

TESE DE DOUTORADO

O LIMITE SEMICLÁSSICO DA DESCOERÊNCIA
EM SISTEMAS CAÓTICOS

Raphael Nunes Púpío Maia

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro, 2007

Tese de Doutorado submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
sob orientação do Pesquisador **Dr. Raúl O. Vallejos**
para a obtenção do título de Doutor em Física por
Raphael Nunes Púpio Maia.

2007

Ao meu irmão Diogo.

Agradecimentos

Em grande parte, a minha formação acadêmica foi conduzida pelo Raúl, e por causa disto, agradeço a ele pelo entusiasmo (e também pela paciência) nestes seis anos de convivência.

Devo agradecer também os camaradas do CBPF e do Fundão, Rômulo, André, Boiúna, Fabrício, Érico, Carlos Magno e Licínio.

Agradeço a minha família e a minha companheira Ana Paula, porque sem eles nada disto teria acontecido. Em especial, tenho profunda gratidão para com o Ricardo, com quem sempre pude contar por todos estes anos.

Gostaria de agradecer também aos professores Alfredo, Helayel, Marcus e Ruynet pelas críticas, sugestões e correções do texto inicialmente apresentado.

Por fim, agradeço a agência CNPQ pelo suporte financeiro a esta tese.

Rio de Janeiro, novembro de 2007.

Resumo

Investigamos a evolução semiclássica de um estado gaussiano de mínima incerteza no regime em que o sistema clássico correspondente apresenta um movimento caótico. Neste estudo utilizamos dois procedimentos analíticos. Usando a teoria WKB dependente do tempo, mostramos que a função de Wigner fica completamente determinada pelas propriedades geométricas de uma variedade clássica que evolui no tempo. Nesta abordagem, a expressão da função de Wigner semiclássica contém singularidades (cáusticas). Elaboramos também uma aproximação globalmente uniforme (apropriada para aplicações), construída a partir da decomposição do estado inicial em termos de estados coerentes que são propagados com a dinâmica linearizada localmente. Estas duas aproximações foram comparadas com a solução quântica exata do oscilador harmônico chutado. Discutimos a aplicação da aproximação uniforme para um sistema acoplado a um reservatório térmico na aproximação markoviana, que leva ao processo da descoerência. Este resultado analítico pode ser utilizado, por exemplo, para investigar as leis de escala que aparecem na transição quântico-clássico.

Abstract

We investigate the semiclassical evolution of a minimum uncertainty gaussian state in a classically chaotic system. We consider two analytical approaches. Using standard time-dependent WKB theory, we show that the Wigner function becomes completely determined by the geometric properties of an evolving classical manifold. This approach results in a semiclassical Wigner function which has singularities (caustics). We employ a globally uniform approximation (suitable for applications), obtained by decomposing the initial state into coherent states which are then propagated with the locally-linearized dynamics. Both approximations were compared with the exact quantum solution of the kicked harmonic oscillator. We discuss an application of the uniform approximation for a system coupled to a thermal reservoir in the Markovian approximation, which leads to the decoherence process. This analytical result can be used, for example, to investigate some scaling laws which appear in the quantum-to-classical transition.

Conteúdo

Resumo	v
Abstract	vi
Introdução	xii
1 Mecânica Quântica no Espaço de Fase	1
1.1 Sistemas Hamiltonianos	1
1.1.1 Álgebra Linear Simplética	3
1.1.2 Funções Geratrizes	7
1.2 Operadores Unitários e Representações	9
1.2.1 Operador de Translação	10
1.2.2 Operador de Reflexão	11
1.2.3 Representação de Weyl	13
1.2.4 Representação Metaplética	15
1.3 Aspectos Probabilísticos	19
1.3.1 Matrizes de Correlação	20
1.3.2 Função de Wigner	22
2 Superposições entre Estados de Incerteza Mínima	27
2.1 Oscilador Harmônico	27
2.2 Estados Coerentes	31

2.3	Propagador Semiclássico	34
2.4	Superposições Quânticas	40
2.4.1	Interferências Quânticas Simples	41
2.4.2	Interferências Quânticas e a Covariância Metaplética	44
2.4.3	Interferências Quânticas Gerais	45
3	Dinâmica Semiclássica	60
3.1	Aproximação de Fase Estacionária	60
3.1.1	Introdução	61
3.1.2	Função de Wigner no Limite Semiclássico	63
3.2	Propagação Semiclássica Uniforme	67
3.2.1	Decomposição de Estados Gaussianos	67
3.2.2	Aproximação de Órbitas Adjacentes (AOA)	69
3.2.3	Função de Wigner na AOA	70
3.3	Modelo Parabólico	71
3.3.1	Solução Analítica	73
3.3.2	Aproximação de Fase Estacionária	75
3.3.3	Função de Wigner na AOA	77
3.4	Oscilador Harmônico Chutado (OHC)	82
3.4.1	Solução Numérica	84
3.4.2	Aproximação de Fase Estacionária	86
3.4.3	Função de Wigner na AOA	89
4	Descoerência no Limite Semiclássico	97
4.1	Equação Mestra	98
4.2	Dinâmica Linear	103
4.3	Propagador Semiclássico na Aproximação Markoviana	108
4.4	Função de Wigner na AOA	110

5 Conclusão	116
A Representações Integrais	121
B Funções de Airy	125
Referências	136

Lista de Figuras

2.1	Dinâmica linear de um estado gaussiano	36
2.2	Construção de centro e corda da superposição	40
2.3	Superposição de dois estados coerentes “redondos”	43
2.4	Superposição de um estado coerente com um comprimido	56
2.5	Localização do centro da hipérbole	57
2.6	Superposição de dois estados comprimidos	59
3.1	Circuito fechado no espaço de fase estendido	63
3.2	Diagrama da construção de corda	65
3.3	Decomposição de um estado gaussiano	68
3.4	Função de Wigner do modelo parabólico	74
3.5	Variedade lagrangeana parabólica	75
3.6	Corte da função de Wigner do modelo parabólico (WKB)	78
3.7	Corte da função de Wigner do modelo parabólico (AOA)	81
3.8	Função de Wigner do OHC	85
3.9	Variedade lagrangeana do OHC	87
3.10	Corte da função de Wigner do KHO (WKB)	90
3.11	Posição do OHC: Clássico vs quântico	91
3.12	Fidelidade da AOA para o OHC	92
3.13	Corte da função de Wigner do KHO (AOA)	94
3.14	Corte da função de Wigner do KHO (AOA)	95

3.15	Distância média da função de Wigner (AOA)	96
A.1	Corte do plano complexo	123
B.1	Contornos de integração	126
B.2	Funções de Airy	128

Introdução

O início do século XX ficou marcado pelo surgimento da física quântica, e desde então, este paradigma da ciência moderna continua a ser investigado. Algumas idéias daquela época, como o modelo atômico de Bohr (1913), as condições quânticas de Sommerfeld-Wilson (1915), os pacotes de onda de Schrödinger (1926), o método WKB (1926), o teorema de Ehrenfest (1927), o propagador de Van Vleck (1928) e a pseudo-distribuição de probabilidades de Wigner (1932), eram justificadas em limites apropriados, i.e., valores grandes para os números quânticos, $\hbar \rightarrow 0$, etc. A dificuldade em quantizar os sistemas não-integráveis foi observada pela primeira vez por Einstein (1917), quando colocou as condições quânticas na forma invariante de ângulo-ação.

Mais tarde, as condições quânticas propostas por Einstein foram redescobertas e corrigidas com uma adição de fase por Keller (1953). Isto possibilitou estabelecer a conexão entre as funções de onda no limite semiclássico e a topologia no espaço de fase clássico dos sistemas ligados integráveis (relacionados com toros). Para esta classe de sistemas, a aproximação EBK¹ tem um forte apelo geométrico [1]. Por volta dos anos 60, Maslov desenvolveu um método que possibilitou atravessar os pontos de retorno (que são singularidades da aproximação WKB). Ele observou que mesmo para um estado não-estacionário do sistema pode-se associar uma superfície (ou variedade) do espaço de fase a uma função de onda [2]. Por exemplo, os autoestados dos operadores de posição ou momento (relacionados com planos) [3], ou

¹EBK abrevia os nomes de Einstein, Brillouin e Keller.

os autoestados dos níveis de energia excitados de um hamiltoniano limitado e integrável (relacionados com toros) [4]. Este importante conceito geométrico remonta ao propagador semiclássico de Van Vleck [5]. Mais um avanço fora feito por Berry (1977), que mostrou como calcular a função de Wigner no limite semiclássico a partir das propriedades geométricas de uma variedade clássica invariante [6]. Pouco depois, Berry e Balazs [4] discutiram como calcular a função de Wigner semiclássica para um estado não-estacionário do sistema.

Nos últimos anos, foi investigada a evolução quântica de um estado gaussiano no regime em que o sistema clássico corresponde é caótico [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]. Conforme pode ser observado, os pacotes de onda de Schrödinger não percorrem a trajetória clássica (exceto no caso de uma dinâmica linear). Na realidade, o estado evoluído sob a ação de uma dinâmica não-linear não mantém sua forma gaussiana e nem permanece como um estado clássico porque passa a apresentar padrões de interferências quânticas na sua função de Wigner. O interesse particular na evolução dos estados gaussianos é pertinente porque as evoluções clássica e quântica podem ser comparadas já que o estado inicial é também um estado clássico. Nos estudos [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14] o sistema se encontra acoplado com um reservatório, e a atenção foi dada para a transição quântico-clássico bem como para o crescimento da entropia de von Neumann. A explicação para o crescimento linear da entropia se baseou em argumentos semiclássicos qualitativos. Por exemplo, Zurek e Paz argumentaram que os mecanismos responsáveis pelo crescimento linear da entropia, com uma taxa dada pelo expoente de Lyapunov [7], são (i) a ação do sistema caótico de esticar e dobrar (isto cria franjas de interferência na função de Wigner), (ii) concomitante com a ação difusiva do reservatório (que destrói as interferências).

A descrição semiclássica de uma dinâmica quântica, quando aplicável, não só serve como uma aproximação, mas pode também fornecer uma intuição física importante. Esta descrição é bastante satisfatória para os sistemas classicamente in-

tegráveis. Por outro lado, nos sistemas clássicos que apresentam um movimento caótico, a descrição semiclássica ainda não está totalmente compreendida. Uma vez que o princípio de correspondência estabelece que a mecânica clássica deve ser recuperada a partir da mecânica quântica (em um limite apropriado), este é o caminho natural para tentar compreender a transição entre a teoria quântica e a teoria clássica da mecânica. As aproximações semiclássicas são obtidas no limite em que *o valor da constante de Planck possa ser considerado pequeno quando comparado com as ações tipicamente encontradas no sistema clássico correspondente*. Este limite será freqüentemente usado nesta tese de forma abreviada pelas expressões “no limite em que $\hbar \rightarrow 0$ ”, “correções da ordem de $\mathcal{O}(\hbar)$ ”, etc.

Nesta tese, vamos descrever a evolução semiclássica de um estado gaussiano com a teoria WKB dependente do tempo. Iremos mostrar que a função de Wigner calculada a partir desta teoria possui a descrição de cordas e centros elaborada por Berry e Balazs. Entretanto, ao invés de usar uma aproximação uniforme na vizinhança da cáustica da função de Wigner, elaboramos um método de propagação uniforme em todo o espaço de fase. Para fazer isto, usaremos a decomposição do estado inicial em termos de estados coerentes seguida da propagação linear. Analisaremos os resultados obtidos com simulações numéricas para um sistema simples: o oscilador harmônico chutado. A escolha deste modelo se deve ao fato de que (i) existe uma vasta literatura do modelo clássico e quântico e (ii) este sistema tem uma realização experimental. Compararemos os resultados obtidos pelas duas aproximações semiclássicas com a solução quântica, e apontaremos as deficiências de cada uma delas.

A discussão contida no primeiro capítulo tem como objetivo apresentar alguns conceitos básicos das teorias clássica e quântica da mecânica. Este material introdutório serve de alicerce para os capítulos seguintes. No capítulo 2 discutiremos os estados coerentes do oscilador harmônico e também as superposições quânticas entre

os estados de incerteza mínima. Discutiremos a propagação semiclássica dos estados coerentes na aproximação linear da dinâmica. O capítulo 3 analisa a dinâmica de um estado gaussiano de incerteza mínima sob a ação de uma dinâmica caótica geral. Nesta configuração, mostraremos como propagar a função de Wigner utilizando a teoria WKB dependente do tempo e também com um método uniforme baseado na propagação semiclássica dos estados coerentes. No capítulo 4 estudamos a propagação semiclássica, na aproximação markoviana, da função de Wigner de um sistema que interage com um reservatório térmico difusivo. Neste caso, mostramos como incluir a descoerência na propagação semiclássica elaborada no terceiro capítulo.

Capítulo 1

Mecânica Quântica no Espaço de Fase

O presente capítulo tem como objetivo expor a formulação da mecânica quântica no espaço de fase. Este é o caminho natural a ser tomado quando se pretende investigar o limite semiclássico da mecânica quântica. Por esta razão, começaremos discutindo os sistemas dinâmicos hamiltonianos. Na sequência daremos ênfase às representações dos operadores no espaço de fase. A discussão no final deste capítulo é dedicada a função de Wigner.

1.1 Sistemas Hamiltonianos

Um sistema dinâmico hamiltoniano fica determinado por um conjunto de coordenadas generalizadas Q e seus pares canônicos P . Devemos usar um par de variáveis canonicamente conjugadas para cada grau de liberdade do sistema. Contudo, para os nossos propósitos bastará considerarmos um único grau de liberdade. O par de variáveis dinâmicas associadas a este grau de liberdade, independentes entre si, determinam um espaço de estados bidimensional, o *espaço de fase*. Um ponto qualquer do espaço de fase será representado por um vetor real $X \in \mathbb{R}^2$. A notação adotada é a seguinte:

$$X = \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Denotaremos o gradiente com respeito ao ponto X , de forma consistente, pelo vetor $\nabla_X = (\partial/\partial P, \partial/\partial Q)^T$. Com bastante freqüência serão usadas as matrizes

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

que são, respectivamente, a matriz identidade e uma *matriz simplética*. Esta última verifica as propriedades de antisimetria e de ortogonalidade,

$$\mathbf{J}^T = -\mathbf{J} = \mathbf{J}^{-1}. \quad (1.3)$$

Podemos definir o produto simplético na forma de um produto escalar,

$$X \wedge X' \equiv [\mathbf{J}X] \cdot X' = PQ' - QP' = -X' \wedge X. \quad (1.4)$$

O produto simplético é antisimétrico porque a matriz \mathbf{J} é antisimétrica. Em particular, para dois vetores paralelos, $X \parallel X'$, o produto simplético é nulo, $X \wedge X = 0$.

As equações de movimento dos sistemas hamiltonianos são as equações de Hamilton. Estas são calculadas a partir da hamiltoniana $H(X, t)$ do sistema, e constituem um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem. As equações de Hamilton podem ser escritas de forma compacta da seguinte maneira:

$$\dot{X} = \mathbf{J} \nabla_X H(X, t). \quad (1.5)$$

O lado direto desta equação é chamado de *campo vetorial hamiltoniano*. De imediato, verificamos que este campo de velocidades tem divergente nulo,

$$\nabla_X \cdot [\mathbf{J} \nabla_X H(X, t)] = \nabla_X \wedge \nabla_X H(X, t) = 0. \quad (1.6)$$

Na última igualdade usamos que o produto simplético é nulo. Isto significa que *os sistemas hamiltonianos são conservativos*. Esta propriedade pode ser entendida melhor quando analisamos a evolução de um conjunto de condições iniciais que cobre uma certa área \mathcal{A}_0 no espaço de fase. A evolução deste conjunto de pontos vai cobrir

uma outra região de área igual a inicial, $\mathcal{A}_t = \mathcal{A}_0$. Na realidade, esta propriedade é um caso particular da conservação dos *invariantes de Poincaré-Cartan* [15, 16].

Podemos também analisar a evolução de um ensemble estatístico de partículas. Para isto, devemos usar uma distribuição de probabilidades, $W^{CL}(X)$ ¹. A dinâmica hamiltoniana da distribuição $W_t^{CL}(X)$ é dada pela *equação de Liouville*,

$$\frac{\partial}{\partial t} W_t^{CL}(X) = [\nabla_X W_t^{CL}(X)] \wedge [\nabla_X H(X, t)]. \quad (1.7)$$

No lado direito desta equação aparecem os *colchetes de Poisson* entre as duas funções do espaço de fase, $W_t^{CL}(X)$ e $H(X, t)$.

1.1.1 Álgebra Linear Simplética

Na mecânica hamiltoniana, as *matrizes simpléticas* estão estreitamente relacionadas com as transformações canônicas lineares. Por esta razão, vamos introduzir o grupo simplético, e na sequência, a parametrização de Cayley de uma matriz simplética.

O grupo simplético Sp é o grupo de todas as matrizes reais 2×2 que preservam o produto simplético:

$$\mathbf{S} \in Sp \iff [\mathbf{S}X] \wedge [\mathbf{S}X'] = X \wedge X' \text{ para todo } X, X' \in \mathbb{R}^2. \quad (1.8)$$

Obviamente, as matrizes \mathbf{I} e \mathbf{J} pertencem a este grupo. Se \mathbf{S} é uma matriz simplética, a sua transposta \mathbf{S}^T e a sua inversa \mathbf{S}^{-1} também são matrizes simpléticas. Uma matriz $\mathbf{S}_3 = \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2$, com $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2 \in Sp$, também preserva o produto simplético,

$$[\mathbf{S}_3 X] \wedge [\mathbf{S}_3 X'] = [(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) X] \wedge [(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) X'] = X \wedge X'. \quad (1.9)$$

A definição do grupo simplético (1.8), na versão matricial, equivale a uma das seguintes igualdades:

$$\mathbf{S} \mathbf{J} \mathbf{S}^T = \mathbf{S}^T \mathbf{J} \mathbf{S} = \mathbf{J} \quad \text{ou} \quad \mathbf{S}^T \mathbf{J} = \mathbf{J} \mathbf{S}^{-1}. \quad (1.10)$$

¹O sobrescrito *CL* é a abreviação da palavra *CLÁSSICO*.

A partir da segunda igualdade acima, deduzimos uma propriedade do produto simplético,

$$[\mathbf{S}X] \wedge X' = X \wedge [\mathbf{S}^{-1} X']. \quad (1.11)$$

O determinante da condição simplética (1.10) estabelece um vínculo para os elementos de uma matriz simplética. Com efeito:

$$\det [\mathbf{S} \mathbf{J} \mathbf{S}^T] = [\det \mathbf{S}]^2 = 1. \quad (1.12)$$

Este resultado nos permite concluir que o determinante de uma matriz do grupo (1.8) deve valer $\det \mathbf{S} = \pm 1$.

Considere a mudança de coordenadas que leva um vetor X em um outro X' , denotada por $X' = F(X)$. As transformações de coordenadas no espaço de fases que preservam a forma das equações de Hamilton (1.5) são chamadas de *transformações canônicas*. Ao impor que $\dot{X}' = \mathbf{J} \nabla_{X'} H(X', t)$, chegaremos a relação (1.10),

$$\frac{\partial F}{\partial X} \mathbf{J} \frac{\partial F^T}{\partial X} = \mathbf{J}, \quad (1.13)$$

ou seja, a matriz jacobiana de uma transformação canônica é uma matriz simplética.

