude para a família de estados $\langle z|z'\rangle$, advinda daquela para os operadores de Heisenberg – equação (2.18).

Impondo, baseado nos dois parágrafos precedentes, ainda que a representação de coordenadas do estado “fiducial” seja dada por

$$\langle q|z=0\rangle := \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right] \quad (2.23)$$

então, o estado do tipo (2.20) é o conhecido *estado coerente*.

É possível obter todos os estados coerentes a partir do estado (2.23) pela atuação

³Os estados coerentes são, na realidade, supercompletos, pois o produto escalar $\langle z|z'\rangle$ não é nulo para $z \neq z'$, como será visto nas próximas páginas.

direta dos operadores de translação, ou seja, de acordo com (2.12),

$$\langle q|z\rangle = \langle q|\mathbb{T}_z|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \exp\left[-\left(\frac{q - \langle\hat{q}\rangle_z}{2\Delta q}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle_z q - \frac{i}{2\hbar}\langle\hat{q}\rangle_z\langle\hat{p}\rangle_z\right], \quad (2.24)$$

onde,

$$\Delta q := \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \langle\hat{q}\rangle_z := \langle z|\hat{q}|z\rangle \quad \text{e} \quad \langle\hat{p}\rangle_z := \langle z|\hat{p}|z\rangle. \quad (2.25)$$

A transformada de Fourier da função de onda $\langle q|z\rangle$ resulta em uma nova gaussiana normalizada, $\langle p|z\rangle$, com dispersão dada por $\Delta p = \hbar/2\Delta q$, o que, de acordo com o *princípio da incerteza de Heisenberg*, caracteriza a mínima incerteza para estes estados[22].

Peculiarmente, esses estados formam uma base *supercompleta e não-ortogonal* para um espaço de Hilbert. Se utilizarmos novamente a relação de completeza para os auto-estados de posição, demonstramos facilmente que o produto escalar entre dois estados coerentes z_α e z_β , com dispersões Δq_α e Δq_β , valores médios de posição $Q_\alpha := \langle\hat{q}\rangle_{z_\alpha}$ e $Q_\beta := \langle\hat{q}\rangle_{z_\beta}$, e momento $P_\alpha := \langle\hat{p}\rangle_{z_\alpha}$ e $P_\beta := \langle\hat{p}\rangle_{z_\beta}$, é

$$\begin{aligned} \langle z_\alpha|z_\beta\rangle &= \left(\frac{2\Delta q_\alpha\Delta q_\beta}{\sigma_q^2}\right)^{n/2} \exp\left[-\left(\frac{Q_\alpha - Q_\beta}{2\sigma_q}\right)^2 - \left(\frac{P_\alpha - P_\beta}{2\sigma_p}\right)^2\right] \times \\ &\times \exp\left[\frac{i}{2\hbar}(P_\alpha Q_\alpha - P_\beta Q_\beta) - \frac{i}{\hbar}\frac{Q_\alpha\Delta q_\beta^2 + Q_\beta\Delta q_\alpha^2}{\sigma_q^2}(P_\alpha - P_\beta)\right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Obviamente, este produto é também uma função gaussiana das variáveis Q_α , Q_β , P_α e P_β , cujas dispersões são escritas como

$$\sigma_q := \sqrt{\Delta q_\alpha^2 + \Delta q_\beta^2} \quad \text{e} \quad \sigma_p := \sqrt{\Delta p_\alpha^2 + \Delta p_\beta^2} = \frac{\hbar}{2} \frac{\sigma_q}{\Delta q_\alpha\Delta q_\beta}. \quad (2.27)$$

Sob quaisquer circunstâncias, o produto escalar (2.26) nunca é zero, ou seja, dois estados coerentes nunca são ortogonais, porém sustentam uma relação de completeza e por isso são denominados *supercompletos*.

Cabe ainda comentar que estes estados são auto-estados do operador de aniquilação, \hat{a} , que determina a hamiltoniana de um oscilador harmônico quântico como $H := (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})\hbar\omega$, e tem autovalor $z := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle\hat{q}\rangle_z + \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\langle\hat{p}\rangle_z$.

A teoria dos estados coerentes é o subterfúgio para a harmonia das bases de momento e coordenada num espaço de Hilbert, apesar da relação de comutação dos operadores que têm essas bases como autovetores. A evolução temporal dos estados coerentes sob a hamiltoniana do oscilador harmônico descreve o movimento de uma partícula clássica no espaço de fase, inspirando o agnome *estados quase-clássicos* para estes estados[22].

Deve-se a R. J. Glauber as propriedades e a descrição destes estados, encontradas nos artigos seminais [15]. Descrições mais sucintas são encontradas em alguns simulacros como em [22].

2.2.3 Operadores Metapléticos

Além dos operadores de Heisenberg descritos no parágrafo acima, outros objetos de extrema importância para nossos fins são os *operadores Metapléticos*, aos quais essa seção é dedicada. Como já descritos, os operadores de Heisenberg surgem, neste contexto pelo menos, como tentativa de descrever translações de funções de onda no espaço de fase, já os operadores metapléticos, introduzidos por V. Bargmann em [4], de um modo geral, surgem para quantizar transformações canônicas lineares.

Uma *transformação canônica linear* entre dois vetores no espaço de fase $Z = (Q, P) \mapsto z = (q, p)$ é escrita como

$$Z_j = \sum_{k=1}^{2n} S_{jk} z_k, \quad (2.28)$$

onde $S := [S_{jk}]$ obedece à condição de simplecticidade (1.11).

Se impusermos o processo de quantização natural, que mapeia o parêntesis de Poisson (1.7) no comutador canônico (2.1), definido por

$$\{z_j, z_k\} = J_{jk} \mapsto [\hat{z}_j, \hat{z}_k] = i\hbar J_{jk}, \quad (2.29)$$

à transformação (2.28), obtemos que a mesma relação de comutação é satisfeita pela nova variável \hat{Z} , já que S é simplética em (2.28).

Procuramos um operador, $M(S)$, inspirados em (2.7), de tal forma que

$$M(S)^\dagger \hat{z} M(S) = S \hat{z} = \hat{Z}, \quad (2.30)$$

um operador deste tipo é chamado de *metaplético*.

Em virtude desta equação, um estado $|\phi\rangle \in \mathfrak{H}$ de um sistema quântico pode ser transformado em outro $|\psi\rangle \in \mathfrak{H}$ pela atuação de $M(S)$, com efeito, escrevemos

$$|\psi\rangle = M(S)|\phi\rangle,$$

o que é válido para qualquer $|\phi\rangle$.

Considera-se dois casos distintos de atuação dos operadores metapléticos: transformação *ativa* e *passiva*. Caso $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ representem estados distintos, ou seja, correspondentes a uma transformação canônica ativa no espaço de fases, as base para \mathfrak{H} permanecem invariantes perante a atuação de $M(S)$ e este operador mapeia um estado no outro permitindo-nos escrever particularmente para a base de posição,

$$\langle q|\psi\rangle = \int dq' \langle q|M(S)|q'\rangle \phi(q').$$

Já para a transformação passiva, os vetores representam o mesmo estado analisados com respeito a bases diferentes,

$$|q\rangle_{\hat{Q}} = M|q\rangle_{\hat{q}}, \quad (2.31)$$

o índice \hat{Q} indica a base dos auto-estados do operador de posição transformada por $M(S)$ de acordo com a equação (2.30) e o índice \hat{q} indica a base original, o que para os estados se manifesta como

$$\begin{aligned} \psi(q_{\hat{Q}}) &:= {}_{\hat{Q}}\langle q|\psi\rangle \\ &= \int dq' {}_{\hat{Q}}\langle q|q'\rangle_{\hat{q}} \langle q'|\phi\rangle \\ &= \int dq' {}_{\hat{Q}}\langle q|M(S)|q'\rangle_{\hat{q}} \phi(q'). \end{aligned}$$

Para ambos os casos, ativo e passivo, o elemento de matriz do operador metaplético é dado por

$$\begin{aligned} \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|q'\rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}} \times \\ &\times \exp\left[\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} q' - 2q' \cdot \mathbf{B}^{-1} q + q \cdot \mathbf{D} \mathbf{B}^{-1} q)\right], \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde omitimos os índices dos auto-estados de posição e as matrizes $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ e \mathbf{D} são blocos da matriz simplética \mathbf{S} , cf. eq.(1.13), e $\sigma = \pm 1$ é um sinal a ser discutido adiante; a dedução deste elemento encontra-se no Apêndice B desta tese.

Se considerarmos o estado $|\psi\rangle = \mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle$, onde $|0\rangle$ é o estado “fiducial” definido em (2.23) com $m\omega = 1$, obtemos um elemento de matriz misto entre estados coerentes e auto-estados de posição, ou seja,

$$\langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle = \frac{\sigma}{(\pi\hbar)^{n/4} [\det(\mathbf{A} + i\mathbf{B})]^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} q \cdot \left(\frac{\mathbf{D} - i\mathbf{C}}{\mathbf{A} + i\mathbf{B}}\right) q\right], \quad (2.33)$$

onde por comodismo de notação definimos a fração entre matrizes $\frac{\mathbf{A}}{\mathbf{B}}$ por $\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}$. Esta equação será utilizada posteriormente na composição do propagador semiclássico e está deduzida no apêndice B.

O elemento $\langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|z = \xi\rangle$ pode ser obtido facilmente pela aplicação direta do operador de translação definido na seção 2.2.1, *i.e.*, $\langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|z = \xi\rangle = \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})\mathbf{T}_\xi|0\rangle$ e da regra de comutação deste com o operador metaplético encontrada no Apêndice A. Destarte encontramos:

$$\begin{aligned} \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|z = \xi\rangle &= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \frac{\sigma}{[\det(\mathbf{A} + i\mathbf{B})]^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} \chi \cdot (\mathbf{A} + i\mathbf{B})^{-1} (\mathbf{A} - i\mathbf{B}) \chi\right] \times \\ &\times \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} q \cdot \left(\frac{\mathbf{D} - i\mathbf{C}}{\mathbf{A} + i\mathbf{B}}\right) q + \frac{\sqrt{2}}{\hbar} \chi \cdot (\mathbf{A} + i\mathbf{B})^{-1} q\right], \end{aligned} \quad (2.34)$$

com

$$\xi := (\xi_q, \xi_p) \quad \text{e} \quad \chi := \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi_q + i\xi_p). \quad (2.35)$$

Obtemos o elemento $\langle \xi_1 | \mathbf{M}(\mathbf{S}) | \xi_2 \rangle$ introduzindo uma relação de completeza para a base de autoestado de posição [18],

$$\begin{aligned} \langle \xi_1 | \mathbf{M}(\mathbf{S}) | \xi_2 \rangle &= \frac{\sigma}{[\det \Lambda]^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} (|\chi_1|^2 + |\chi_2|^2) \right] \\ &\times \exp \left[\frac{1}{2\hbar} (\chi_1^* \cdot \Gamma^* \Lambda^{-1} \chi_1^* + 2\chi_2 \cdot \Lambda^{-1} \chi_1^* - \chi_2 \cdot \Lambda^{-1} \Gamma \chi_2) \right], \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde, por compacidade, definimos

$$\Lambda := \frac{1}{2} [(A + D) + i(B - C)] \quad \text{e} \quad \Gamma := \frac{1}{2} [(A - D) - i(B + C)]; \quad (2.37)$$

e ainda,

$$\xi_j := (\xi_{q_j}, \xi_{p_j}) \quad \text{e} \quad \chi := \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi_{q_j} + i\xi_{p_j}), \quad (2.38)$$

para $j = 1, 2$.

Nos restam ainda alguns comentários sobre estes operadores, que foram camuflados para o bom decorrer do texto: a possível divergência dos métodos utilizados, o significado de σ na equação (2.32) e sua relação deste último com a composição de metapléticos.

É notável, a partir da equação (2.32), a ocorrência de termos inversamente proporcionais a $\det \mathbf{B}$. Esses termos divergem para $\det \mathbf{B} \rightarrow 0$, apesar destes em nenhum momento envolverem aproximações. Destarte a divergência é um fenômeno puramente físico e natural, ou seja, podemos chamá-lo de uma *cáustica* para os operadores metapléticos.

No caso de *funções de onda WKB*, cf. [20], as cáusticas são singularidades da amplitude das funções de onda - $\frac{\partial S(q)}{\partial q}$ - devido a ineficácia da aproximação e representam entraves no processo de quantização. Todavia, engenhosamente, são contornáveis realizando-se uma transformada de Fourier, que reconstrói a função de onda semiclássica na base dos momentos onde tal singularidade deixa de existir.

Aqui contornamos a divergência de forma similar, como pode ser apreendido da equação (2.33), onde a cáustica presente em (2.32) é eclipsada ao passarmos à base de estados coerentes.

O operador M , definido em (2.30), tem como parâmetro uma matriz simplética S . Estudemos agora a regra de composição destes operadores associada à composição de transformações simpléticas descritas na seção 1.2. O elemento de matriz da composição de dois metapléticos pode ser calculado utilizando a relação de completeza, a equação (2.32) e as relações (1.13). O resultado é o que segue:

$$\begin{aligned} \langle q|M(S_1)M(S_2)|q'\rangle &= \int dw \langle q|M(S_1)|w\rangle \langle w|M(S_2)|q'\rangle \\ &= \frac{\sigma_1\sigma_2}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^{2n}|\det B_1|^{1/2}|\det B_2|^{1/2}}} e^{\left[\frac{i}{2\hbar}q\cdot D_1B_1^{-1}q+q'B_2^{-1}A_2q'\right]} \times \\ &\times \sqrt{\frac{(2\pi i\hbar)^n}{|\det(B_1^{-1}A_1+D_2B_2^{-1})|}} \times \\ &\times e^{\frac{i}{2\hbar}(qB_1^{-1}+q'B_2^{-1})(B_1^{-1}A_1+D_2B_2^{-1})^{-1}(qB_1^{-1}+q'B_2^{-1})}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

O produto S_3 de duas matrizes simpléticas S_1 e S_2 é escrito como

$$S_3 = \begin{pmatrix} A_1A_2 + B_1C_2 & A_1B_2 + B_1D_2 \\ C_1A_2 + D_1C_2 & C_1B_2 + D_1D_2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} A_3 & B_3 \\ C_3 & D_3 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Então, prudentemente analisando a composição dos operadores metapléticos (2.39) e a composição para os simpléticos (2.40), o elemento de matriz de $M(S_1)M(S_2)$ pode ser escrito como,

$$\langle q|M(S_3)|q'\rangle = \frac{\sigma_3}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n|\det B_3|}} e^{\left[\frac{i}{2\hbar}(q'\cdot B_3^{-1}A_3q'-2q'\cdot B_3^{-1}q+q\cdot D_3B_3^{-1}q)\right]},$$

que exceto a fase σ_3 é a mesma equação (2.32) para $S_3 := S$. É possível observar que esta fase extraordinária é,

$$\sigma_3 := \sigma_1\sigma_2 \exp\left\{-\frac{i\pi}{4} [n - \text{sng}(B_1^{-1}B_3B_2^{-1}) + \varphi(B_3) - \varphi(B_1) - \varphi(B_2) + 1]\right\}, \quad (2.41)$$

com as seguintes definições: $\text{sng}(X) = N_+ - N_-$, onde N_{\pm} é o número de autovalores positivos, respectivamente negativos e $\varphi(X) = \pm 1$ é a função sinal do $\det X$, ou seja, é igual a 1 para $\det X \geq 0$ ou -1 para $\det X < 0$.

Para o caso unidimensional, $n = 1$, podemos escrever

$$\sigma_3 := \sigma_1 \sigma_2 e^{\frac{i\pi}{4} [\varphi(\mathbf{B}_3)\varphi(\mathbf{B}_1)\varphi(\mathbf{B}_2) + \varphi(\mathbf{B}_1) + \varphi(\mathbf{B}_2) - \varphi(\mathbf{B}_3) - 2]}, \quad (2.42)$$

que assume os valores ± 1 .

A composição dos operadores metapléticos, que acabamos de ver, permite a construção do *Grupo Metaplético*, denominado por $Mp(2n)$. Podemos observar que o produto do grupo $Sp(n, \mathbb{R})$ é preservado em $Mp(2n)$, se utilizarmos a equação (2.30),

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_3 \hat{z} &= \mathbf{M}(\mathbf{S}_3)^\dagger \hat{z} \mathbf{M}(\mathbf{S}_3) \\ &= [\pm \mathbf{M}(\mathbf{S}_1) \mathbf{M}(\mathbf{S}_2)]^\dagger \hat{z} [\pm \mathbf{M}(\mathbf{S}_1) \mathbf{M}(\mathbf{S}_2)] \\ &= \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \hat{z}, \end{aligned}$$

e os grupos são ditos *homomorfos*. Porém este homomorfismo claramente é não injetivo, todavia é “quase unívoco”, *i.e.*, existem dois únicos metapléticos para cada simplético [14].

A presença do sinal σ no produto dos operadores surge a fim de respeitar propriedades topológicas do grupo $Sp(n, \mathbb{R})$ [19, 14]. Para fins práticos a escolha do sinal depende das particularidades do operador em questão. Por exemplo, para a identidade escolhemos o sinal +1, a fim de que represente a identidade também no grupo $Mp(2n)$.

Após escolhido o corte das folhas de Riemann no plano complexo⁴, o sinal de um operador pode ser determinado pela composição de dois outros operadores de mesma natureza. Por exemplo, para uma matriz $\mathbf{S}(\theta)$ de rotação, dado que $\mathbf{S}(0) = \mathbb{I}$

⁴Para os cálculos das raízes quadradas tomamos o corte da folha de Riemann no eixo real positivo.

e que $\theta = \theta_1 + \theta_2$, σ_θ é determinado pelos sinais dos elementos $\sin(\theta)$, $\sin(\theta_1)$, $\sin(\theta_2)$ das matrizes de rotação. Ao atravessar a folha de Riemann o sinal da raiz quadrada em (2.32) pode mudar, em contrapartida a mudança deve ser acompanhada pelo sinal em (2.41) garantindo a continuidade do operador metaplético.

Um exemplo típico de transformação metaplética passiva é a *transformação de escala*, realizada pela matriz simplética

$$S_E = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m\omega}} & 0 \\ 0 & \sqrt{m\omega} \end{pmatrix},$$

que transforma o elemento $\langle q|M(S)|0\rangle$ da equação (2.33) no elemento

$$\langle q|M(S')|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \frac{\sigma}{[\det(\mathbf{A} + i\mathbf{B})]^{1/2}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} q \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{D} - i\mathbf{C} \\ \mathbf{A} + i\mathbf{B} \end{pmatrix} q\right],$$

com $S' = SS_E$. Já para o elemento $\langle q|M(S)|\xi\rangle$, a transformação de escala atua similarmente, porém, a corda ξ , definida em (2.38), deve ser transformada de acordo com $\tilde{\xi} = S_E^{-1}\xi$, o que se deve à transformação da base do espaço de fase e conseqüentemente a do espaço de Hilbert. Esse procedimento também pode ser entendido se em (2.33) substituíssemos o estado coerente com $m\omega \neq 1$. Em ambos os casos, escolhemos $\sigma = +1$.

Um outro exemplo interessante é a *transformada de Fourier*, que corresponde a uma rotação de $\frac{\pi}{2}$ no espaço de fase, ou seja, $S = \mathbf{J}$, novamente com $\sigma = +1$. Esses dois exemplos talvez esgotem o conjunto das transformações passivas relevantes. Para as transformações ativas, encontraremos ao longo deste texto diversas aparições.

Por fim, alternativamente podemos atribuir aos operadores metapléticos um mapeamento entre estados coerentes, ou seja, devido à sua forma quadrática, esses são operadores que deixam invariante o conjunto de estados coerentes[14]. Portanto o estado $M|z\rangle$ é a forma de um estado coerente mais geral possível e o produto escalar entre estados deste tipo é representado pela equação (2.36), onde a matriz

simplética S nesta equação é tomada como o produto das matrizes de cada estado, conforme a composição de operadores metaplétricos. Este produto escalar se reduz à (2.26) quando $S = \mathbb{I}$ e $\sigma = 1$.

No que tange à óptica, uma família de estados coerentes, isto é, estados com diferentes parâmetros m e ω , são utilizados para a descrição dos campos eletromagnéticos quantizados, e são denominados comprimidos (do inglês “squeezed”) e se restringem aos estados descritos na seção 2.2.2. O estado geral, que consiste num estado coerente “metapletizado”, também recebe a alcunha de coerente, pois também são estados de mínima incerteza. A fim de evitar confusões, sempre nos referiremos a estes como *estados coerentes gerais*, já os comprimidos e não comprimidos serão nomeados de apenas coerentes.

2.3 Formalismo de Weyl-Wigner

O princípio da incerteza de Heisenberg ostensivamente descarta a possibilidade de conjunção da mecânica quântica com o espaço de fase, já que a impossibilidade inerente da observação simultânea de momentos e coordenadas impede a construção de distribuições de probabilidades quânticas sobre o espaço de fase. Todavia, uma nova classe de distribuições, denominadas “quase-probabilísticas”, perspicazmente contradiz este discurso.

A primeira destas foi escrita em 1932 por E. P. Wigner com o desígnio de calcular correções quânticas à mecânica estatística clássica, e hoje constitui um artefato importante para tratamento da mecânica semiclássica. M. Berry em [5] criou a teoria semiclássica para função de Wigner que foi estendida por A. Ozorio de Almeida em [21] e outros.

A transformação de Weyl constitui a generalização da função de Wigner para quaisquer funções dos operadores de posição e momento, já que esta se destina apenas ao operador densidade. Para a construção das representações de Weyl e Wigner

seguiremos a conduta de [21] que se baseia nos operadores de translação capitulados na seção (2.2.1) e suas transformadas de Fourier conhecidas como operadores de reflexão.

Realizando a transformada de Fourier⁵ do operador de translação \mathbb{T}_ξ em (2.15), encontramos [21]

$$\frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi \exp\left[\frac{i}{\hbar} z \wedge \xi\right] \mathbb{T}_\xi = \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi \exp\left[\frac{i}{\hbar} \xi \wedge (\hat{z} - z)\right] =: \mathbb{R}_z. \quad (2.43)$$

Este operador é chamado de o *operador de reflexão* devido à similaridade da relação deste com o de translação e a relação entre suas versões clássicas, ver Apêndice A, e seus elementos de matriz nas bases dos auto-estados de \hat{q} e \hat{p} são dados respectivamente por

$$\langle q' | \mathbb{R}_z | q'' \rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar} p \cdot (q' - q'')\right] \delta(-q'' + 2q - q'), \quad (2.44)$$

$$\langle p' | \mathbb{R}_z | p'' \rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} q \cdot (p' - p'')\right] \delta(-p'' + 2p - p'). \quad (2.45)$$

Devido às propriedades inerentes aos operadores de translação, consideremos a possibilidade de escrevermos quaisquer operadores como a combinação linear deles, ou seja,

$$\hat{A}(\hat{z}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d\xi A(\xi) \mathbb{T}_\xi, \quad (2.46)$$

com os coeficientes $A(\xi)$ a serem determinados por:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[\mathbb{T}_{-\xi} \hat{A} \right] &= \text{Tr} \int \frac{d\xi'}{(2\pi\hbar)^n} A(\xi') \mathbb{T}_{-\xi} \mathbb{T}_{\xi'} \\ &= \int \frac{d\xi'}{(2\pi\hbar)^n} A(\xi') \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \xi' \wedge \xi\right] \text{Tr} \mathbb{T}_{\xi' - \xi} \\ &= A(\xi). \end{aligned}$$

Outrossim, podemos escrever

$$\hat{A}(\hat{z}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \int dz A(z) \mathbb{R}_z, \quad (2.47)$$

⁵Pode-se definir no espaço de fase a representação de centros e cordas: um ponto z é o centro de uma corda ξ , e estas variáveis são canonicamente conjugadas em um espaço de fase duplo. A transformada de Fourier é dita simétrica com relação ao termo $z \wedge \xi = p\xi_q - q\xi_p$ [21].

com

$$A(z) = \text{Tr} \left[\mathbf{R}_z \hat{A} \right], \quad (2.48)$$

que é a nobre transformada de Weyl para o operador $\hat{A}(z)$.