Dinâmica Linear

Neste parágrafo vamos descrever a aproximação de órbitas adjacentes (AOA). Considere a solução $X_t = F_t(X_0)$ das equações de Hamilton (1.5), que se encontra em X_0 no instante inicial $t = 0$. Partindo de um ponto X'_0 próximo de X_0 , a solução será dada por $X'_t = F_t(X'_0)$. Podemos aproximar a segunda solução a partir da primeira por meio da seguinte expansão:

$$X'_t \approx X_t + \mathbf{S}_t [X'_0 - X_0], \quad \mathbf{S}_t = \left. \frac{\partial F_t(X'_0)}{\partial X'_0} \right|_{X_0}. \quad (1.14)$$

Nesta aproximação, o vetor centrado $\delta X_t \equiv X'_t - X_t$ é calculado a partir de seu valor inicial com a aplicação da matriz jacobiana da transformação $F_t(X'_0)$ calculada no ponto X_0 . Note que esta evolução é dada por uma matriz simplética (1.13). Por

outro lado, podemos usar a expansão em série de Taylor para o hamiltoniano $H(X, t)$ até ordem quadrática no vetor δX_t ,

$$H^{AOA}(X', t) = H(X_t, t) - \dot{X} \wedge \delta X_t + \frac{1}{2} \delta X_t \cdot \mathbf{H}_t \delta X_t. \quad (1.15)$$

Nesta expansão foram usadas as equações de Hamilton e a matriz hessiana

$$\mathbf{H}_t = \left. \frac{\partial^2 H(X, t)}{\partial X^2} \right|_{X_t}. \quad (1.16)$$

Portanto, o movimento do vetor centrado δX_t é descrito por um sistema de equações diferenciais lineares,

$$\delta \dot{X}_t = \mathbf{J} \mathbf{H}_t \delta X_t. \quad (1.17)$$

A solução deste sistema de equações é dado pela relação (1.14), ou de forma consistente, $\delta X_t = \mathbf{S}_t \delta X_0$. A continuidade da transformação determina que a matriz simplética deve obedecer o limite $\mathbf{S}_{t \rightarrow 0} = \mathbf{I}$. Neste caso, o determinante em (1.12) passa a valer $\det \mathbf{S}_t = 1$. A parametrização no tempo t da matriz simplética pode ser escrita de maneira explícita como $\mathbf{S}_t = \mathbf{S}(t, 0)$. Assim, a reversão temporal da transformação é uma outra matriz simplética, $[\mathbf{S}(t, 0)]^{-1} = \mathbf{S}(0, t)$. Mais ainda, para um instante intermediário τ contido no intervalo $t \geq \tau \geq 0$, a regra da cadeia determina que $\mathbf{S}(t, 0) = \mathbf{S}(t, \tau) \mathbf{S}(\tau, 0)$.

Parametrização de Cayley

Para estabelecer uma ponte entre as transformações canônicas lineares e uma certa família de operadores unitários, serão introduzidas as matrizes de Cayley. Estas matrizes entrarão em cena novamente no segundo capítulo, onde vamos analisar as superposições quânticas entre estados de incerteza mínima.

Para cada matriz simplética \mathbf{S} podemos associar uma única matriz simétrica $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$. Esta bijeção é conhecida como *parametrização de Cayley*, e é o análogo simplético da bijeção entre as matrizes unitárias e as matrizes simétricas. A

parametrização de Cayley de uma matriz simplética \mathbf{S} é dada pela matriz simétrica

$$\mathbf{C} = \mathbf{J}(\mathbf{S} - \mathbf{I})(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}. \quad (1.18)$$

Esta matriz existe somente quando $\det(\mathbf{S} + \mathbf{I}) \neq 0$. A partir da identidade

$$(\mathbf{S} - \mathbf{I})(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1} = [(\mathbf{S} + \mathbf{I}) - 2\mathbf{I}](\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1} = \mathbf{I} - 2(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}, \quad (1.19)$$

concluimos que também é possível expressar a matriz de Cayley como

$$\mathbf{C} = \mathbf{J} - 2\mathbf{J}(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}. \quad (1.20)$$

Ao substituir na igualdade (1.19) a matriz identidade $\mathbf{I} = (\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S} + \mathbf{I})$, deduziremos a comutação $(\mathbf{S} - \mathbf{I})(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1} = (\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S} - \mathbf{I})$. Com esta relação, a parametrização passa a ser escrita como

$$\mathbf{C} = \mathbf{J}(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S} - \mathbf{I}). \quad (1.21)$$

Para verificar que a matriz \mathbf{C} é simétrica, usamos a matriz (1.18) transposta e a propriedade (1.10), $\mathbf{S}^T \mathbf{J} = \mathbf{J} \mathbf{S}^{-1}$,

$$\mathbf{C}^T = -(\mathbf{S}^T + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S}^T - \mathbf{I})\mathbf{J} = -\mathbf{J}(\mathbf{S}^{-1} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S}^{-1} - \mathbf{I}). \quad (1.22)$$

A última destas igualdades é igual a definição (1.21), e portanto $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$.

Para inverter a parametrização (1.18), podemos multiplicar por \mathbf{J} pelo lado direito da definição (1.20), $\mathbf{J}\mathbf{C} + \mathbf{I} = 2(\mathbf{S} + \mathbf{I})^{-1}$. Com esta relação, expressamos a matriz simplética em termos da matriz de Cayley,

$$\mathbf{S} = 2(\mathbf{J}\mathbf{C} + \mathbf{I})^{-1} - \mathbf{I}. \quad (1.23)$$

Escrevendo a matriz identidade como $\mathbf{I} = (\mathbf{J}\mathbf{C} + \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{J}\mathbf{C} + \mathbf{I})$, expressamos a matriz simplética também como

$$\mathbf{S} = (\mathbf{I} - \mathbf{J}\mathbf{C})(\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C})^{-1} = (\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{J}\mathbf{C}). \quad (1.24)$$

As relações (1.18) e (1.24) determinam a bijeção entre a matriz simplética \mathbf{S} e a matriz de Cayley \mathbf{C} .

Existe uma outra parametrização de Cayley para a matriz simplética \mathbf{S} . Esta pode ser definida por meio da matriz (1.18),

$$\mathbf{C}_J \equiv -\mathbf{J}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{J} = -\mathbf{J}(\mathbf{S} + \mathbf{I})(\mathbf{S} - \mathbf{I})^{-1}. \quad (1.25)$$

Note que esta matriz de Cayley existe sempre que $\det(\mathbf{S} - \mathbf{I}) \neq 0$. A partir da equação acima é imediato verificar que $\mathbf{C}_J = \mathbf{C}_J^T$ porque $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$. A matriz \mathbf{C}_J também pode ser expressa de forma equivalente como

$$\mathbf{C}_J = -\mathbf{J}(\mathbf{S} - \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{S} + \mathbf{I}) = -\mathbf{J} - 2\mathbf{J}(\mathbf{S} - \mathbf{I})^{-1}. \quad (1.26)$$

Multiplicando por \mathbf{J} pelo lado direito da segunda igualdade acima, teremos a identidade $\mathbf{J}\mathbf{C}_J - \mathbf{I} = 2(\mathbf{S} - \mathbf{I})^{-1}$. Com esta identidade invertemos a relação (1.25),

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} - 2(\mathbf{I} - \mathbf{J}\mathbf{C}_J)^{-1} = -(\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C}_J)(\mathbf{I} - \mathbf{J}\mathbf{C}_J)^{-1}. \quad (1.27)$$

Resumindo, sempre podemos relacionar uma matriz simplética \mathbf{S} com uma matriz de Cayley, que pode ser \mathbf{C} ou \mathbf{C}_J .

1.1.2 Funções Geratrizes

Existem inúmeras funções geratrizes que são capazes de descrever uma única transformação canônica linear. Por exemplo, podemos citar aquelas definidas no livro do Goldstein [17]. Em particular, estamos interessados nas *funções geratrizes de centro e de corda* [18]. Estas duas funções tornam mais transparente a associação que faremos entre o grupo simplético (1.8) e uma certa família de operadores unitários.

Para as funções geratrizes de centro ou de corda, a transformação canônica $X_+ = F(X_-)$ é sempre escrita numa forma bastante peculiar. A partir dos vetores $X_{\pm} \in \mathbb{R}^2$, podemos definir de maneira implícita um outro par de vetores:

$$X_{\pm} = X \pm \frac{1}{2}\xi. \quad (1.28)$$

Os vetores X e ξ são, respectivamente, o *centro* e a *corda* da transformação. A relação acima determina uma translação rígida, $X_+ = \xi + X_-$, ou uma reflexão, $X_+ = 2X - X_-$, com respeito ao ponto X do espaço de fase.

A função geratriz de centro $S(X)$, associada a uma matriz simplética \mathbf{S} , é um polinômio quadrático em X que pode ser expresso como

$$S(X) = \zeta \wedge X + X \cdot \mathbf{C} X, \quad (1.29)$$

sendo que a matriz da forma quadrática é a parametrização de Cayley (1.18) da matriz \mathbf{S} e $\zeta \in \mathbb{R}^2$ é um vetor arbitrário. A corda da transformação canônica é obtida a partir do gradiente de $S(X)$,

$$\xi(X) = -\mathbf{J} \nabla_X S(X). \quad (1.30)$$

O gradiente da função geratriz (1.29) vale $\xi(X) = \zeta - 2\mathbf{J}\mathbf{C}X$. Se usarmos esta corda na definição (1.28) para eliminar tanto ξ quanto X , iremos obter a seguinte transformação:

$$X_+ = \mathbf{S} X_- + \frac{1}{2} [\mathbf{S} + \mathbf{I}] \zeta. \quad (1.31)$$

Usamos na igualdade acima que $(\mathbf{I} - \mathbf{J}\mathbf{C}) = \mathbf{S}(\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C})$, fórmula (1.24). Vemos claramente que a matriz jacobiana $\partial X_+ / \partial X_-$ desta transformação é a matriz simplética \mathbf{S} . No caso particular em que $\mathbf{S} = \mathbf{I}$, o resultado é a translação rígida $X_+ = T_\zeta(X_-) = \zeta + X_-$.

Por outro lado, para descrever uma transformação simplética \mathbf{S} podemos usar a função geratriz de corda $S(\xi)$. Se usarmos a parametrização de Cayley (1.25) da matriz \mathbf{S} e um vetor arbitrário $\bar{X} \in \mathbb{R}^2$, a função geratriz de corda será dada pelo polinômio

$$S(\xi) = \xi \wedge \bar{X} + \frac{1}{4} \xi \cdot \mathbf{C}_J \xi. \quad (1.32)$$

Neste caso, o centro da transformação definido em (1.28) deve ser calculado como o gradiente

$$X(\xi) = \mathbf{J} \nabla_\xi S(\xi). \quad (1.33)$$

Usando explicitamente $X(\xi) = \bar{X} + \mathbf{J}\mathbf{C}_J \xi/2$ para eliminar ξ e X nas relações (1.28), chegaremos a transformação

$$X_+ = \mathbf{S}X_- + [\mathbf{I} - \mathbf{S}]\bar{X}. \quad (1.34)$$

Esta função geratriz é apropriada para $\mathbf{S} = -\mathbf{I}$, no qual o resultado é uma reflexão, $X_+ = R_{\bar{X}}(X_-) = 2\bar{X} - X_-$, com respeito ao ponto \bar{X} do espaço de fase.

1.2 Operadores Unitários e Representações

A representação dos operadores quânticos no espaço de fase apareceu com os trabalhos de Weyl [19] e Moyal [20]. O propósito desta seção é apresentar esta construção, ainda que de forma lacônica. Sugerimos ao leitor interessado a compilação mais atual de Ozorio de Almeida [18].

Da maneira usual, introduzimos os autoestados do operador de posição, $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$, e do operador de momento, $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$. Estes dois conjuntos de autoestados obedecem as relações de ortogonalidade $\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$ e $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$. A decomposição do operador identidade em termos dos autoestados de posição $\int dq|q\rangle\langle q| = \hat{1}$ e de momento $\int dp|p\rangle\langle p| = \hat{1}$, tornam possível expandir um estado qualquer. O produto interno misto na forma de uma onda plana, $\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{iqp/\hbar}$, possibilita a mudança de uma representação para outra através das transformadas de Fourier. Nas próximas seções usaremos a versão quântica do vetor coluna (1.1),

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} \hat{p} \\ \hat{q} \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Este vetor tem como componentes os operadores elementares \hat{p} e \hat{q} , obtidos pela quantização do par de variáveis dinâmicas. A quantização pode ser feita com a *regra de comutação canônica* $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, sendo que \hbar é a constante de Planck.

1.2.1 Operador de Translação

Considere uma combinação linear e real dos operadores elementares escrita na forma $\xi \wedge \hat{x}$. Construimos o operador de translação da seguinte maneira:

$$\hat{T}_\xi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \xi \wedge \hat{x}\right). \quad (1.36)$$

Uma consequência imediata desta definição é que $\hat{T}_0 = \hat{1}$. O operador de translação é unitário porque uma translação na direção $-\xi$ representa um deslocamento na direção inversa, $\hat{T}_\xi^{-1} = \hat{T}_{-\xi} = \hat{T}_\xi^\dagger$. Podemos separar as duas contribuições de \hat{q} e \hat{p} , isto é, $\xi \wedge \hat{x} = \xi_p \hat{q} - \xi_q \hat{p}$. Porém, uma vez que os operadores \hat{q} e \hat{p} não comutam, devemos aplicar a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}, \quad (1.37)$$

sempre que $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$. Ao aplicar esta identidade aos operadores $\hat{T}_{\xi_q} = e^{-i\xi_q \hat{p}/\hbar}$ e $\hat{T}_{\xi_p} = e^{i\xi_p \hat{q}/\hbar}$, encontramos

$$\hat{T}_\xi = \hat{T}_{\xi_q} \hat{T}_{\xi_p} e^{i\xi_q \xi_p/2\hbar} = \hat{T}_{\xi_p} \hat{T}_{\xi_q} e^{-i\xi_q \xi_p/2\hbar}. \quad (1.38)$$

Estas duas igualdades podem ser usadas para calcular a ação do operador de translação nos autoestados de posição, $\hat{T}_\xi |q\rangle = e^{i\xi_p(2q+\xi_q)/\hbar} |q + \xi_q\rangle$, ou momento, $\hat{T}_\xi |p\rangle = e^{-i\xi_q(2p+\xi_p)/\hbar} |p + \xi_p\rangle$. A partir das relações de ortogonalidade, calculamos os elementos de matriz

$$\langle q'' | \hat{T}_\xi | q' \rangle = \delta(\xi_q + q' - q'') e^{i\xi_p(q'+q'')/2\hbar}, \quad (1.39)$$

$$\langle p'' | \hat{T}_\xi | p' \rangle = \delta(\xi_p + p' - p'') e^{-i\xi_q(p'+p'')/2\hbar}. \quad (1.40)$$

O traço do operador de translação pode ser facilmente calculado com um dos elementos de matriz acima,

$$\text{Tr } \hat{T}_\xi = 2\pi\hbar \delta(\xi), \quad (1.41)$$

onde usamos a expressão para a função delta de Dirac em duas dimensões (A.1).

O produto de dois operadores de translação, em direções ξ e η arbitrárias, é também um outro operador de translação, a menos de um fator de fase. Para obter o fator de fase aplicamos novamente a fórmula de BCH (1.37),

$$\hat{T}_\eta \hat{T}_\xi = \hat{T}_{\eta+\xi} e^{i\eta\wedge\xi/2\hbar}. \quad (1.42)$$

Em geral, a composição de muitos operadores de translação,

$$\hat{T}_{\xi_n} \cdots \hat{T}_{\xi_1} = \hat{T}_{\xi_1+\cdots+\xi_n} e^{-i\mathcal{D}_{n+1}(\xi_1,\cdots,\xi_n)/\hbar}, \quad (1.43)$$

tem um fator de fase dado pela área simplética²

$$\mathcal{D}_{n+1}(\xi_1, \cdots, \xi_n) = \frac{1}{2} [\xi_1 \wedge \xi_2 + (\xi_1 + \xi_2) \wedge \xi_3 + \cdots + (\xi_1 + \cdots + \xi_{n-1}) \wedge \xi_n]. \quad (1.44)$$

Em particular, temos a identidade

$$\hat{T}_\xi^\dagger \hat{T}_\eta \hat{T}_\xi = \hat{T}_\eta e^{i\eta\wedge\xi/\hbar}. \quad (1.45)$$

A expansão da última identidade em série de Taylor, em torno de $\eta = 0$, permite deduzir (heurísticamente) a relação

$$\hat{T}_\xi^\dagger (\eta \wedge \hat{x}) \hat{T}_\xi = \eta \wedge (\hat{x} + \xi). \quad (1.46)$$

O efeito da operação que aparece nas duas identidades (1.45) e (1.46) é simplesmente deslocar o operador \hat{x} na direção ξ no espaço de fase.

1.2.2 Operador de Reflexão

Mostraremos nesta seção que o operador de reflexão no espaço de fase, com respeito ao ponto X , é dado pela fórmula integral

$$\hat{R}_X = \frac{1}{4\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{i}{\hbar} X \wedge \xi\right) \hat{T}_\xi. \quad (1.47)$$

²Esta fase é dada pela área do polígono de $n+1$ lados determinado univocamente pelo conjunto de vetores ξ_1, \cdots, ξ_n .

A partir desta definição verificamos que $\hat{R}_X^\dagger = \hat{R}_X$. Em particular, o operador de paridade \hat{R}_0 é o operador de reflexão com respeito à origem do espaço de fase, ou seja,

$$\hat{R}_0 = \frac{1}{4\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \hat{T}_\xi. \quad (1.48)$$

Desta definição podemos calcular que $\hat{R}_0^2 = \hat{1}$. A fórmula inversa de (1.47), é também uma fórmula integral,

$$\hat{T}_\xi = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX \exp\left(-\frac{i}{\hbar} X \wedge \xi\right) \hat{R}_X. \quad (1.49)$$

Destacamos a seguinte identidade ($\hat{T}_0 = \hat{1}$):

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX \hat{R}_X = \hat{1}. \quad (1.50)$$

Esta é uma possível decomposição do operador identidade.

O deslocamento do operador de paridade na direção X é calculado quando aplicamos a fórmula (1.45) na definição (1.48). Com efeito:

$$\hat{R}_X = \hat{T}_X \hat{R}_0 \hat{T}_X^\dagger = \hat{T}_{2X} \hat{R}_0 = \hat{R}_0 \hat{T}_{-2X}. \quad (1.51)$$

As duas últimas igualdades são calculadas de maneira similar. Calcularemos a regra de composição de um operador de translação \hat{T}_ξ com um operador de reflexão \hat{R}_X . Para isto, usamos a última igualdade da equação (1.51) e a composição dos operadores de translação (1.38),

$$\hat{R}_X \hat{T}_\xi = \hat{R}_0 \hat{T}_{-2X} \hat{T}_\xi = e^{-iX \wedge \xi/\hbar} \hat{R}_{X-\xi/2}. \quad (1.52)$$

Desta relação, calculamos a ordem contrária,

$$\hat{T}_\xi \hat{R}_X = \left[\hat{R}_X \hat{T}_{-\xi} \right]^\dagger = e^{-iX \wedge \xi/\hbar} \hat{R}_{X+\xi/2}. \quad (1.53)$$

O deslocamento do operador de reflexão na direção ξ ,

$$\hat{T}_\xi \hat{R}_X \hat{T}_\xi^\dagger = \hat{R}_{X+\xi}, \quad (1.54)$$

é calculado com as composições (1.52) e (1.53). Mais ainda, verificamos que

$$\hat{R}_X \hat{T}_\xi \hat{R}_X = \hat{T}_{-\xi} e^{2i\xi \wedge X/\hbar}. \quad (1.55)$$

A expansão em série da igualdade acima, em torno de $\xi = 0$, resulta na identidade

$$\hat{R}_X \hat{x} \hat{R}_X = 2X - \hat{x}, \quad (1.56)$$

que é idêntica a propriedade clássica correspondente. Nos falta calcular a regra de composição dos operadores de reflexão. Se usarmos as duas identidades, $\hat{R}_X = \hat{R}_0 \hat{T}_{-2X}$ e $\hat{R}_{X'} = \hat{T}_{2X'} \hat{R}_0$, o produto resultante irá valer $\hat{R}_{X'} \hat{R}_X = \hat{T}_{2X'} \hat{R}_0^2 \hat{T}_{-2X} = \hat{T}_{2X'} \hat{T}_{-2X}$. Se juntarmos os operadores de translação com a composição (1.38), chegaremos a seguinte regra:

$$\hat{R}_{X'} \hat{R}_X = e^{2iX \wedge X'/\hbar} \hat{T}_{2(X'-X)}. \quad (1.57)$$

Para mostrar que o operador de reflexão é idempotente, $\hat{R}_X^2 = \hat{1}$, basta colocar $X = X'$ na equação acima. Isto também significa que o operador de reflexão é unitário, $\hat{R}_X^{-1} = \hat{R}_X^\dagger = \hat{R}_X$.

Com a segunda igualdade em (1.51), calculamos a aplicação do operador de reflexão nos autoestados de posição, $\hat{R}_X |q\rangle = e^{2iP(Q-q)/\hbar} |2Q - q\rangle$, e de momento, $\hat{R}_X |p\rangle = e^{-2iQ(P-p)/\hbar} |2P - p\rangle$. Os elementos de matriz

$$\langle q'' | \hat{R}_X | q' \rangle = \delta(2Q - q' - q'') e^{-iP(q' - q'')/\hbar}, \quad (1.58)$$

$$\langle p'' | \hat{R}_X | p' \rangle = \delta(2P - p' - p'') e^{iQ(p' - p'')/\hbar}, \quad (1.59)$$

são obtidos a partir das relações de ortogonalidade dos autoestados.

1.2.3 Representação de Weyl

O operador de reflexão no espaço de fase, $\hat{\mathcal{R}}_X = 2\hat{R}_X$, é a *transformada de Fourier exata* do operador de translação \hat{T}_ξ . Este conjunto de operadores tem as

seguintes propriedades: formam uma decomposição do operador identidade, veja a equação (1.50), e verificam a relação de ortogonalidade

$$\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{R}}_X \hat{\mathcal{R}}_{X'} \right] = 2\pi\hbar \delta(X - X') . \quad (1.60)$$

Este traço é calculado a partir da composição de duas reflexões (1.57), e do traço de um operador de translação, fórmula (1.41). Portanto, um operador arbitrário \hat{A} tem uma expansão da forma

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX A(X) \hat{\mathcal{R}}_X \quad (1.61)$$

O operador \hat{A} é mapeado numa função das variáveis do espaço de fases $A(X)$, conhecida como *símbolo de Weyl*. Este símbolo é extraído a partir do traço

$$A(X) = \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{R}}_X \hat{A} \right] . \quad (1.62)$$

Ao invés de uma expansão em termos dos operadores de reflexão, pode-se usar o conjunto dos operadores de translação. A relação de ortogonalidade neste caso é dada por

$$\text{Tr} \left[\hat{T}_\xi \hat{T}_{\xi'}^\dagger \right] = 2\pi\hbar \delta(\xi - \xi') . \quad (1.63)$$

A expansão complementar do operador \hat{A} fica na forma

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi A(\xi) \hat{T}_\xi , \quad (1.64)$$

e o símbolo correspondente é calculado pelo traço

$$A(\xi) = \text{Tr} \left[\hat{T}_{-\xi} \hat{A} \right] . \quad (1.65)$$

As duas funções $A(X)$ e $A(\xi)$ estão relacionadas. As duas relações são:

$$A(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX A(X) \exp \left(\frac{i}{\hbar} X \wedge \xi \right) , \quad (1.66)$$

$$A(X) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi A(\xi) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \xi \wedge X \right) . \quad (1.67)$$

A primeira igualdade é uma transformada de Fourier, e a segunda a transformada inversa. O símbolo de Weyl de um operador hermitiano é uma função real, $[A(X)]^* = A(X)$. Em geral, a função $A(\xi)$ é uma função complexa que tem a propriedade $[A(\xi)]^* = A(-\xi)$. Somente quando for uma função par, $A(\xi) = A(-\xi)$, esta será uma função real.

1.2.4 Representação Metaplética

Nesta seção vamos introduzir a *representação metaplética* do grupo de matrizes simpléticas definido em (1.8). Esta representação é formada por uma família de operadores unitários, chamados de operadores metapléticos. Mais detalhes sobre este assunto podem ser encontrados em [18, 21, 22, 23, 24].

Os operadores metapléticos $\hat{M}_{\mathbf{S}}$ são exponenciais imaginárias de uma forma quadrática do vetor \hat{x} . Nossa abordagem consiste em considerar a representação de Weyl (1.61) destes operadores, que pode ser construída a partir da função geratriz de centro (1.29). O símbolo de Weyl deste operador, $M_{\mathbf{S}}(X) = 2 \text{Tr} [\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X]$, é dado pela seguinte função complexa:

$$M_{\mathbf{S}}(X) = \frac{2 i^{\nu - \frac{1}{2} \text{sgn } \mathbf{C}}}{|\det(\mathbf{S} + \mathbf{I})|^{1/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} X \cdot \mathbf{C} X\right). \quad (1.68)$$

Usamos a parametrização de Cayley (1.18), válida sempre que $\det(\mathbf{S} + \mathbf{I}) \neq 0$. A fase constante depende do índice $\nu = \nu(\mathbf{S})$, que é calculado por meio da relação

$$\frac{1}{\pi} \arg \det(\mathbf{S} - \mathbf{I}) = -\nu(\mathbf{S}) + 1 \pmod{2}. \quad (1.69)$$

A demonstração de que esta fórmula define corretamente a representação metaplética do grupo de matrizes simpléticas foi feita por de Gosson e pode ser encontrada no artigo [23]. Existem dois valores de ν para cada matriz \mathbf{S} . Desta forma, o fator de fase do símbolo de Weyl pode ser determinado a menos de um fator ± 1 . As duas possibilidades de sinal refletem a seguinte relação: existe um par de operadores metapléticos para cada matriz simplética. Isto será discutido no final desta seção.

Na representação de Weyl, o operador metaplético $\hat{M}_{\mathbf{S}}$ tem uma expansão (1.61), isto é,

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX M_{\mathbf{S}}(X) \hat{R}_X. \quad (1.70)$$

No caso especial em que $\pm i\hat{M}_{\mathbf{I}} = \hat{1}$, esta integração *colapsa* na decomposição do operador identidade (1.50).

No caso degenerado, $\det(\mathbf{S} + \mathbf{I}) = 0$, devemos usar a parametrização de Cayley $\mathbf{C}_{\mathbf{J}}$ definida em (1.25). Exceto quando $\det(\mathbf{S} - \mathbf{I}) = 0$, o símbolo complementar é dado por $M_{\mathbf{S}}(\xi) = \text{Tr}[\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{T}_{-\xi}]$. Este símbolo é calculado através da transformada de Fourier (1.66) do símbolo de Weyl $M_{\mathbf{S}}(X)$,

$$M_{\mathbf{S}}(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX \exp\left(\frac{i}{\hbar} X \wedge \xi\right) M_{\mathbf{S}}(X). \quad (1.71)$$

Para resolver a integral acima precisamos completar um quadrado e usar a fórmula de Fresnel (A.12). O resultado desta integração é dado pela função complexa

$$M_{\mathbf{S}}(\xi) = \frac{i^{\nu}}{|\det(\mathbf{S} - \mathbf{I})|^{1/2}} \exp\left(-\frac{i}{4\hbar} \xi \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{J}} \xi\right), \quad (1.72)$$

e a expansão do operador metaplético em termos dos operadores de translação assume a forma

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi M_{\mathbf{S}}(\xi) \hat{T}_{\xi}. \quad (1.73)$$

Destacamos o par de operadores $\pm i\hat{M}_{-\mathbf{I}} = \hat{R}_0$, que estão relacionados com o operador de paridade (1.48). O operador de paridade está relacionado *univocamente* com a matriz simplética $-\mathbf{I}$, como pode ser visto em (1.56).

Unitariedade e a Covariância Metaplética

Demonstraremos que os operadores metapléticos são unitários, ou seja, verificam a igualdade $\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} \hat{M}_{\mathbf{S}} = \hat{1}$. Esta propriedade pode ser calculada usando a representação de Weyl (1.68),

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dX' \int_{-\infty}^{\infty} dX'' M_{\mathbf{S}}(X') M_{\mathbf{S}}^*(X'') \hat{R}_{X'} \hat{R}_{X''}. \quad (1.74)$$

A composição $\hat{R}_{X'} \hat{R}_{X''} = e^{iX'' \wedge X' / \hbar} \hat{T}_{2(X'-X'')}$ é calculada com a identidade (1.57). Se usarmos as coordenadas $X \pm \xi/2$ para X'' e X' , respectivamente, conseguiremos expressar a equação (1.74) na forma

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = \frac{|\det[\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C}]|}{(\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \hat{T}_{2\xi} \int_{-\infty}^{\infty} dX e^{-2iX \wedge [\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C}] \xi / \hbar}. \quad (1.75)$$

Na última equação usamos que $2|\det(\mathbf{S} + \mathbf{I})|^{-1/2} = |\det(\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C})|^{1/2}$. Note que a integração da coordenada X é uma representação integral da função delta de Dirac (A.1). Resta-nos usar a propriedade das funções delta de Dirac,

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = |\det[\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C}]| \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \hat{T}_{2\xi} \delta([\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{C}] \xi) = \hat{1}. \quad (1.76)$$

Este resultado nos permite concluir que

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} \hat{M}_{\mathbf{S}} = \hat{1}. \quad (1.77)$$

Para demonstrar que $\hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} \hat{M}_{\mathbf{S}} = \hat{1}$, basta refazer novamente o percurso (1.74)-(1.76) da demonstração.

A *covariância metapléctica* estabelece que $\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} = \hat{R}_{\mathbf{S}X}$. Para demonstrar esta propriedade vamos considerar o seguinte operador:

$$\hat{R}_{\mathbf{S}X} \hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_{\mathbf{S}}(X') \hat{R}_{\mathbf{S}X} \hat{R}_{X'} \hat{R}_X. \quad (1.78)$$

O produto dos três operadores de reflexão que aparece dentro da integração, a menos de uma fase, é um outro operador de reflexão. Isto nos permite escrever

$$\hat{R}_{\mathbf{S}X} \hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_{\mathbf{S}}(X') e^{-4i\mathcal{D}_3(X, -X', \mathbf{S}X) / \hbar} \hat{R}_{[\mathbf{S} + \mathbf{I}]X - X'}. \quad (1.79)$$

A fase usada é determinada pela área \mathcal{D}_3 definida em (1.44). Com a mudança de variáveis $X'' = [\mathbf{S} + \mathbf{I}]X - X'$, poderemos reescrever esta igualdade como

$$\hat{R}_{\mathbf{S}X} \hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_{\mathbf{S}}(X'') \hat{R}_{X''} = \hat{M}_{\mathbf{S}}. \quad (1.80)$$

Usando a unitariedade do operador metaplético, $\hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger \hat{M}_{\mathbf{S}} = \hat{1}$, e em seguida que um operador de reflexão é idempotente, $\hat{R}_X^2 = \hat{1}$, demonstramos a covariância metaplética,

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger = \hat{R}_{\mathbf{S}X}. \quad (1.81)$$

Em especial, para $X = 0$ temos a identidade $\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_0 \hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger = \hat{R}_0$. Isto significa que qualquer operador metaplético comuta com o operador de paridade,

$$\left[\hat{M}_{\mathbf{S}}, \hat{R}_0 \right] = 0. \quad (1.82)$$

No caso dos operadores de translação, $\hat{T}_\xi = \hat{R}_{\xi/2} \hat{R}_0$, podemos fazer a seguinte manipulação algébrica:

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{T}_\xi \hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger = \hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{R}_{\xi/2} \hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger \hat{R}_0 = \hat{R}_{\mathbf{S}\xi/2} \hat{R}_0. \quad (1.83)$$

Substituindo $\hat{T}_{\mathbf{S}\xi} = \hat{R}_{\mathbf{S}\xi/2} \hat{R}_0$ na equação acima, chegamos a covariância metaplética para os operadores de translação,

$$\hat{M}_{\mathbf{S}} \hat{T}_\xi \hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger = \hat{T}_{\mathbf{S}\xi}. \quad (1.84)$$

As relações (1.81) e (1.84) foram calculadas com o símbolo de Weyl, válido sempre que $\det(\mathbf{S} + \mathbf{I}) \neq 0$. As mesmas relações podem ser demonstradas com o símbolo dado pela fórmula (1.72). Portanto, a covariância metaplética é sempre válida. A identidade mais flagrante dos operadores metapléticos pode ser encontrada, heurísticamente, quando fazemos a expansão em série da identidade (1.84) em torno de $\xi = 0$. Desta expansão, encontramos a seguinte identidade:

$$\hat{M}_{\mathbf{S}}^\dagger \hat{x} \hat{M}_{\mathbf{S}} = \mathbf{S} \hat{x}. \quad (1.85)$$

Esta relação mostra a ação dos operadores metapléticos, isto é, realizam as transformações canônicas lineares do vetor operador \hat{x} .

Regra de Composição

Considere duas matrizes $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2 \in Sp$ e suas respectivas parametrizações de Cayley \mathbf{C}_1 e \mathbf{C}_2 . A composição $\mathbf{S}_3 = \mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 \in Sp$ também é uma matriz simplética - veja a demonstração (1.9). Os operadores metapléticos correspondentes (pelos subscritos) a estas três matrizes são $\hat{M}_{\mathbf{S}_1}$, $\hat{M}_{\mathbf{S}_2}$ e $\hat{M}_{\mathbf{S}_3}$. O fator de fase i^ν definido em (1.69) determina, a menos de um fator ± 1 , uma representação unitária de Sp , ou seja,

$$\hat{M}_{\mathbf{S}_3} = \pm \hat{M}_{\mathbf{S}_1} \hat{M}_{\mathbf{S}_2}. \quad (1.86)$$

Uma vez feita a escolha deste fator de fase, a família dos operadores metapléticos constitui a *representação metaplética* do grupo Sp . Para completar o enunciado desta representação, devemos relacionar de forma correta os índices ν_1 , ν_2 e ν_3 . Com a ajuda do subscrito k , escrevemos os símbolos de Weyl,

$$M_{\mathbf{S}_k}(X) = \frac{2 i^{\nu_k - \frac{1}{2} \text{sgn } \mathbf{C}_k}}{|\det(\mathbf{S}_k + \mathbf{I})|^{1/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} X \cdot \mathbf{C}_k X\right), \quad k = 1, 2, 3. \quad (1.87)$$

Note que $\mathbf{C}_3 = \mathbf{J}(\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 - \mathbf{I})(\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + \mathbf{I})^{-1}$. O índice ν_3 deve ser calculado por meio da seguinte relação [23]:

$$\nu_3 = \nu_1 + \nu_2 - \frac{1}{2} \text{sgn}(\mathbf{C}_1 + \mathbf{C}_2). \quad (1.88)$$

A ambiguidade na escolha do sinal aparece, de maneira explícita, quando extraímos a raiz quadrada de um número complexo. Neste tese, vamos sempre escolher o corte do plano complexo que fica logo acima do semi-eixo real negativo (A.5).

1.3 Aspectos Probabilísticos

A discussão inicial desta seção vai mostrar como a relação de incerteza de Heisenberg pode ser formulada em termos de uma desigualdade matricial [25, 26, 27]. Neste contexto, aproveitamos para definir as matrizes de correlação de um estado quân-

tico. A segunda parte desta seção é dedicada integralmente a *função de Wigner* [28, 29].

1.3.1 Matrizes de Correlação

Um estado arbitrário, não necessariamente puro, é descrito por um operador densidade. Um operador densidade deve ser um operador autoadjunto e positivo, $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \geq 0$, e também normalizado $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$. O valor esperado de um observável \hat{A} pode ser calculado por meio do traço de operadores,

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \text{Tr} [\hat{\rho} \hat{A}]. \quad (1.89)$$

O desvio de seu valor esperado, $\delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, permite nos definir o desvio padrão ΔA ,

$$\Delta A^2 \equiv \langle (\delta\hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2. \quad (1.90)$$

De forma quantitativa, a maior parte dos resultados da observação do operador \hat{A} estão concentrados no intervalo $\langle \hat{A} \rangle \pm \Delta A$. Para um par de observáveis \hat{A} e \hat{A}' , definimos a covariância

$$\text{Cov}(\hat{A}, \hat{A}') \equiv \frac{1}{2} \langle \{ \delta\hat{A}, \delta\hat{A}' \} \rangle = \frac{1}{2} \langle \{ \hat{A}, \hat{A}' \} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{A}' \rangle, \quad (1.91)$$

onde usamos o anti-comutador entre os operadores, $\{ \hat{A}, \hat{A}' \} \equiv \hat{A} \hat{A}' + \hat{A}' \hat{A}$. Note que a variância ΔA^2 é um caso particular da covariância para $\hat{A} = \hat{A}'$.

Considere um estado $\hat{\rho}$ que verifica $\Delta p, \Delta q < \infty$. Neste caso o vetor médio $\langle \hat{x} \rangle$ está bem definido, assim como a matriz de correlação $\varrho \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$, dada pela relação

$$\varrho + \frac{i\hbar}{2} \mathbf{J} = \text{Tr} [\hat{\rho} \delta\hat{x} \delta\hat{x}^T] \geq 0. \quad (1.92)$$

Para demonstrar a desigualdade, note que uma combinação linear das componentes do vetor $\delta\hat{x}$ verifica a seguinte desigualdade:

$$\text{Tr} [\hat{\rho} (X \cdot \delta\hat{x})^2] = X \cdot \text{Tr} [\hat{\rho} \delta\hat{x} \delta\hat{x}^T] X \geq 0. \quad (1.93)$$

Para que a forma quadrática seja positiva é necessário e suficiente que a matriz da forma quadrática seja positiva, $\text{Tr} [\hat{\rho} \delta \hat{x} \delta \hat{x}^T] \geq 0$. Destacamos que quando somamos a desigualdade (1.92) com o seu conjugado hermitiano, mostramos que a matriz de correlação é uma matriz positiva,

$$\varrho \geq 0. \quad (1.94)$$

A partir da igualdade em (1.92), podemos encontrar os elementos da matriz de correlação. Com a relação de comutação, $[\delta \hat{p}, \delta \hat{q}] = i\hbar$, temos explicitamente

$$\varrho = \begin{pmatrix} \Delta p^2 & \langle \{ \delta \hat{p}, \delta \hat{q} \} \rangle / 2 \\ \langle \{ \delta \hat{p}, \delta \hat{q} \} \rangle / 2 & \Delta q^2 \end{pmatrix} \quad (1.95)$$

Desta maneira, vemos que a matriz de correlação é simétrica, $\varrho^T = \varrho$. Os valores esperados contidos na matriz (1.95) aparecem de forma simétrica nos operadores canônicos. Quando calculamos o determinante da definição (1.95), obtemos a seguinte desigualdade:

$$[\det \varrho]^{1/2} = \left[\Delta p^2 \Delta q^2 - \frac{1}{4} \langle \{ \delta \hat{p}, \delta \hat{q} \} \rangle^2 \right]^{1/2} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.96)$$

Sempre é possível colocar a matriz de correlação numa forma diagonal porque a matriz ϱ é simétrica. Escolhendo uma base conveniente, em que $\mathbf{O} \varrho \mathbf{O}^T$ é uma matriz diagonal,

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.97)$$

Esta é a relação de incerteza de Heisenberg do par canônico. A diferença entre este enunciado e aquele em (1.96) se deve à presença das correlações entre posição e momento. As correlações podem aparecer mediante uma transformação canônica linear da matriz de correlação (1.92),

$$\mathbf{S} \left[\varrho + \frac{i\hbar}{2} \mathbf{J} \right] \mathbf{S}^T = \mathbf{S} \varrho \mathbf{S}^T + \frac{i\hbar}{2} \mathbf{J} \geq 0. \quad (1.98)$$

Usamos na desigualdade acima a condição simplética (1.10), $\mathbf{S} \mathbf{J} \mathbf{S}^T = \mathbf{J}$. A relação de incertezas na forma matricial é independente da base.