2.3.1 Função de Wigner

Como mencionado antes, a função de Wigner, $W(z)$, é proporcional à transformada de Weyl para o operador densidade $\hat{\rho}$, então,

$$W(z) := \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \text{Tr}[\mathbf{R}_z \hat{\rho}]. \quad (2.49)$$

Para um estado puro, ou seja, $\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$ e com respeito à base das coordenadas, podemos realizar o traço e reeditar $W(z)$ como

$$W(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int \psi(q + \frac{1}{2}\xi_q) \psi^*(q - \frac{1}{2}\xi_q) e^{-\frac{i}{\hbar}p\xi_q} d\xi_q. \quad (2.50)$$

e ainda para a representação de momentos,

$$W(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int \psi(p + \frac{1}{2}\xi_p) \psi^*(p - \frac{1}{2}\xi_p) e^{\frac{i}{\hbar}q\xi_p} d\xi_p. \quad (2.51)$$

A projeção de $W(z)$ nas bases de coordenada e momento resulta nas densidades de probabilidade de momento e coordenada, ou melhor, integrando a equação (2.50) em q e p , obtemo as distribuições marginais de probabilidade:

$$\int W(z) dq = |\langle\psi|p\rangle|^2 \quad \text{e} \quad \int W(z) dp = |\langle\psi|q\rangle|^2 \quad (2.52)$$

respectivamente em p e q .

Por meio da função de Wigner, um estado quântico pode ser representado por coordenadas do espaço de fase e suas projeções rendem as probabilidades quânticas, o que revela o seu caráter genuinamente semiclássico. Porém, tal função não pode ser encarada como uma distribuição no espaço de fase, como ϱ na seção 3.1.1, já que pode assumir valores negativos – donde o surgimento do epíteto “distribuição quase-probabilística”.

2.3.2 Função de Wigner de Estados Coerentes

A função de Wigner para um estado coerente $|\alpha\rangle$ é diretamente obtida a partir da equação (2.50),

$$W_\alpha(z) := \frac{1}{\pi\hbar} \langle \alpha | \mathbf{R}_z | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left[- \left(\frac{q - Q_\alpha}{\sqrt{2}\Delta q_\alpha} \right)^2 - \left(\frac{p - P_\alpha}{\sqrt{2}\Delta p_\alpha} \right)^2 \right],$$

para a qual usamos o estado coerente padrão definido em (2.25). A função W_α também é uma gaussiana normalizada, centrada nos pontos Q_α e P_α do espaço de fase. Já que a transformação de escala é uma transformação metapléctica, podemos reescrever a equação acima de um modo mais sutil, se pusermos $m\omega = 1$, temos

$$W_\alpha(z) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} (z - \xi_\alpha)^2 \right], \quad (2.53)$$

com $\xi_\alpha := (\xi_q = Q_\alpha, \xi_p = P_\alpha)$.

Um estado importante é a superposição de dois estados coerentes,

$$|\psi_1\rangle := \frac{1}{\sqrt{2 + 2\text{Re}(\langle \alpha | \beta \rangle e^{i\phi})}} (|\alpha\rangle + e^{i\phi} |\beta\rangle),$$

cuja função de Wigner pode ser calculada utilizando a relação (2.49) com $\hat{\rho} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ e o resultado obtido acima,

$$W_1(z) = \frac{1}{2 + 2\text{Re}(\langle \alpha | \beta \rangle e^{i\phi})} \left[W_\alpha(z) + W_\beta(z) + \frac{2}{\pi\hbar} I_1(\alpha, \beta) \right],$$

o termo $I_1(\alpha, \beta) := \text{Re}(\langle \alpha | \mathbf{R}_z | \beta \rangle e^{i\phi})$ é justamente o que confere importância a esse exemplo, pois trata da interferência genuinamente quântica; I_1 é calculado utilizando-se as regras do Apêndice 2,

$$\langle \alpha | \mathbf{R}_z | \beta \rangle = \langle \alpha | \mathbf{R}_{(z - \frac{\xi_\beta - \xi_\alpha}{2})} | \alpha \rangle e^{\frac{i}{\hbar} z \wedge (\xi_\alpha - \xi_\beta) + \frac{i}{2\hbar} \xi_\alpha \wedge \xi_\beta},$$

destarte,

$$\begin{aligned} W_1(z) &= \frac{1}{2 + 2\text{Re}(\langle \alpha | \beta \rangle e^{i\phi})} [W_\alpha(z) + W_\beta(z)] \\ &+ \frac{1}{1 + \text{Re}(\langle \alpha | \beta \rangle e^{i\phi})} \left[W_{\frac{\alpha+\beta}{2}}(z) \cos \left(\frac{1}{\hbar} z \wedge (\xi_\alpha - \xi_\beta) + \frac{1}{2\hbar} \xi_\alpha \wedge \xi_\beta + \phi \right) \right]. \end{aligned}$$

As duas funções de Wigner acima, $W_\alpha(z)$ e $W_1(z)$, são exemplos particulares, onde α e β representam estados coerentes. Para estados coerentes gerais, ou seja, estados sob a atuação metaplética, a superposição

$$|\psi\rangle = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{S}_\alpha)|\alpha\rangle + \mathbf{M}(\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle}{\sqrt{2 + 2\text{Re}\langle\alpha|\mathbf{M}(\mathbf{S}_\alpha^{-1}\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle}}$$

gera, usando a definição (2.49) e as regras do apêndice A, a função de Wigner:

$$W(z) = \frac{[W_\alpha(\mathbf{S}_\alpha^{-1}z) + W_\beta(\mathbf{S}_\beta^{-1}z) + 2(\pi\hbar)^{-1}\text{Re}\langle\alpha|\mathbf{M}(\mathbf{S}_\alpha^{-1})\mathbf{R}_z\mathbf{M}(\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle]}{2 + 2\text{Re}\langle\alpha|\mathbf{M}(\mathbf{S}_\alpha^{-1}\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle} \quad (2.54)$$

é a forma mais geral de funções de Wigner em termos do operador metaplético definido na seção 2.2.3.

Os termos diagonais, $W_\gamma(\mathbf{S}_\gamma^{-1}z) := (\pi\hbar^{-1})\langle\gamma|\mathbf{M}^\dagger(\mathbf{S}_\gamma)\mathbf{R}_z\mathbf{M}(\mathbf{S}_\gamma)|\gamma\rangle$ são pacotes gaussianos centrados no espaço de fase rotacionado por \mathbf{S}_γ nos pontos $\xi_\gamma = (\xi_q(\gamma), \xi_p(\gamma))$, com $\gamma = \alpha, \beta$.

O termo não diagonal, ou de interferência, é calculado usando as regras do apêndice A, com efeito,

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\mathbf{M}(\mathbf{S}_\alpha^{-1})\mathbf{R}_z\mathbf{M}(\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle &= \langle 0|\mathbf{T}_\alpha^\dagger\mathbf{T}_{2\mathbf{S}_\alpha^{-1}z}\mathbf{M}(-\mathbf{S}_\alpha^{-1}\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle \\ &= \langle\alpha - 2\mathbf{S}_\alpha^{-1}z|\mathbf{M}(-\mathbf{S}_\alpha^{-1}\mathbf{S}_\beta)|\beta\rangle \exp\left[\frac{i\pi}{2} + \frac{i}{\hbar}\alpha \wedge \mathbf{S}_\alpha^{-1}z\right]. \end{aligned}$$

Para calcular a parte real deste termo apelamos para eq. (2.37), com $\mathbf{S} := -\mathbf{S}_\alpha^{-1}\mathbf{S}_\beta$, $\xi_1 := \xi_{\alpha-2\mathbf{S}_\alpha^{-1}z}$ e $\xi_2 := \xi_\beta$.

Capítulo 3

Propagação de Pacotes de Onda

“Laissez-faire, laissez-passer, le monde va de lui-même.”

A estrutura versada nos capítulos anteriores porta a base física e matemática para o bom discorrer do atual capítulo. Realizar-se-á uma aproximação semiclássica com objetivo de descrever o efeito de propagação de pacotes de onda quânticos tendo como baluarte o espaço de fase.

Distintas aproximações semiclássicas da mecânica quântica foram propostas. Neste capítulo daremos ênfase àquela concebida por E. J. Heller em [10] e desenvolvida por R. G. Littlejohn em [18].

Iniciamos o capítulo por descrever a propagação de distribuições, ou pacotes clássicos. Neste contexto, desenvolvemos a AOA (definida no primeiro capítulo) para pacotes localizados, a fim de obtermos a dinâmica dos pontos da distribuição linearizada em torno da trajetória do centro. Construimos também o propagador semiclássico com base na quantização das transformações canônicas geradas pela dinâmica linear. Por fim, tratamos da propagação linear da função de Wigner e concluimos com um exemplo não-linear para a aplicação da teoria semiclássica do propagador.

3.1 Propagadores

A propagação quântica, apresentada na seção 2.1, é responsável pela evolução temporal de estados num espaço de Hilbert, como descrito nas equações (2.2), (2.3) e (2.4). Resta-nos ainda, a propagação clássica de distribuições, ou funções, sobre o espaço de fase e a semiclássica que une as duas citadas com o objetivo de evoluir estados quânticos localizados no espaço de fase.

3.1.1 Propagação Clássica

Abrimos esta discussão escrevendo dois conhecidos teoremas¹, o de Liouville e o da unicidade das soluções, que serão usados para o entendimento da dinâmica de funções sobre o espaço de fase clássico. São eles:

(i) Teorema de Liouville: *O fluxo de fase hamiltoniano, (1.5), conserva o volume de qualquer domínio Ω do espaço de fase.*

(ii) Teorema da Unicidade: *Dado um campo vetorial, $\nabla_z H$, contínuo num domínio aberto do espaço de fase com condição inicial $\varphi(z_i, t_i)$, então o sistema de equações diferenciais (1.1) admite uma solução única numa certa vizinhança de t_i .*

O teorema (i) garante que o volume de uma região Ω do espaço de fase é um *invariante integral de Poincaré*, já que a evolução temporal é uma transformação canônica, (1.12), e que como para qualquer transformação deste tipo tem jacobiano 1, (1.11), então

$$v(\Omega) := \int_{\Omega} dz = \int_{W(\Omega)} \left| \frac{\partial W}{\partial Z} \right| dZ = \int_{W(\Omega)} dZ,$$

¹Tais teoremas foram adaptados para as condições deste trabalho. As versões fidedignas são encontradas em [2], assim como suas demonstrações.

onde W é função definida por $Z := W(z)$. Já o teorema (ii) nos remete a impossibilidade de criação e destruição de pontos representativos no espaço de fase, já que como a solução é única, cada ponto, z , é levado por W em um único respectivo, Z , pelo fluxo (1.5).

Definamos uma função ϱ das variáveis de espaço de fase, chamada de *distribuição*, como

$$\begin{aligned} \varrho &: \mathbb{R}^{2n} \times \mathbb{T} \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}_{\geq} \\ &: (z, t) \longmapsto \varrho(z, t) \quad \text{tal que} \quad \int \varrho(z, t) dz = 1, \end{aligned} \quad (3.1)$$

que pode ser entendida como um conjunto infinito de condições iniciais atrelados a um peso estatístico correspondendo a $\varrho(z, t)$.

A variação temporal desta função, de acordo com (1.2) e (1.7), é

$$\begin{aligned} \frac{d\varrho}{dt} &= \nabla_z \varrho \cdot \dot{z} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} \\ &= \nabla_z \varrho \cdot \mathbf{J} \nabla_z H(z) + \frac{\partial \varrho}{\partial t} \\ &= \{\varrho, H\} + \frac{\partial \varrho}{\partial t}. \end{aligned}$$

O termo $\frac{d\varrho}{dt}$ é identicamente nulo devido a sua própria definição inspirada nos teoremas (i) e (ii): o volume e o número de pontos são constantes, daí então a variação da densidade desses pontos ser zero com o tempo. Tal afirmação permite dizer que o fluxo de ϱ no espaço de fase é como o de um fluido incompressível, que obedece a equação hidrodinâmica, às vezes, conhecida como *equação de Liouville*:

$$\{\varrho, H\} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0,$$

cuja solução é

$$\varrho(z, t) = \int dz' \delta(z - W_t(z')) \varrho_0(z'), \quad (3.2)$$

e $W_t(z) = z(t)$.

O valor médio das coordenadas do espaço de fase evolui de acordo com

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle z \rangle &= \frac{d}{dt} \int z \varrho(z, t) dz \\ &= \int z \frac{\partial \varrho}{\partial t} dz \\ &= - \int z [\nabla_z \varrho \cdot \mathbf{J} \nabla_z H(z)] dz \end{aligned}$$

integrando por partes, obtemos

$$\frac{d}{dt}\langle z \rangle = \mathbf{J} \langle \nabla_z H \rangle. \quad (3.3)$$

Esta equação representa o equivalente clássico do *teorema de Ehrenfest*. Sobretudo, não garante que a órbita $\langle z(t) \rangle$ seja gerada pela condição inicial $\langle z \rangle_{t=0}$, pois H não depende de $\langle z(t) \rangle$, mas sim de z . Ou seja, a equação (3.3) não constitui um sistema dinâmico hamiltoniano.

Contudo, esperamos que, se $\varrho(z, t = 0) := \varrho_0(z)$ é localizada em um ponto $z_0 := \langle z \rangle_{t=0}$, $\varrho(z, t)$ seja localizada em $\langle z \rangle$ para tempos suficientemente pequenos. Para este fim, vamos utilizar a técnica de AOA definida na seção 1.1. A expansão da hamiltoniana, como em (1.4), em torno de $\langle z \rangle$ é

$$H(z) = H(\langle z \rangle) + (z - \langle z \rangle) \cdot \left. \frac{\partial H}{\partial z} \right|_{\langle z \rangle} + \frac{1}{2} (z - \langle z \rangle) \mathcal{H}_{\langle z \rangle} (z - \langle z \rangle) + \dots,$$

se utilizarmos a equação (3.3), obtemos que aproximadamente

$$\frac{d}{dt}\langle z \rangle = \mathbf{J} \nabla_z H(\langle z \rangle),$$

que é um sistema dinâmico hamiltoniano genuíno, com solução $\langle z \rangle(t) = \varphi(\langle z \rangle_{t=0}, t)$. No caso de uma hamiltoniana quadrática em z , este resultado é igual à equação (3.3).

A única informação que obtivemos até agora com a AOA é relativa à trajetória do centro, $\langle z \rangle$, da distribuição. Todavia, como a dinâmica de ϱ é, ao menos aproximadamente, hamiltoniana, utilizaremos outros elementos inerentes a tal dinâmica para descrevermos mais detalhadamente o comportamento da função distribuição.

O operador simplético (1.5) é responsável pelas transformações canônicas que afetam a dinâmica de um sistema. Para o caso do pacote estamos interessados em transformações como rotação, dispersão e estiramento dentre outras.

Vamos definir o propagador clássico linearizado em torno da trajetória $\langle z(t) \rangle$ como um conjunto de operações realizadas sobre a distribuição:

$$U_{cl}(t, \bar{z}_0) := T_{cl}(\bar{z}(t))S(t)T_{cl}(\bar{z}_0)^{-1}, \quad (3.4)$$

para qual definimos $\bar{z}(t) := \langle z \rangle(t)$. A primeira translação $T_{cl}(\langle z \rangle_{t=0})^{-1}$ tem como objetivo transladar o sistema para a origem, poderíamos ter realizado uma mudança de coordenadas e colocado o pacote centrado em $z = 0$ para $t = 0$, porém quando tratarmos do propagador semiclássico este tipo de comportamento será indesejado. O segundo operador é o mapa tangente que realizará as deformações e/ou rotações na distribuição. A última das três ações de $U_{cl}(t, \bar{z}_0)$ é retransladar a função para a posição no instante de tempo desejado.

A evolução de ϱ é, de acordo com (3.2) e (3.4),

$$\varrho(z, t) = \varrho_0 \left(\mathbf{S}(t)^{-1}(z - \bar{z}(t)) + z_0 \right).$$

Se faz necessário, devido à tenuidade dos argumentos em favor da última e da (3.4) equações, uma demonstração um pouco mais detalhada. Olhando para equação de Liouville, calculemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(z, t) &= \frac{\partial \varrho_0}{\partial z} \left[\dot{\mathbf{S}}^{-1}(z - \bar{z}) - \mathbf{S}^{-1} \dot{\bar{z}} \right] \text{ e} \\ \frac{\partial \varrho}{\partial z} &= \frac{\partial \varrho_0}{\partial z} \cdot \mathbf{S}^{-1}, \end{aligned}$$

e colocando nessa equação, temos

$$\frac{\partial \varrho_0}{\partial z} \left[\dot{\mathbf{S}}^{-1}(z - \bar{z}) - \mathbf{S}^{-1} \dot{\bar{z}} \right] + \frac{\partial \varrho_0}{\partial z} \left[\mathbf{S}^{-1} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial z} \Big|_{\bar{z}} + \mathbf{S}^{-1} \mathbf{J} \frac{\partial^2 H}{\partial z \partial z} \Big|_{\bar{z}} (z - \bar{z}) \right] = 0,$$

onde usamos a expansão (1.4) até segunda ordem; usando que $d/dt(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{S}) = 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{S}}^{-1}\mathbf{S} + \dot{\mathbf{S}}\mathbf{S}^{-1} = 0$ e igualando os termos de mesma potência em $z - \bar{z} := \delta z$,

$$\delta \dot{z} = \mathbf{J} \mathcal{H}_{\bar{z}(t)} \delta z \text{ e } \dot{\mathbf{S}} = \mathbf{J} \mathcal{H}_{\bar{z}(t)} \mathbf{S}$$

que são as equações de movimento na AOA da seção 1.1!

3.1.2 Propagação Semiclássica

Como o objetivo deste trabalho é construir um propagador quântico para funções de onda localizadas no espaço de fase, propomos, então uma forma análoga ao propagador clássico na AOA, para um pacote de onda $|\psi_0\rangle$ centrado em $\langle\hat{z}\rangle := z_0$,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, z_0)|\psi_0\rangle,$$

com $\hat{U}(t, z_0)$ escrito em termos dos operadores de Heisenberg e dos metapléticos, além de uma fase criada por conveniência, então,

$$\hat{U}(t, z_0) := \exp\left[\frac{i}{\hbar}\gamma(t)\right] \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger. \quad (3.5)$$

Substituindo no primeiro membro da equação de Schroedinger (2.4) encontramos que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, z_0)|\psi_0\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.6)$$

A derivada temporal do termo entre colchetes da eq. (3.6) é calculada no apêndice C. Seu resultado é:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \left[-\dot{\gamma}(t) + (\hat{z} - z) \wedge \dot{z} + \frac{1}{2}z \wedge \dot{z} - \frac{1}{2}(\hat{z} - z) \cdot \mathbf{J}\dot{\mathbf{S}}^{-1}(\hat{z} - z) \right] |\psi(t)\rangle. \quad (3.7)$$

Se utilizarmos a AOA para hamiltoniana² \hat{H} em (2.4), tal como em (1.4), obtemos

$$H(\hat{z}) = H(z) + (\hat{z} - z) \cdot \frac{\partial H}{\partial z} \Big|_z + \frac{1}{2}(\hat{z} - z) \mathcal{H}_z(\hat{z} - z) + \dots$$

²Apesar dessa hamiltoniana ser um operador, essa expansão se justifica ao realizarmos a sua transformada de Weyl-Wigner [21] e após a expansão tomarmos a transformada inversa; cf. seção 2.3

Unindo a expansão para a hamiltoniana com (3.7) na equação de Schroedinger e igualando termos em potências $(\hat{z} - z)$,

$$\dot{\gamma} = \frac{z \wedge \dot{z}}{2} - H(z(t)), \quad (3.8)$$

$$\dot{z} = \mathbf{J}\nabla_z H(z(t)), \quad (3.9)$$

$$\dot{S} = \mathbf{J}\nabla_z^2 H(z(t))S. \quad (3.10)$$

Que são as equações que descrevem a evolução dos parâmetros necessários para que construamos a aproximação desejada para o propagador.

A aplicação do propagador a um estado arbitrário $|\psi_0\rangle$ pode ser decomposta em evoluções de pacotes gaussianos se nos utilizarmos da relação de completitude (2.22),

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\psi_0\rangle \\ &= \hat{U}(t) \int \frac{dz_0}{(2\pi\hbar)^n} |z_0\rangle \langle z_0 | \psi_0\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dz_0 \langle z_0 | \psi_0\rangle \hat{U}(t) |z_0\rangle. \end{aligned}$$

Utilizaremos agora a AOA para $\hat{U}(t)|z_0\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &\simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dz_0 \langle z_0 | \psi_0\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\gamma(t)\right] \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger |z_0\rangle, \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dz_0 \langle z_0 | \psi_0\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\gamma(t)\right] \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) |z=0\rangle. \end{aligned}$$

Definimos, então, o propagador semiclássico como:

$$\hat{U}_{\text{AOA}} := \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dz_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}\gamma(t)\right] \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) |z=0\rangle \langle z_0|. \quad (3.11)$$

Nossa aproximação semiclássica – AOA – consiste, então, em decompor um estado $|\psi_0\rangle$ em pacotes gaussianos distribuídos sobre todo o espaço de fase, centrados em coordenadas $z_0 := (q_0, p_0)$, e evoluí-los sob a ação dos operadores metapléticos e de translações, que representam quanticamente as transformações canônicas sobre as órbitas clássicas.

O propagador é descrito como função dos parâmetros (3.8), (3.9) e (3.10). O primeiro destes, é uma fase constituída pela energia e área simplética da órbita do centro dos pacotes da decomposição; o segundo, é a equação de evolução da órbita clássica do centro dos pacotes; e por fim, o terceiro é o mapa tangente da transformação canônica.

A decomposição em gaussianas localizadas no espaço de fase é de fundamental importância para essa aproximação: os pacotes resultantes da evolução permanecem gaussianos [10, 14, 18], já que operador de evolução é composto de translações rígidas e do operador metaplético quadrático nas variáveis do espaço de fase.

A não-linearidade da dinâmica clássica impede a construção de um propagador quântico exato. Porém pelo método AOA, podemos aproximá-la e quantizá-la. O tempo em que a aproximação semiclássica diverge da dinâmica quântica é conhecido como *tempo de Ehrenfest* [23, 28].

Uma das condições que determinam a eficiência da aproximação semiclássica é a unitariedade do propagador. O propagador semiclássico eq. (3.11) só é unitário quando a Hamiltoniana em (1.2) é quadrática na variável z . Neste caso a aproximação de órbitas adjacentes é exata, já que a expansão em δz é nula a partir do terceiro termo – a derivada da matriz hessiana é o último termo da expansão. Para essa dinâmica existe uma correspondência entre os propagadores unitários quânticos e as transformações canônicas clássicas, o que em geral não é verdade.

A eficiência da aproximação semiclássica, no entanto, deve equivaler a eficiência da AOA clássica. Enquanto a dinâmica clássica caótica puder ser bem representada pela linear, a dinâmica quântica será bem descrita pela semiclássica.

3.2 Propagação da Função de Wigner

Na seção 2.3.1 descrevemos a função de Wigner de acordo com seu caráter semiclássico. A não-positividade impede que seu tratamento seja comum ao dado

às probabilidades clássicas, entretanto seu conhecimento, garante a determinação completa do estado quântico. A evolução das funções de onda é atrelada ao propagador quântico e no espaço de fase a evolução está descrita por matrizes simpléticas. A relação semiclássica de união entre essas duas propagações é determinada pelo propagador semiclássico. A evolução da função de Wigner reproduz a evolução semiclássica no espaço de fase.

A função de Wigner para um estado puro $|\psi(t)\rangle := \hat{U}(t) |\psi_0\rangle$ é dada por

$$W(z, t) := \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \text{Tr}[\mathbf{R}_z \hat{\rho}(t)],$$

com

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|.$$

No caso de uma hamiltoniana quadrática, onde a AOA é exata, o propagador $\hat{U}(t)$ é escrito sem nenhuma aproximação como o produto de operadores metapléticos e de Heisenberg. Assim, encontramos a evolução para função de Wigner do estado puro:

$$\begin{aligned} W(z, t) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \text{Tr}[\mathbf{R}_z \hat{\rho}(t)] \\ &= \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \langle \psi | e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}^\dagger(t)) \mathbf{T}_{z(t)}^\dagger \mathbf{R}_z e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \langle \psi | \mathbf{R}_{\mathbf{S}^{-1}(z-z(t))+z_0} | \psi \rangle \\ &= W(\mathbf{S}^{-1}(z - z(t)) + z_0), \end{aligned}$$

onde usamos as relações do apêndice A.

Este resultado é interessante, pois que a função de Wigner evolui como uma distribuição clássica (3.2) e por isso o centro de um pacote coerente descreve a trajetória clássica no espaço de fase.

3.3 Hamiltoniana $\hat{H} := Kp^3$

Como primeiro exemplo não-linear, ou melhor, não-quadrático em z , consideremos a hamiltoniana cúbica em p . Apesar da forma exótica dessa hamiltoniana, o expoente cúbico é responsável por características peculiares de uma dinâmica e sua compreensão pode auxiliar no entendimento de sistemas não-lineares quando expandidos até terceira ordem.

Aqui escreveremos o propagador exato para essa hamiltoniana e utilizaremos as técnicas das seções anteriores deste capítulo para construir o propagador semiclassico na AOA e analisaremos a aproximação. Por fim, estabeleceremos uma conexão do propagador quântico com as autofunções de uma hamiltoniana linear.

Para $\hat{H} := Kp^3$, com K constante de unidades $TL^{-1}M^{-2}$, onde T é unidade temporal, L é de comprimento e M de massa, o elemento de matriz do propagador (2.3) é escrito como

$$\langle q | \hat{U}(t) | q' \rangle = \langle q | e^{-\frac{i}{\hbar} K \hat{p}^3 t} | q' \rangle,$$

utilizando a relação de completeza para os estados de momento, este pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{U}(t) | q' \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left[-\frac{i}{\hbar} p^3 t + \frac{i}{\hbar} p(q - q') \right] \\ &= \left(\frac{1}{3\hbar^2 K t} \right)^{1/3} \text{Ai} \left[- \left(\frac{1}{3\hbar^2 K t} \right)^{1/3} (q - q') \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde Ai é a função de Airy definida por

$$\text{Ai}(x) := \int dy \exp \left[\frac{i}{3} y^3 + ixy \right]. \quad (3.13)$$

Um gráfico desta função pode ser visto na figura 3.1.

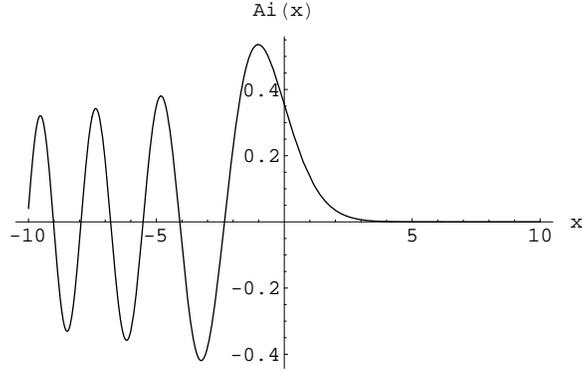


Figura 3.1: Função de Airy - $\text{Ai}(x)$.

Já para os auto-estados de momento, $\langle p | \hat{U}(t) | p' \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} K p^3 t} \delta(p' - p)$. Consideremos também o elemento misto do propagador,

$$\langle p | \hat{U}(t) | q' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} K p^3 t - \frac{i}{\hbar} p q'}, \quad (3.14)$$

que é a transformada de Fourier de (3.12).

Vamos calcular, pelo método AOA, o propagador semiclássico para a mesma hamiltoniana.

Trata-se de um sistema unidimensional que possui a energia como constante de movimento, portanto um sistema integrável, as equações de movimento clássicas são dadas, segundo a equação (1.2), por

$$z(t) := \begin{pmatrix} q_0 + 3Kp_0^2 t \\ p_0 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

com p_0 e q_0 como condições iniciais.

Equações de Movimento em AOA

A equação (3.9) é idêntica a do movimento clássico. Já a (3.8) tem como solução para a fase:

$$\gamma(t) = \frac{1}{2} K p_0^3 t. \quad (3.16)$$

E finalmente a solução de (3.10) é

$$S(t) = \begin{pmatrix} 1 & 6Kp_0t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Propagador em AOA

O elemento de matriz do operador metaplético em (2.33) se torna

$$\langle q | \mathbf{M}(\mathbf{S}) | 0 \rangle = \frac{\sigma}{(\pi \hbar m \omega)^{1/4} [(m\omega)^{-1} + 6iKp_0t]^{1/2}} \exp \left[- \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \frac{q^2}{1 + 6im\omega Kp_0t} \right],$$

com o uso de (3.17). A transformada de Fourier deste elemento é dada por

$$\langle p | \mathbf{M}(\mathbf{S}) | 0 \rangle = \frac{\sigma}{(m\omega\pi\hbar)^{1/4}} \exp \left[- \frac{p^2}{2\hbar m \omega} (1 + 6im\omega Kp_0t) \right], \quad (3.18)$$

permitindo-nos reescrever o elemento de matriz misto do propagador em (3.11),

$\langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | \psi_0 \rangle$, com $|\psi\rangle := |q'\rangle$, como:

$$\langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle = \int \frac{dz_0}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \langle p | T(z(t)) \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) | z = 0 \rangle \langle z_0 | q' \rangle$$

Submetendo este resultado às condições especificadas em (3.16) e (2.26):

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_0 dq_0 \langle p | T(z(t)) \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) | z = 0 \rangle \times \\ &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} K p_0^3 t - \frac{m\omega}{2\hbar} (q' - q_0)^2 - \frac{i}{\hbar} p_0 q' + \frac{i}{2\hbar} q_0 p_0 \right], \end{aligned}$$

onde usamos que $\langle \hat{q} \rangle_{z_0} = q_0$ e $\langle \hat{p} \rangle_{z_0} = p_0$; e ainda às (2.14) com $\xi \rightarrow z(t)$ – dado em

(3.15) e (3.18) com $p \rightarrow (p - p(t))$:

$$\begin{aligned}
 \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_0 dq_0 \langle p - p(t) | \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) | z = 0 \rangle \times \\
 &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} K p_0^3 t - \frac{m\omega}{2\hbar} (q' - q_0)^2 - \frac{i}{\hbar} p_0 q' + \frac{i}{2\hbar} q_0 p_0 \right] \times \\
 &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (q_0 + 3K p_0^2 t) p_0 - \frac{i}{\hbar} (q_0 + 3K p_0^2 t) p \right] \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\sigma}{(m\omega\pi\hbar)^{1/4}} \int dp_0 dq_0 \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{2\hbar m\omega} (1 + 6im\omega K p_0 t) \right] \times \\
 &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} K p_0^3 t - \frac{m\omega}{2\hbar} (q' - q_0)^2 - \frac{i}{\hbar} p_0 q' + \frac{i}{2\hbar} q_0 p_0 \right] \times \\
 &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (q_0 + 3K p_0^2 t) p_0 - \frac{i}{\hbar} (q_0 + 3K p_0^2 t) p \right].
 \end{aligned}$$

Rearrmando as constantes multiplicativas e os termos exponenciais:

$$\begin{aligned}
 \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle &= \frac{\sigma}{2(\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int dp_0 \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{2\hbar m\omega} (1 + 6im\omega K p_0 t) \right] \times \\
 &\times \exp \left[\frac{2i}{\hbar} K p_0^3 t - \frac{i}{\hbar} p_0 q' - \frac{3i}{\hbar} K p_0^2 p t \right] \times \\
 &\times \int dq_0 \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (q' - q_0)^2 - \frac{i}{\hbar} q_0 p + \frac{i}{\hbar} q_0 p_0 \right].
 \end{aligned}$$

A última integral é gaussiana e seu resultado é

$$\begin{aligned}
 I &:= \int dq_0 \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (q' - q_0)^2 - \frac{i}{\hbar} q_0 p + \frac{i}{\hbar} q_0 p_0 \right] \\
 &= \left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2\hbar m\omega} (p_0 - p)^2 - \frac{i}{\hbar} q' (p - p_0) \right].
 \end{aligned}$$

Finalmente encontramos

$$\begin{aligned}
 \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle &= \frac{\sigma}{(2m\omega)^{\frac{1}{2}} \pi\hbar} \int dp_0 \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{2\hbar m\omega} (2 + 6im\omega K p_0 t) \right] \times \\
 &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} q' p - \frac{i}{\hbar} (3p_0^2 p - 2p_0^3) K t \right], \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

que é a equação para o propagador semiclássico com hamiltoniana proporcional a \hat{p}^3 na aproximação AOA.

À luz da seção 3.1.2, a decomposição do estado $|q = q'\rangle$ em pacotes gaussianos, $\langle z_0 | q'\rangle$, permite tratarmos o propagador na aproximação AOA. À medida que o estado gaussiano (2.26) se torna mais concentrado em torno de seu centro, (q_0, p_0) , a qualidade da aproximação deve melhorar.

Porém, no limite em que a dispersão Δp decresce à zero (ou melhor, $\omega \rightarrow 0$), a dispersão Δq cresce indefinidamente devido ao princípio da incerteza, mesmo assim conseguimos recuperar o resultado exato, com efeito, se notarmos que

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \left[\frac{1}{(\pi \hbar m \omega)^{1/2}} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\hbar m \omega}} \right] = \delta(p - p_0)$$

então,

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} K p^3 t - \frac{i}{\hbar} q' p \right] = \langle p | \hat{U}(t) | q'\rangle.$$

Por outro lado, se tomarmos o limite $\hbar \rightarrow 0$ obtemos uma maneira de “driblar” o princípio da incerteza, já que assim $\Delta q, \Delta p \rightarrow 0$ simultaneamente. Para este fim, reescrevemos o integrando de (3.19) como uma exponencial de potências de $(p_0 - p)$, ou seja,

$$\exp \left[-\frac{1}{m\omega} \left(\frac{p_0 - p}{\hbar^{1/2}} \right)^2 - iKt \left(\frac{p_0 - p}{\hbar^{1/3}} \right)^3 - \frac{i}{\hbar} Ktp^3 - \frac{i}{\hbar} q'p \right].$$

O primeiro termo é uma gaussiana e seu limite deve nos conduzir a uma delta de Dirac, porém, o segundo é um termo oscilatório. Precisamos garantir, ao menos, que a largura do pico centrado em p seja maior que a da gaussiana no limite desejado. As partes real e imaginária do termo em p_0^3 têm largura³ dada por

$$\Delta = \left(\frac{8\pi\hbar}{3Kt} \right)^{1/3}$$

e a largura da gaussiana é definida como $\Delta_G := (m\omega\hbar)^{1/2}$. Realmente, no limite $\hbar \rightarrow 0$ temos $\Delta_G \ll \Delta$, o que justifica

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \left[\frac{1}{(\pi \hbar m \omega)^{1/2}} e^{-\frac{(p_0-p)^2}{\hbar m \omega}} \right] = \delta(p_0 - p),$$

³A largura é definida como a distância entre os dois zeros da função circunjacentes ao pico em p_0 .

de sorte que o limite da equação (3.19) é

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle p | \hat{U}_{\text{AOA}} | q' \rangle = \langle p | \hat{U}(t) | q' \rangle.$$

Conclusão

O propagador semiclássico construído para hamiltoniana cúbica nesta seção reproduz o propagador exato no limite em que as dispersões dos pacotes tendem a zero, ou seja, quanto menor o tamanho do pacote melhor a aproximação semiclássica.

O tempo de Ehrenfest é uma medida de quão acurada é a aproximação semiclássica. Como a aproximação, neste caso, no limite desejado é idêntica à quântica, equivale dizer que o tempo de Ehrenfest é tão grande quanto queiramos, para tanto, basta reduzir o tamanho dos pacotes da discretização suficientemente.

Conexão com as Autofunções do Potencial Linear

A hamiltoniana de uma partícula sob ação de uma força constante, F , é

$$H = \frac{1}{2m} p^2 - Fq. \quad (3.20)$$

Esse sistema é integrável, pois é unidimensional e H não depende explicitamente do tempo, seu espaço de fase é folheado em parábolas representadas pela equação $p(q) = \pm \sqrt{2m(H + Fq)}$.

A equação de Schroedinger para esse sistema pode ser escrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - (Fq + E) \right] \psi(q) = 0 \quad (3.21)$$

com solução:

$$\psi(q) = \frac{1}{|F|^{1/2}} \left(\frac{2m|F|}{\hbar^2} \right)^{1/3} \text{Ai} \left[- \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{1/3} (q - q_r) \right], \quad (3.22)$$

onde a função Ai está definida em (3.13) e $q_r := -E/F$ é o ponto de retorno da trajetória clássica. O fator $|F|^{1/2}$, provém de uma “ δ -normalização”, ou seja, a normalização tipo partícula livre.

Da figura 3.2 apreende-se o comportamento da função de onda $\psi(q)$ em 3.22. O espectro do Hamiltoniano (3.3) é contínuo, já que o potencial é não-confinante. Para energias menores que $V(q)$, a função de onda tende assintoticamente a zero e para valores de energia maiores que o potencial, $\psi(q)$ é oscilatória.

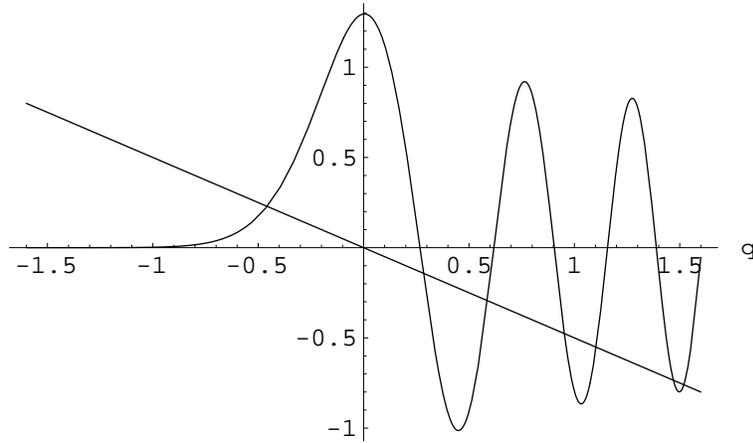


Figura 3.2: Função de onda $\psi(q)$ e Potencial linear $V(q)$ com $\frac{2m}{\hbar^2} = 10$, $F = 1/2$, $q_r = -0.2$.

Derivando (3.14) com relação p e definindo $\tilde{\psi}(p) := \langle p | \hat{U}(t) | q' \rangle$, obtemos

$$\frac{\partial \tilde{\psi}(p)}{\partial p} = -\frac{i}{\hbar} (3Ktp^2 + q'),$$

que é uma equação de Schroedinger na base dos momentos. Realizando uma transformada de Fourier inversa e arrumando as constantes, temos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{1}{6mKt} (q - q') \right] \psi(q) = 0, \quad (3.23)$$

que é a equação para uma partícula sob a ação de um potencial

$$V(q) = -\frac{q - q'}{6mKt}.$$

Comparando as duas equações de Schroedinger, (3.21) e (3.23) identificamos

$$F \rightarrow \frac{1}{6mKt} \quad \text{e} \quad q_r := -\frac{E}{F} \rightarrow q'. \quad (3.24)$$

Podemos, então, associar a função de onda, (3.12), resultante da propagação do estado $|q = q'\rangle$ por uma hamiltoniana Kp^3 com a função de onda de uma equação de Schroediger para uma partícula sujeita a um potencial linear.

Função de Wigner

A função de Wigner para a função de onda (3.14) é calculada [3] utilizando a definição (2.50),

$$W(z) = \left(\frac{4}{3Kt\hbar^2} \right)^{1/3} \text{Ai} \left[- \left(\frac{4}{3Kt\hbar^2} \right)^{1/3} (q - q' - 3Ktp^2) \right].$$

Utilizando a correspondência (3.24) podemos transfigurá-la em

$$W(z) = \left(\frac{8m}{\hbar^2 F^2} \right)^{1/3} \text{Ai} \left[- \left(\frac{8m}{\hbar^2 F^2} \right)^{1/3} (H(z) - E) \right],$$

que é a função de Wigner para a função de onda (3.22)[26].

Epílogo

No espaço de fase clássico a evolução temporal da hamiltoniana cúbica leva uma distribuição clássica concentrada em $q = q'$, tal como, $\varrho_0(q) = \pm\delta(q - q')$, em uma parábola com foco no eixo das coordenadas, de acordo com as equações (3.15). O propagador em (3.12) propaga um estado $\langle q | \psi \rangle = \delta(q - q')$ em uma função de Airy com máximos na parábola clássica como está esboçado na figura 3.3.

O método AOA consiste, então, em decompor o estado inicial $\langle q | \psi \rangle = \delta(q - q')$ em pacotes coerentes (3.19). No limite em que a largura ΔP é zero recuperamos o resultado exato.

A função de Wigner para o propagador da hamiltoniana cúbica, (3.12), é uma função de Airy constante ao longo de parábolas no espaço de fase descritas pela

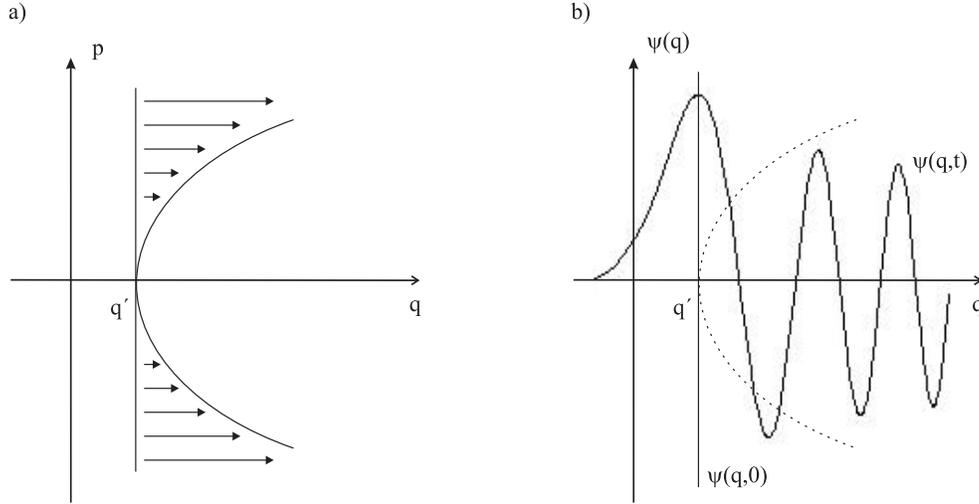


Figura 3.3: a) Distribuição clássica em $t = 0$ (reta) e em t (parábola). b) Função de onda em $t = 0$ e em t .

equação $q - q' - 3Ktp^2 = a$ com a constante, figura 3.4, que também pode ser entendida como a função de Wigner para a função de onda de um potencial linear, (3.3), através da correspondência (3.24).

E ainda, se utilizarmos o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \text{Ai} \left(\frac{y - y_0}{\epsilon} \right) = \delta(y - y_0)$$

em (3.3) obtemos o *limite clássico* da função de Wigner,

$$W_{cl}(z) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \left(\frac{8m}{F^2 \hbar^2} \right)^{1/3} \text{Ai} \left[- \left(\frac{8m}{F^2 \hbar^2} \right)^{1/3} (H(z) - E) \right] = \delta(H(z) - E)$$

que se condensa sobre a parábola clássica e garante a normalização das probabilidades marginais em (2.52).

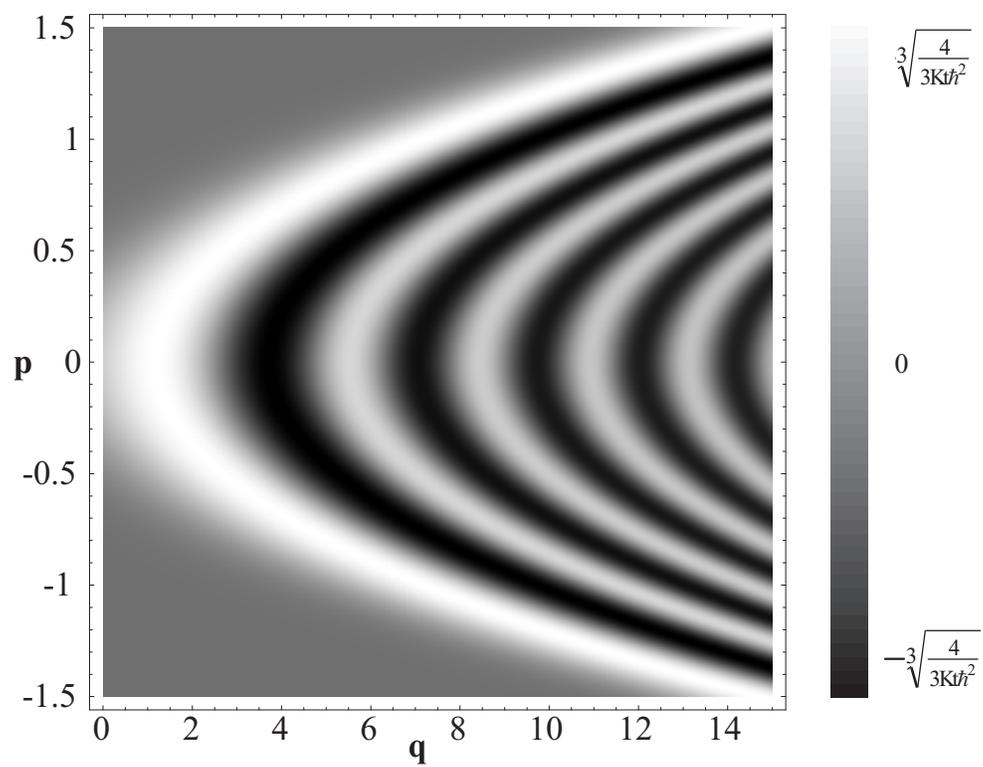


Figura 3.4: Função de Wigner com $q' = 0$, $K = 2$, $t = 1$ e $\hbar = 1$.

Capítulo 4

Superposição Discreta de Pacotes

“A connecting principle,
Linked to invisible
Almost imperceptible
Something inexpressible.
Science unsusceptible
Logic so inflexible
Causally connectible
Yet not is invincible”

The Police - *Synchronicity*

A representação de estados em termos de combinações lineares de outros é, talvez, o ardil mais importante e intrigante do mundo microscópico.

Superposições simples, de dois estados apenas, como o estado gato e os pares EPR, são incompatíveis com o senso comum e são alvos das maiores discordâncias dentre os estudiosos. O colapso da função de onda é mais um dentre os fenômenos intrigantes associados à superposição. Diversas teorias, ou melhor, interpretações, surgem como tentativa de elucidar esses conceitos e/ou torná-los ao menos razoáveis.

Não obstante as incongruências, superposições são importantes e fundamentalmente necessárias tanto experimental quanto teoricamente: a possibilidade de

recriar, aproximadamente, um estado com pacotes de onda é um método eficaz de compreensão e modelagem do mundo quântico.

Neste capítulo apresentamos a primeira parte do método computacional relativo a propagação de pacotes. No capítulo anterior escrevemos o propagador semiclássico como uma integral sobre os estados coerentes, provinda da decomposição do estado inicial em pacotes localizados no espaço de fase. É sobre esta decomposição que serão aplicados os conceitos deste capítulo.

Na primeira seção, apresentamos o método de reduzir a decomposição de um estado coerente em infinitos pacotes distribuídos ao longo do espaço de fases a apenas uma dimensão. Na seguinte, é realizada a discretização e o truncamento da soma relativa à decomposição do pacote inicial. Terminamos o capítulo estudando o erro da aproximação numérica, no que diz respeito à discretização e ao truncamento, e analisando a reprodução do estado inicial por meio de um número finito de pacotes.

4.1 Decomposição em Estados Coerentes

Qualquer estado pode ser expandido numa soma de estados coerentes¹, eq.(2.25), utilizando a relação (2.22):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d\alpha \langle \alpha|\psi\rangle |\alpha\rangle. \quad (4.1)$$

No caso em que $|\psi\rangle$ também represente um estado coerente $|\beta\rangle$,

$$|\beta\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d\alpha \langle \alpha|\beta\rangle |\alpha\rangle, \quad (4.2)$$

os coeficientes desta expansão, $\langle \alpha|\beta\rangle$, são determinados pela equação (2.26).