1.3.2 Função de Wigner

Uma maneira de representar um estado quântico no espaço de fase é utilizar a função de Wigner [28]. Esta função é uma das ferramentas mais comuns que são utilizadas para investigar o limite semiclássico dos sistemas quânticos. Vale a pena comentar que a função de Wigner pode ser medida no laboratório [30, 31, 32].

A função de Wigner de um estado $\hat{\rho}$ pode ser calculada como o valor esperado do operador de reflexão [33, 34],

$$W(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{R}_X \right]. \quad (1.99)$$

Se usarmos a relação de ortogonalidade dos autoestados $|q\rangle$, e o elemento de matriz (1.58) do operador de reflexão, encontraremos a expressão familiar da função de Wigner em termos dos elemento de matriz de $\hat{\rho}$ na representação de coordenadas,

$$W(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-2isP/\hbar} \langle Q - s | \hat{\rho} | Q + s \rangle. \quad (1.100)$$

No caso de um estado puro, em que $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, podemos definir a função de onda $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$ e a sua transformada de Fourier $\phi(p)$. As densidades marginais de probabilidade $\int dP W(X) = |\psi(Q)|^2$ e $\int dQ W(X) = |\phi(P)|^2$, são calculadas por meio de uma integração.

Um estado pode ser representado pelo operador densidade $\hat{\rho}$ (no espaço de Hilbert) ou pela função de Wigner (no espaço de fases). As duas representações contém a mesma informação sobre o estado. Isto fica mais claro quando usamos a representação de Weyl (1.61),

$$\hat{\rho} = \int_{-\infty}^{\infty} dX W(X) \hat{R}_X. \quad (1.101)$$

A normalização da distribuição (1.99) segue da decomposição do operador identidade (1.50),

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX W(X) = \text{Tr} [\hat{\rho}] = 1. \quad (1.102)$$

A pureza de um estado, $\mathcal{P} \equiv \text{Tr} [\hat{\rho}^2]$, pode ser expressa em termos da função de Wigner,

$$\mathcal{P} = 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dX [W(X)]^2 \leq 1. \quad (1.103)$$

A igualdade é válida quando o estado é puro.

A função de Wigner enunciada no parágrafo anterior permite-nos tratar a mecânica quântica como uma teoria estatística no espaço de fases. A função de Wigner deve ser chamada de distribuição de *pseudo-probabilidades* porque esta pode assumir valores negativos. De fato, esta se encontra no intervalo $-1 \leq \pi\hbar W(X) \leq 1$. A partir da distribuição de pseudo-probabilidades $W(X)$ extraímos o valor esperado dos observáveis. Para ser mais específico, o valor esperado de um operador \hat{A} , cujo símbolo de Weyl correspondente vale $A(X) = 2 \text{Tr} [\hat{A} \hat{R}_X]$, é calculado da seguinte maneira:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dX W(X) A(X). \quad (1.104)$$

Esta equação é análoga ao cálculo dos valores esperados na teoria estatística da mecânica clássica.

Estados Gaussianos

No próximo capítulo iremos analisar os estados de incerteza mínima. Será conveniente definirmos a *função gaussiana padrão*³

$$G(X) \equiv \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2} X^2\right). \quad (1.105)$$

A função de Wigner de um estado gaussiano arbitrário fica completamente determinada por um vetor médio, $\langle \hat{x} \rangle = \mathcal{Z} \equiv (\mathcal{P}, \mathcal{Q})^T$, e por uma matriz de correlação, ϱ . Neste caso, a função de Wigner pode ser escrita em termos da nossa gaussiana padrão,

$$G_{\sqrt{\varrho}}(X - \mathcal{Z}) \equiv [\det \varrho]^{-1/2} G(\varrho^{-1/2} [X - \mathcal{Z}]). \quad (1.106)$$

³Por simplicidade usaremos a notação $X^2 = X \cdot X = P^2 + Q^2$ para o produto escalar.

Se calcularmos a pureza (1.103) desta distribuição, encontraremos que

$$\mathcal{P}(\varrho) = 2\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dX [G_{\sqrt{\varrho}}(X - Z)]^2 = \frac{\hbar/2}{\sqrt{\det \varrho}} \leq 1. \quad (1.107)$$

O valor da pureza $\mathcal{P}(\varrho)$ de um estado gaussiano é calculada como a razão de duas áreas: A área do espaço de fase *ocupada* pelo estado, $\mathcal{A}_\varrho = \sqrt{\det \varrho}$, e a área de uma *célula* do espaço de fase, $\hbar/2$. A desigualdade da fórmula (1.107), estabelece que $\mathcal{A}_\varrho \geq \hbar/2$. Logo, a função de Wigner gaussiana $G_{\sqrt{\varrho}}(X - Z)$ que representa um estado puro tem uma matriz de correlação que verifica $\sqrt{\det \varrho} = \hbar/2$. Do contrário, o estado não é puro. Este enunciado está de acordo com a relação de incerteza (1.96).

Dinâmica Quântica de um Sistema Isolado

No nível quântico, a dinâmica do operador densidade de um sistema isolado é determinada pela equação de von Neumann. Para um dado operador hamiltoniano, $\hat{H}(t)$, a equação é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}]. \quad (1.108)$$

Não é difícil de verificar que esta equação implica na conservação da normalização (1.102) e também da pureza (1.103), isto é, $\dot{\mathcal{P}} = 0$. A solução formal desta equação, $\hat{\rho}_t = \hat{U}_t \hat{\rho}_0 \hat{U}_t^\dagger$, pode ser escrita com o operador de evolução

$$\hat{U}_t = \overrightarrow{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt' \right). \quad (1.109)$$

O operador de ordenamento temporal estabelece, para dois operadores $\hat{H}(t')$ e $\hat{H}(t)$ em que $t' < t$, a maneira na qual a composição deve ser ordenada, $\overrightarrow{T} [\hat{H}(t') \hat{H}(t)] = \hat{H}(t) \hat{H}(t')$.

No espaço de fase, a evolução da função de Wigner é determinada por uma equação diferencial parcial (EPD). Esta EDP, a *equação de Wigner-Moyal* [20, 28], é calculada a partir da equação de von Neumann (1.108). Com o símbolo de Weyl do

operador hamiltoniano, $H(X, t) = 2 \operatorname{Tr} [\hat{H}(t) \hat{R}_X]$, esta EDP pode ser escrita numa forma compacta

$$\frac{\partial}{\partial t} W_t(X) = \frac{2}{\hbar} \operatorname{sen} \left(\frac{\hbar}{2} \nabla_{X'} \wedge \nabla_X \right) H(X, t) W_t(X') \Big|_{X'=X}, \quad (1.110)$$

ou de maneira equivalente, como a soma de duas contribuições,

$$\frac{\partial}{\partial t} W_t(X) = \nabla_X W_t(X) \wedge \nabla_X H(X, t) + \llbracket H(X, t), W_t(X) \rrbracket. \quad (1.111)$$

A primeira contribuição é dada pelos colchetes de Poisson, como na equação de Liouville (1.7). A segunda contribuição, chamada de *colchetes de Wigner-Moyal*, é definida por meio da série

$$\llbracket H(X, t), W_t(X) \rrbracket = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(\hbar/2)^{2l}}{2l+1} (\nabla_{X'} \wedge \nabla_X)^{2l+1} H(X, t) W_t(X') \Big|_{X=X'}. \quad (1.112)$$

Esta série contém derivadas de ordem cúbica ou maior. Em um sistema hamiltoniano em que $H(X) = X \cdot \mathbf{H}_0 X$, os colchetes de Wigner-Moyal não contribuem e a evolução quântica coincide com a evolução clássica. Neste caso, a evolução é dada por uma transformação canônica linear e o operador de evolução (1.109) é um operador metaplético. Em virtude da propriedade cíclica do traço e da covariância metaplética (1.81), pode-se verificar que

$$W_t(X) = \frac{1}{\pi \hbar} \operatorname{Tr} \left[\hat{\rho}_0 \hat{U}_{\mathbf{S}_t}^\dagger \hat{R}_X \hat{U}_{\mathbf{S}_t} \right] = W_0(\mathbf{S}_t^{-1} X). \quad (1.113)$$

Esta relação é conhecida como *covariância metaplética da função de Wigner*. Nestes sistemas em particular, é suficiente conhecer a matriz simplética \mathbf{S}_t para calcular a evolução da função de Wigner $W_t(X)$.

Função Característica

Em alguns casos, pode ser mais fácil calcular a *função característica* de um estado $\hat{\rho}$ do que a função de Wigner. Por esta razão, é comum definir a função

$$\chi(\xi) = \frac{1}{2\pi \hbar} \operatorname{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{T}_{-\xi} \right], \quad (1.114)$$

que é a transformada de Fourier da função de Wigner (1.66),

$$\chi(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX W(X) \exp\left(\frac{i}{\hbar} X \wedge \xi\right). \quad (1.115)$$

Devemos ter $2\pi\hbar\chi(0) = 1$ para garantir a normalização. A expansão em série do operador de translação na equação (1.114), contém todas as médias $\langle (\xi \wedge \hat{x})^n \rangle$ porque $2\pi\hbar\chi(\xi) = 1 - i\langle \xi \wedge \hat{x} \rangle/\hbar + \dots$. Por exemplo, o gradiente da função característica fornece o vetor médio [29]

$$\langle \hat{x} \rangle = i\hbar \left[2\pi\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} \chi(\xi) \right]_{\xi=0}, \quad (1.116)$$

e a matriz hessiana fornece a matriz de correlação (1.95),

$$\varrho = \hbar^2 \mathbf{J} \left[2\pi\hbar \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \chi(\xi) - \left(2\pi\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} \chi(\xi) \right)^2 \right]_{\xi=0} \mathbf{J}. \quad (1.117)$$

O operador densidade, na base dos operadores de translação, é expandido como

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \chi(\xi) \hat{T}_\xi. \quad (1.118)$$

Esta expansão é possível por causa da representação (1.64).

Capítulo 2

Superposições entre Estados de Incerteza Mínima

Neste capítulo vamos introduzir o conceito de estado de incerteza mínima, e a sua relação com os *estados coerentes* de um oscilador harmônico. Na última seção, investigam-se as superposições quânticas entre dois estados de incerteza mínima de uma mesma família. No final do capítulo, encontra-se o primeiro resultado desta tese: a superposição entre um par de estados de incerteza mínima arbitrários. Esta fórmula é imprescindível para uma das aproximações semiclássicas que utilizaremos nos próximos capítulos.

2.1 Oscilador Harmônico

O operador hamiltoniano que determina a dinâmica de um oscilador harmônico de massa m e frequência natural de oscilação ω é o seguinte:

$$\hat{H}^{OH} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega}{2} \hat{q}^2, \quad (2.1)$$

O período das oscilações vale $T = 2\pi/\omega$. A evolução do par canônico de operadores (na representação de Heisenberg), $\hat{x}_t = \mathbf{S}_t^{OH} \hat{x}_0$, é dada pela matriz simplética

$$\mathbf{S}_t^{OH} = \begin{pmatrix} \cos \omega t & -m\omega \operatorname{sen} \omega t \\ \operatorname{sen} \omega t / m\omega & \cos \omega t \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Esta evolução é idêntica a evolução clássica porque o operador (2.1) é uma forma quadrática. Na representação de Schrödinger, a evolução de uma função de onda $\psi_0(q')$ pode ser calculada com o propagador do oscilador harmônico,

$$\psi_t(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq' U_t^{OH}(q, q') \psi_0(q'), \quad (2.3)$$

onde $U_t^{OH}(q, q') = \langle q | e^{-it\hat{H}^{OH}/\hbar} | q' \rangle$ é dado pelo elemento de matriz do operador de evolução. Este operador é um operador metaplético, e sendo assim, o propagador $U_t^{OH}(q, q')$ é uma exponencial quadrática nas variáveis q e q' ,

$$U_t^{OH}(q, q') = \left[\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin\omega t} \right]^{1/2} \exp \left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin\omega t} [(q^2 + q'^2) \cos\omega t - 2qq'] \right). \quad (2.4)$$

Note que existem singularidades para ângulos $\omega t = n\pi$. Neste caso é necessário calcular o limite apropriado [24]. A raiz do número imaginário puro que aparece no fator constante deve ser extraída no corte do plano complexo determinado em (A.5).

Uma combinação linear complexa do par de operadores elementares \hat{p} e \hat{q} pode ser escrita em termos de \hat{x} como um produto simplético, equação (1.4). Por exemplo, para o operador de aniquilação

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p} \quad (2.5)$$

devemos escolher o vetor complexo

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \begin{pmatrix} \sqrt{m\omega} \\ -i/\sqrt{m\omega} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Em termos deste operador, a hamiltoniano (2.1) fica:

$$\hat{H}^{OH} = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\hat{1}}{2} \right]. \quad (2.7)$$

Assim os autoestados do operador $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ são também autoestados de energia. Os autoestados de \hat{H}^{OH} são denotados por $|n\rangle$:

$$\hat{H}^{OH} |n\rangle = \hbar\omega \left[n + \frac{1}{2} \right] |n\rangle. \quad (2.8)$$

Os autoestados $|n\rangle$ formam uma base ortonormal, $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$. As regras algébricas usuais do operador (2.5) e seu conjugado hermitiano são:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}|0\rangle = 0, \quad (2.9)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (2.10)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}. \quad (2.11)$$

O estado fundamental do oscilador harmônico, $n = 0$, é também chamado de *estado do vácuo*, uma expressão importada da ótica quântica usada para designar o estado de um campo eletromagnético quantizado com nenhum fóton.

O valor esperado do vetor \hat{x} , para um dos autoestados $|n\rangle$ do operador hamiltoniano \hat{H}^{OH} , pode ser calculado com as regras (2.9) e (2.10),

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0. \quad (2.12)$$

A partir desta observação, pode-se demonstrar com as regras (2.9) e (2.10) que a matriz de correlação (1.95) é diagonal,

$$\varrho^{OH}(n) = [2n+1] \begin{pmatrix} \hbar m\omega/2 & 0 \\ 0 & \hbar/2m\omega \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Na equação acima vemos que $\varrho^{OH}(n)$ é proporcional a matriz de correlação do estado fundamental do oscilador harmônico. Os elementos diagonais da matriz $\varrho^{OH}(0)$ são as dispersões $\Delta p^2(0)$ e $\Delta q^2(0)$ do estado $|0\rangle$. A ausência dos elementos fora da diagonal significa que não existem correlações entre posição e momento. Adotaremos a seguinte definição:

$$\sigma \equiv \sqrt{\varrho^{OH}(0)} = \begin{pmatrix} \sigma_p & 0 \\ 0 & \sigma_q \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Destacamos o fato de que esta matriz verifica a igualdade da relação de incerteza (1.96), $\sqrt{\det \sigma^2} = \hbar/2$, ou seja, o estado fundamental do oscilador harmônico é um estado de incerteza mínima. Mais ainda, a matriz (2.14) tem a seguinte propriedade:

$$\frac{\hbar}{2} \sigma^{-1} = \mathbf{J} \sigma \mathbf{J}^T. \quad (2.15)$$

Note a semelhança desta propriedade com a condição simplética (1.10). Isto nos permite dizer que a matriz $\sigma = \sqrt{\hbar/2} \mathbf{S}_{m\omega}$ é proporcional a uma matriz simplética que realiza uma mudança de escala.

Na sequência, calcularemos a função de Wigner do estado do vácuo. Para isto precisamos do elemento de matriz $\langle 0 | \hat{T}_X | 0 \rangle$. Se usarmos o número complexo $\eta = \alpha \wedge X$, o operador de translação pode ser reescrito em termos do operador \hat{a} , de maneira que $\hat{T}_X = e^{iX\hat{a}/\hbar} = e^{\eta\hat{a}^\dagger - \eta^*\hat{a}}$. Com a fórmula BCH (1.37) e $\hat{a}|0\rangle = 0$, encontramos

$$\langle 0 | \hat{T}_X | 0 \rangle = \langle 0 | e^{\eta\hat{a}^\dagger} e^{-\eta^*\hat{a}} | 0 \rangle e^{-|\eta|^2/2} = e^{-|\eta|^2/2}. \quad (2.16)$$

O elemento de matriz do operador de translação, como função de X , é a função gaussiana

$$\langle 0 | \hat{T}_X | 0 \rangle = \exp\left(-\frac{1}{8} [\sigma^{-1} X]^2\right). \quad (2.17)$$

A matriz da forma quadrática é dada pela matriz (2.14). Com o produto de operadores (1.51), $\hat{R}_X | 0 \rangle = \hat{T}_{2X} \hat{R}_0 | 0 \rangle = \hat{T}_{2X} | 0 \rangle$, encontramos o elemento de matriz

$$\langle 0 | \hat{R}_X | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{T}_{2X} | 0 \rangle = \pi\hbar G_\sigma(X), \quad (2.18)$$

que pode ser escrito em termos da função gaussiana (1.106). A função de Wigner (1.99) do estado do vácuo, $W_{|0\rangle}(X)$, é proporcional ao elemento de matriz do operador de reflexão (2.18),

$$W_{|0\rangle}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{2} [\sigma^{-1} X]^2\right). \quad (2.19)$$

Portanto, a função de Wigner do estado do vácuo é uma gaussiana centrada na origem do espaço de fase que tem uma matriz de correlação σ^2 . A relação entre a função $W_{|0\rangle}(X)$ e a sua matriz de correlação é calculada com a fórmula (1.104),

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dX X^T X G_\sigma(X). \quad (2.20)$$

Esta matriz verifica a igualdade (1.107), ou seja, o estado do vácuo cobre uma área do espaço de fase igual a $\hbar/2$.

2.2 Estados Coerentes

Nesta seção discutiremos a teoria dos estados coerentes. Uma compilação de artigos relacionados aos estados coerentes e suas aplicações é encontrada no livro de Klauder e Skagerstam [35]. Os estados coerentes são definidos de três maneiras equivalentes. A maneira mais intuitiva é gerar um estado coerente simplesmente deslocando o estado do vácuo da origem para um ponto qualquer do espaço de fases. De forma equivalente, um estado coerente é um autoestado do operador de destruição no qual o autovalor é um número complexo (o operador de destruição não é hermitiano). Podemos também definir um estado coerente como o estado quântico que minimiza a relação de incerteza de Heisenberg.

Considere um vetor coluna $Z \equiv (\mathcal{P}, \mathcal{Q})^T$. A translação do estado $|0\rangle$ localizado na origem para um ponto Z do espaço de fase representa o estado coerente

$$|Z\rangle = \hat{T}_Z |0\rangle. \quad (2.21)$$

O valor esperado do operador de reflexão, para um estado coerente, pode ser calculado por meio do deslocamento (1.54),

$$\langle Z | \hat{R}_X | Z \rangle = \langle 0 | \hat{T}_Z^\dagger \hat{R}_X \hat{T}_Z | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{R}_{X-Z} | 0 \rangle. \quad (2.22)$$

Usando a função gaussiana (2.18), calculamos a função de Wigner (1.99) do estado coerente $|Z\rangle$,

$$W_{|Z\rangle}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{2} [\sigma^{-1}(X - Z)]^2\right). \quad (2.23)$$

Um estado coerente é representado no espaço de fases por uma função gaussiana centrada no ponto $\langle \hat{x} \rangle = Z$. A matriz de covariância do estado coerente também é a matriz σ^2 . O próprio estado do vácuo faz parte do conjunto dos estados coerentes, para $Z = 0$.