A integração em estados coerentes consiste em uma integração dupla sobre todo o espaço de fase[22], portanto, a integral em α da equação (4.2) é decomposta em

¹Por comodismo de notação, usaremos as três primeiras letras do alfabeto grego, α , β e γ , no lugar de z_α , z_β e z_γ para rotular estados coerentes.

integrais sobre Q_α e P_α :

$$|\beta\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha dP_\alpha \langle \alpha | \beta \rangle |\alpha\rangle.$$

A função de onda do estado $|\beta\rangle$ na representação de coordenadas, em virtude da última equação, é escrita em termos da função de onda $\langle q | \alpha \rangle$, isto é,

$$\psi_\beta(q) := \langle q | \beta \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha dP_\alpha \langle \alpha | \beta \rangle \langle q | \alpha \rangle. \quad (4.3)$$

Se reescrevermos a integral (4.3) para um pacote $\psi_\beta(q)$ centrado na origem do espaço de fase, empregando as equações (2.25) e (2.26), observamos que

$$\begin{aligned} \psi_\beta(q) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \left(\frac{2\Delta q_\beta^2}{\sigma_q^2} \right)^{n/4} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha \exp \left[- \left(\frac{q - Q_\alpha}{2\Delta q_\alpha} \right)^2 - \left(\frac{Q_\alpha}{2\sigma_q} \right)^2 \right] \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dP_\alpha \exp \left[- \left(\frac{P_\alpha}{2\sigma_p} \right)^2 - \frac{i}{\hbar} P_\alpha \left(\frac{\Delta q_\beta^2}{\sigma_q^2} Q_\alpha - q \right) \right] \\ &= \left(\frac{2\pi^{1/2}\sigma_p}{2\pi\hbar} \right)^n \left(\frac{2\Delta q_\beta^2}{\sigma_p^2} \right)^{n/4} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha \exp \left[- \left(\frac{q - Q_\alpha}{2\Delta q_\alpha} \right)^2 - \left(\frac{Q_\alpha}{2\sigma_q} \right)^2 - \frac{\sigma_p^2}{\hbar^2} \left(\frac{\Delta q_\beta^2}{\sigma_q^2} Q_\alpha - q \right)^2 \right], \quad (4.4) \end{aligned}$$

onde na última linha a integral P_α foi efetuada. Destarte, fica demonstrado que ao menos a função de onda $\psi_q(\beta)$ pode ser decomposta em termos de pacotes localizados apenas no espaço configuracional.

E ainda, se definirmos as variáveis:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\alpha, \beta) &:= \Delta q_\alpha^2 + 2\Delta q_\beta^2 \quad \text{e} \\ \mathcal{B}(\alpha, \beta) &:= \Delta q_\alpha^2 \Delta q_\beta^2, \end{aligned}$$

podemos reconstruir $\psi_q(\beta)$ em (4.4) como:

$$\langle q | \beta \rangle = \frac{1}{\Delta q_\alpha^n} \left(\frac{\widetilde{\Delta q_\alpha}}{2\pi\Delta q_\beta} \right)^{n/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha \langle q | \widetilde{\alpha} \rangle \exp \left[- \frac{Q_\alpha^2}{2\mathcal{A}(\alpha, \beta)} \right], \quad (4.5)$$

onde $\langle q|\tilde{\alpha}\rangle$ é uma função de onda coerente com centro e largura dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_\alpha &= Q_\alpha \left(\frac{2\Delta q_\beta^2}{\mathcal{A}(\alpha, \beta)} \right) \quad \text{e} \\ \tilde{\Delta}q_\alpha &= \sqrt{\frac{\mathcal{B}(\alpha, \beta)}{\mathcal{A}(\alpha, \beta)}}.\end{aligned}$$

É possível obter a mesma expansão para os vetores de estados $|\beta\rangle$ em termos de $|\tilde{\alpha}\rangle$, já que o argumento da exponencial em (4.5) não depende de q . Com efeito,

$$|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha f(\alpha, \beta) |\tilde{\alpha}\rangle, \quad (4.6)$$

onde

$$f(\alpha, \beta) := \frac{1}{\Delta q_\alpha^n} \left(\frac{\tilde{\Delta}q_\alpha}{2\pi\Delta q_\beta} \right)^{n/2} \exp\left[-\frac{Q_\alpha^2}{2\mathcal{A}(\alpha, \beta)}\right]. \quad (4.7)$$

4.2 Discretização

A aproximação de um estado arbitrário por um número finito de pacotes de onda se torna útil de acordo com a possibilidade de implementação computacional e experimental de certas teorias. Consentindo com o método de S. Szabo *et al* em [24], elaboraremos uma superposição unidimensional finita de estados coerentes ao longo do eixo de coordenadas de um espaço de fase.

A discretização da integral (4.6) traduz-se na utilização de N estados $|\tilde{\alpha}_k\rangle$ centrados em posições Q_k e distribuídos simetricamente em torno do centro Q_0 do pacote $|\beta\rangle$, *i.e.*,

$$Q_k = Q_0 + \left(k - \frac{N+1}{2} \right) \delta Q, \quad k = 1, \dots, N. \quad (4.8)$$

O parâmetro Q_N deliberará o truncamento da soma em (4.6),

$$|\beta\rangle \simeq \int_{-Q_N}^{+Q_N} dQ_\alpha f(\alpha, \beta) |\tilde{\alpha}\rangle, \quad (4.9)$$

assim como δQ o fará para a discretização de (4.9). Então, podemos escrever o estado $|\beta_N\rangle$, que aproximadamente descreve o estado original $|\beta\rangle$, como:

$$|\beta\rangle \approx |\beta_N\rangle = \delta Q \sum_{k=1}^N f(\alpha_k, \beta) |\widetilde{\alpha}_k\rangle. \quad (4.10)$$

A função $f(\alpha_k, \beta)$ representa o peso associado a cada pacote componente da distribuição. Esta função é essencialmente aquela definida em (4.7), apenas substituindo os valores de Q_α pelos correspondentes discretos Q_k .

4.3 Métodos Numéricos

Nesta parte do texto serão apresentados os métodos e resultados computacionais relacionados com a seção anterior.

Consideremos o estado coerente $|\beta\rangle$ centrado na origem do espaço de fase, *i.e.*, $Q_\beta = P_\beta = 0$ e N pacotes coerentes circulares, $|\alpha_k\rangle$, centrados em pontos distribuídos ao longo do eixo das coordenadas de acordo com a equação (4.8).

A largura de $|\beta\rangle$ é $\Delta q_\beta = \sqrt{\frac{\hbar}{2s}}$ e a dos pacotes circulares, $\Delta q_\alpha = \Delta p_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}$. O parâmetro s é denominado de parâmetro de compressão e denota o quanto às dispersões de $|\beta\rangle$ são esticadas/comprimidas com relação às de $|\alpha\rangle$.

A função $f(\alpha_k, \beta)$ da eq. (4.7), a qual especifica quanto cada um dos N estados $|\alpha_k\rangle$ contribui para a soma, é uma gaussiana em Q_α , figura 4.1.

Permitimo-nos escolher um valor para o truncamento da coordenada, Q_N , a partir do qual, o ônus de $f(\alpha, \beta)$ torna-se irrelevante para a soma total. Para tanto calculamos Q_N a fim de que o valor desta função se reduza à 10^{-j} do máximo, ou seja,

$$f(\alpha, \beta) \Big|_{Q_\alpha=Q_N} = 10^{-j} f(\alpha, \beta) \Big|_{Q_\alpha=0} \implies Q_N = \sqrt{\frac{j \ln(10)}{2\mathcal{A}(\alpha, \beta)}} \quad (4.11)$$

para j inteiro positivo.

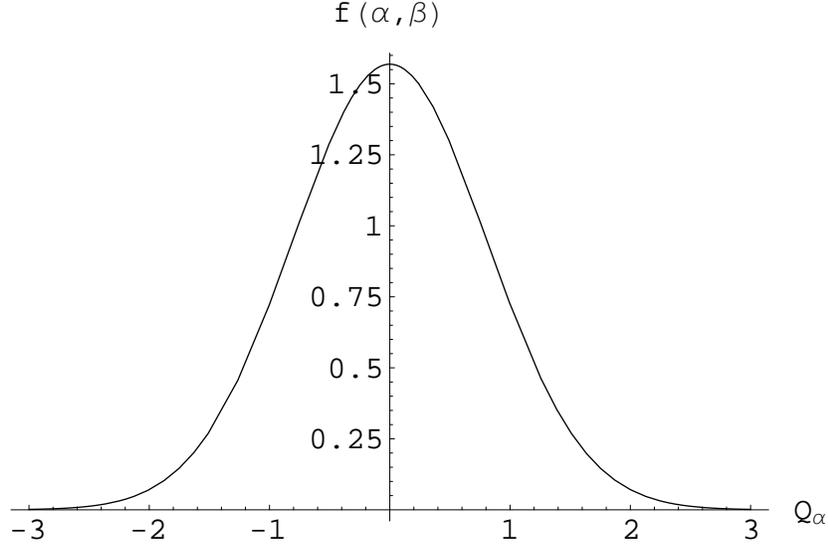


Figura 4.1: Comportamento de $f(\alpha, \beta)$ para $\hbar = 0.0128$ e $s = 0.02$.

Para os valores de \hbar e s da figura 4.1, temos $\Delta q_\alpha = \Delta p_\alpha = 0.08$, $\Delta q_\beta \simeq 0.57$ e $s := \Delta q_\alpha^2 / \Delta q_\beta^2 = 0.02$.

Na figura (4.2) temos um gráfico da função de onda $\psi_\beta(q)$ e sua reconstrução através da decomposição em pacotes, eq. (4.10), o que legitima a escolha dos parâmetros N e Q_N .

Para o valor de Q_N apresentado na figura 4.2 escolhemos $j = 5$, de acordo com o critério apresentado em (4.11). O número de pacotes, a princípio, é escolhido de modo a ajustar até a saturação absoluta a reprodução visual da figura 4.2, tornando a função de onda aproximada, para meios práticos, idêntica à exata.

Outro modo de observar a qualidade da aproximação são os valores dos erros associados aos produtos escalares $\epsilon_1 := 1 - \langle \beta | \beta_N \rangle \simeq 10^{-11}$ e $\epsilon_2 := 1 - \langle \beta_N | \beta_N \rangle \simeq 10^{-6}$.

Podemos definir outra quantidade ϵ associada ao erro da aproximação, calculando ponto a ponto o quadrado da distância entre as funções de onda exata e

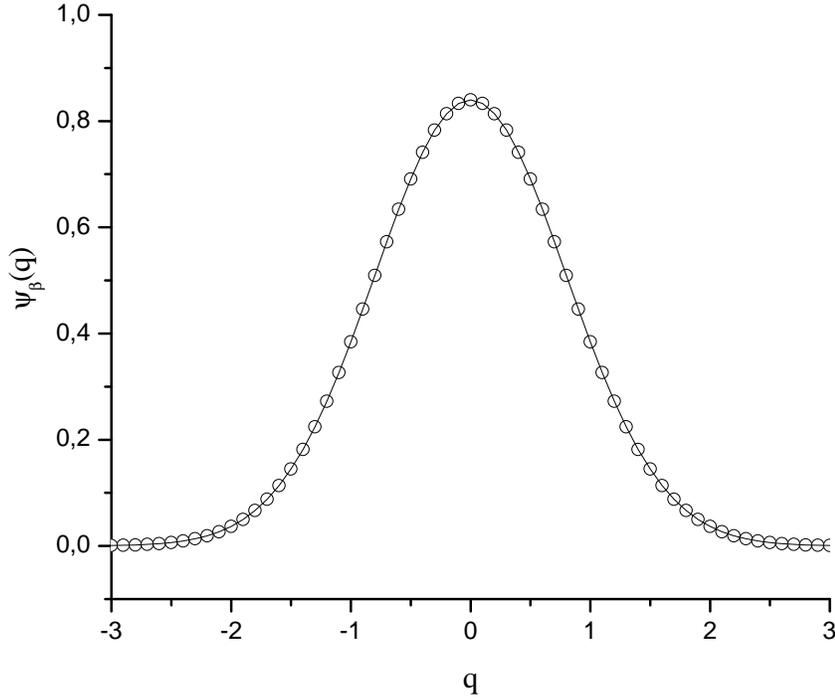


Figura 4.2: Função de onda $\psi_\beta(q)$ - linha contínua, função aproximada $\langle q|\beta_N\rangle$ - círculos; com $N = 65$ e $Q_N = 3.9$.

aproximada:

$$\begin{aligned} \epsilon(\delta Q, N) &:= \int_{-\infty}^{+\infty} dq [\langle q|\beta_N\rangle - \langle q|\beta\rangle]^2 \\ &= 1 + \langle \beta_N|\beta_N\rangle - 2\langle \beta|\beta_N\rangle. \end{aligned}$$

Essa função é graficada na figura 4.3 e mostra devidamente a variação do erro de acordo com o número de pacotes e da distância entre eles.

Aumentando o número de pacotes, o erro se aproxima cada vez mais de zero. Para cada valor de N no gráfico 4.3 existe um valor ótimo de δQ . Acima deste o erro aumenta, pois, Q_N é muito grande, cf. eq. (4.8), e a densidade de pacotes é insuficiente para reproduzir o pacote β . Abaixo, o erro também aumenta, pois, os pacotes α_k se concentram e as regiões mais externas de β ficam desprovidas da

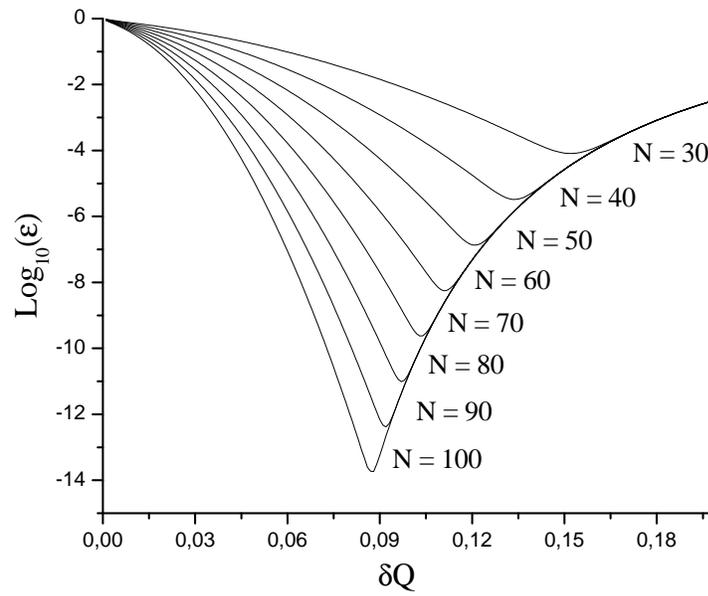


Figura 4.3: Função erro, $\epsilon(\delta Q, N)$, para diferentes números de pacotes, N , em função da distância entre eles, δQ .

decomposição.

Capítulo 5

Simulações Numéricas

“As caravelas, mandei-as afundar, para não terdes qualquer veleidade de voltar.”

H. Cortés

A aproximação de órbitas adjacentes norteou o desenvolvimento das técnicas de propagação descritas nos capítulos precedentes. A linearização em torno da órbita clássica conduzirá ao propagador semiclássico e, então, à função de Wigner de um estado coerente sob a atuação do mapa não-linear.

5.1 Evolução Clássica do O.H.C.

Na seção 3.1.1 descrevemos as propriedades gerais da propagação clássica de distribuições sob ação de uma dinâmica hamiltoniana geral. Aqui apresentaremos os resultados computacionais relacionados com o mapa OHC.

Uma distribuição, (3.2), gaussiana

$$\varrho_0(z) = \frac{1}{2\pi\Delta_q\Delta_p} \exp\left[-\frac{(q-q_0)^2}{2\Delta_q^2} - \frac{(p-p_0)^2}{2\Delta_p^2}\right],$$

sob ação do mapa OHC, evolui de acordo com (3.2), como

$$\varrho(z, t = \mathbf{t}) = \varrho_0\left(\widetilde{M}_{\mathbf{t}}^{-1}(z)\right),$$

onde $\widetilde{M}_\tau^{-1}(z)$ é a τ -ésima aplicação da inversa do mapa do OHC, eq. (1.17), *i.e.*,

$$\widetilde{M}^{-1}(z_\tau) := z_{\tau-1} = \begin{pmatrix} \cos(\nu\tau)q_\tau - \sin(\nu\tau)p_\tau \\ \sin(\nu\tau)q_\tau + \cos(\nu\tau)p_\tau - K \sin[\cos(\nu\tau)q_\tau - \sin(\nu\tau)p_\tau] \end{pmatrix}.$$

A figura 5.1 mostra a evolução sob 4 aplicações do mapa OHC de pacotes clássicos centrados em posições distintas. As distribuições mostradas são representadas por 5 linhas: do centro para fora as linhas encerram respectivamente 15%, 35%, 55%, 75%, 95% da probabilidade total.

O grau de distorção das distribuições é um indício da não-linearidade da dinâmica em diferentes partes do espaço de fase. O gráfico a) mostra o pacote para $\tau = 4$ centrado no ponto $(0, 0)$, que é um ponto fixo do mapa, cf. seção 1.4.3. Sob estas circunstâncias, o ponto central permanece invariante pela evolução, enquanto o restante da distribuição se estica por toda a variedade instável, cf. fig. 1.6. Os outros gráficos mostram pacotes, localizados inicialmente em pontos ordinários do eixo das coordenadas, percorrendo tal variedade. Os pacotes em b) e c) sofrem a dilatação característica da proximidade ao ponto fixo hiperbólico, enquanto que para d) e e) a influência deste ponto diminui; para o gráfico e) a influência do ponto elíptico, cf. seção 1.4.3, predomina e os pacotes permanecem quase gaussianos. Todos os gráficos mostram apenas a parte negativa do eixo q ; pacotes localizados nas posições simétricas teriam o mesmo comportamento devido à simetria de reflexão da dinâmica em torno da origem.

5.1.1 Evolução do Centro dos Pacotes

A dinâmica do OHC clássico, mapa (1.17), pode ser decomposta em 2 mapas distintos: um mapa linear S_r de rotação de um ângulo $\nu\tau$ e outro de chute não-linear, S_c :

$$z_{\tau+1} = S_r S_c(z_\tau),$$

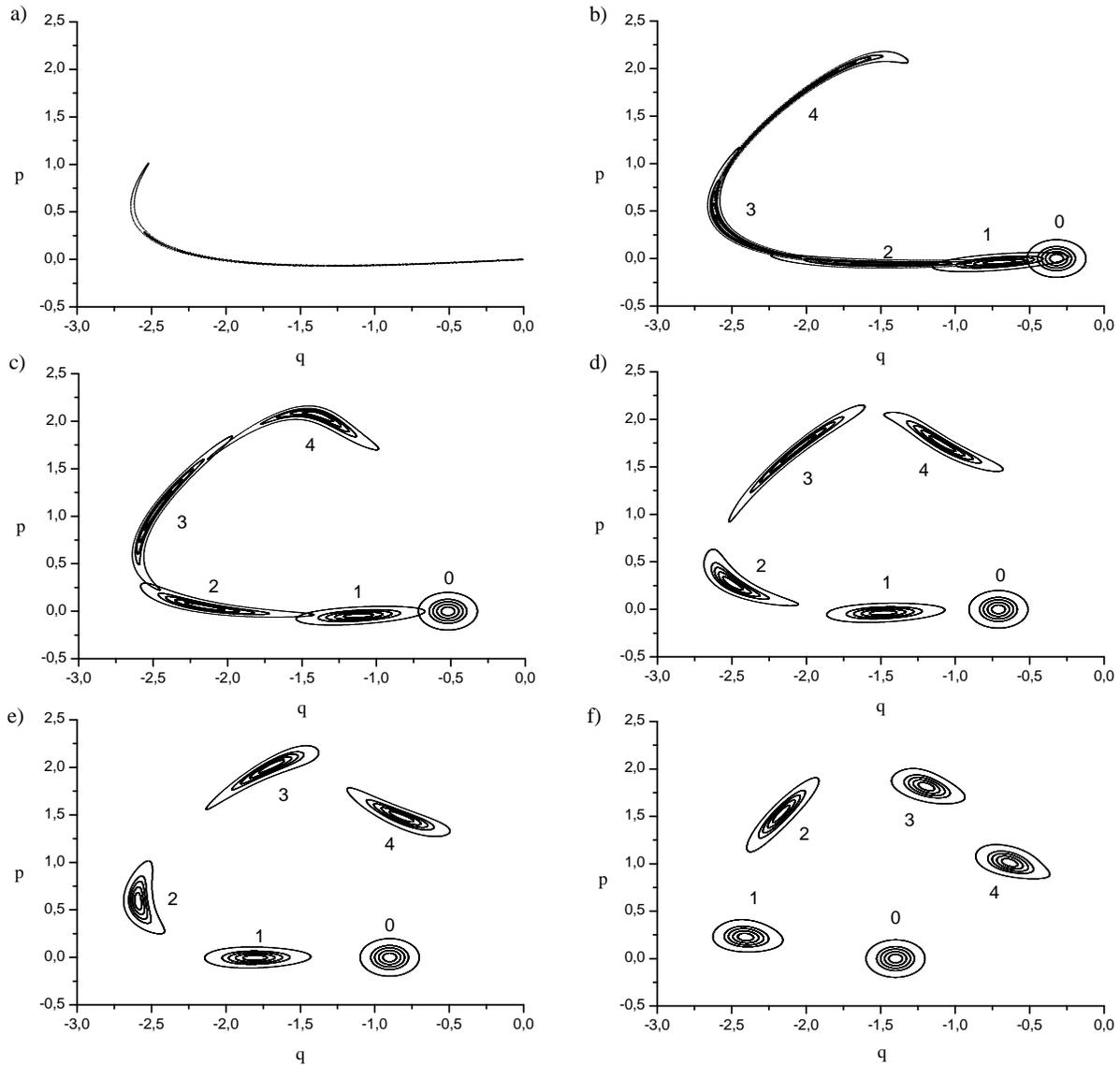


Figura 5.1: Distribuições clássicas evoluídas pelo OHC. Os números 0, 1, 2, 3, 4 acima dos pacotes indicam o tempo de evolução, τ . O gráfico a) indica o pacote centrado em $(0, 0)$ evoluído após 4 aplicações (só mostramos a metade). Os valores médios (q, p) dos pacotes iniciais ($\tau = 0$) são iguais a b) $(-0.32, 0)$, c) $(-0.52, 0)$, d) $(-0.71, 0)$, e) $(-0.9, 0)$ e f) $(-1.4, 0)$; os pacotes iniciais têm dispersões $\Delta_q = \Delta_p = 0.08$.

tais que,

$$\mathbf{S}_r(z) = \begin{pmatrix} \cos(\nu\tau) & \sin(\nu\tau) \\ -\sin(\nu\tau) & \cos(\nu\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

e

$$\mathbf{S}_c(z) = (q, p + K \sin(q))^T. \quad (5.2)$$

Tomando como referência uma órbita, $\bar{z} := (\bar{q}, \bar{p})$, a AOA pode ser aplicada,

$$\delta z_{t+1} \approx \tilde{\mathbf{S}}_c(\bar{z}) \delta z_t$$

com $\delta z_t = z_t - \bar{z}$ e

$$\tilde{\mathbf{S}}_c(\bar{z}) := \frac{\partial \mathbf{S}_c}{\partial z_t}(\bar{z}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ K \cos(\bar{q}) & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

A diagonalização da matriz $\tilde{\mathbf{S}}_c(\bar{z})$ revela dois autovalores iguais à 1 e um autovetor igual à $(0, 1)$, mostrando que é um cisalhamento vertical, cf. seção 1.3 e figura 1.1.

O movimento do centro, $\bar{z}(\mathbf{t})$, de uma distribuição clássica se propaga aproximadamente com o hamiltoniano não-linear. Porém, a dinâmica do OHC de todos os outros pontos da distribuição é aproximada pela composição dos mapas lineares (5.1) e (5.3).

Como o erro da aproximação diminui com δz_t , quanto mais concentrada a distribuição e para as regiões mais próximas ao centro, o método tem maior eficiência.

Na seção 1.4.3 o mapa OHC foi linearizado, note que o que lá foi definido como $\nabla_z \tilde{\mathbf{M}}(Z)$ pode ser decomposto no produto de \mathbf{S}_r e $\tilde{\mathbf{S}}_c$ em $Z = \bar{z}$.

Na figura 5.2 temos quatro aplicações sucessivas dos mapas (5.3) e (5.1) a dois pacotes gaussianos localizados em pontos distintos do espaço de fase. Os gráficos mostrados representam a evolução linear dos mesmos pacotes dos gráficos c) e f) da figura 5.1, porém, agora com o mapa OHC linearizado. Os centros dos pacotes seguem trajetórias próximas nos casos linear e não-linear.

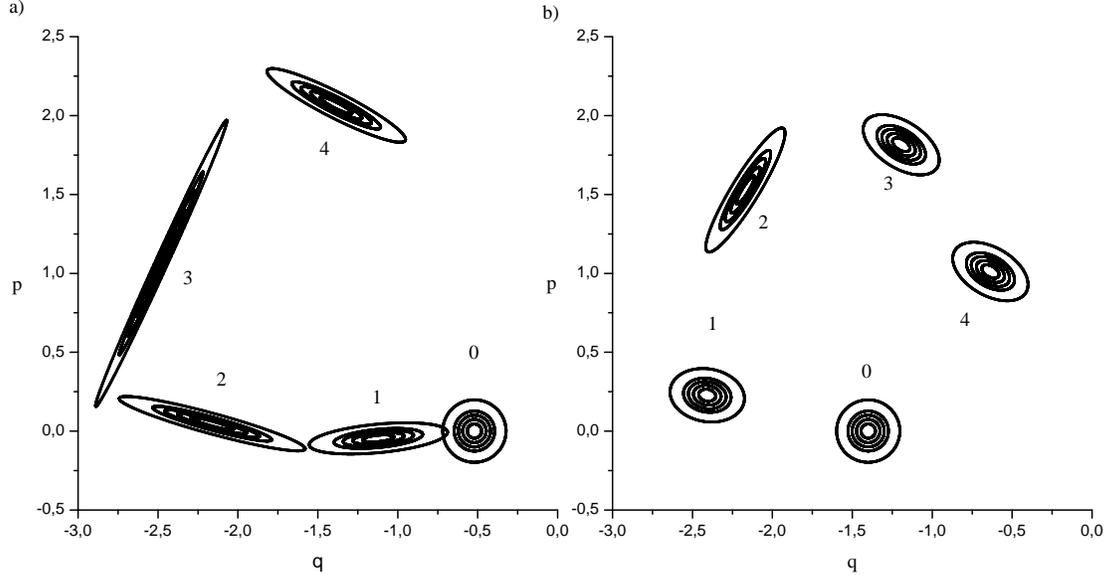


Figura 5.2: Distribuições clássicas evoluídas pelo mapa OHC linearizado. Os números 0, 1, 2, 3, 4 acima dos pacotes indicam o tempo de evolução, τ . Os valores médios (q, p) dos pacotes iniciais ($\tau = 0$) são iguais a a) $(-0.52, 0)$ e b) $(-1.4, 0)$; os pacotes iniciais têm dispersões $\Delta_q = \Delta_p = 0.08$.

5.2 Evolução Quântica do O.H.C.

Para evoluir um estado coerente, antes, vamos construir o propagador quântico para dinâmica do OHC. No caso clássico evoluímos a distribuição de acordo com o mapa clássico; para o caso quântico construiremos o propagador para a função de Wigner através das técnicas do artigo de Berry *et al* [6] para mapas quânticos.

A evolução de um estado quântico com a hamiltoniana do OHC é realizada, como no caso clássico, mediante a aplicação estroboscópica, cf. seção 1.4.1.

Um estado quântico $|\psi_\tau\rangle$ é evoluído a um estado $|\psi_{\tau+1}\rangle$ pela aplicação do mapa quântico unitário, ou propagador discreto,

$$\hat{U}(\tau, \tau + 1) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}K \cos \hat{q}\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\nu^2}{2}\hat{q}^2\right)\tau\right],$$

construído a partir da equação de Schroedinger: primeiro integramos a equação

entre dois instantes de tempo infinitesimalmente separados sob a ação exclusiva do termo de chute, Após, evoluímos por um período τ sob a dinâmica do oscilador harmônico. Dessarte,

$$\psi_{\mathfrak{t}+1}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \langle q | \hat{U} | q' \rangle \psi_{\mathfrak{t}}(q'), \quad (5.4)$$

com

$$\begin{aligned} \langle q | \hat{U} | q' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar \sin(\nu\tau)}} \exp \left\{ -\frac{i\pi}{4} + \frac{i}{2\hbar \sin(\nu\tau)} [(q^2 + q'^2) \cos(\nu\tau) - 2qq'] \right\} \\ &\times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} K \cos q \right], \end{aligned}$$

onde a primeira linha é o elemento de matriz do propagador do oscilador harmônico e a segunda corresponde ao propagador do chute – ambos escritos adimensionalmente (cf. eq. (1.12)).

Para calcular a evolução da função de Wigner, utilizamos a relação (2.50) com a função de onda (5.4), assim obtemos

$$W_{\mathfrak{t}+1}(z) = \frac{1}{\pi\hbar} \iiint d\xi_q dq_1 dq_2 \psi_{\mathfrak{t}}^*(q_1) \psi_{\mathfrak{t}}(q_2) \langle q_1 | \hat{U}^\dagger | q - \frac{1}{2}\xi_q \rangle \langle q + \frac{1}{2}\xi_q | \hat{U} | q_2 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} p \xi_q}.$$

Realizando a mudança de variáveis $q_1 = q' - \frac{1}{2}\xi'$, $q_2 = q' + \frac{1}{2}\xi'$ e introduzindo uma nova integral em dp' acompanhada de uma delta de Dirac, chegamos a

$$W_{\mathfrak{t}+1}(z) = \int dz' \mathcal{L}(\mathbf{S}_r^{-1}z, z') W_{\mathfrak{t}}(z') \quad (5.5)$$

como em [25], onde

$$\mathcal{L}(\mathbf{S}_r^{-1}z, z') = \frac{1}{\pi\hbar} \delta(q_r - q') \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [K \sin q' \sin y - y(p_r - p')] \right\}$$

e

$$z_r = (q_r, p_r)^\top = \mathbf{S}_r^{-1}z,$$

onde \mathbf{S}_r é a matriz simplética de rotação de um ângulo $\nu\tau$ definida em (5.1).

Na figura 5.3 é apresentada a evolução da função de Wigner de acordo com a equação (5.5) para $\mathfrak{t} = 2, 3$. Essa evolução é realizada no artigo de F. Toscano, R.L. de Matos Filho e L. Davidovich [25].

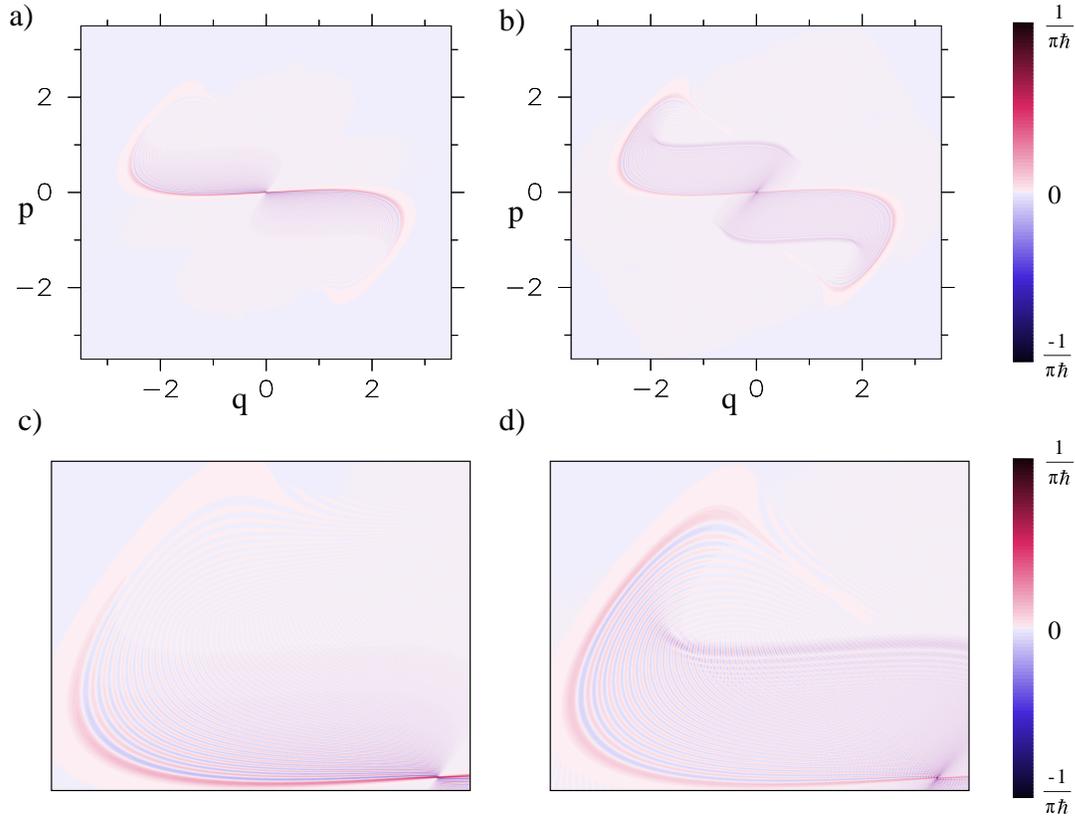


Figura 5.3: Propagação Quântica da Função de Wigner para um pacote coerente, de largura $\Delta q = \sqrt{\frac{\hbar}{2s}}$, com $\hbar = 0.0128$ e $s = 0.02$. a) $t = 2$ e b) $t = 3$; c) ampliação do retângulo $(-0.1, 2.25) \times (-2.5, 0.1)$ em a) e d) idem em b). Figuras cedidas por F. Toscano.

5.3 Evolução Semiclássica do O.H.C.

Como a hamiltoniana do oscilador harmônico chutado não é linear, não podemos construir um operador semiclássico associado que seja exatamente unitário. Porém, na seção 1.1 apresentamos a técnica AOA para linearizar a dinâmica de um sistema hamiltoniano geral, o que permite construir o propagador semiclássico da seção 3.1.2. Este propagador é descrito em termos de operadores metaplétricos e de Heisenberg definidos na seção 2.2.

5.3.1 Propagador Semiclássico do O.H.C.

A hamiltoniana $H = K \cos(q)$ nos dá equações de movimento para o chute em forma diferencial – equação (1.2), *i.e.*, para uma condição inicial (q_0, p_0) a evolução contínua no tempo é dada por:

$$z(t) = (q_0, p_0 + K \sin(q)t)^\top.$$

Para recuperarmos o mapa discreto (5.2) colocamos $t = 1$ nesta equação.

O cisalhamento contínuo é quantizado como apresentado na seção 3.1.2. Resolvendo as equações (3.8), (3.9) e (3.10) com $t = 1$ temos

$$\begin{aligned} \gamma_c &= -K \cos(q_0) + \frac{1}{2\hbar} K \sin(q_0) q_0, \\ z_c &= (q_0, p_0 + K \sin(q_0))^\top, \\ \mathbf{S} &= \tilde{\mathbf{S}}_c. \end{aligned} \quad (5.6)$$

A última equação é a mesma que a (5.3) e a penúltima é a linearização do chute. Então, exceto a fase puramente quântica γ_c , essas são as equações linearizadas da dinâmica do chute.

O propagador semiclássico na AOA, equação (3.5), para um chute é:

$$\hat{U}_c = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \gamma_c\right] \mathbf{T}_{z_c} \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger, \quad (5.7)$$

com γ_c , $\tilde{\mathbf{S}}_c$ e z_0 dados por (5.6) e um operador metaplético, de acordo com (??), associado à matriz simplética (5.3) escrito como:

$$\begin{aligned} \langle q | \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c) | \xi \rangle &= \frac{\sigma_c}{(\pi\hbar)^{1/4}} \exp\left[-\frac{1 - iK \cos(q_0)}{2\hbar} q^2 + \frac{i}{\hbar} \xi_p (q + \xi_q/2)\right] \times \\ &\times \exp\left[\frac{1}{\hbar} \xi_q q - \frac{1}{4\hbar} (\xi_q^2 - \xi_p^2)\right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

A quantização da rotação (5.1) nos conduz a um metaplético $\mathbf{M}(\mathbf{S}_r)$, e de acordo com (2.36),

$$\langle q | \mathbf{M}(\mathbf{S}_r) | \xi \rangle = \frac{\sigma_r}{(\pi\hbar)^{1/4}} \exp\left[-\frac{i\nu\tau}{2} - \left(\frac{q - \xi_q^R}{2\hbar}\right)^2 + \frac{i}{\hbar} \xi_p^R q - \frac{i}{2\hbar} \xi_q^R \xi_p^R\right], \quad (5.9)$$

com $\xi^r := \mathbf{S}_r \xi = (\xi_q^r, \xi_p^r)^\top$; note que esta equação também representa a ação do operador de rotação $\exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau)$, em um estado coerente $|\xi\rangle$, onde \hat{H} é a hamiltoniana do oscilador harmônico nas unidades especificadas por (5.1).

Os sinais¹ σ_c em (5.8) e σ_r em (5.9) são determinados como explicitado no final da seção 2.2.3. Assim, para a matriz do chute $\tilde{\mathbf{S}}_c$ temos $\sigma_c = \pm 1$ se $\cos(q_0) \leq 0$ e $\sigma_r = 1$ para rotação \mathbf{S}_r .

Reunindo as informações de (5.7) e (5.9), o propagador semiclássico do OHC para uma única evolução do mapa fica determinado por:

$$\hat{U}_{\text{OHC}} = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \gamma_c\right] \mathbf{M}(\mathbf{S}_r) \mathbf{T}_{z_c} \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger. \quad (5.10)$$

A quantização do mapa OHC nos rende, então, o propagador semiclássico que consiste, cf. seção 3.1.2, na atuação de um operador de translação, $\mathbf{T}_{z_0}^\dagger$, que leva o centro, (q_0, p_0) , do estado ao qual ele será aplicado para a origem, realiza a transformação metaplética de cisalhamento, $\mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c)$, retranslada o centro para a posição após o chute, \mathbf{T}_{z_c} e finalmente aplica a rotação ao pacote, $\mathbf{M}(\mathbf{S}_r)$.

A evolução estroboscópica de um estado $|\psi_\tau\rangle$ localizado é construída mediante aplicação sucessiva do propagador semiclássico – eq. (5.10), destarte,

$$|\psi_{\tau+1}\rangle = \hat{U}_{\text{OHC}} |\psi_\tau\rangle. \quad (5.11)$$

Definamos o centro do pacote $|\psi_\tau\rangle$ como a corda $\xi^\tau := (\xi_q^\tau, \xi_p^\tau)$ que representa a τ -ésima aplicação do mapa clássico (1.17) à corda inicial $z_0 = (q_0, p_0) := (\xi_q^0, \xi_p^0)$. Conseqüentemente redefinindo a fase, a matriz e a coordenada do centro em (5.6) por respectivamente γ_c^τ , $\tilde{\mathbf{S}}_c^\tau$ e z_c^τ , onde estas indicam a substituição de (q_0, p_0) por (ξ_q^τ, ξ_p^τ) em seus respectivos argumentos, escrevemos a evolução como:

¹O corte das folhas de Riemann no plano complexo é tomado abaixo do eixo real positivo. Tal escolha não oferece influência significativa, pois, de acordo com a equação (2.42), o sinal σ do operador metaplético se adéqua a essa alternância.

$$|\psi_{\mathfrak{t}_n}\rangle = \prod_{\mathfrak{t}=1}^{\mathfrak{t}_n} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\gamma_c^{\mathfrak{t}}\right) \mathbf{M}(\mathbf{S}_r) \mathbf{T}_{z_c^{\mathfrak{t}}} \mathbf{M}(\widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}}) \mathbf{T}_{\xi^{\mathfrak{t}-1}}^{\dagger} \right] |\psi_{\mathfrak{t}=0}\rangle, \quad (5.12)$$

onde o símbolo \prod representa o produtório ordenado. Se ainda definirmos

$$\hat{U}_{\text{OHC}}^{\mathfrak{t}_n} := \prod_{\mathfrak{t}=1}^{\mathfrak{t}_n} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\gamma_c^{\mathfrak{t}}\right) \mathbf{M}(\mathbf{S}_r) \mathbf{T}_{z_c^{\mathfrak{t}}} \mathbf{M}(\widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}}) \mathbf{T}_{\xi^{\mathfrak{t}-1}}^{\dagger} \right]$$

como sendo o propagador que evolui o estado $|\psi_{\mathfrak{t}_0}\rangle$ diretamente ao $|\psi_{\mathfrak{t}_n}\rangle$, escrevemos a eq.(5.12) de forma compacta:

$$|\psi_{\mathfrak{t}_n}\rangle = \hat{U}_{\text{OHC}}^{\mathfrak{t}_n} |\psi_{\mathfrak{t}=0}\rangle. \quad (5.13)$$

5.3.2 Algoritmo de Propagação Semiclássica

No caso de $|\psi_{\mathfrak{t}}\rangle$ em (5.11) constituir um estado coerente, a evolução computacional desse estado se resume a um algoritmo que considera a aplicação individual de cada operador constituinte do propagador em (5.12) entre os instantes $\mathfrak{t}, \mathfrak{t} + 1$. Esse algoritmo é laconicamente escrito como segue:

1. Determinação do pacote inicial ($|\psi_{\mathfrak{t}}\rangle$) de acordo com eq. (2.38):
 - (a) Escolher a forma inicial: matriz \mathbf{S}_i .
 - (b) Escolher o centro do pacote: $(\xi_q^{\mathfrak{t}}, \xi_p^{\mathfrak{t}})$.
2. Translação do centro $(\mathbf{T}_{\xi^{\mathfrak{t}}}^{\dagger})$: $(\xi_q^{\mathfrak{t}}, \xi_p^{\mathfrak{t}}) \rightarrow (0, 0)$.
3. Cisalhamento do pacote $(\mathbf{M}(\widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}+1}))$:
 - (a) Compor os metapléticos de \mathbf{S}_i e $\widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}+1}$ de acordo com eq.(2.40).
 - (b) Determinar matriz $\mathbf{S}_{i,c}^{\mathfrak{t}+1} := \widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}+1} \mathbf{S}_i$.
 - (c) Determinar o sinal da composição, $\sigma(\mathbf{S}_i, \widetilde{\mathbf{S}}_c^{\mathfrak{t}+1})$, de acordo com eq.(2.41).

4. Translação do centro ($\mathbb{T}_{z_c^{t+1}}$): $(0, 0) \rightarrow (\xi_q^{t+1}, \xi_p^{t+1})$.
5. Rotação do pacote ($\mathbb{M}(\mathbb{S}_r)$):
 - (a) Compor os metapléticos de $\mathbb{S}_{i,c}^{t+1}$ e \mathbb{S}_r de acordo com eq.(2.40).
 - (b) Determinar matriz $\mathbb{S}_{i,c,r}^{t+1} := \mathbb{S}_r \mathbb{S}_{i,c}^{t+1}$.
 - (c) Determinar o sinal da composição, $\sigma(\mathbb{S}_r, \mathbb{S}_{i,c}^{t+1})$, de acordo com eq.(2.41).
 - (d) Determinar o centro de acordo com eq.(5.9): $(\xi_q^r, \xi_p^r) = \mathbb{S}_r(\xi_q^{t+1}, \xi_p^{t+1})$.
6. Calcular a fase γ_c^t de acordo com eq.(5.6).
7. Construir o pacote ($|\psi_{t+1}\rangle$) de acordo com eq.(??):
 - (a) Forma final: matriz $\mathbb{S}_{i,c,r}^{t+1}$.
 - (b) Centro do pacote: $(\xi_q^{t+1}, \xi_p^{t+1}) := (\xi_q^R, \xi_p^R)$.
8. Adicionar ao estado ($|\psi_{t+1}\rangle$) a fase final resultante das composições dos metapléticos e das translações.

A aplicação sucessiva deste algoritmo permite que construamos um estado final gaussiano $|\psi_{t_n}\rangle$ a partir de um estado gaussiano inicial $|\psi_0\rangle$. Caso o estado inicial não seja gaussiano existe a possibilidade de expandirmo-lo em pacotes coerentes e aplicarmos o propagador a cada estado coerente, como em (3.11).

O maior préstimo deste procedimento é a contemporização de escrevermos o propagador, antes composto por translações e metapléticos, num produto ordenado para intervalos t diferentes – eq. (5.12) –, como um produto de dois operadores, \mathbb{T}'_ξ , $\mathbb{M}(\mathbb{S}')$ e uma fase, ϕ . Para $|\psi_0\rangle$ um pacote coerente do tipo (2.23) centrado na origem do espaço de fase, *i.e.*, $\mathbb{S}_i = \mathbb{I}$ e $(\xi_q^0, \xi_p^0) = (0, 0)$, a evolução sob duas aplicações do

propagador pode ser calculada tal como:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \hat{U}_{OHC}^2 |\psi_0\rangle \\
&= \prod_{t=1}^2 \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\gamma_c^t\right) \mathbf{M}(\mathbf{S}_r(\nu\tau)) \mathbf{T}_{z_c^t} \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c^t) \mathbf{T}_{\xi^{t-1}}^\dagger \right] |\psi_0\rangle \\
&= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\gamma_c^1 + \frac{i}{\hbar}\gamma_c^2\right) \mathbf{M}(\mathbf{S}_r(\nu\tau)) \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c^2) \mathbf{T}_{S_c^{2-1}z_c^2} \mathbf{T}_{\xi^1}^\dagger \mathbf{M}(\mathbf{S}_r(\nu\tau)) \mathbf{M}(\tilde{\mathbf{S}}_c^1) \mathbf{T}_{S_c^{1-1}z_c^1} \mathbf{T}_{\xi^0}^\dagger |\psi_0\rangle \\
&= \sigma(\mathbf{S}_r, \mathbf{S}_c^1) \sigma(\mathbf{S}_r, \mathbf{S}_c^2) e^{\frac{i}{\hbar}(\gamma_c^1 + \gamma_c^2 - \frac{1}{2}S_c^{2-1}z_c^2 \wedge \xi^1 - \frac{1}{2}S_c^{1-1}z_c^1 \wedge \xi^0)} \times \\
&\quad \times \mathbf{M}(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^2) \mathbf{T}_{(S_c^{2-1}z_c^2 - \xi^1)} \mathbf{M}(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^1) \mathbf{T}_{(S_c^{1-1}z_c^1 - \xi^0)} |\psi_0\rangle \\
&= \sigma(\mathbf{S}_r, \mathbf{S}_c^1) \sigma(\mathbf{S}_r, \mathbf{S}_c^2) \sigma(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^2, \mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^1) \times \\
&\quad \times e^{\frac{i}{\hbar}[\gamma_c^1 + \gamma_c^2 - \frac{1}{2}S_c^{2-1}z_c^2 \wedge \xi^1 - \frac{1}{2}S_c^{1-1}z_c^1 \wedge \xi^0 + \frac{1}{2}(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^1)^{-1} (S_c^{2-1}z_c^2 - \xi^1) \wedge S_c^{1-1}z_c^1 - \xi^0]} \times \\
&\quad \times \mathbf{M}(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^2 \mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^1) \mathbf{T}_{[(\mathbf{S}_r \tilde{\mathbf{S}}_c^1)^{-1} (S_c^{2-1}z_c^2 - \xi^1) + S_c^{1-1}z_c^1 - \xi^0]} |\psi_0\rangle \\
&:= e^{\frac{i}{\hbar}\phi} \mathbf{M}(\mathbf{S}') \mathbf{T}_{\xi'} |\psi_0\rangle, \tag{5.14}
\end{aligned}$$

onde usamos apenas as regras de composição para operadores metapléticos (2.40), para translações (2.16) e a regra de comutação entre operadores metapléticos e translações, ambas encontradas no apêndice A. Dada a complexidade do resultado torna-se evidente a necessidade de um algoritmo computacional para calcular a operação destes propagadores semiclássicos em estados quânticos.

5.3.3 Decomposição e Propagação

A propagação semiclássica para os pacotes coerentes foi determinada pelo propagador (5.12). A observação desta propagação no espaço de fase tem como candidata natural a função de Wigner cuja evolução (quântica), no caso de um pacote coerente, foi tratada na seção 5.2. A reconstrução semiclássica será realizada utilizando o propagador da seção 5.3.1 e os métodos numéricos de discretização da seção 4.3.