O produto interno entre dois estados $|Z\rangle$ e $|Z'\rangle$ pode ser manipulado usando a composição (1.42) dos operadores de translação,

$$\langle Z' | Z \rangle = \langle 0 | \hat{T}_{Z'}^\dagger \hat{T}_Z | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{T}_{Z-Z'} | 0 \rangle e^{iZ \wedge Z' / 2\hbar}. \quad (2.24)$$

O elemento de matriz do operador de translação, fórmula (2.17), pode ser expresso em termos da gaussiana padrão (2.18),

$$\langle Z' | Z \rangle = \pi \hbar G_\sigma ([Z - Z']/2) e^{i Z \wedge Z' / 2 \hbar}. \quad (2.25)$$

Esta fórmula mostra que os estados coerentes não são ortogonais entre si. Somente quando Z e Z' estiverem suficientemente separados que teremos $|\langle Z' | Z \rangle|^2 \rightarrow 0$, ou seja, os dois estados passam a ser quase ortogonais.

Autoestados do Operador de Destruição

Podemos mostrar que o estado coerente (2.21) é um autoestado do operador de destruição \hat{a} , definido em (2.5). Se usarmos a unitariedade dos operadores de translação, $\hat{T}_Z \hat{T}_Z^\dagger = \hat{1}$, encontramos a igualdade

$$\hat{a} |Z\rangle = \hat{a} \hat{T}_Z |0\rangle = \hat{T}_Z \left[\hat{T}_Z^\dagger \alpha \wedge \hat{x} \hat{T}_Z \right] |0\rangle. \quad (2.26)$$

O produto de operadores dentro do colchetes acima resulta em um deslocamento do vetor \hat{x} na direção Z , propriedade (1.46),

$$\hat{a} |Z\rangle = \hat{T}_Z [\alpha \wedge (\hat{x} + Z)] |0\rangle = \hat{T}_Z [\hat{a} + \alpha \wedge Z] |0\rangle. \quad (2.27)$$

Na última igualdade usaremos a equação (2.9), i.e., o estado do vácuo é um autoestado do operador de destruição, $\hat{a} |0\rangle = 0$. O resultado é a condição de autovalor

$$\hat{a} |Z\rangle = \alpha \wedge Z |Z\rangle. \quad (2.28)$$

Portanto os estados coerentes são autoestados do operador de destruição com um autovalor igual à $\alpha \wedge Z$. Note que o valor esperado do operador hamiltoniano $\langle Z | \hat{H}^{OH} | Z \rangle = |\alpha \wedge Z|^2$ aumenta conforme afastamos o estado $|Z\rangle$ da origem.

Conjunto de Estados Supercompleto

O conjunto dos estados coerentes forma uma base supercompleta, ou melhor, decompõe o operador identidade. A expansão do projetor $|Z\rangle\langle Z|$ em termos dos

operadores de reflexão, calculada por meio da representação de Weyl (1.61), é a seguinte:

$$|z\rangle\langle z| = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dX G_{\sigma}(X - z) \hat{R}_X. \quad (2.29)$$

Considere a integração deste projetor,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz |z\rangle\langle z| = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dX \int_{-\infty}^{\infty} dz G_{\sigma}(X - z) \hat{R}_X. \quad (2.30)$$

A função $G_{\sigma}(X - z)$ está normalizada, e por causa disto a integração em Z vale 1. O operador de reflexão decompõe o operador identidade, fórmula (1.50). Resolvendo as duas integrações, demonstramos a seguinte identidade:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz |z\rangle\langle z| = \hat{1}. \quad (2.31)$$

Como consequência desta decomposição, tem-se a possibilidade de representar um estado qualquer em termos do conjunto dos estados coerentes. Um estado $|\psi\rangle$ pode ser escrito como uma superposição linear dos estados coerentes,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dz \langle z|\psi\rangle |z\rangle. \quad (2.32)$$

Conjunto de Estados com Incerteza Mínima

Os estados gaussianos que verificam a igualdade da relação de incerteza (1.98) formam um conjunto incontável. Um estado deste conjunto é construído quando aplicamos um operador metaplético no estado do vácuo $\hat{M}_{\mathbf{S}}|0\rangle$ e em seguida o deslocamos para um ponto Z do espaço de fase,

$$|z, \mathbf{S}\rangle \equiv \hat{T}_z \hat{M}_{\mathbf{S}} |0\rangle. \quad (2.33)$$

O elemento de matriz diagonal do operador de reflexão é calculado como na fórmula (2.22), $\langle z; \mathbf{S} | \hat{R}_X | z; \mathbf{S} \rangle = \langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} \hat{R}_{X-z} \hat{M}_{\mathbf{S}} | 0 \rangle$, e com a covariância metaplética (1.81),

$$\langle z; \mathbf{S} | \hat{R}_X | z; \mathbf{S} \rangle = \langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}^{-1}[X-z]} | 0 \rangle = \pi\hbar G_{\sigma}(\mathbf{S}^{-1}[X - z]). \quad (2.34)$$

Na última igualdade usamos a função gaussiana (2.18). Portanto, a função de Wigner do estado (2.33) é também uma função gaussiana,

$$W_{|z;S\rangle}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{2}[(\mathbf{S}\sigma)^{-1}(X - z)]^2\right). \quad (2.35)$$

A matriz de correlação deste estado gaussiano, $\mathbf{S}\sigma^2\mathbf{S}^T$, é uma transformação simplética da matriz de correlação do estado do vácuo (2.14). A matriz simplética \mathbf{S} preserva área no espaço de fase porque $\det[\mathbf{S}\mathbf{S}^T] = \mathbf{I}$, equação (1.12). Isto garante que a matriz de correlação

$$\sqrt{\det[\mathbf{S}\sigma^2\mathbf{S}^T]} = \sqrt{\det\sigma^2} = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.36)$$

continua a representar um estado de incerteza mínima, embora possam conter *correlações posição-momento*. Uma outra propriedade é a seguinte:

$$\sigma_S \equiv \mathbf{S}\sigma\mathbf{S}^T = \frac{\hbar}{2}\mathbf{J}^T\sigma_S^{-1}\mathbf{J}. \quad (2.37)$$

A demonstração é feita usando (2.15) e a condição simplética (1.10). A identidade (2.37) demonstra que $\sqrt{2/\hbar}\sigma_S$ é uma matriz simplética.

2.3 Propagador Semiclássico

Uma aproximação para a dinâmica semiclassical dos estados coerentes pode ser elaborada com base na aproximação de órbitas adjacentes (1.14). Esta análise semiclassical foi feita por Heller [36, 37] para *os pacotes de onda gaussianos de incerteza mínima*, isto é, para as funções de onda dos estados coerentes na representação de coordenadas. Uma década depois, Littlejohn [38] estendeu o trabalho de Heller, deduzindo uma fórmula para o propagador semiclassical na AOA (independente de base).

Considere a evolução de um estado coerente inicial $|z\rangle$ sob a ação de um operador hamiltoniano $\hat{H}(t)$. A solução formal deste problema é escrita em termos do

operador de evolução (1.109),

$$|\gamma_t(\mathcal{Z})\rangle \equiv \hat{U}_t |\mathcal{Z}\rangle. \quad (2.38)$$

A aproximação AOA consiste em fazer a expansão em série de Taylor do símbolo de Weyl do operador hamiltoniano, $H_t(X) = 2 \text{Tr} [\hat{H}(t) \hat{R}_X]$, ao redor da trajetória clássica \mathcal{Z}_t , guardando os termos até ordem quadrática. A quantização desta expansão resulta em um polinômio da forma

$$\hat{H}_t^{AOA}(\mathcal{Z}_t) = H_t(\mathcal{Z}_t) + \dot{\mathcal{Z}}_t \wedge [\hat{x} - \mathcal{Z}_t] + \frac{1}{2} [\hat{x} - \mathcal{Z}_t] \cdot \mathbf{H}_t(\mathcal{Z}_t) [\hat{x} - \mathcal{Z}_t]. \quad (2.39)$$

A órbita clássica \mathcal{Z}_t do centro do estado gaussiano é a solução das equações de Hamilton (1.5). O escalar $H_t(\mathcal{Z}_t)$ é o símbolo de Weyl calculado na trajetória \mathcal{Z}_t . A matriz da forma quadrática $\mathbf{H}_t(\mathcal{Z}_t)$ é a matriz hessiana (1.16) do símbolo de Weyl. Nesta aproximação, o operador de evolução é calculado a partir do operador hamiltoniano $\hat{H}_t^{AOA}(\mathcal{Z}_t)$,

$$\hat{U}_t^{AOA}(\mathcal{Z}) \equiv \vec{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{t'}^{AOA}(\mathcal{Z}_{t'}) \right). \quad (2.40)$$

Comparado $\hat{U}_t^{AOA}(\mathcal{Z})$ com \hat{U}_t , vemos que o propagador semiclássico tem uma dependência explícita com o vetor \mathcal{Z} . A propagação semiclássica do estado coerente pode então ser escrita como

$$|\gamma_t(\mathcal{Z})\rangle \approx |\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle = \hat{U}_t^{AOA}(\mathcal{Z}) |\mathcal{Z}\rangle. \quad (2.41)$$

O estado $|\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle$ é uma aproximação semiclássica da evolução exata $|\gamma_t(\mathcal{Z})\rangle$. O resultado desta evolução é mostrado no diagrama 2.1. O estado gaussiano centrado no ponto \mathcal{Z} é deslocado para o ponto \mathcal{Z}_t . O propagador semiclássico preserva a forma gaussiana ao longo da evolução.

O propagador semiclássico definido em (2.40) tem uma interpretação geométrica simples. Foi apontado em [38] que o operador $\hat{U}_t^{AOA}(\mathcal{Z})$ pode ser colocado na seguinte forma:

$$\hat{U}_t^{AOA}(\mathcal{Z}) = e^{i\Gamma_t(\mathcal{Z})/\hbar} \hat{T}_{\mathcal{Z}_t} \hat{M}_{\mathcal{S}_t(\mathcal{Z})} \hat{T}_{\mathcal{Z}}^\dagger. \quad (2.42)$$

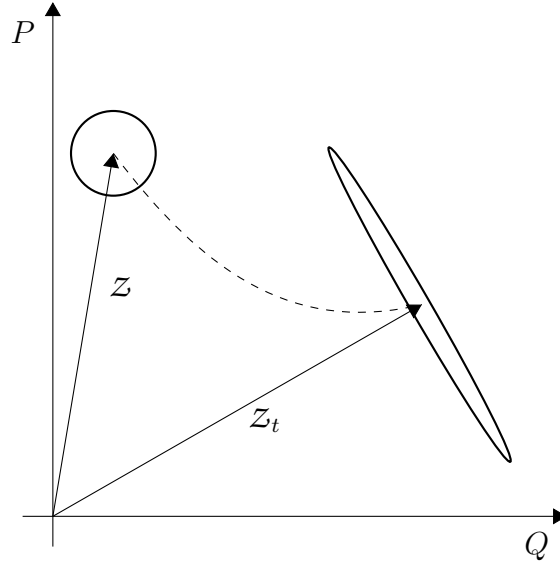


Figura 2.1: Diagrama que mostra a evolução linear da função de Wigner de um estado gaussiano no espaço de fase. O estado inicialmente centrado em Z termina no ponto Z_t , sendo que a linha tracejada representa a órbita clássica. A dinâmica linear produz um outro estado gaussiano.

Este propagador estabelece uma sequência de operações que devem ser feitas no estado inicial. A primeira operação desloca o estado $|Z\rangle$ para a origem do espaço de fase, $\hat{T}_Z^\dagger |Z\rangle = |0\rangle$. Em seguida, o estado do vácuo $|0\rangle$ sofre uma transformação metaplética, $\hat{M}_{S_t(Z)} |0\rangle$. Por fim, este último ganha uma fase adicional $\Gamma_t(Z)$ e é deslocado para a trajetória clássica Z_t . Cada um dos parâmetros envolvidos no operador (2.42) são calculados a partir de equações de movimento. O centro do estado Z_t é a solução das equações de Hamilton

$$\dot{Z} = \mathbf{J} \nabla_Z H_t(Z), \quad (2.43)$$

e a matriz simplética $\mathbf{S}_t(Z)$ é solução da equação

$$\dot{\mathbf{S}}_t = \mathbf{J} \mathbf{H}_t(Z_t) \mathbf{S}_t. \quad (2.44)$$

A dinâmica linear da matriz $\mathbf{S}_t(Z)$ determinada pela equação acima revela a maneira com que a aproximação mantém a forma gaussiana do estado. A função $\Gamma_t(Z)$ é uma

fase dinâmica, que obedece a equação de movimento

$$\dot{\Gamma} = \mathbf{z}_t \wedge \dot{\mathbf{z}}_t - H_t(\mathbf{z}_t). \quad (2.45)$$

A solução desta equação pode ser escrita como

$$\Gamma_t(\mathbf{z}) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{z}}^{\mathbf{z}_t} X \wedge dX - \int_0^t dt' H_{t'}(\mathbf{z}_{t'}). \quad (2.46)$$

Cada sistema tem um tempo característico no qual a dinâmica pode ser bem aproximada pelo propagador AOA. Isto pode ser justificado porque utilizamos um estado gaussiano com incertezas de tamanho comparável com a escala quântica, $\sigma_q \sim \sigma_p \sim \sqrt{\hbar}$. Portanto, deve levar um certo tempo para que a dinâmica passe a distorcer o estado. O propagador semiclássico (2.40) é idêntico ao propagador quântico (1.109) somente quando o operador hamiltoniano for um polinômio quadrático, $\hat{H}(t) = \zeta_t \wedge \hat{x} + \hat{x} \cdot \mathbf{H}_t \hat{x}/2$.

Mapas Quânticos

Nesta seção, calcularemos o propagador semiclássico associado a um mapa quântico [39]. Consideraremos apenas certos mapas que derivam de hamiltonianos “chutados”, isto é, com forças impulsivas:

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} \hat{x} \cdot \mathbf{H}_0 \hat{x} + V(\hat{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau), \quad (2.47)$$

onde \mathbf{H}_0 é uma matriz real e simétrica e $V(\hat{x})$ denota uma função do vetor \hat{x} . O operador de evolução pode ser separado em duas contribuições, uma para a dinâmica linear e outra para o chute. Desta forma, os estados imediatamente antes do pulso $n + 1$ e n , respectivamente, estão conectados pela fórmula de recorrência

$$|\psi_{n+1}\rangle = \hat{U}_\tau |\psi_n\rangle = \hat{M}_{\mathbf{S}_0} e^{-iV(\hat{x})/\hbar} |\psi_n\rangle, \quad (2.48)$$

obtida integrando diretamente a equação de Schrödinger [40]. Utilizamos nesta equação que o operador de evolução $e^{-i\tau \hat{x} \cdot \mathbf{H}_0 \hat{x}/2\hbar} = \hat{M}_{\mathbf{S}_0}$ é o operador metaplético que realiza a transformação simplética $\mathbf{S}_\tau = e^{\tau \mathbf{J} \mathbf{H}_0}$.

O propagador semiclássico para um estado coerente $|\mathcal{Z}\rangle$, equação (2.42), é calculado a partir da aproximação do operador de evolução (2.48). O resultado da propagação quântica

$$|\gamma_n(\mathcal{Z})\rangle = \hat{U}_n |\mathcal{Z}\rangle = [\hat{U}_\tau]^n |\mathcal{Z}\rangle, \quad (2.49)$$

pode ser aproximado com o propagador semiclássico,

$$|\gamma_n(\mathcal{Z})\rangle \approx |\gamma_n^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle \equiv \hat{U}_n^{AOA} |\mathcal{Z}\rangle. \quad (2.50)$$

Para usar a propagação AOA devemos primeiro obter a órbita clássica. Nestes sistemas, a integração das equações de Hamilton resultam em mapas dinâmicos. Com o símbolo de Weyl do operador (2.47), encontramos as equações de movimento

$$\dot{\mathcal{Z}} = \mathbf{J} \mathbf{H}_0 \mathcal{Z}_t + \mathbf{J} V'(\mathcal{Z}_t) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau). \quad (2.51)$$

Denotamos o gradiente como $V'(\mathcal{Z}_t) = \nabla_{\mathcal{Z}} V(\mathcal{Z}_t)$. Vemos que a trajetória consiste de uma dinâmica linear, exceto nos instantes de tempo $n\tau$ no qual a partícula recebe um impulso instantâneo. Entre dois pulsos consecutivos, a dinâmica é dada por uma transformação simplética $\mathbf{S}_\tau \mathcal{Z} = e^{\tau \mathbf{J} \mathbf{H}_0} \mathcal{Z}$. O mapa dos impulsos são calculados quando integramos as equações de Hamilton entre os instantes $t_{\pm} = n\tau \pm \varepsilon$, imediatamente depois/antes do n -ésimo pulso,

$$\mathcal{Z}(t_+) - \mathcal{Z}(t_-) = \mathbf{J} \mathbf{H}_0 \int_{t_-}^{t_+} dt \mathcal{Z}_t + \mathbf{J} V'(\mathcal{Z}(t_-)). \quad (2.52)$$

No limite em que $\varepsilon \rightarrow 0$, a integral que resta na última igualdade se anula, de maneira que

$$\mathcal{Z}(t_+) = \mathcal{Z}(t_-) + \mathbf{J} V'(\mathcal{Z}(t_-)). \quad (2.53)$$

A composição do pulso seguido da transformação simplética, resulta no mapa

$$\mathcal{Z}_{n+1} = e^{\tau \mathbf{J} \mathbf{H}_0} [\mathcal{Z}_n + \mathbf{J} V'(\mathcal{Z}_n)]. \quad (2.54)$$

Esta é a trajetória clássica escrita como uma fórmula recursiva, ou seja, aquela que conecta os pontos Z_{n+1} e Z_n , imediatamente antes do pulso $n + 1$ e n , respectivamente. O ponto inicial $Z_0 = Z$ deve ser a posição do centro do estado coerente. A equação de movimento da matriz simplética (2.44) é a seguinte:

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{J} \left[\mathbf{H}_0 + \mathbf{V}(Z_t) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - nT) \right] \mathbf{S}. \quad (2.55)$$

A dinâmica desta matriz, tal como a da trajetória Z_n , consiste de uma dinâmica linear com impulsos instantâneos em $n\tau$. Quando integramos esta equação no tempo entre os instantes $t_{\pm} = n\tau \pm \varepsilon$, imediatamente depois/antes do n -ésimo pulso, encontramos que

$$\mathbf{S}(t_+) - \mathbf{S}(t_-) = \mathbf{J}\mathbf{H}_0 \int_{t_-}^{t_+} dt \mathbf{S}(t) + \mathbf{J}\mathbf{V}(Z(t_-)) \mathbf{S}(t_-). \quad (2.56)$$

Ao calcularmos o limite $\varepsilon \rightarrow 0$, vemos que a integral do lado direito desta igualdade se anula,

$$\mathbf{S}(t_+) = [\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{V}(Z(t_-))] \mathbf{S}(t_-). \quad (2.57)$$

Entre dois pulsos consecutivos teremos $\mathbf{S}(t_+) \rightarrow e^{\tau\mathbf{J}\mathbf{H}_0} \mathbf{S}(t_+)$. Portanto, a composição nos leva ao mapa

$$\mathbf{S}_{n+1} = e^{\tau\mathbf{J}\mathbf{H}_0} [\mathbf{I} + \mathbf{J}\mathbf{V}(Z_n)] \mathbf{S}_n, \quad (2.58)$$

com a condição inicial adequada $\mathbf{S}_0 = \mathbf{I}$. Este mapa estabelece a maneira de calcular a matriz simplética \mathbf{S}_{n+1} , imediatamente antes do pulso $n + 1$, a partir da matriz \mathbf{S}_n , imediatamente antes do pulso n . A fase dinâmica é calculada segundo a fórmula (2.46),

$$\Gamma_n = \sum_{n'=0}^n \left[\frac{1}{2} Z_{n'} \cdot \nabla_Z V(Z_{n'}) - V(Z_{n'}) \right]. \quad (2.59)$$

O propagador semiclássico definido em (2.50), pode finalmente ser escrito na forma

$$\hat{U}_n^{AOA} = e^{i\Gamma_n(Z)/\hbar} \hat{T}_{Z_n} \hat{M}_{\mathbf{S}_n(Z)} \hat{T}_Z^\dagger. \quad (2.60)$$

A regra de composição (1.86) dos operadores metapléticos deve ser aplicada na equação acima para calcular $\hat{M}_{\mathcal{S}_n}$. Este operador foi construído com a expansão em série do potencial $V(\hat{x})$ contido na equação (2.48).