Aplicaremos as ferramentas desenvolvidas anteriormente para propagar um estado gaussiano, $|\beta(0)\rangle$, esticado ao longo do eixo das coordenadas. O estiramento é

considerado grande demais de modo que não é possível aplicar a AOA diretamente. Então primeiramente, decomponemos o estado $|\beta(0)\rangle$ em termos de outros pacotes gaussianos, $|\alpha(0)\rangle$, cf. eq.(4.2), e aproximamos essa decomposição por uma soma sobre um número finito de pacotes, cf. seção 4.2,

$$\begin{aligned} |\beta(\mathbf{t})\rangle &:= \hat{U}(\mathbf{t}) |\beta(0)\rangle \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha dP_\alpha \langle \alpha | \beta(0) \rangle \hat{U}(\mathbf{t}) |\alpha\rangle. \end{aligned}$$

Por outro lado, a evolução hamiltoniana deste pacote pode ser escrita usando a aproximação de órbitas adjacentes para gerar o propagador semiclássico de acordo com a decomposição em pacotes coerentes descrita em (3.11), expressamente:

$$\begin{aligned} |\beta(\mathbf{t})\rangle &\simeq \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_\alpha dP_\alpha \langle \alpha | \beta(0) \rangle \hat{U}_{AOA}(\mathbf{t}, \alpha) |\alpha\rangle \\ &\simeq \delta Q \sum_{k=1}^N f(\alpha_k, \beta(0)) \hat{U}_{AOA}(\mathbf{t}, \tilde{\alpha}_k) |\tilde{\alpha}_k\rangle := |\beta_N(\mathbf{t})\rangle, \end{aligned} \quad (5.15)$$

com $f(\alpha_k(0), \beta(0))$ dado em (4.7).

De acordo com a natureza estroboscópica da evolução do OHC, o propagador $\hat{U}_{AOA}(\mathbf{t}, \tilde{\alpha}_k)$ descrito na equação anterior pode ser identificado com $\hat{U}_{OHC}^{\mathbf{t}\alpha}$ em (5.13), como fizemos na seção 5.3.1 para a hamiltoniana do chute:

$$|\beta_N^{\mathbf{t}}\rangle := \delta Q \sum_{k=1}^N f(\alpha_k^0, \beta^0) \hat{U}_{OHC}^{\mathbf{t}}(\mathbf{t}, \tilde{\alpha}_k) |\tilde{\alpha}_k\rangle$$

A função de Wigner, $W_{\beta_N^{\mathbf{t}}}(z)$, para o estado $|\beta_N^{\mathbf{t}}\rangle$ é calculada usando a definição (2.49),

$$W_{\beta_N^{\mathbf{t}}}(z) = \frac{1}{\pi\hbar} \langle \beta_N^{\mathbf{t}} | \mathbf{R}_z | \beta_N^{\mathbf{t}} \rangle, \quad (5.16)$$

e a expansão em estados coerentes (5.15), destarte,

$$W_{\beta_N^{\mathbf{t}}}(z) = \frac{1}{\pi\hbar} \delta Q^2 \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N f(\alpha_j, \beta(0)) f(\alpha_k, \beta(0)) \langle \tilde{\alpha}_j | \hat{U}_{OHC}^{\mathbf{t}}(\tilde{\alpha}_j)^\dagger \mathbf{R}_z \hat{U}_{OHC}^{\mathbf{t}}(\tilde{\alpha}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle.$$

Para facilitar o cômputo, vamos expressar a soma pela qual a função de Wigner é descrita em um termo diagonal e outro não-diagonal, $W_{\beta_N}^t(z) := W_{jj}^t(z) + W_{jk}^t(z)$, respectivamente

$$W_{jj}^t(z) := \frac{1}{\pi\hbar} \delta Q^2 \sum_{j=1}^N [f(\alpha_j, \beta(0))]^2 \langle \tilde{\alpha}_j | \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_j)^\dagger \mathbf{R}_z \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_j) | \tilde{\alpha}_j \rangle$$

e

$$W_{jk}^t(z) := \frac{2}{\pi\hbar} \delta Q^2 \sum_{\substack{j,k=1 \\ j>k}}^N f(\alpha_j, \beta(0)) f(\alpha_k, \beta(0)) \operatorname{Re} \langle \tilde{\alpha}_j | \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_j)^\dagger \mathbf{R}_z \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle.$$

A equação (5.14) garante que o algoritmo de propagação semiclássica conduz o propagador \hat{U}_{OHC}^t a uma forma simples, ou seja, podemos defini-lo como

$$\hat{U}_{OHC}^t | \tilde{\alpha}_l \rangle := e^{\frac{i}{\hbar} \phi_l} \mathbf{T}_{\xi_l} \mathbf{M}(\mathbf{S}_l) | \tilde{\alpha}_l \rangle.$$

Para esta forma, podemos calcular os termos da função de Wigner através das regras de comutação entre operadores definidas no apêndice A. Para o termo diagonal,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\alpha}_j | \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_j)^\dagger \mathbf{R}_z \hat{U}_{OHC}^t(\tilde{\alpha}_j) | \tilde{\alpha}_j \rangle &= \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{M}(\mathbf{S}_j)^\dagger \mathbf{T}_{\xi_j}^\dagger \mathbf{R}_z \mathbf{T}_{\xi_j} \mathbf{M}(\mathbf{S}_j) | \tilde{\alpha}_j \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{M}(\mathbf{S}_j)^\dagger \mathbf{R}_{z-\xi_j} \mathbf{M}(\mathbf{S}_j) | \tilde{\alpha}_j \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{R}_{\mathbf{S}_j^{-1}(z-\xi_j)} | \tilde{\alpha}_j \rangle \\ &= (\pi\hbar) W_{\tilde{\alpha}_j}(\mathbf{S}_j^{-1}(z-\xi_j)), \end{aligned} \quad (5.17)$$

assim, os termos da soma diagonal são as funções de Wigner dos pacotes coerentes componentes da discretização, no referencial transformado pela matriz \mathbf{S}_j^{-1} e com centro transladado por ξ_j .

Já para termo não-diagonal, ou de interferência, usaremos as regras de composição entre os operadores metapléticos, eq. (2.40), a composição de translações, (2.16), a forma metaplética para o operador de reflexão e a comutação entre translações e metapléticos, ambas no apêndice A:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{\alpha}_j | \hat{U}_{OHC}^\dagger(\tilde{\alpha}_j)^\dagger \mathbf{R}_z \hat{U}_{OHC}(\tilde{\alpha}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}[\phi_j - \phi_k + z \wedge (\xi_k - \xi_j) + \frac{1}{2} \xi_k \wedge \xi_j]} \times \\
&\times \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{M}(\mathbf{S}_j)^\dagger \mathbf{R}_{z - \frac{1}{2}(\xi_j + \xi_k)} \mathbf{M}(\mathbf{S}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}[\phi_j - \phi_k + z \wedge (\xi_k - \xi_j) + \frac{1}{2} \xi_k \wedge \xi_j]} \times \\
&\times i \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{M}(\mathbf{S}_j)^\dagger \mathbf{T}_{2z - (\xi_j + \xi_k)} \mathbf{M}(-\mathbb{I}) \mathbf{M}(\mathbf{S}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle \\
&= \sigma(\mathbf{S}_j^{-1}, -\mathbb{I}) \sigma(-\mathbf{S}_j^{-1}, \mathbf{S}_k) e^{\frac{i\pi}{2} - \frac{i}{\hbar}[\phi_j - \phi_k + z \wedge (\xi_k - \xi_j) + \frac{1}{2} \xi_k \wedge \xi_j]} \times \\
&\times \langle \tilde{\alpha}_j | \mathbf{T}_{\mathbf{S}_j^{-1}[2z - (\xi_j + \xi_k)]} \mathbf{M}(-\mathbf{S}_j^{-1} \mathbf{S}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle \\
&= \sigma(\mathbf{S}_j^{-1}, -\mathbb{I}) \sigma(-\mathbf{S}_j^{-1}, \mathbf{S}_k) \times \\
&\times e^{\frac{i\pi}{2} - \frac{i}{\hbar}[\phi_j - \phi_k + z \wedge (\xi_k - \xi_j) + \frac{1}{2} \xi_k \wedge \xi_j] - \frac{1}{2} \alpha_j \wedge \mathbf{S}_j^{-1}[2z - (\xi_j + \xi_k)]} \times \\
&\times \langle \tilde{\alpha}_j - \mathbf{S}_j^{-1}[2z - (\xi_j + \xi_k)] | \mathbf{M}(-\mathbf{S}_j^{-1} \mathbf{S}_k) | \tilde{\alpha}_k \rangle. \quad (5.18)
\end{aligned}$$

Este elemento metaplético é calculado usando a equação (2.37).

Na figura 5.4 apresentamos a evolução semiclássica para o mesmo estado, $|\beta\rangle$, descrito na figura 5.3 aproximado pelo estado $|\beta_N\rangle$, uma decomposição de $|\beta\rangle$ em $N = 134$ pacotes circulares.

5.4 Cáusticas da Função de Wigner

No espaço de fases, as cáusticas aparecem naturalmente como restrição ao movimento: “as cáusticas são envelopes de trajetórias” [20], e para as curvas convexas (toros) na camada de energia, também são o conjunto de pontos onde a aproximação WKB diverge [20]. Para as funções de Wigner resultante das quantizações desses toros, obtemos as, assim chamadas por Berry, cáusticas de Wigner [5, 21].

Comentaremos aqui, pictoricamente, uma possível extensão das cáusticas de Wigner para curvas não convexas. Sobretudo, analisaremos as cáusticas da função de Wigner evoluída pelo OHC na aproximação semiclássica AOA.

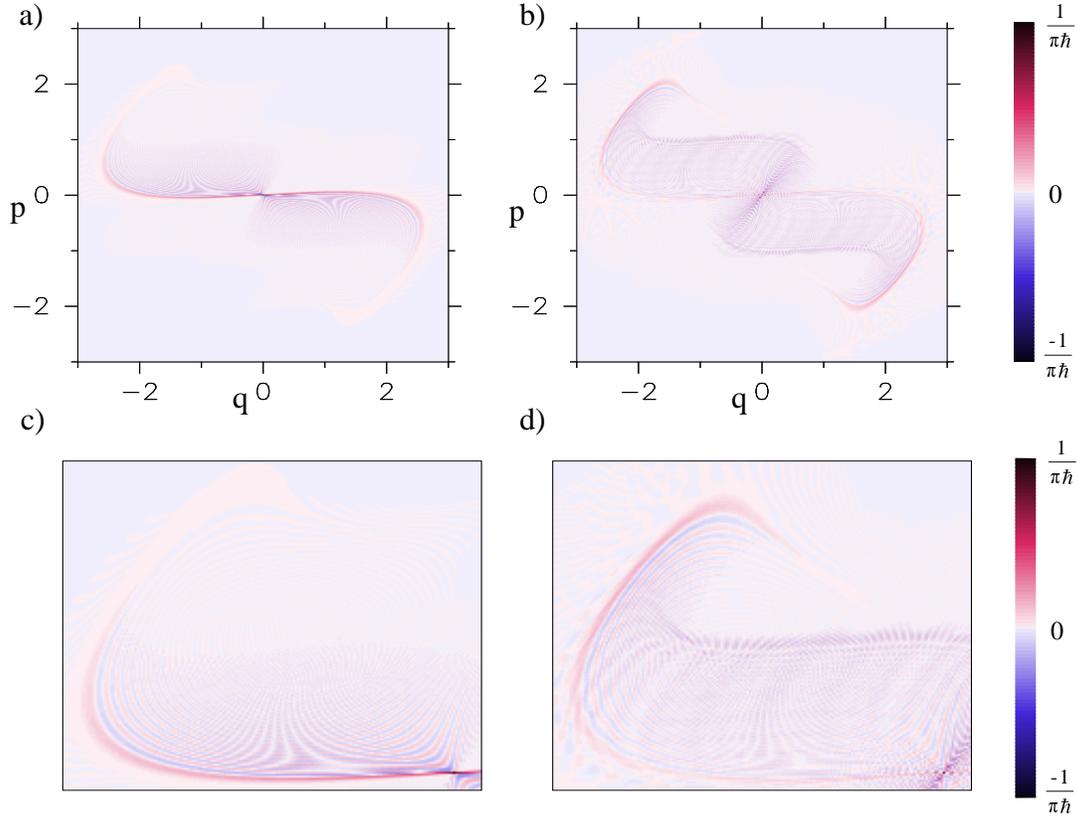


Figura 5.4: Propagação semiclássica da função de Wigner para um pacote coerente, de largura $\Delta q = \sqrt{\frac{\hbar}{2s}}$, com $\hbar = 0.0128$ e $s = 0.02$. O pacote inicial foi decomposto em 134 pacotes circulares de largura $\Delta q = 0.08$. a) $\tau = 2$ e b) $\tau = 3$; c) ampliação do retângulo $(-0.1, 2.25) \times (-2.5, 0.1)$ em a) e d) idem em b).

A função de Wigner foi escrita como soma de elementos de matriz do operador de reflexão envolvendo pacotes coerentes, que nesta seção será representada simplesmente por:

$$W(z) \propto \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \langle \alpha_j | R_z | \alpha_k \rangle. \quad (5.19)$$

Utilizamos esta forma simples para a função de Wigner, em detrimento das apresentadas na seção anterior, porque os resultados aqui realizados, casualmente, não perdem nenhuma informação com esta restrição. Estamos apenas interessados no movimento do centro dos pacotes coerentes descritos pelas transformações canônicas

clássicas e na forma coerente, que sob a atuação dos operadores de Heisenberg e metapléticos se mantém.

O operador de reflexão atuando no pacote $|\alpha_k\rangle$ pode ser expresso, isentando-se de uma fase $\phi_k := \alpha_k \wedge z$, por $|\alpha_k - 2z\rangle$, de modo que a equação (5.19) pode ser reescrita como:

$$W(z) \propto \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} \phi_k} \langle \alpha_j | \alpha_k - 2z \rangle. \quad (5.20)$$

A função de Wigner no ponto z do espaço de fase é, então, uma soma de termos, cada um dos quais tem amplitude máxima, de acordo com (2.26), em

$$z = \frac{\xi_j + \xi_k}{2},$$

onde ξ_k é o centro do pacote $|\alpha_k\rangle$, *i.e.*, a função de Wigner tem máximos relativos em pontos que são médios às cordas unindo o centro dos pacotes.

As cáusticas da função de Wigner que obtivemos propagando um pacote gaussiano com o OHC, e em geral de curvas não convexas, mimetizam o comportamento das cáusticas de toros: as cáusticas da função de Wigner se localizam nos pontos do espaço de fase onde há coalescência de centros das cordas [5, 21]. Na figura 5.5 todos os pontos apresentados são centros de cordas; as regiões mais densas são as cáusticas para a função de Wigner de um estado coerente evoluído sob a dinâmica do OHC.

A variedade instável do ponto fixo da origem do OHC (figura 1.6) é por si só uma cáustica, nestes pontos centros de pacotes adjacentes coalescem. A origem pode ser denominada *ponto focal* devido à simetria de reflexão do mapa do OHC, para cada pacote existe um simétrico com respeito a ela. Nas figuras 5.4 e 5.3 as cáusticas são os pontos de maior intensidade da função de Wigner.

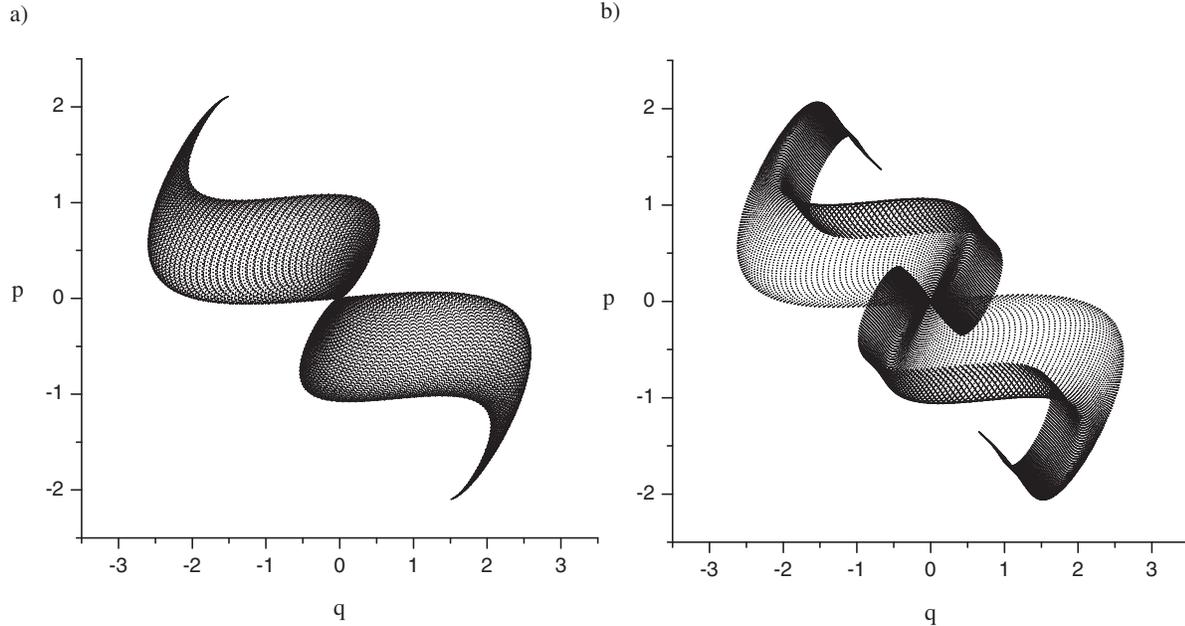


Figura 5.5: Cáusticas da função de Wigner para um pacote coerente evoluído pela dinâmica do Oscilador Harmônico Chutado. a) 2 e b) 3 aplicações do mapa estroboscópico.

5.5 Análise da Aproximação Semiclássica

Os resultados apresentados na seção 5.3.3 carecem de alguns comentários. Esta seção é dedicada à análise do resultado da aproximação semiclássica.

5.5.1 Unitariedade

O estado inicial tem simetria de reflexão com respeito à origem, *i.e.*, $R_0 |\beta_0\rangle = |\beta_0\rangle$. A evolução quântica preserva esta simetria: $R_0 |\beta_t\rangle = |\beta_t\rangle$, portanto a função de Wigner em $z = 0$ pode ser escrita como

$$W_t(z = 0) := \frac{1}{\pi\hbar} \langle \beta_t | R_0 | \beta_t \rangle = \frac{1}{\pi\hbar} \langle \beta_t | \beta_t \rangle,$$

isto é, $\pi\hbar W_t(z = 0) = \langle \beta_t | \beta_t \rangle$.

A aproximação semiclássica também preserva essa simetria, já que a posição dos pacotes pelos quais o pacote inicial é decomposto só depende do mapa linearizado do OHC, que é simétrico com respeito a origem. Então, o desvio de $\pi\hbar W_{\mathfrak{t}}(z=0)$ da unidade indica a perda de unitariedade.

O valor da função de Wigner exata no centro é $(\pi\hbar)^{-1}$. Para evolução quântica, apresentada na seção 5.2, a concordância do resultado numérico segue até a oitava casa decimal para $\mathfrak{t} = 2, 3$.

Na tabela 5.5.1 encontramos o valor da função de Wigner semiclássica no centro do espaço de fase em unidades de $(\pi\hbar)$, em função do número de aplicações do mapa do OHC, \mathfrak{t} .

\mathfrak{t}	$\pi\hbar W_{\beta_N}^{\mathfrak{t}}(z=0)$
0	1.0000...
1	1.0005
2	0.995
3	1.4

Tabela 5.1: Valores da função de Wigner no ponto $z=0$ em unidades de $\pi\hbar$ em função do tempo de propagação \mathfrak{t} , com $(\pi\hbar)^{-1} = 24.867959\dots$ para $\hbar = 0.0128$ e $N = 134$ pacotes.

O erro relativo é definido por:

$$\epsilon_{\%} := \pi\hbar \left| (\pi\hbar)^{-1} - W_{\beta_N}^{\mathfrak{t}}(z=0) \right| = 1 - \pi\hbar W_{\beta_N}^{\mathfrak{t}}(z=0).$$

que é exatamente o desvio da unidade da função de Wigner.

O erro para $\mathfrak{t} = 0$ é tão pequeno quanto queiramos, só depende da discretização do pacote inicial. A análise do erro da discretização foi feita na seção 4.3. Já para $\mathfrak{t} = 3$ o erro é da ordem de 40%, e é devido as não-linearidades, cujos efeitos são muito influentes e não conseguem ser descritos pela linearização. Ou seja, a

aproximação AOA para a construção do propagador rende bons resultados apenas para tempos curtos, como relatado na seção 3.1.2.

5.5.2 Secções da Função de Wigner

A comparação dos gráficos em 5.4 e em 5.3 pode ser mais acurada se tomarmos um corte longitudinal que permita observar a função de Wigner em apenas uma de suas variáveis.

Para a segunda aplicação do mapa do OHC, figura 5.4- a) e figura 5.3- a), escolhemos, sem nenhuma anteposição, o plano $q = -2$. As funções de Wigner, exata e aproximada, neste plano são representadas na figura 5.6.

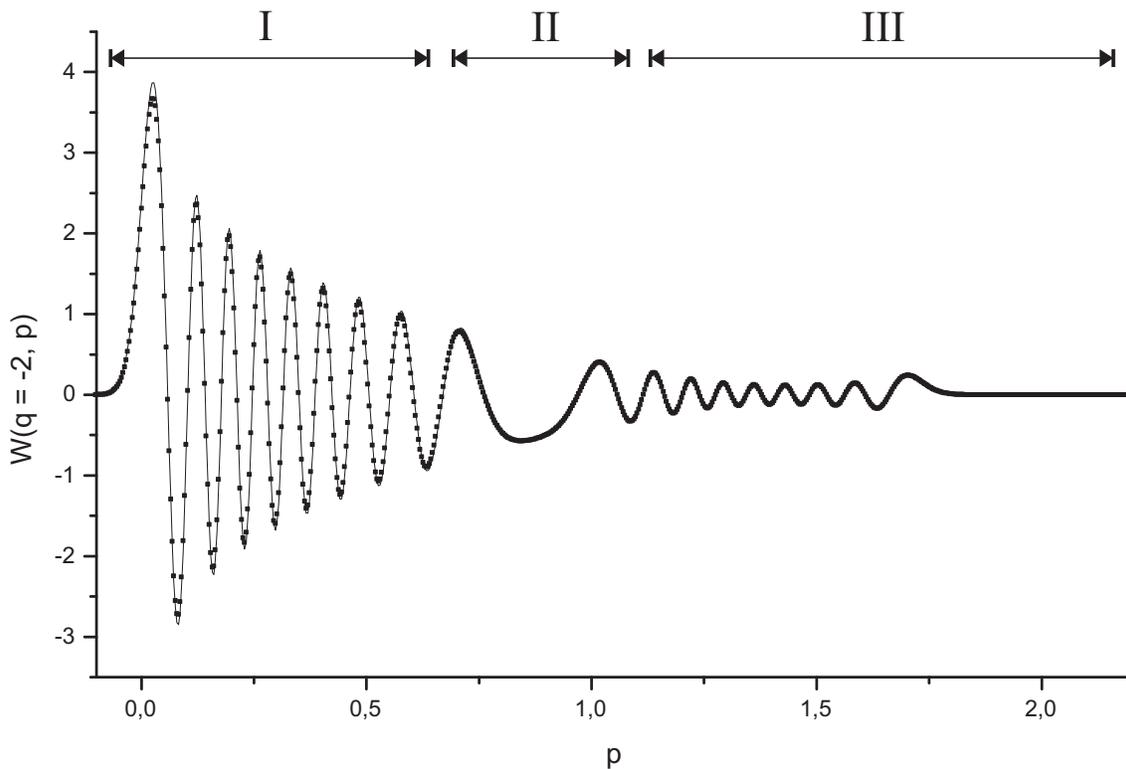


Figura 5.6: Secção transversal da função de Wigner, plano $q = -2$, para a segunda aplicação do mapa do OHC. Evolução quântica: linha contínua; aproximação semiclássica: pontos.

Nesta figura da seção transversal podemos ressaltar alguns detalhes do comportamento global da função de Wigner (veja figura 5.4):

- Região I: o pico situado próximo ao ponto $p = 0$ representa o filamento resultante da evolução do pacote inicial, ou a cáustica de Wigner da seção anterior. À esquerda deste pico há um decaimento rápido e monótono, à direita temos uma região de oscilações regulares. Esse tipo de comportamento é característico da função de Airy;

- Região II: no intervalo $p \in (0.8, 1.0)$ existe um vale bojudo correspondendo à outra cáustica da função de Wigner, observe também a figura 5.5-a);

- Região III: a partir do vale da cáustica, temos oscilações regulares até o ponto $p = 1.75$, onde encontramos um último pico diminuto, porém saliente, que representa o segundo corte do plano ao filamento do pacote. Após este último pico, a função de Wigner decresce assintoticamente à reta $W(-2, p) = 0$.

Em geral, é importante ressaltar a aparência, excetuando-se algumas peculiaridades, da função de Wigner na seção transversal com uma função de Airy (cf. figura 3.1). Na seção 3.3 propagamos um estado esticado ao longo do eixo dos momentos sob a ação da hamiltoniana cúbica. Este estado se assemelha ao pacote inicial da propagação semiclássica, que é um pacote coerente esticado ao longo do eixo das coordenadas, tanto quanto as dobras da função de Wigner (figura 5.4-a)) se aproximam da função de Wigner do estado propagado pela hamiltoniana cúbica (figura 3.4). Portanto, a forma bipolarabólica da figura 5.4-a) é decorrente da ação dos termos cúbicos na hamiltoniana do OHC.

Pela apreciação dos gráficos pudemos observar que a aproximação semiclássica concorda muito bem com a evolução quântica exata para $\mathfrak{t} = 2$. Contudo, para $\mathfrak{t} = 3$ não existe uma concordância tão satisfatória, a dissimilitude já pode ser observada nos gráficos 5.3 e 5.4. Para uma comparação mais refinada, escolhemos duas seções: $q = -2$ e $q = -1.5$, respectivamente nas figuras 5.7 e 5.8.

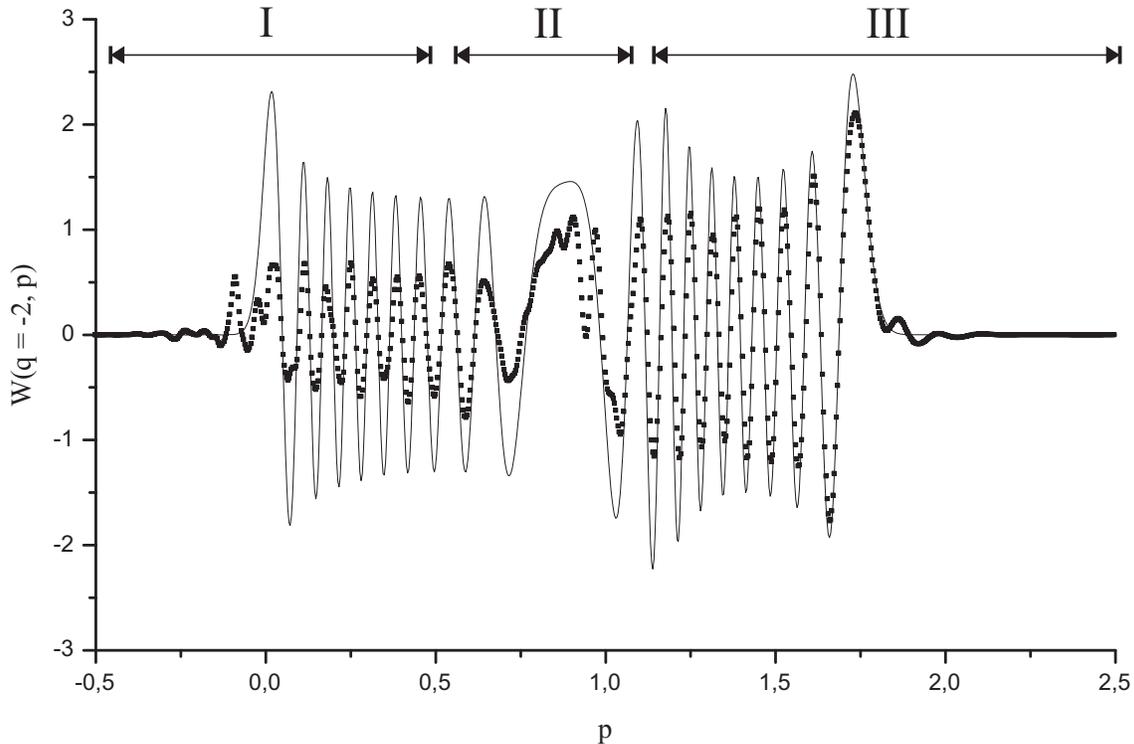


Figura 5.7: Secção transversal da função de Wigner, plano $q = -2$, para a terceira aplicação do mapa do OHC. Evolução quântica: linha contínua; aproximação semiclássica: pontos.

Na secção longitudinal $q = -2$, figura 5.7, podemos observar que na região I a curva da função exata descreve as características de uma função de Airy; a aproximação, peculiarmente, só reproduz a fase das oscilações. Na região II temos uma cáustica, que também não é reproduzida pela aproximação semiclássica. Já na região III, o erro da aproximação é atenuado, e o comportamento imita também uma função de Airy. O pico próximo a $p = 2$ representa a interseção do plano longitudinal com o filamento da função de Wigner.

O mesmo comportamento consta na figura 5.8, onde o plano longitudinal é tomado em $q = -1.5$: em todo o plano apenas as fases das oscilações são bem reproduzidas, todavia, para os pontos posteriores a cáustica em $p = 0.7$ da região II, a aproximação melhora vertiginosamente.

A representação da função de Wigner na equação (5.20) ilustra o bom comportamento da aproximação semiclássica no que concerne à reprodução das fases das oscilações em ambos os casos, $q = -1.5$ e $q = -2$: elas só dependem dos centros dos pacotes. Estes pacotes seguem a trajetória clássica linearizada que descreve com erro razoável a trajetória não-linear, cf. seção 5.1.1.

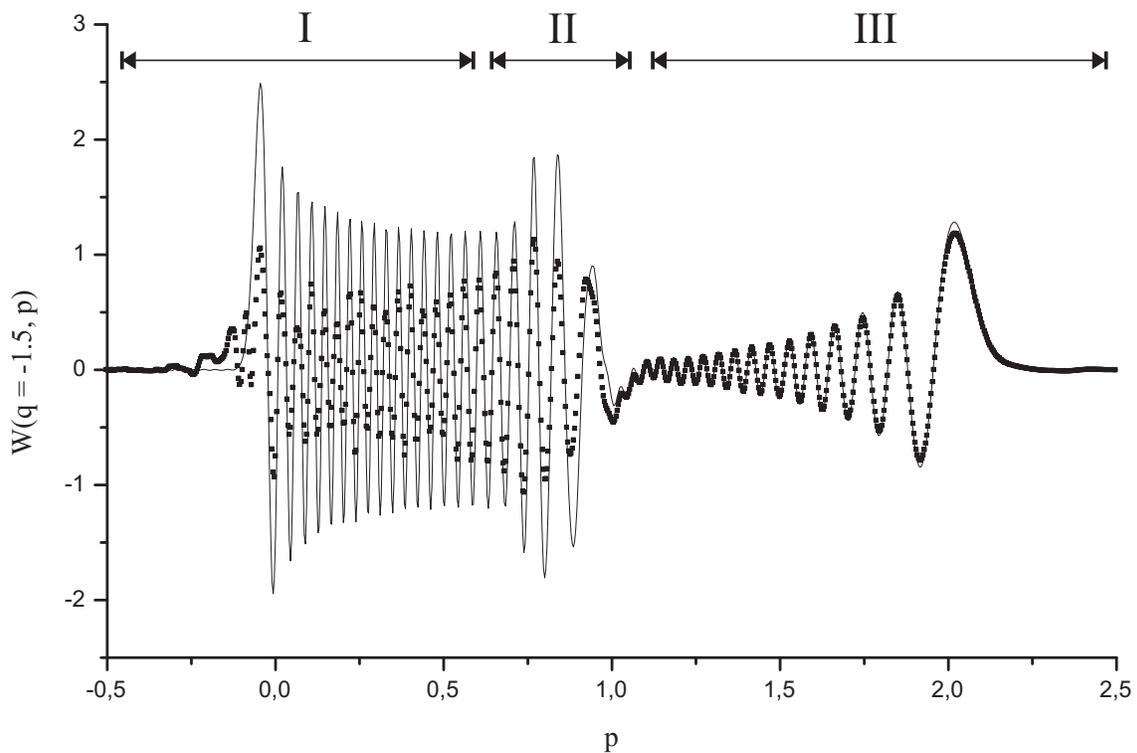


Figura 5.8: Secção transversal da função de Wigner, plano $q = -1.5$, para a terceira aplicação do mapa do OHC. Evolução quântica: linha contínua; aproximação semiclássica: pontos.

Nesta próxima seção discutiremos a razão das dificuldades do método semiclássico para $\tau = 3$, assim como o êxito para $\tau = 2$.

5.5.3 Não-gaussianidade

Nossa aproximação linear local pressupõe que a forma dos pacotes componentes da discretização não é alterada pelo mapa não-linear, ou, pelo menos, que essa alteração seja pequena o suficiente para garantir um bom resultado.

Nesta seção estudaremos o quanto as deformações sofridas por um pacote evoluído pela dinâmica do OHC influencia a acurácia da aproximação semiclássica.

Definimos os *momentos centrados* de uma distribuição $\varrho(x)$ como

$$\mu_x^n := \int_{-\infty}^{\infty} \varrho(x)(x - \bar{x})^n,$$

onde $\bar{x} := \int_{-\infty}^{\infty} x\varrho(x)$ é a média da variável aleatória x .

O coeficiente de *assimetria* (do inglês *skewness*) é determinado em termos do terceiro momento da distribuição,

$$\mathcal{A}_x := \frac{\mu_x^3}{(\mu_x^2)^{3/2}},$$

e quantifica a falta de simetria da distribuição com respeito a seu “centro” (a assimetria da gaussiana é nula). Outro coeficiente relevante é o de *curtose*, definido em termos do quarto momento, que mostra o quanto uma distribuição é mais fina ou alongada do que uma gaussiana. O coeficiente de curtose é definido por

$$\mathcal{C}_x := \frac{\mu_x^4}{(\mu_x^2)^2} - 3.$$

O valor do coeficiente $\frac{\mu_x^4}{(\mu_x^2)^2}$ para uma distribuição normal é 3, isto explica a subtração deste termo na definição da curtose. Em ambos coeficientes, o desvio padrão no denominador estabelece a escala da distribuição normal com a qual as distribuições serão comparadas.

Valores de assimetria e curtose diferentes de zero indicam desvios de gaussianidade. Em nosso caso, de distribuições bidimensionais, analisaremos a curtose e assimetria de cada variável q e p .

Na seção 5.3.3 decomparamos o pacote inicial $|\beta\rangle$ em pacotes coerentes $|\alpha\rangle$ distribuídos ao longo do eixo das coordenadas. Para $t = 0$, os valores da curtose e da assimetria de todos os pacotes nas variáveis q e p são nulos. Os valores de curtose e assimetria marginais para alguns desses pacotes, após evoluídos pela dinâmica do OHC para $t = 2$ e $t = 3$, estão nas figuras 5.9 e 5.10.

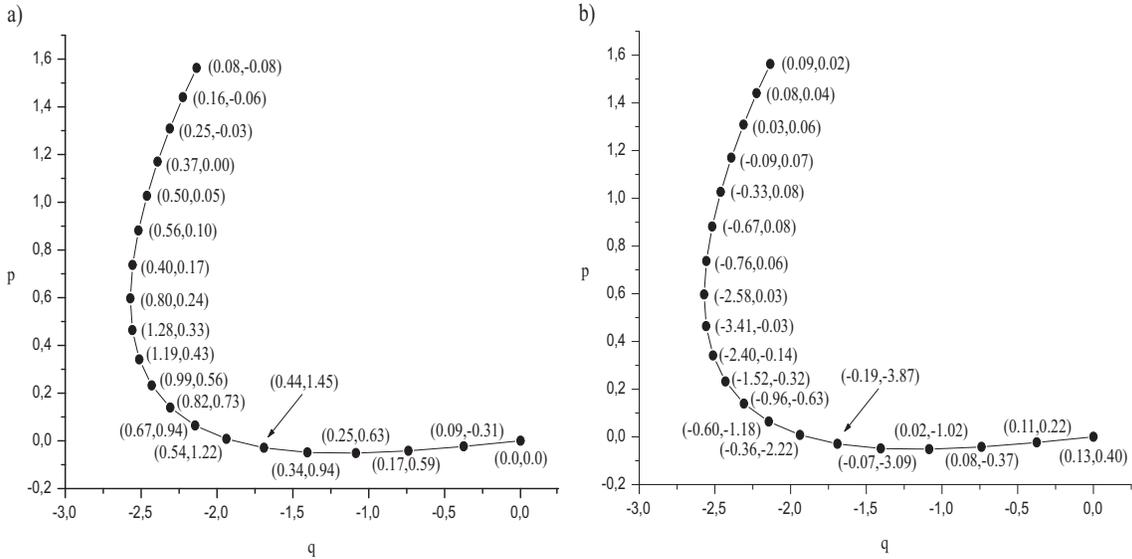


Figura 5.9: Assimetria e Curtose para 20 pacotes coerentes evoluídos pelo mapa OHC para $t = 2$. Os pacotes iniciais estão distribuídos ao longo do eixo negativo das coordenadas e têm largura $\Delta q = \Delta p = 0.08$. Os pontos representam a posição dos centros dos pacotes enquanto que o par ordenado associado a um ponto representa: a) a assimetria nos eixos q e p , $(\mathcal{A}_q, \mathcal{A}_p)$; b) a curtose nos eixos q e p , $(\mathcal{C}_q, \mathcal{C}_p)$.

Os dados apresentados na figura 5.9 e 5.10 concordam com a forma dos pacotes desenhados nos gráficos da figura 5.1. *E.g.*, o pacote 2 do gráfico 5.1-f) é muito próximo de uma gaussiana, está centrado em $(-2.25, 1.5)$ que é uma região de baixa curtose e assimetria nos gráficos da figura 5.9; os pacotes 3 dos gráficos b) e c) em 5.1 estão na região de mais alta curtose e assimetria da figura 5.10 e se apresentam bem deformados, enquanto que o pacote 3 da figura f) está numa região de baixa

curtose e assimetria e aparentemente é pouco deformado.

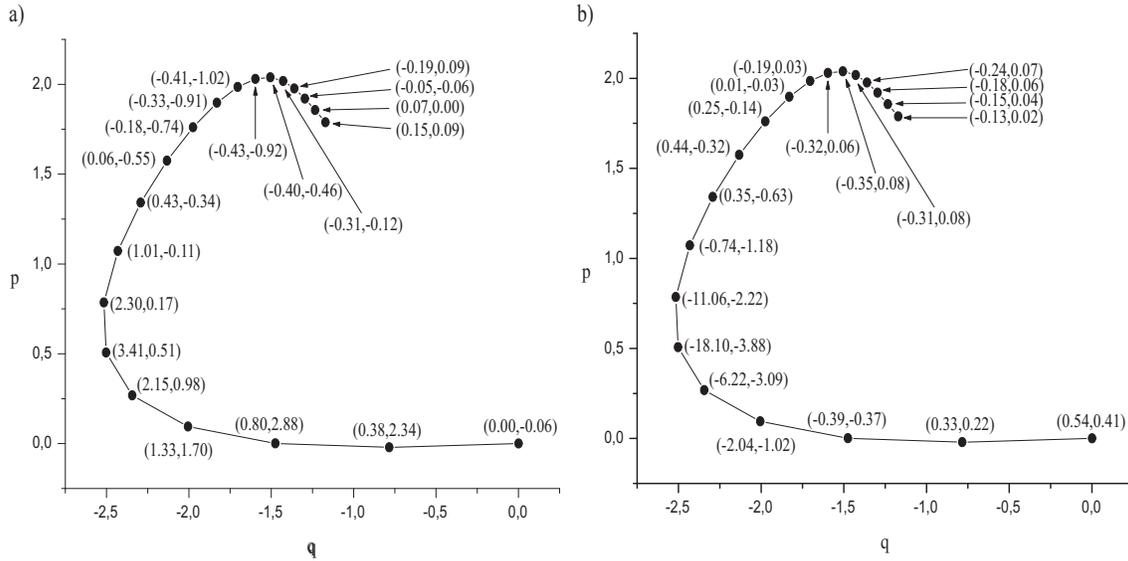


Figura 5.10: Assimetria e Curtose para 20 pacotes coerentes evoluídos pelo mapa OHC para $\tau = 3$. Os pacotes iniciais estão distribuídos ao longo do eixo negativo das coordenadas e têm largura $\Delta q = \Delta p = 0.08$. Os pontos representam a posição dos centros dos pacotes enquanto que o par ordenado associado ao centro representa: a) a assimetria nos eixos q e p , (A_q, A_p) ; b) a curtose nos eixos q e p , (C_q, C_p) .

Em face do exposto, as medidas de curtose e assimetria são boas medidas de não-gaussianidade para pacotes. A aproximação semiclássica sustentada pela linearidade dos pacotes, deixa de prover bons resultados no momento em que os pacotes propagados pelo mapa exato deixam de ser suficientemente gaussianos, ou seja, se tornam muito distintos dos pacotes propagados linearmente. A figura 5.2 em contraste com a figura 5.1 ilustra este comentário: a comparação do gráfico a) de 5.2 com o c) de 5.1 mostra a diferença sensível quanto à forma dos pacotes em detrimento da comparação do gráfico b) de 5.2 com f) de 5.1.

A aproximação semiclássica para $\tau = 2$, figura 5.4-a), é visualmente idêntica à função de Wigner quântica, figura 5.3 e esta coincidência se reflete na figura 5.6. Isto se deve à “quase-unitariedade” do propagador semiclássico para tempos curtos,

discutida na seção 5.5.1 e também às medidas de gaussianidades da figura 5.9, que apresentam de modo geral pequenos valores – pelo menos se comparados com os valores de 5.10.

Para $\tau = 3$ a aproximação semiclássica destoa do resultado exato, como pode ser observado nas figuras 5.7 e 5.8. Contudo, principalmente na figura 5.8 existem regiões onde a aproximação descreve bem o resultado exato. Na figura 5.11, temos duas retas $q = -1.5$ e $q = -2$ interceptadas por cordas unindo centros de pacotes que percorrem a variedade instável do OHC.

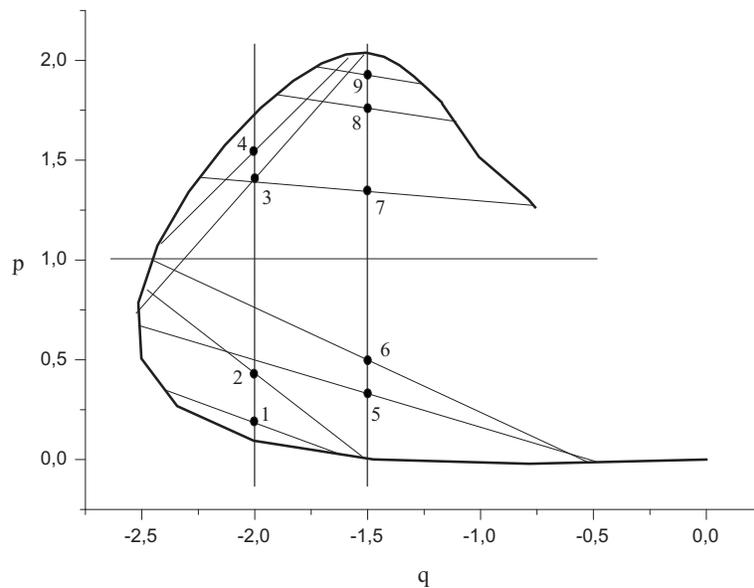


Figura 5.11: Centros de cordas, pontos numerados, nas seções longitudinais, $q = -2$ e $q = -1.5$, da função de Wigner para a terceira aplicação do mapa OHC.

O valor da função de Wigner num ponto determinado, como dito na seção 5.4, depende explicitamente dos pacotes nos extremos das cordas que têm como centro tal ponto. Podemos observar que para $q = -1.5$ na figura 5.11, temos duas famílias distintas de cordas: àquelas que interceptam esta reta acima e abaixo de $p = 1$. As cordas que tem os pontos médios na reta $q = -1.5$ e abaixo da reta $p = 1$ têm as extremidades em pacotes que não são suficientemente gaussianos, ou seja, aqueles

assentados nas regiões de alta curtose e assimetria da figura 5.10, enquanto que os centros que se situam acima da reta $p = 1$ estão nas regiões de baixa curtose e assimetria. Esses argumentos explicam a melhora súbita da função de Wigner a partir da reta $p = 1$ na figura 5.8.

Já para a secção $q = -2$, figura 5.7, a aproximação também melhora a partir de $p = 1$, porém, não tão consideravelmente. Mesmo assim, podemos observar sua causa: as cordas que interceptam a reta $q = -2$ acima de $p = 1$ têm pacotes localizados nas regiões de alta e baixa gaussianidade da variedade instável 5.10, porém, abaixo da reta $p = 1$ temos apenas os centros provindos de pacotes da região de alta curtose e assimetria.

Capítulo 6

Conclusão

“- Decidi fazer esta viagem e eu a farei, aconteça o que acontecer!

Oxalufã perguntou ainda ao babalô, se oferendas e sacrifícios melhorariam as coisas.

Este respondeu-lhe: Qualquer que sejam suas oferendas, a viagem será desastrosa.”

Pierre F. Verger - *Lendas africanas dos orixás*

Um pacote inicialmente gaussiano, submetido à ação de uma hamiltoniana caótica, apresenta estruturas diferentes ao longo da evolução.

Consideremos, por simplicidade, o caso que o centro do pacote, suposto circular, coincide com um ponto fixo (hiperbólico). Em um primeiro instante, o pacote se estica em direção da variedade instável e se comprime na direção da variedade estável. Para um pacote pequeno o suficiente, este regime é linear, já que a influência das partes não-lineares do hamiltoniana pode ser ignorada. O tempo de duração da fase linear é, o já comentado, tempo de Ehrenfest, τ_E .

Após o tempo de Ehrenfest, a ação dos termos não-lineares não pode ser negligenciada. Uma dinâmica linearizada não é mais capaz de descrever as deformações do pacote que se dobra acompanhando a variedade instável do ponto hiperbólico. Agora, para que continuemos a descrever a evolução, podemos decompor o pacote

esticado em estados coerentes circulares. Cada um destes estados poderá ser propagado durante um tempo τ_E usando a aproximação linear, como fizemos com o pacote original; o estado final será obtido superpondo estes pacotes.

No instante $2\tau_E$, cada um dos pacotes da decomposição pode, então, ser decomposto novamente em outros pacotes e a evolução pode ser continuada pela aplicação sucessiva do método de decomposição e propagação. A evolução do pacote inicial faz com que este se colapse sobre a variedade instável, criando o que podemos chamar de dinâmica filamentar. No limite $\hbar \rightarrow 0$, o filamento preencherá todo o espaço de fase, no caso de um sistema ergódico. Este é um método geral que nos permite, em princípio, analisar as primeiras fases da evolução de um pacote gaussiano usando só a dinâmica clássica linearizada.

Nesta tese, fizemos um primeiro teste do método de propagação linear e decomposição com o objetivo de descrever a evolução de um pacote gaussiano inicial após o tempo de Ehrenfest. Para tanto, já iniciamos com a decomposição de um estado esticado, imitando as características de um estado já evoluído pela primeira fase linear descrita acima. A propagação linear foi implementada usando as técnicas semiclássicas de Littlejohn.

Uma parte deste trabalho destinou-se a construir o arcabouço teórico para a propagação semiclássica, que constituiu na descrição das propagações clássica e quântica tão bem como a descrição dos objetos de propagação: pacotes clássicos, estados coerentes e funções de Wigner.