2.4 Superposições Quânticas

O objeto de estudo desta seção é um estado puro construído como uma superposição entre dois estados de incerteza mínima. Esta análise permitirá determinar o padrão de interferência da função de Wigner deste estado. A fórmula para a superposição entre dois estados do tipo (2.33), será usada no próximo capítulo na elaboração de uma aproximação semiclássica sem singularidades.

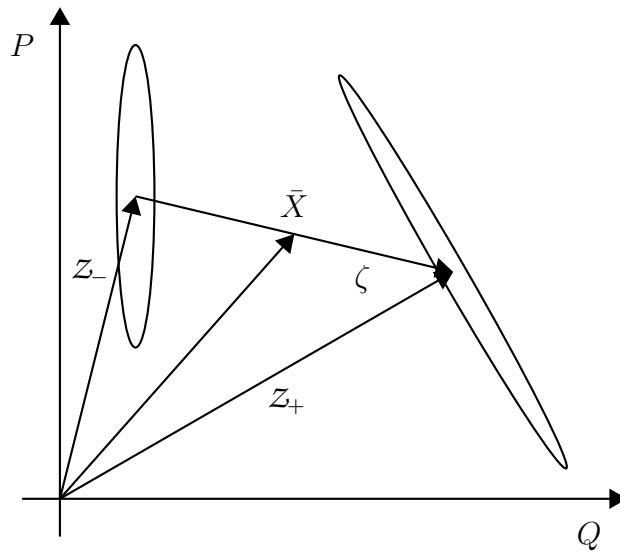


Figura 2.2: Diagrama da superposição entre dois estados gaussianos de incerteza mínima centrados em z_{\pm} . São mostrados o centro \bar{X} e a corda ζ .

Em todos os casos que serão analisados, os dois estados gaussianos estarão centrados nos pontos z_{\pm} . A notação escolhida nos ajuda a definir o centro \bar{X} e a corda ζ por meio da relação implícita

$$z_{\pm} = \bar{X} \pm \frac{1}{2} \zeta. \quad (2.61)$$

Veja na figura 2.2 o esquema que mostra o centro e a corda de uma superposição entre dois estados gaussianos.

2.4.1 Interferências Quânticas Simples

Analisaremos uma superposição de dois estados coerentes (2.21), com centros localizados nos pontos $Z_{\pm} \in \mathbb{R}^2$ do espaço de fase,

$$|Z_{\pm}\rangle = \hat{T}_{Z_{\pm}}|0\rangle. \quad (2.62)$$

Usaremos um estado puro que é uma superposição de dois estado coerentes da forma

$$|\mathcal{A}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} (a|Z_+\rangle + b|Z_-\rangle), \quad (2.63)$$

onde os coeficientes $a, b \in \mathbb{C}$ são números complexos arbitrários. A constante de normalização que deve ser usada vale

$$\mathcal{N} = |a|^2 + |b|^2 + 2 \operatorname{Re} [ab^* \langle Z_- | Z_+ \rangle]. \quad (2.64)$$

Para determinar esta constante devemos usar a fórmula (2.25) da superposição entre dois estados coerentes, $\langle Z_- | Z_+ \rangle = \pi \hbar G_{\sigma}(\zeta/2) e^{i\zeta \wedge \bar{X}/2\hbar}$.

A função de Wigner do estado puro considerado é dada pelo seguinte elemento de matriz:

$$W_{|\mathcal{A}\rangle}(X) = \frac{1}{\pi \hbar} \langle \mathcal{A} | \hat{R}_X | \mathcal{A} \rangle. \quad (2.65)$$

Ao substituir nesta fórmula o estado puro (2.63), notamos que existem quatro contribuições distintas,

$$W_{|\mathcal{A}\rangle}(X) = \frac{1}{\pi \hbar \mathcal{N}} \left[|a|^2 \langle Z_+ | \hat{R}_X | Z_+ \rangle + |b|^2 \langle Z_- | \hat{R}_X | Z_- \rangle \right] + \frac{2}{\pi \hbar \mathcal{N}} \operatorname{Re} \left[ab^* \langle Z_- | \hat{R}_X | Z_+ \rangle \right]. \quad (2.66)$$

Os dois termos diagonais, $\langle Z_{\pm} | \hat{R}_X | Z_{\pm} \rangle = \pi \hbar G_{\sigma}(X - Z_{\pm})$, são duas funções gaussianas (2.23). Em contrapartida, os outros dois termos, $\langle Z_{\pm} | \hat{R}_X | Z_{\mp} \rangle$, são complexos

conjugados um do outro. Este elemento de matriz cruzado é calculado com a composição entre operadores de reflexão e de translação, fórmulas (1.52) e (1.53). Destas propriedades resulta que

$$\langle Z_- | \hat{R}_X | Z_+ \rangle = \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \bar{X} \wedge \zeta + \frac{i}{\hbar} \zeta \wedge X \right) \langle 0 | \hat{R}_{X-\bar{X}} | 0 \rangle. \quad (2.67)$$

Passamos a usar o centro e a corda definidos em (2.61). Usando a fórmula (2.18) para o elemento de matriz $\langle 0 | \hat{R}_{X-\bar{X}} | 0 \rangle$, obtemos

$$\langle Z_- | \hat{R}_X | Z_+ \rangle = \pi \hbar \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \bar{X} \wedge \zeta + \frac{i}{\hbar} \zeta \wedge X \right) G_\sigma(X - \bar{X}). \quad (2.68)$$

Assim, a função de Wigner (2.66) pode ser escrita como

$$W_{|A\rangle}(X) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[|a|^2 G_\sigma(X - Z_+) + |b|^2 G_\sigma(X - Z_-) \right] + \frac{2}{\mathcal{N}} G_\sigma(X - \bar{X}) \operatorname{Re} \left[ab^* e^{-i \bar{X} \wedge \zeta / 2\hbar + i \zeta \wedge (X - \bar{X}) / \hbar} \right]. \quad (2.69)$$

Observe que o termo de interferência está centrado no ponto \bar{X} do espaço de fase. A frequência das oscilações depende da magnitude da corda $|\zeta|/\hbar$, ou seja, da distância entre os centros dos estados $|Z_\pm\rangle$.

Pode-se interpretar o termo linear que aparece na exponencial imaginária da fórmula (2.69), $S(X) = \zeta \wedge X$, como a função geratriz (1.32) que realiza a transformação $X_+ = \zeta + X_-$. Em especial, se escolhermos o centro do estado coerente $X_- = Z_-$, teremos a aplicação $X_+ = \zeta + Z_- = Z_+$. Esta transformação canônica é simplesmente uma translação rígida.

Função de Wigner

Mostraremos a função de Wigner (2.69) para a superposição mais simples entre dois estados de incerteza mínima. A superposição do par de estados coerentes centrados em $Z_\pm = \pm Z$, tem um termo de interferência localizado no ponto $\bar{X} = 0$. Utilizaremos estados "redondos", isto é, $\sigma_q = \sigma_p$. A função de Wigner $W_{|A\rangle}(X)$ assume valores que oscilam entre $\pm\pi\hbar$ numa região de raio $\sim \sqrt{\sigma_q}$ em torno de

\bar{X} . Estas oscilações ocorrem na direção perpendicular à corda ζ e têm uma frequência determinada pelo vetor de onda $\mathbf{J}\zeta/\hbar$. Na figura 2.3 são mostradas duas

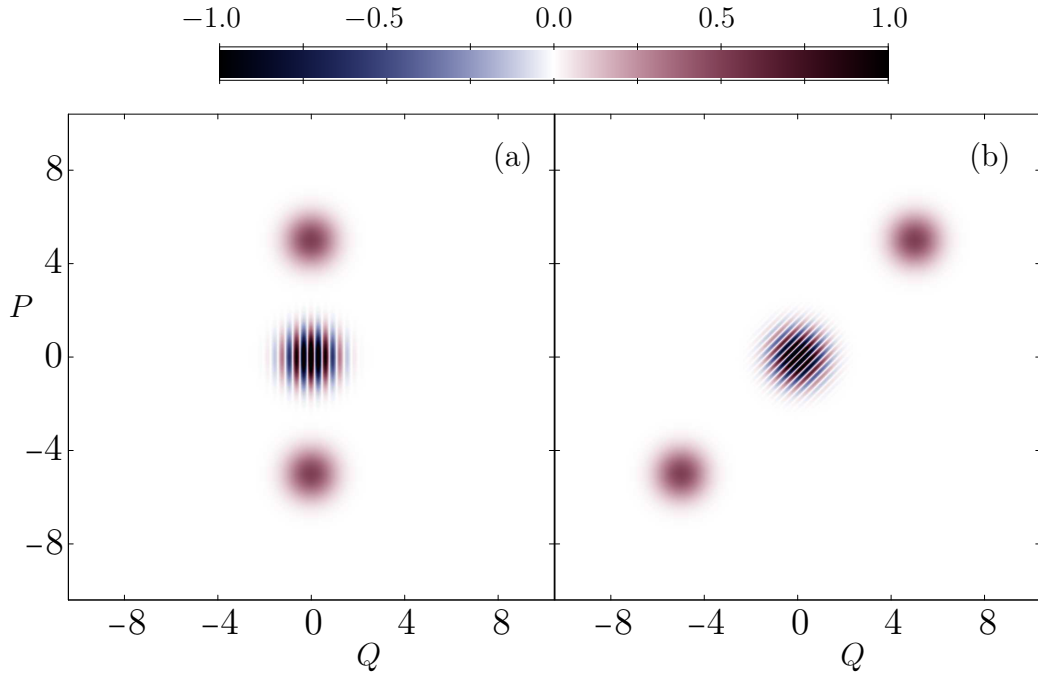


Figura 2.3: Função de Wigner $\pi\hbar W_{|\mathcal{A}\rangle}(X)$ de uma superposição entre dois estados coerentes, sendo que $\sigma_q = \sigma_p \approx 0.7$. Os estados estão centrados em $Z_{\pm} = (\pm 5, 0)$ no quadro (a) e em $Z_{\pm} = (\pm 5, \pm 5)$ no quadro (b). Em ambos os casos o padrão de interferência está centrado no ponto $\bar{X} = 0$.

superposições: o gráfico (a) mostra uma superposição de estados coerentes localizados nos pontos $Z_{\pm} = (\pm 5, 0)$ sobre a reta $Q = 0$. No gráfico (b) a posição dos dois estados coerentes vale $Z_{\pm} = (\pm 5, \pm 5)$. Usamos estados coerentes “redondos”, $\sigma_q = \sigma_p \approx 0.7$. A constante de Planck vale $\hbar = 2\sigma_q\sigma_p \approx 1.0$. A separação entre os estados determina uma frequência transversal $|\zeta|/\hbar = 10$ no gráfico (a) e $|\zeta|/\hbar \approx 14$ no gráfico (b). Como a distância entre os estados coerentes é menor no primeiro caso, as oscilações do termo de interferência têm uma frequência menor. A forma destas oscilações é dada pelas curvas de nível $\text{Re}[e^{i\zeta \wedge X/\hbar}] = cte$, que aparece no

termo cruzado da função de Wigner (2.69).

2.4.2 Interferências Quânticas e a Covariância Metaplética

Considerando um par de vetores $Z_{\pm} \in \mathbb{R}^2$ e uma matriz $\mathbf{S} \in Sp$, podemos construir um par de estados de mínima incerteza

$$|\tilde{Z}_{\pm}\rangle \equiv \hat{T}_{Z_{\pm}} \hat{M}_{\mathbf{S}} |0\rangle. \quad (2.70)$$

Este par de estados é mais geral do que o par definido em (2.62). Com uma matriz $\mathbf{S} = \mathbf{I}$, recuperamos os estados $|\tilde{Z}_{\pm}\rangle = |Z_{\pm}\rangle$ da seção anterior. Vamos considerar um estado puro que é uma superposição do par $|\tilde{Z}_{\pm}\rangle$ de estados,

$$|\tilde{\mathcal{A}}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} (a|\tilde{Z}_{-}\rangle + b|\tilde{Z}_{+}\rangle). \quad (2.71)$$

A constante que garante a normalização deste estado é dada por

$$\mathcal{N} = |a|^2 + |b|^2 + 2 \operatorname{Re} [a b^* \langle \tilde{Z}_{-} | \tilde{Z}_{+} \rangle]. \quad (2.72)$$

No final do próximo parágrafo mostraremos como calcular o produto interno $\langle \tilde{Z}_{-} | \tilde{Z}_{+} \rangle$ a partir do elemento de matriz $\langle \tilde{Z}_{-} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{+} \rangle$.

A função de Wigner do estado puro (2.71) é dada pelo elemento de matriz diagonal $W_{|\tilde{\mathcal{A}}\rangle}(X) = \langle \tilde{\mathcal{A}} | \hat{R}_X | \tilde{\mathcal{A}} \rangle / \pi \hbar$. Se substituirmos explicitamente o par $|\tilde{Z}_{\pm}\rangle$ de estados envolvidos na superposição iremos encontrar

$$W_{|\tilde{\mathcal{A}}\rangle}(X) = \frac{1}{\pi \hbar \mathcal{N}} \left[|a|^2 \langle \tilde{Z}_{+} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{+} \rangle + |b|^2 \langle \tilde{Z}_{-} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{-} \rangle \right] + \frac{2}{\pi \hbar \mathcal{N}} \operatorname{Re} \left[a b^* \langle \tilde{Z}_{-} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{+} \rangle \right]. \quad (2.73)$$

As contribuições diagonais $\langle \tilde{Z}_{\pm} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{\pm} \rangle = \pi \hbar G_{\sigma}(\mathbf{S}^{-1}[X - Z_{\pm}])$ desta função de Wigner são funções gaussianas, fórmula (2.34). O elemento de matriz cruzado do operador de reflexão, manipulado como em (2.67), resulta em

$$\langle \tilde{Z}_{-} | \hat{R}_X | \tilde{Z}_{+} \rangle = \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \bar{X} \wedge \zeta + \frac{i}{\hbar} \zeta \wedge X \right) \langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}}^{\dagger} \hat{R}_{X-\bar{X}} \hat{M}_{\mathbf{S}} | 0 \rangle. \quad (2.74)$$

Se aplicarmos a covariância metaplética (1.81), $\hat{M}_S^\dagger \hat{R}_{X-\bar{X}} \hat{M}_S = \hat{R}_{\mathbf{S}^{-1}[X-\bar{X}]}$, encontraremos a função complexa

$$\langle \tilde{Z}_- | \hat{R}_X | \tilde{Z}_+ \rangle = \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \bar{X} \wedge \zeta + \frac{i}{\hbar} \zeta \wedge X \right) G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}[X - \bar{X}]). \quad (2.75)$$

Podemos agora calcular o produto interno que aparece na constante de normalização (2.72). Note que temos a igualdade $|\tilde{Z}_+\rangle = \hat{R}_0 \hat{T}_{-z_+} \hat{M}_S |0\rangle$, por causa da reflexão do operador de translação, fórmula (1.55) com respeito à origem, e da comutação entre os operadores \hat{R}_0 e \hat{M}_S , fórmula (1.82). Por causa destas relações podemos usar (2.75) com $X = 0$, trocando $Z_+ \rightarrow -Z_+$, para encontrar

$$\langle \tilde{Z}_- | \tilde{Z}_+ \rangle = \langle \tilde{Z}_- | \hat{R}_0 \hat{T}_{z_+}^\dagger \hat{M}_S |0\rangle = \pi \hbar G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}\zeta/2) e^{i\zeta \wedge \bar{X}/2\hbar}. \quad (2.76)$$

Note que trocar $Z_+ \rightarrow -Z_+$ equivale às mudanças $\bar{X} \rightarrow -\zeta/2$ e $\zeta \rightarrow -2\bar{X}$. A função de Wigner do estado $|\tilde{\mathcal{A}}\rangle$, fórmula (2.73), vale

$$W_{|\tilde{\mathcal{A}}\rangle}(X) = \frac{1}{\mathcal{N}} [|a|^2 G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}[X - z_+]) + |b|^2 G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}[X - z_-])] + \frac{2}{\mathcal{N}} G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}[X - \bar{X}]) \operatorname{Re} \left[ab^* e^{-i\bar{X} \wedge \zeta/2\hbar + i\zeta \wedge (X - \bar{X})/\hbar} \right]. \quad (2.77)$$

Comparando esta função de Wigner com a (2.69), vemos que ao utilizar uma matriz simplética \mathbf{S} , a forma das gaussianas e do termo interferência é alterada linearmente.

2.4.3 Interferências Quânticas Gerais

Considere o par de vetores $z_\pm \in \mathbb{R}^2$ e de matrizes $\mathbf{S}_\pm \in Sp$. Definimos com estes vetores e matrizes o seguinte par de estados gaussianos:

$$|\gamma_\pm\rangle \equiv \hat{T}_{z_\pm} \hat{M}_{\mathbf{S}_\pm} |0\rangle. \quad (2.78)$$

Em particular, para matrizes idênticas, $\mathbf{S}_\pm = \mathbf{S}$, recuperamos o estado (2.70) definido na seção anterior. Um estado puro $|\mathcal{B}\rangle$ que é uma superposição dos estados (2.78) será denotado como a combinação linear

$$|\mathcal{B}\rangle \equiv \frac{1}{\mathcal{N}^{1/2}} (a |\gamma_+\rangle + b |\gamma_-\rangle), \quad (2.79)$$

com coeficientes $a, b \in \mathbb{C}$. Se quisermos um estado devidamente normalizado, $\langle \mathcal{B} | \mathcal{B} \rangle = 1$, devemos usar a constante

$$\mathcal{N} = |a|^2 + |b|^2 + 2 \operatorname{Re} [a b^* \langle \gamma_- | \gamma_+ \rangle]. \quad (2.80)$$

A combinação linear (2.79) dos dois estados genéricos (2.78) determina a superposição mais geral que pode ser construída. O produto interno $\langle \gamma_- | \gamma_+ \rangle$ será calculado a partir do elemento de matriz cruzado $\langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle$.