Na outra parte construímos o propagador, como extensão da teoria de Littlejohn de dinâmicas contínuas, para a dinâmica estroboscópica do oscilador harmônico chutado e apresentamos os resultados numéricos. Como um primeiro exemplo de aplicação do método teórico, analisamos também a hamiltoniana cúbica. Mostramos que o propagador semiclássico para esta hamiltoniana se reduz ao caso exato ao tomarmos os pacotes da decomposição suficientemente pequenos, o que corrobora

com a análise final da gaussianidade dos pacotes evoluídos pela dinâmica caótica do oscilador chutado.

A parcela do trabalho que se destinou à simulação resumiu-se na decomposição do estado inicial em pacotes coerentes e a propagação destes pacotes. A decomposição numérica é extremamente eficaz. Já a propagação possui limitações no que tange à perda de gaussianidade dos pacotes evoluídos. A eficiência numérica da teoria depende do tamanho relativo da constante de Planck e conseqüentemente do tamanho dos pacotes.

Assim se diminuirmos a constante de Planck, mantendo o comprimento do estado inicial, a qualidade da aproximação deverá melhorar. Alternativamente, se quisermos uma maior precisão, mantendo \hbar fixo, deveríamos realizar uma decomposição adicional, por exemplo, na segunda aplicação do mapa do OHC.

Como continuação imediata deste trabalho construiremos a teoria semiclássica para curvas não-fechadas no espaço de fase, o que descrevemos como “filamentos quânticos”, já que o pacote se estende ao longo da variedade instável como um filamento. Acreditamos que os cálculos de fase estacionária mostrarão que a estrutura semiclássica de um filamento é determinada por cordas e áreas simpléticas de modo similar ao que ocorre com as funções de Wigner associadas a toros.

Apêndice A

Relações entre Operadores

Aqui é apresentado um compêndio de fórmulas tratando das relações entre os operadores de reflexão, translação e metaplético. A maioria dessas fórmulas foram retiradas de uma versão pré-impressa de um artigo de R. O. Vallejos, e algumas podem ser encontradas em [21].

Relações Clássicas

No espaço de fase definimos os operadores de translação e reflexão, respectivamente como,

$$T_\xi : z \longmapsto z + \xi,$$

$$R_z : \eta \longmapsto -\eta + 2z,$$

onde, $z, \xi, \eta \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$.

A composição das translações e reflexões é descrita por

$$\begin{aligned}
T_{\xi_2} T_{\xi_1} &= T_{\xi_1 + \xi_2}, \\
R_{z_2} R_{z_1} &= T_{2(z_2 - z_1)}, \\
T_{\xi} R_z &= R_{z + \xi/2}, \\
R_z T_{\xi} &= R_{z - \xi/2}, \\
R_z = T_{2z} R_0 &= R_0 T_{-2z};
\end{aligned}$$

todas as expressões acima são trivialmente dedutíveis a partir das definições desses operadores.

Relações Quânticas

A versão dos operadores de translação e reflexão quânticos já foi descrita nas seções (2.2.1) e (2.3). Como dito em (2.3), os operadores de reflexão são a transformada de Fourier dos operadores de translação,

$$\begin{aligned}
R_z &:= \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi \exp[iz \wedge \xi/\hbar] T_{\xi} \\
&= \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi \exp[i\xi \wedge (\hat{z} - z)/\hbar].
\end{aligned}$$

A composição de operadores de translação e reflexão é derivada por

$$\begin{aligned}
R_z T_{\xi} &= \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi' \exp(iz \wedge \xi'/\hbar) T_{\xi'} T_{\xi} \\
&= \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi' \exp[i(z - \xi/2) \wedge \xi'/\hbar] T_{\xi + \xi'} \\
&= \frac{1}{(4\pi\hbar)^n} \int d\xi'' \exp[i(z - \xi/2) \wedge (\xi'' - \xi)/\hbar] T_{\xi''} \\
&= \exp[-iz \wedge \xi/\hbar] R_{z - \xi/2}.
\end{aligned}$$

tão bem como,

$$T_\xi R_z = \exp(-iz \wedge \xi/\hbar) R_{z+\xi/2},$$

$$R_z = T_{2z} R_0 = R_0 T_{-2z},$$

e ainda,

$$T_\xi R_z T_\xi^\dagger = R_{z+\xi}.$$

Podemos agora definir a composição de dois operadores de reflexão,

$$R_{z_2} R_{z_1} = T_{2z_2} R_0 R_0 T_{-2z_1} = T_{2z_2} T_{-2z_1} = \exp[iz_1 \wedge z_2/\hbar] T_{2(z_2-z_1)}.$$

Apreende-se deste parágrafo a estreita relação entre esses operadores e os clássicos do parágrafo anterior.

Operadores Metapléticos

A forma linear $\omega(z_1, z_2) := z_1 \wedge z_2$ é invariante sob transformações canônicas lineares, $\omega(\mathbf{S}z_1, \mathbf{S}z_2) = \omega(z_1, z_2)$, devido as propriedades do produto “ \wedge ”, eq. (1.8), e a simplecticidade da matriz \mathbf{S} , eq. (1.11).

Calculemos a conjugação da forma $\omega(\hat{z}, z_0)$ por $\mathbf{M}(\mathbf{S})$:

$$\mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger (\mathbf{J}\hat{z} \cdot z_0) \mathbf{M}(\mathbf{S}) = \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger (\mathbf{J}\hat{z}\mathbf{M}(\mathbf{S}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger z_0) \mathbf{M}(\mathbf{S}) = \omega(\mathbf{S}^{-1}\hat{z}, z_0).$$

O operador de translação pode ser expandido em potências de $\omega(\hat{z}, z_0)$, cf. seção 2.2.1, e então facilmente se demonstra a *covariância dos operadores de Heisemberg*,

$$\mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger T_\xi \mathbf{M}(\mathbf{S}) = T_{\mathbf{S}^{-1}\xi}.$$

Escrevendo R_0 como a transformada de Fourier de T_ξ , é demonstrável que,

$$\mathbf{M}(\mathbf{S}) R_0 \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger = R_0,$$

assim, utilizando a composição de translações com reflexões,

$$\mathbf{M}(\mathbf{S}) \mathbf{R}_z \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger = \mathbf{M}(\mathbf{S}) \mathbf{T}_{2z} \mathbf{R}_0 \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger = \mathbf{T}_{2\mathbf{S}z} \mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_{\mathbf{S}z},$$

que é a *covariância metaplética* e implica na *covariância da função de Wigner*,

$$W(z) \propto \text{Tr}(\mathbf{R}_z \hat{\rho}) = \langle \psi | \mathbf{R}_z | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{M}(\mathbf{S})^\dagger \mathbf{R}_z \mathbf{M}(\mathbf{S}) | \phi \rangle = W(\mathbf{S}^{-1}z)$$

para um estado $|\psi\rangle = \mathbf{M}(\mathbf{S})|\phi\rangle$.

O operador \mathbf{R}_0 pode ser representado em termos de um metaplético. Uma rotação de $\theta = \pi$ em um estado coerente (2.25) pode ser escrita como

$$\langle q | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | \beta \rangle = \langle q | \mathbf{M}(-\mathbb{I}) | \beta \rangle \Big|_{\sigma=1},$$

se $\hat{H} = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \hbar \omega$ e utilizarmos a (2.38). Para \mathbf{R}_0 ,

$$\langle q | \mathbf{R}_0 | \beta \rangle = \langle q | -\beta \rangle,$$

comparando com a equação anterior:

$$\mathbf{R}_0 = i\mathbf{M}(-\mathbb{I}).$$

Apêndice B

Elemento de Matriz do Operador Metaplético

Neste apêndice deduzimos os elementos de matriz do operador metaplético, $\langle q|M(S)|q'\rangle$, eq. (2.32) e $\langle q|M(S)|0\rangle$, eq. (2.33).

Elemento $\langle q|M(S)|q'\rangle$

Tomando como referência apenas a parte configuracional¹, \hat{Q} , em (2.30)

$$\hat{Q} = A\hat{q} + B\hat{p},$$

para qual usamos a decomposição (1.13) para S e assumimos que $\sqrt{\det B} \neq 0$, temos que os elementos de matriz são dados por

$${}_{\hat{q}}\langle q'|\hat{Q}|q\rangle_{\hat{Q}} = q {}_{\hat{q}}\langle q'|q\rangle_{\hat{Q}}. \quad (\text{B.1})$$

O índice \hat{Q} indica a base dos auto-estados desse operador, ou seja, $\hat{Q}|q\rangle_{\hat{Q}} = q|q\rangle_{\hat{Q}}$, idem para \hat{q} ; o autovalor q é o mesmo para os dois operadores, \hat{Q} e \hat{q} , já que estamos

¹Separamos o operador \hat{Z} pois não é possível criar auto-estados desse operador, já que as suas partes não comutam, vide (2.29).

falando de um mesmo estado (transformação canônica passiva), portanto, temos a equação diferencial

$$\left(\mathbf{A}q' - i\hbar\mathbf{B}\frac{\partial}{\partial q'} - q \right) \mathbf{m}(q', q) = 0,$$

onde $\mathbf{m}(q', q) := \hat{q}\langle q' | q \rangle_{\hat{Q}}$, que tem como solução

$$\mathbf{m}(q', q) = \Lambda(q) \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}q' - 2q' \cdot \mathbf{B}^{-1}q)\right].$$

O fator $\Lambda(q)$ se faz necessário devido a derivação parcial com relação à q' , mas pode ser obtido diretamente da condição de ortonormalização para os auto-estados de \hat{Q} , com efeito,

$$\begin{aligned} \delta(q - q') &= \hat{Q}\langle q' | q \rangle_{\hat{Q}} \\ &= \int dq'' \hat{Q}\langle q' | q'' \rangle_{\hat{Q}} \hat{Q}\langle q'' | q \rangle_{\hat{Q}} \\ &= \int dq'' \mathbf{m}(q'', q')^* \mathbf{m}(q'', q) \\ &= \int dq'' \Lambda^*(q') \Lambda(q) \exp\left[\frac{i}{\hbar} q'' \cdot \mathbf{B}^{-1}(q - q')\right] \\ &= (2\pi\hbar)^n \Lambda^*(q') \Lambda(q) \delta[\mathbf{B}^{-1}(q - q')] \\ &= |\Lambda(q)|^2 (2\pi\hbar)^n |\det \mathbf{B}| \delta(q - q') \quad \therefore \\ \Lambda(q) &= \frac{e^{\frac{i}{\hbar}s(q)}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}}. \end{aligned}$$

Assim, o produto escalar é escrito como

$$\mathbf{m}(q', q) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}s(q)}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}} \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}q' - 2q' \cdot \mathbf{B}^{-1}q)\right], \quad (\text{B.2})$$

porém ainda é necessário encontrarmos a fase $s(q)$. Isto é feito tomando, agora, os elementos de matriz do segundo par de equações (2.30),

$$\hat{P} = \mathbf{C}\hat{q} + \mathbf{D}\hat{p},$$

o que proporciona

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial q} + i\hbar\mathbf{D}\frac{\partial}{\partial q'} - \mathbf{C}q' \right) \mathbf{m}(q', q) = 0,$$

usando a equação (B.2), temos

$$\frac{\partial s(q)}{\partial q} = (\text{DB}^{-1}\text{A} - \text{C} - \text{B}^{-1})q' - \text{DB}^{-1}q,$$

e também as condições (1.14) sobre S , que anulam o termo entre parêntesis da equação acima,

$$s(q) = -\frac{1}{2}q \cdot \text{DB}^{-1}q - \hbar c,$$

com c constante. Com isso, reescrevemos a equação (B.2),

$$\begin{aligned} \mathfrak{m}(q', q) &= \frac{\sigma^*}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \text{B}|}} \times \\ &\times \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \text{B}^{-1}\text{A}q' - 2q' \cdot \text{B}^{-1}q + q \cdot \text{DB}^{-1}q)\right], \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

onde definimos $\sigma := i^{\frac{n}{2}} e^{ic}$, que está intimamente relacionado com a construção do produto entre metapléticos na seção 2.2.3.

Observando a atuação do operador M nos auto-estados de posição, equação (2.31), e comparando diretamente com a (B.1), podemos reescrever a definição de $\mathfrak{m}(q', q)$ como

$$\mathfrak{m}(q', q)^* := \hat{q} \langle q | q' \rangle_{\hat{q}} = \langle q | \text{M}(\text{S}) | q' \rangle,$$

o que finalmente nos rende a equação (2.32). A dedução deste elemento de matriz, bem como a teoria de operadores metapléticos é encontrada em [18].

Elemento $\langle q | \text{M}(\text{S}) | 0 \rangle$

Utilizando a relação de completeza para a base $|q'\rangle$ e a equação (2.32),

$$\begin{aligned} \langle q | \text{M}(\text{S}) | 0 \rangle &= \int dq' \langle q | \text{M}(\text{S}) | q' \rangle \langle q' | 0 \rangle \\ &= \frac{\sigma}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \text{B}|}} \times \\ &\times \int dq' \exp\left[\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \text{B}^{-1}\text{A}q' - 2q' \cdot \text{B}^{-1}q + q \cdot \text{DB}^{-1}q)\right] \langle q' | 0 \rangle. \end{aligned}$$

O estado $\langle q'|0\rangle$ coerente é dado na eq.(2.23) com $m\omega = 1$, assim,

$$\begin{aligned} \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}} \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \times \\ &\times \int dq' \exp\left[\frac{i}{2\hbar} (q' \cdot \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}q' - 2q' \cdot \mathbf{B}^{-1}q + q \cdot \mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}q) - \frac{1}{2\hbar} q' \cdot q'\right]. \end{aligned}$$

Rearrmando os argumentos da exponencial,

$$\begin{aligned} \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}} \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} q \cdot \mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}q\right] \times \\ &\times \int dq' \exp\left\{-\frac{1}{2i\hbar} [q' \cdot (\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A} + i\mathbb{I}) q' - 2q \cdot \mathbf{B}^{-1}q']\right\}. \end{aligned}$$

Efetuando a integral,

$$\begin{aligned} \langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{(2\pi i\hbar)^n |\det \mathbf{B}|}} \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{n/4} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} q \cdot \mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}q\right] \times \\ &\times \sqrt{\frac{(2i\pi\hbar)^n}{\det(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A} + i\mathbb{I})}} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} q \cdot \mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}q - \frac{i}{2\hbar} q \cdot (\mathbf{A}\mathbf{B} + i\mathbf{B}^2)^{-1}q\right]. \end{aligned}$$

Utilizando as equações (1.14), finalmente obtemos o elemento de matriz desejado:

$$\langle q|\mathbf{M}(\mathbf{S})|0\rangle = \frac{\sigma}{(\pi\hbar)^{n/4} [\det(\mathbf{A} + i\mathbf{B})]^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2\hbar} q \cdot \left(\frac{\mathbf{D} - i\mathbf{C}}{\mathbf{A} + i\mathbf{B}}\right) q\right].$$

Apêndice C

Derivada Temporal do Propagador Semiclássico

Neste apêndice calculamos a derivada do propagador semiclássico, eq.(3.6).

A equação (3.6) é a que segue:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbb{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathcal{S}(t)) \mathbb{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle. \quad (\text{C.1})$$

Para calcular a derivada do termo entre colchetes precisamos da derivada dos operadores de Heisenberg e dos metapléticos.

Operador de Heisenberg:

Para calcular a derivada destes operadores, apelamos para a equação (2.16) e encontramos

$$\mathbb{T}_{z+\dot{z}\Delta t} = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar} \dot{z} \wedge z\right] \mathbb{T}_{\dot{z}\Delta t} \mathbb{T}_z.$$

Substituindo o operador $\mathbb{T}_{\dot{z}\Delta t}$, temos que

$$\mathbb{T}_{z+\dot{z}\Delta t} = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar} \dot{z} \wedge z - \frac{i\Delta t}{\hbar} \hat{z} \wedge z\right] \mathbb{T}_z.$$

Expandindo a exponencial até a primeira ordem em Δt , ficamos com

$$\mathbb{T}_{z+\dot{z}\Delta t} = \left\{ 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left[\hat{z} \wedge \dot{z} - \frac{1}{2} z \wedge \dot{z} \right] \right\} \mathbb{T}_z.$$

No limite $\Delta t \rightarrow 0$, temos finalmente a derivada temporal:

$$\frac{d}{dt}\mathbb{T}_z = -\frac{i}{\hbar} \left[(\hat{z} - z) \wedge \dot{z} + \frac{1}{2}z \wedge \dot{z} \right] \mathbb{T}_z. \quad (\text{C.2})$$

Operador Metaplético:

Trataremos este de forma semelhante aos de Heisenberg.

Uma matriz $\mathbb{S}(t + \Delta t)$ pode ser expandida em primeira ordem em Δt , com efeito,

$$\mathbb{M}(\mathbb{S}(t + \Delta t)) = \mathbb{M}(\mathbb{S} + \Delta t \dot{\mathbb{S}}).$$

Utilizando a composição de metapléticos da seção 2.2.3, obtemos,

$$\mathbb{M}(\mathbb{S}(t + \Delta t)) = \mathbb{M}(\mathbb{S}(\mathbb{I} + \Delta t \dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1})) = \mathbb{M}(\mathbb{I} + \Delta t \dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1})\mathbb{M}(\mathbb{S}),$$

onde escolhemos o sinal positivo de acordo com a continuidade, pois que $\mathbb{M}(\mathbb{I}) = \mathbb{I}$.

Um operador metaplético infinitesimal deve ser da forma:

$$\mathbb{M}(\epsilon) = 1 - \frac{i\epsilon}{2\hbar} \hat{z} \cdot \mathbb{K} \hat{z},$$

de modo que a equação (2.30) seja satisfeita para um operador $\mathbb{S} := \mathbb{I} + \epsilon \mathbf{JK}$ infinitesimal. E, de acordo com (1.11), \mathbb{K} é simétrico.

Portanto,

$$\mathbb{M}(\mathbb{S}(t + \Delta t)) = \left(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \hat{z} \cdot \mathbf{J}\dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1} \hat{z} \right) \mathbb{M}(\mathbb{S}(t)).$$

e finalmente, no limite $\Delta t \rightarrow 0$, encontramos:

$$\frac{d}{dt}\mathbb{M}(\mathbb{S}) = \left(\frac{i}{2\hbar} \hat{z} \cdot \mathbf{J}\dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1} \hat{z} \right) \mathbb{M}(\mathbb{S}). \quad (\text{C.3})$$

Reunindo as derivadas, eqs. (C.2) e (C.3), em (C.1) escrevemos:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle \\
&= i\hbar \left[\frac{i}{\hbar} \dot{\gamma}(t) e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle \\
&\quad - i\hbar \left[\frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \left((\hat{z} - z) \wedge \dot{z} + \frac{1}{2} z \wedge \dot{z} \right) \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle \\
&\quad + i\hbar \left[\frac{i}{2\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(t)} \mathbf{T}_{z(t)} \left(\hat{z} \cdot \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} \hat{z} \right) \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger \right] |\psi_0\rangle \\
&= \left[-\dot{\gamma}(t) + (\hat{z} - z) \wedge \dot{z} + \frac{1}{2} z \wedge \dot{z} - \frac{1}{2} (\hat{z} - z) \cdot \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} (\hat{z} - z) \right] \times \\
&\quad \times \mathbf{T}_{z(t)} \mathbf{M}(\mathbf{S}(t)) \mathbf{T}_{z_0}^\dagger |\psi_0\rangle \quad \therefore \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \left[-\dot{\gamma}(t) + (\hat{z} - z) \wedge \dot{z} + \frac{1}{2} z \wedge \dot{z} - \frac{1}{2} (\hat{z} - z) \cdot \mathbf{J} \dot{\mathbf{S}} \mathbf{S}^{-1} (\hat{z} - z) \right] |\psi(t)\rangle.
\end{aligned} \tag{C.4}$$

Bibliografia

- [1] V.I. Arnold, *Equações Diferenciais Ordinárias* (Mir, Moscou, 1985).
- [2] V.I. Arnold, *Métodos Matemáticos da Mecânica Clássica* (Mir, Moscou, 1987).
- [3] N.L. Balazs e B.K. Jennings, Phys. Rep. **104**, 6, 347-391 (1984) – *Wigner's Function and Other Distribution Functions in Mock Phase Spaces*.
- [4] V. Bargmann, Comm. Pure and App. Math. **14**, 187-214 (1961) – *On a Hilbert Space of Analytic Functions and an Associated Integral Transform*.
- [5] M.V. Berry, Phil. Trans. R. Soc. **287**, 237-271 (1977) – *Semi-Classical Mechanics in Phase Space: A Study of Wigner's Function*.
- [6] M.V. Berry, N.L. Balazs, M. Tabor e A. Voros, Ann. Phys. (N.Y.) **122**, 26-63 (1979) – *Quantum Maps*.
- [7] A.R.R. de Carvalho, *Caos Descoerência, Proteção de Estados e a transição Quântico-Clássico para Íons Aprisionados* – Tese de Doutorado – Universidade

- Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- [8] B.V. Chirikov, Phys. Rep. **52**, 263-379 (1979) – *A Universal Instability of Many Dimensional Oscillator Systems*.
- [9] P. Dineen e P. Coles, arXiv:astro-ph/0511802 (2005) – *Multivariate Non-Normality in WMAP 1st Year Data* e Enciclopédia Virtual Wikipedia (<http://en.wikipedia.org>), verbetes: *Kurtosis*, *Skewness*.
- [10] E.J. Heller, J. Chem. Phys. **62**, 4, 1544-1555 (1975) – *Time Dependent Approach to Semiclassical Dynamics*.
- [11] M. Hénon, *Numerical Exploration of Hamiltonian Systems in Les Houches, section XXXVI, 1981 – Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, Gioos, R.H.G. Helleman e R. Stora eds. (North-Holland Publishing Company, 1983).
- [12] R.C. Hilborn, *Chaos and Nonlinear Dynamics* (Oxford University Press, Nova Iorque, 2000).
- [13] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, segunda edição, Amsterdam, 1980).
- [14] M. Gosson, *Maslov Classes, Metaplectic Representation and Lagrangian Quantization* (Akademic Verlag, 1997 - Mathematical Research, vol. 95).

-
- [15] R.J. Glauber, Phys. Rev. **130**, 2529-2539 (1963) – *The Quantum Theory of Optical Coherence* e Phys. Rev **131**, 2766-2788 (1963) – *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*.
- [16] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Nova Iorque, 1990).
- [17] G. Kells, *Quantum Chaos in the Delta Kicked Harmonic Oscillator* – DP Thesis – National University of Ireland, Maynooth, 2005.
- [18] R.G. Littlejohn, Phys. Rep. **138**, 193-291 (1986) – *The Semiclassical Evolution of Wave Packets*.
- [19] B. Mehlig e M. Wilkinson, arXiv:cond-mat/0012027 (2000) – *Semiclassical Trace Formulae Using Coherent States*.
- [20] A.M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems – Chaos and Quantization* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).
- [21] A.M. Ozorio de Almeida, Phys. Rep. **295**, 265-342 (1998) – *The Weyl Representation in Classical and Quantum Mechanics*.
- [22] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Kluwer Academic Publishers, Nova Iorque, 2002).

-
- [23] P.G. Silvestrov e C.W.J. Beenakker, Phys. Rev. E **65**, 1-3 (2002) – *Ehrenfest Times for Classically Chaotic Systems*.
- [24] S. Szabo, P. Adam, J.Janznsky e P. Domokos, Phys. Rev. A **53**, 2698-2710 (1996) – *Construction of Quantum States of the Radiation Field by Discrete Coherent-State Superposition*.
- [25] F. Toscano, R.L. de Matos Filho e L. Davidovich, Phys. Rev. A **71**, 1-4 (2005) – *Decoherence and the Quantum-Classical Limit in the Presence of Chaos*.
- [26] F. Toscano e A.M. Ozorio de Almeida, J. Phys. A **32**, 6321-6346 (1999) – *Geometrical Approach to the Distribution of the Zeros for the Husimi Function*.
- [27] G.M. Zaslavsky, R.Z. Sagdeev, D.A. Usikov e A.A. Chernikov, *Weak Chaos and Quasi-Regular Patterns* (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [28] W.H. Zurek, Nature **412**, 712-717 (2001) – *Sub-Planck Structure in Phase Space and its Relevance to Quantum Decoherence*.