Nosso objetivo será calcular a função de Wigner do estado (2.79). Para isto, devemos expressar o valor esperado do operador de reflexão, $W_{|\mathcal{B}\rangle}(X) = \langle \mathcal{B} | \hat{R}_X | \mathcal{B} \rangle / \pi \hbar$, em termos dos estados (2.78),

$$W_{|\mathcal{B}\rangle}(X) = \frac{1}{\pi \hbar \mathcal{N}} \left[|a|^2 \langle \gamma_+ | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle + |b|^2 \langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_- \rangle \right] + \frac{2}{\pi \hbar \mathcal{N}} \operatorname{Re} \left[a b^* \langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle \right]. \quad (2.81)$$

Vemos que as duas contribuições diagonais, $\langle \gamma_{\pm} | \hat{R}_X | \gamma_{\pm} \rangle$, são funções gaussianas. Por simplicidade, definiremos duas matrizes positivas e simétricas,

$$\sigma_{\pm}^2 = \mathbf{S}_{\pm} \sigma^2 \mathbf{S}_{\pm}^T > 0, \quad \text{sendo que } \sigma_{\pm}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \mathbf{J} \sigma_{\pm}^{-2} \mathbf{J}^T. \quad (2.82)$$

Isto nos motiva a usar as funções gaussianas

$$G_{\sigma_{\pm}}(X) = \frac{1}{\pi \hbar} \exp \left(-\frac{1}{2} [\sigma_{\pm}^{-1} X]^2 \right), \quad (2.83)$$

que são obtidas por meio da transformação das incertezas σ da função de Wigner do estado do vácuo (2.19). Os elementos de matriz $\langle \gamma_{\pm} | \hat{R}_X | \gamma_{\pm} \rangle = \pi \hbar G_{\sigma_{\pm}}(X - Z_{\pm})$ podem ser expressos em termos deste par de funções. O elemento de matriz cruzado e seu complexo conjugado, $\langle \gamma_{\pm} | \hat{R}_X | \gamma_{\mp} \rangle$, necessitam de uma análise mais detalhada. O propósito da presente seção é justamente deduzir uma fórmula para este termo cruzado. Não é difícil de ver que a função de Wigner (2.81) pode ser colocada na

seguinte forma:

$$W_{|B\rangle}(X) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left[|a|^2 G_{\sigma_+}(X - z_+) + |b|^2 G_{\sigma_-}(X - z_-) \right] + \frac{2}{\mathcal{N}} \operatorname{Re} [a b^* C(X - \bar{X})] . \quad (2.84)$$

Nesta expressão introduzimos a função complexa das correlações

$$C(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \zeta \wedge \bar{X} + \frac{i}{\hbar} \zeta \wedge X \right) \langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}_+} | 0 \rangle , \quad (2.85)$$

que está relacionada com o elemento de matriz não diagonal do operador de reflexão $C(X - \bar{X}) = \langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle / \pi\hbar$.

Devemos calcular o elemento de matriz $\langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}_+} | 0 \rangle$ para podermos determinar completamente a função complexa $C(X)$. Isto pode ser feito por meio da representação de Weyl de um operador metaplético (1.86). Antes devemos usar a covariância metaplética, fórmula (1.81), para escrever a identidade $\hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}_+} = \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{M}_{\mathbf{S}_+}$. Em seguida aplicamos a regra para a composição de operadores metapléticos, fórmula (1.86),

$$\hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{M}_{\mathbf{S}_+} = \hat{M}_{\mathbf{S}_-^{-1}\mathbf{S}_+} = \hat{M}_{\mathbf{V}} = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_{\mathbf{V}}(X') \hat{R}_{X'} , \quad (2.86)$$

Note que o operador metaplético a ser expandido é aquele que está associado à matriz simplética $\mathbf{V} = \mathbf{S}_-^{-1}\mathbf{S}_+$. O símbolo de Weyl que deve ser usado é o seguinte:

$$M_{\mathbf{V}}(X) = 2 \frac{i^{\nu(\mathbf{V}) - \frac{1}{2} \operatorname{sgn} \mathbf{C}}}{|\det(\mathbf{V} + \mathbf{I})|^{1/2}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} X \cdot \mathbf{C} X \right) . \quad (2.87)$$

A matriz de Cayley é calculada como $\mathbf{C} = \mathbf{J}(\mathbf{V} - \mathbf{I})(\mathbf{V} + \mathbf{I})^{-1}$. O cálculo do índice deve ser feito segundo a fórmula (1.88),

$$\nu(\mathbf{V}) = \nu(\mathbf{S}_+) + \nu(\mathbf{S}_-) - \frac{1}{2} \operatorname{sgn} (\mathbf{C}_+ + \mathbf{C}_-) , \quad (2.88)$$

que depende dos índices $\nu(\mathbf{S}_\pm)$ e das matrizes $\mathbf{C}_\pm = \mathbf{J}(\mathbf{S}_\pm - \mathbf{I})(\mathbf{S}_\pm + \mathbf{I})^{-1}$ correspondentes às matrizes simpléticas \mathbf{S}_\pm . Levando em conta estas considerações,

expressamos o elemento de matriz como a fórmula integral abaixo,

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}_+} | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_V | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_V(X') \langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{R}_{X'} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.89)$$

O elemento de matriz do operador de reflexão que aparece no integrando da última equação pode ser reescrito, $\hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{R}_{X'} = e^{2i X' \wedge \mathbf{S}_-^{-1}X / \hbar} \hat{T}_{2[\mathbf{S}_-^{-1}X - X']}$, usando a regra de composição (1.57),

$$\langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{R}_{X'} | 0 \rangle = \exp\left(\frac{2i}{\hbar} X' \wedge \mathbf{S}_-^{-1}X\right) \langle 0 | \hat{T}_{2[\mathbf{S}_-^{-1}X - X']} | 0 \rangle. \quad (2.90)$$

Em seguida expressamos o elemento de matriz do operador de reflexão como uma função gaussiana. Para isto, usamos a o elemento de matriz (2.17),

$$\langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{R}_{X'} | 0 \rangle = \pi \hbar \exp\left(\frac{2i}{\hbar} X' \wedge \mathbf{S}_-^{-1}X\right) G_\sigma(\mathbf{S}_-^{-1}X - X'). \quad (2.91)$$

Conseguimos reescrever o elemento de matriz cruzado (2.89) como a integral de uma função gaussiana complexa da forma

$$\langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_V | 0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_V(X') G_\sigma(\mathbf{S}_-^{-1}X - X') e^{2i X' \wedge \mathbf{S}_-^{-1}X / \hbar}. \quad (2.92)$$

O passo seguinte é fazer a mudança de variável $X'' = \mathbf{S}_-^{-1}X - X'$,

$$\langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_V | 0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dX' M_V(\mathbf{S}_-^{-1}X - X'') W_\sigma(X'') e^{2i \mathbf{S}_-^{-1}X \wedge X'' / \hbar}. \quad (2.93)$$

Substituindo explicitamente o símbolo de Weyl (2.87) temos

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_V | 0 \rangle &= \frac{2}{\pi \hbar} \frac{i^{\nu(\mathbf{V}) - \frac{1}{2} \text{sgn } \mathbf{C}}}{|\det(\mathbf{V} + \mathbf{I})|^{1/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{S}_-^{-1}X) \cdot \mathbf{C} (\mathbf{S}_-^{-1}X)\right) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dX'' \exp\left(-\frac{1}{2} X'' \cdot \left[\sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C}\right] X'' - \frac{2i}{\hbar} X'' \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{J}) \mathbf{S}_-^{-1}X\right). \end{aligned} \quad (2.94)$$

A função gaussiana pode ser integrada porque a matriz da forma quadrática tem parte real positiva, $\sigma^{-2} > 0$. Isto garante (A.3) que a integral existe na forma da

gaussiana complexa

$$\langle 0 | \hat{R}_{\mathbf{S}_-^{-1}X} \hat{M}_{\mathbf{S}} | 0 \rangle = \frac{4}{\hbar} \frac{i^{\nu(\mathbf{V}) - \frac{1}{2} \text{sgn } \mathbf{C}}}{|\det(\mathbf{V} + \mathbf{I})|^{1/2}} \left[\det \left(\sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C} \right) \right]^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} X \cdot \mathbf{G} X \right), \quad (2.95)$$

A raiz quadrada do determinante a ser escolhida deve ser aquela que se encontra no semi-plano real positivo, definição (A.5) do apêndice A. Esta escolha permite escrever o resultado na forma compacta

$$\langle 0 | \hat{M}_{\mathbf{S}_-}^\dagger \hat{R}_X \hat{M}_{\mathbf{S}_+} | 0 \rangle = g^{-1} \exp \left(-\frac{1}{2} X \cdot \mathbf{G} X \right). \quad (2.96)$$

O resultado (2.95) determina a matriz complexa $\mathbf{G} \in \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2$ e o número constante $g \in \mathbb{C}$. A matriz complexa da forma quadrática é obtida pela relação

$$\mathbf{G} = (\mathbf{S}_-^{-1})^T \left(\frac{4}{\hbar^2} (\mathbf{C} + \mathbf{J}) \left[\sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C} \right]^{-1} (\mathbf{C} - \mathbf{J}) - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C} \right) \mathbf{S}_-^{-1}. \quad (2.97)$$

O número complexo tem um módulo igual a

$$|g| = 2^{-1} \left| \det \left[(\mathbf{S}_+ + \mathbf{S}_-) \sigma^2 - \frac{i\hbar}{2} (\mathbf{S}_+ - \mathbf{S}_-) \mathbf{J} \right] \right|^{1/2}, \quad (2.98)$$

e seu argumento é dado por

$$\arg g = -\frac{\pi}{2} \nu(\mathbf{V}) + \frac{\pi}{4} \text{sgn } \mathbf{C} + i \text{Ind} \left[\sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C} \right]. \quad (2.99)$$

A seguir processaremos a relação (2.97) da matriz \mathbf{G} para encontrar as suas partes real e imaginária.

A inversa da matriz complexa contida na relação (2.97) pode ser separada em uma parte real e uma parte imaginária. Isto pode ser feito com o resultado (A.13) para a matriz

$$\left[\sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \mathbf{C} \right]^{-1} = \left[\sigma^{-2} - \frac{4}{\hbar^2} \mathbf{C} \sigma^2 \mathbf{C} \right]^{-1} + i \left[\frac{2}{\hbar} \mathbf{C} + \frac{\hbar}{2} \sigma^{-2} \mathbf{C} \sigma^{-2} \right]^{-1}. \quad (2.100)$$

Após substituir esta matriz inversa na equação (2.97) que define a matriz \mathbf{G} , denotaremos as duas contribuições como

$$\mathbf{G} = \bar{\sigma}^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \bar{\mathbf{C}}. \quad (2.101)$$

Com a definição das matrizes (2.82) é possível escrever a parte real da matriz \mathbf{G} da seguinte forma:

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{\sigma_+^2 + \sigma_-^2}{2} > 0. \quad (2.102)$$

A parte real da matriz \mathbf{G} é positiva porque a forma quadrática

$$X \cdot \bar{\sigma}^2 X = \frac{1}{2} (X_+^2 + X_-^2) \geq 0, \quad \text{para todo } X_{\pm} = \sigma \mathbf{S}_{\pm}^T X, \quad (2.103)$$

é positiva. Se por acaso tivermos que $\mathbf{S}_- = \mathbf{S} = \pm \mathbf{S}_+$, teremos nestes dois casos uma matriz $\bar{\sigma}^2 = \mathbf{S} \sigma^2 \mathbf{S}^T$. A parte imaginária expressa em termos das matrizes (2.82) assume a seguinte forma:

$$\bar{\mathbf{C}} = -\bar{\sigma}^{-2} \left[\frac{1}{2} (\sigma_+^2 - \sigma_-^2) \right] \mathbf{J} = -(\sigma_-^{-2} \sigma_+^2 + \mathbf{I})^{-1} (\sigma_-^{-2} \sigma_+^2 - \mathbf{I}) \mathbf{J}. \quad (2.104)$$

A matriz $\sigma_-^{-2} \sigma_+^2 \in Sp$ porque as matrizes σ_{\pm}^2 são proporcionais às transformações da matriz simplética $\mathbf{S}_{m\omega} = \sqrt{2/\hbar} \sigma$. Levando isto em conta, concluímos que $\bar{\mathbf{C}}$ é uma parametrização de Cayley. Isto nos permite reescrever a contribuição imaginária como

$$\bar{\mathbf{C}} = \mathbf{J} (\sigma_+^2 \sigma_-^{-2} - \mathbf{I}) (\sigma_+^2 \sigma_-^{-2} + \mathbf{I})^{-1} = \mathbf{J} \left[\frac{1}{2} (\sigma_+^2 - \sigma_-^2) \right] \bar{\sigma}^{-2}. \quad (2.105)$$

Note que para $\mathbf{S}_- = \mathbf{S} = \pm \mathbf{S}_+$ teremos uma matriz $\bar{\mathbf{C}} = 0$ nula. Mais ainda, como $\sigma_{\pm}^2 > 0$, o denominador da última igualdade não pode se anular. Quando fazemos a troca das matrizes $\mathbf{S}_- \Leftrightarrow \mathbf{S}_+$, a parte imaginária $\bar{\mathbf{C}} \Rightarrow -\bar{\mathbf{C}}$ troca de sinal. Se permutarmos os vetores Z_{\pm} e também as matrizes \mathbf{S}_{\pm} , vemos que isto equivale a tomar o complexo conjugado do elemento de matriz $\langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle^* = \langle \gamma_+ | \hat{R}_X | \gamma_- \rangle$. Com isso garantimos que o termo de interferência da função de Wigner é uma função real.

Usando a fórmula da matriz complexa inversa (A.13) e a relação entre a matriz de incertezas σ_{\pm}^2 e sua inversa (2.82), mostramos que a matriz \mathbf{G} satisfaz a seguinte relação:

$$\mathbf{G}^{-1} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \mathbf{J} \mathbf{G} \mathbf{J}^T. \quad (2.106)$$

Esta relação estabelece que a matriz (complexa simétrica) $\hbar \mathbf{G}/2$ é uma matriz que verifica a condição simplética (1.10). Com efeito:

$$\left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{G}\right] \mathbf{J} \left[\frac{\hbar}{2} \mathbf{G}\right] = \mathbf{J}. \quad (2.107)$$

Vamos calcular os autovalores $\mathcal{G} \in \mathbb{C}$ da matriz simétrica \mathbf{G} . O polinômio característico pode ser manipulado usando a relação (2.106),

$$\det[\mathbf{G} - \mathcal{G} \mathbf{I}] = \det\left[\frac{4}{\hbar^2} \mathbf{J} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{J}^T - \mathcal{G} \mathbf{I}\right]. \quad (2.108)$$

Ao usar que o determinante de uma matriz simplética $\det \mathbf{J} = 1$ vale a unidade,

$$\det[\mathbf{G} - \mathcal{G} \mathbf{I}] = \left(\frac{2}{\hbar}\right)^4 \det\left[\mathbf{G}^{-1} - \frac{\hbar^2}{4} \mathcal{G} \mathbf{I}\right], \quad (2.109)$$

concluimos que

$$\det[\mathbf{G} - \mathcal{G} \mathbf{I}] = \mathcal{G}^2 \det \mathbf{G}^{-1} \det\left[\mathbf{G} - \frac{4}{\hbar^2} \mathcal{G} \mathbf{I}\right]. \quad (2.110)$$

Se \mathcal{G} for uma raiz do polinômio característico da matriz \mathbf{G} , então $4/\hbar^2 \mathcal{G}$ será também. Os autovalores da matriz de covariância aparece em pares de tal maneira que esta matriz pode ser colocada na seguinte forma diagonal:

$$\mathbf{O} \mathbf{G} \mathbf{O}^T = \begin{pmatrix} \mathcal{G} & 0 \\ 0 & 4/\hbar^2 \mathcal{G} \end{pmatrix} \quad (2.111)$$

A matriz \mathbf{O} é a uma matriz ortogonal que diagonaliza \mathbf{G} . Ao tomarmos o determinante da igualdade acima mostramos que

$$\sqrt{\det \mathbf{G}^{-1}} = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.112)$$

Este resultado para o determinante está em completa concordância com a fórmula (2.107).

Podemos escrever a função complexa $C(X)$, definida em (2.85), a partir do elemento de matriz (2.96), como a gaussiana

$$C(X) = \frac{1}{\pi\hbar g} \exp\left(-\frac{1}{2}X \cdot \mathbf{G} X + \frac{i}{\hbar}\zeta \wedge X + \frac{i}{2\hbar}\zeta \wedge \bar{X}\right). \quad (2.113)$$

O elemento de matriz cruzado do operador de reflexão está relacionado com o termo de coerência $C(X)$ por meio da seguinte expressão:

$$\langle \gamma_- | \hat{R}_X | \gamma_+ \rangle = \pi\hbar C(X - \bar{X}). \quad (2.114)$$

Para completar a fórmula da função de Wigner (2.84) devemos calcular a constante de normalização (2.80). Na realidade, falta encontrar uma expressão para o produto interno $\langle \gamma_- | \gamma_+ \rangle$. Note que é válida a relação $|\gamma_+\rangle = \hat{R}_0 \hat{T}_{-z_+} \hat{M}_{\mathbf{S}_+} |0\rangle$, o que permite usar a fórmula (2.114) calculada em $X = 0$ com a mudança $Z_+ \rightarrow -Z_+$,

$$\begin{aligned} \langle \gamma_- | \gamma_+ \rangle &= \langle \gamma_+ | \hat{R}_0 \hat{T}_{-z_+} \hat{M}_{\mathbf{S}_+} |0\rangle \\ &= g^{-1} \exp\left(-\frac{1}{8}\zeta \cdot \mathbf{G}\zeta + \frac{i}{2\hbar}\zeta \wedge \bar{X}\right). \end{aligned} \quad (2.115)$$

Neste caso fizemos as mudanças $\bar{X} \rightarrow -\zeta/2$ e $\zeta \rightarrow -2\bar{X}$.

Digressão: Função geratriz de centro

Na função complexa (2.113) está contida a informação sobre o padrão de interferência da superposição entre o par $|\gamma_{\pm}\rangle$ de estados. A separação da matriz da forma quadrática em contribuições real e imaginária, fórmula (2.101), motiva reescrever a função $C(X)$ de uma outra maneira,

$$C(X - \bar{X}) = g^{-1} W_{\bar{\sigma}}(X - \bar{X}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\Phi(X - \bar{X})\right). \quad (2.116)$$

A amplitude é definida pela função

$$W_{\bar{\sigma}}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{1}{2}[\bar{\sigma}^{-1}X]^2\right). \quad (2.117)$$

A fase é um polinômio quadrático em X da forma

$$\Phi(X - \bar{X}) = [X - \bar{X}] \cdot \bar{\mathbf{C}} [X - \bar{X}] + \zeta \wedge [X - \bar{X}] + \frac{1}{2} \zeta \wedge \bar{X}. \quad (2.118)$$

A matriz da forma quadrática $\bar{\mathbf{C}}$ é a parametrização de Cayley (2.105) da matriz simplética $\sigma_+^2 \sigma_-^{-2}$.

A fase $\Phi(X)$ pode certamente ser interpretada como uma função geratriz de centro. Esta função de centro, escrita como um polinômio quadrático em X , é a geradora (1.31) da transformação canônica

$$X_+ = \sigma_+^2 \sigma_-^{-2} X_- + \frac{1}{2} [\sigma_+^2 \sigma_-^{-2} + \mathbf{I}] \zeta. \quad (2.119)$$

Em especial, para os pontos $X_{\pm} = \pm \zeta/2 + \delta Z_{\pm}$, temos a relação

$$\sigma_+^{-2} \delta Z_+ = \sigma_-^{-2} \delta Z_-. \quad (2.120)$$

Isto significa que a função geratriz de centro $\Phi(X)$ pode ser interpretada como a geradora da transformação que leva a função $G_{\sigma_-}(X - Z_-)$ na função $G_{\sigma_+}(X - Z_+)$.

A forma do padrão de interferência da superposição entre o par $|\gamma_{\pm}\rangle$ de estados é determinada a partir da função $\Phi(X)$. Esta função determina uma superfície bidimensional. Note que podemos colocar o polinômio (2.118) na forma

$$\Phi(X) - \Phi(\bar{X}) = [X - (\bar{X} - \bar{\mathbf{C}}^{-1} \mathbf{J} \zeta)] \cdot \bar{\mathbf{C}} [X - (\bar{X} - \bar{\mathbf{C}}^{-1} \mathbf{J} \zeta)] - \zeta \cdot \bar{\mathbf{C}} \mathbf{J} \zeta. \quad (2.121)$$

Isto quer dizer que o centro da superfície, que denotamos por X_S , está localizado no ponto

$$X_S = \bar{X} - \bar{\mathbf{C}}^{-1} \mathbf{J} \zeta. \quad (2.122)$$

As curvas de nível da superfície $\Phi(X)$ no espaço de fases são as seções paralelas ao plano de fases

$$\Phi(X) = \text{constante}. \quad (2.123)$$

Analisando o determinante da matriz $\bar{\mathbf{C}}$ poderemos discernir qual superfície é determinada polinômio quadrático $\Phi(X)$. Isto é equivalente a analisar o *discriminante do polinômio*. O determinante da matriz (2.105) pode ser ágilmente manipulado como

$$\det \bar{\mathbf{C}} = \frac{\det [\sigma_+^2 \sigma_-^{-2} - \mathbf{I}]}{\det [\sigma_+^2 \sigma_-^{-2} + \mathbf{I}]} = \frac{\det [\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1} - \mathbf{I}]}{\det [\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1} + \mathbf{I}]} . \quad (2.124)$$

A matriz simplética, simétrica e positiva, $\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1}$, tem pares de autovalores reais e positivos. Denotaremos estes autovalores por $e^{\pm\varsigma}$. Consideraremos autovalores não-degenerados, $\varsigma \neq 0$, ou o mesmo que $\mathbf{S}_+ \neq \mathbf{S}_-$. Neste caso existe uma certa transformação ortogonal, $\mathbf{O} \mathbf{O}^T = \mathbf{I}$, tal que $\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1} = \mathbf{O} \mathbf{D} \mathbf{O}^T$. A matriz diagonal é escrita como $\mathbf{D} = \text{diag} (e^\varsigma, e^{-\varsigma})$. Destas considerações resulta o seguinte valor para o determinante (2.124):

$$\det \bar{\mathbf{C}} = \frac{1 - \cosh \varsigma}{1 + \cosh \varsigma} . \quad (2.125)$$

Este determinante é sempre negativo, $\det \bar{\mathbf{C}} < 0$. Logo as curvas de nível da superfície bidimensional $\Phi(X)$ têm que ser hipérbolas.

Analisemos agora a amplitude (2.117) da função $C(X)$. O determinante da matriz $\bar{\sigma}^2$, dada pela fórmula (2.102), corresponde à área coberta no espaço de fases pela função complexa $C(X)$. Manipulamos o determinante desta matriz de maneira a deixá-lo na forma

$$\det \bar{\sigma}^2 = \det \left[\frac{\sigma_+^2 + \sigma_-^2}{2} \right] = \det \sigma^2 \det \left[\frac{\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1} + \mathbf{I}}{2} \right] . \quad (2.126)$$

Com os mesmos argumentos usados no parágrafo anterior, aqueles com respeito aos autovalores da matriz $\sigma_-^{-1} \sigma_+^2 \sigma_-^{-1}$, iremos encontrar a desigualdade

$$\det \bar{\sigma}^2 = \det \sigma^2 \left[\frac{1 + \cosh \varsigma_k}{2} \right] \geq \det \sigma^2 = \frac{\hbar^2}{4} . \quad (2.127)$$

Na última igualdade usamos as relações de incerteza (1.97). Esta desigualdade estabelece que a área coberta no espaço de fases pela função cruzada $C(X)$ é maior do que a área coberta por um estado de mínima incerteza. A igualdade é válida somente quando $\varsigma = 0$, ou melhor, quando $\mathbf{S}_\pm = \mathbf{S}$.

Funções de Wigner

Ilustraremos o resultado geral da função de Wigner de uma superposição entre dois estados gaussianos de incerteza mínima com dois exemplos. Primeiro, considere a superposição entre um estado gaussiano $|\gamma_+\rangle = |Z, \mathbf{S}\rangle$ e um estado coerente $|Z_-\rangle = | - Z\rangle$. Tal estado é escrito na notação de Dirac como

$$|\mathcal{B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} (|Z_-\rangle + |\gamma_+\rangle), \quad \mathcal{N} = 2 (1 + \text{Re}[\langle Z_-|\gamma_+\rangle]). \quad (2.128)$$

A matriz simplética que representa uma transformação hiperbólica é a seguinte:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} e^{-\mu} & 0 \\ 0 & e^{\mu} \end{pmatrix}. \quad (2.129)$$

Para $\mu > 0$, esta matriz simplética estica a coordenada Q e comprime a coordenada P . A função de Wigner que representa este estado é a soma dos três termos

$$W_{|\mathcal{B}\rangle}(X) = \frac{1}{\mathcal{N}} [G_\sigma(X + Z) + 2 \text{Re}[C(X)] + G_\sigma(\mathbf{S}^{-1}[X - Z])]. \quad (2.130)$$

O primeiro e último termo da soma são funções gaussianas enquanto que o termo de interferência fica determinado pela matriz da forma quadrática

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\cosh \mu} \begin{pmatrix} e^\mu \sigma_p^{-2} & 0 \\ 0 & e^{-\mu} \sigma_q^{-2} \end{pmatrix} - \frac{2i}{\hbar} \tanh \mu \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.131)$$

e pelo fator constante,

$$g^{-1} = \cosh \mu/2, \quad \mathcal{N} = 2 \left(1 + \frac{1}{\cosh \mu/2} \right). \quad (2.132)$$

Assim, a função $C(X)$ que aparece na função de Wigner (2.130) é dada por

$$C(X) = \frac{1}{\pi \hbar \cosh \mu/2} G_\sigma([\mathbf{S}\sigma]^{-1}X) \exp\left(\frac{2i}{\hbar} QP \tanh \mu\right). \quad (2.133)$$

Na figura 2.4 mostramos o estado (2.130) para os dois casos que aparecem na figura 2.3. O fator de compressão nos dois casos vale $\mu = \ln 4$. Os dois eixos ortogonais colocados na figura correspondem aos eixos da hipérbole. No gráfico (a) o centro da hipérbole está localizado no ponto $\Delta \bar{X} = (5.7, 0)$. No gráfico (b) $\Delta \bar{X} \approx (5.7, -5.7)$.

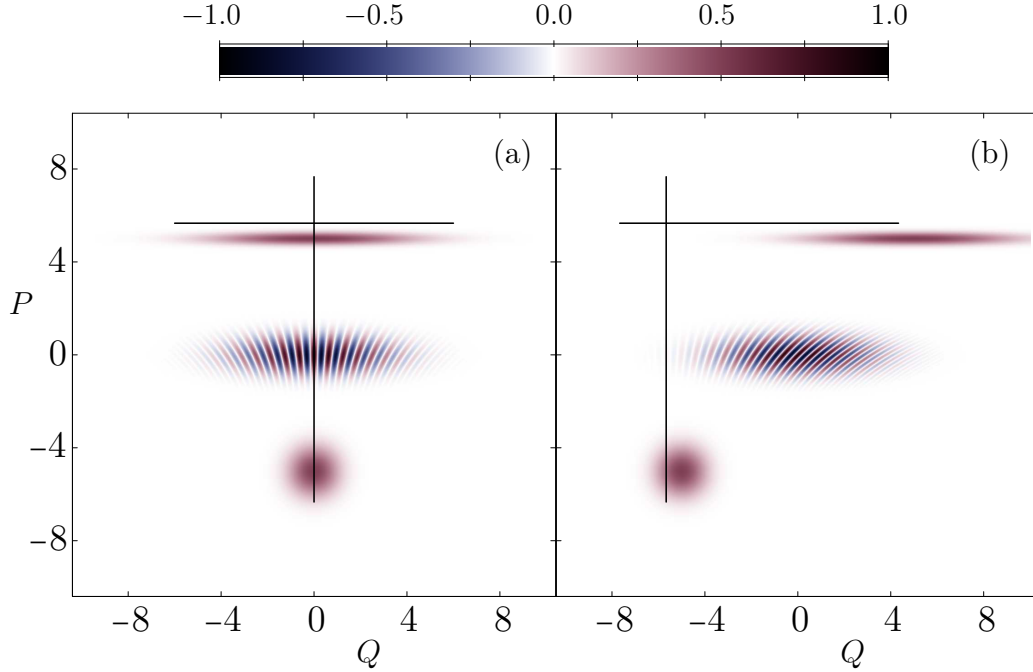


Figura 2.4: Função de Wigner $\pi\hbar W_{|\mathcal{A}\rangle}(X)$ de uma superposição entre dois estados gaussianos. Utilizamos os mesmos parâmetros da figura 2.3, sendo que o fator de compressão vale $\mu = \ln 4$. O centro da hipérbole está localizado em $\Delta\bar{X} = (5.7, 0)$ no quadro (a) e em $\Delta\bar{X} = (5.7, -5.7)$ no quadro (b).

O centro da hipérbole está localizado em $X_S = \bar{X} + \Delta\bar{X}$, fórmula (2.122). O deslocamento com respeito a coordenada centro é dada pelo vetor

$$\Delta\bar{X} = -\bar{\mathbf{C}}^{-1}\mathbf{J}\zeta = \frac{1}{2 \tanh \mu} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \zeta. \quad (2.134)$$

A forma quadrática (2.131) engloba os casos em que o estado comprimido é um autoestado de momento $\mu \rightarrow +\infty$ ou um autoestado de posição $\mu \rightarrow -\infty$. A parte real tem os seguintes limites assintóticos:

$$\lim_{\mu \rightarrow +\infty} \text{Re } \mathbf{G} = \begin{pmatrix} 2\sigma_p^{-2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{\mu \rightarrow -\infty} \text{Re } \mathbf{G} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\sigma_q^{-2} \end{pmatrix}. \quad (2.135)$$

Assim, para o autoestado de momento, a largura do termo de interferência fica $(\sigma_p^2/2, \infty)$. No caso de um autoestado de posição, teremos uma largura assintótica

$(\infty, \sigma_q^2/2)$. A posição do centro da hipérbole (2.134) tem os limites

$$\lim_{\mu \rightarrow \pm\infty} \Delta\bar{X} = \pm \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \zeta. \quad (2.136)$$

Considere um percurso de μ que parte de $+\infty$, passa por 0 e termina em $-\infty$. O centro da hipérbole parte do ponto $\Delta\bar{X}^{(\infty)}$, vai até o $+\infty$ sobre a reta $\Delta\bar{X}$ e reaparece em $-\infty$ até chegar ao ponto $\Delta\bar{X}^{(-\infty)}$. No diagrama esquemático (2.5) mostramos a localização assintótica do centro da hipérbole.

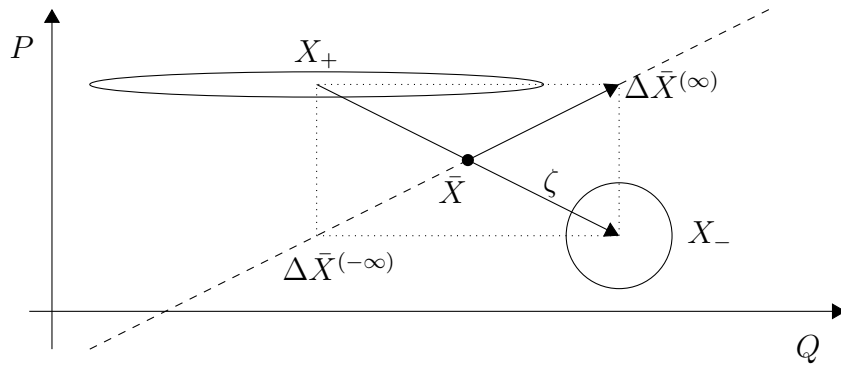


Figura 2.5: Localização do centro da hipérbole de uma superposição de dois estados gaussianos. Para um dado parâmetro de compressão μ , a posição do centro da hipérbole fica sempre sobre a reta tracejada.

Consideraremos agora um caso particular: uma superposição entre dois estados comprimidos em direções ortogonais, $|\gamma_{\pm}\rangle = |z_{\pm} = 0, \mathbf{S}^{\pm 1}\rangle$, um deles comprimido em P e o outro em Q . O estado puro

$$|\mathcal{B}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_{\pm}}} (|\gamma_{+}\rangle \pm |\gamma_{-}\rangle), \quad \mathcal{N}_{\pm} = 2 (1 \pm \text{Re}[\langle\gamma_{-}|\gamma_{+}\rangle]), \quad (2.137)$$

é um estado par/ímpar com respeito a troca de γ_{+} por γ_{-} . Escolhemos uma compressão exponencial $e^{-\mu}$ na direção Q para o estado $|\gamma_{-}\rangle$ e a mesma compressão na direção P para o estado $|\gamma_{+}\rangle$. Esta descrição é representada pela matriz simplética (2.129) e sua inversa. A função de Wigner par/ímpar $W_{\pm}(X)$ deste nosso exemplo é a seguinte:

$$W_{\pm}(X) = \frac{1}{\mathcal{N}_{\pm}} [G_{\sigma}(\mathbf{S}X) \pm 2\text{Re}[C(X)] + G_{\sigma}(\mathbf{S}^{-1}X)] \quad (2.138)$$

A matriz da forma quadrática do termo de interferência da função de Wigner é a seguinte:

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\cosh 2\mu} \sigma^{-2} - \frac{2i}{\hbar} \tanh 2\mu \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.139)$$

Com o objetivo de escrever o polinômio característico, e portanto encontrar os autovalores da inversa dessa matriz, calculamos o traço e o determinante (usando $\sigma_q = \sigma_p = \hbar/2$)

$$\text{Tr } \mathbf{G}^{-1} = \frac{\hbar}{\cosh 2\mu}, \quad \det \mathbf{G}^{-1} = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.140)$$

Desta forma temos a equação característica e suas respectivas raízes λ e λ^* :

$$\lambda^2 - \frac{\hbar}{\cosh 2\mu} \lambda + \frac{\hbar^2}{4} = 0, \quad \lambda = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\cosh 2\mu} + i |\tanh 2\mu| \right). \quad (2.141)$$

O fator g assume o valor

$$g^{-1} = \cosh \mu. \quad (2.142)$$

Conseqüentemente, a constante de normalização vale

$$\mathcal{N}_{\pm} = 2 \left(1 \pm \frac{1}{\cosh \mu} \right). \quad (2.143)$$

Finalmente, o termo de interferência da função da Wigner pode ser escrito como

$$C(X) = \frac{2}{\pi \hbar \cosh \mu} \text{Re} \left[\exp \left(-\frac{1}{2} X \cdot (\cosh 2\mu \sigma)^{-1} X - \frac{2i}{\hbar} \tanh 2\mu QP \right) \right]. \quad (2.144)$$

O centro da hipérbole das franjas de interferência fica localizado na origem, uma vez que $\bar{X} + \Delta \bar{X} = 0$. Na figura 2.6 é mostrada a função de Wigner (a) par e (b) ímpar.

A análise feita nesta seção foi dirigida para o estudo de uma superposição entre estados gaussianos. Desde o começo, consideramos um estado coerente de um oscilador harmônico unidimensional. Entretanto, poderíamos ter considerado muitos modos de vibração, cada um com uma frequência natural ω_k . No caso de muitos graus de liberdade, todas as fórmulas deduzidas neste capítulo continuam

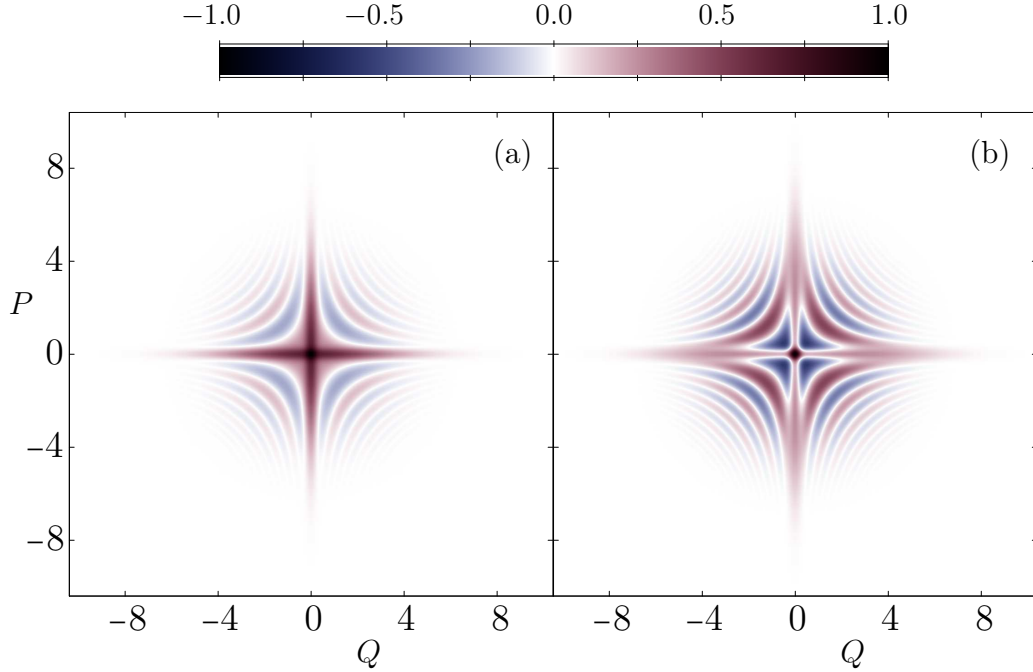


Figura 2.6: Função de Wigner $\pi\hbar W_{\pm}(X)$ da superposição entre dois estados gaussianos com incertezas $\sigma_q = \sigma_p = 0.7$. Os estados estão localizados em $Z_{\pm} = (0, 0)$. Um deles está comprimido na direção vertical e o outro na horizontal; em ambos os casos o fator de compressão vale $\mu = \ln 4$. Na figura mostramos (a) o estado par $W_+(X)$ e (b) o estado ímpar $W_-(X)$.

sendo válidas. Destacamos que o resultado do termo de interferência (2.113) da função de Wigner é o mesmo daquele encontrado em [38], porém Littlejohn deduziu esta fórmula na representação de coordenadas. Aqui nós não utilizamos os blocos das matrizes simpléticas \mathbf{S}_{\pm} .

Capítulo 3

Dinâmica Semiclássica

”For any dynamical system with a classical analogue, a state for which the classical description is valid as an approximation is represented in quantum mechanics by a wave packet, all the coordinates and momenta having approximated numerical values, whose accuracy is limited by Heisenberg uncertainty. Now Schrödinger’s wave equation fixes how such a wave packet varies with time, so in order that the classical description may remain valid, the wave packet should remain a wave packet and should move according to the laws of classical mechanics.”

P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, p. 121 [41].

3.1 Aproximação de Fase Estacionária

No regime semiclássico da dinâmica de um sistema, a análise pode ser feita por meio da teoria WKB dependente do tempo [4, 5, 41, 42]. Destaca-se, nesta abordagem, a descrição geométrica da evolução de um estado não-estacionário. Utilizando a teoria WKB, iremos calcular uma aproximação semiclássica para a evolução de um estado gaussiano.

3.1.1 Introdução

A abordagem semiclássica por meio da teoria WKB dependente do tempo usa o conceito de variedade lagrangeana [3, 15, 40]. Em geral, uma variedade (p, q) é chamada de lagrangeana se $p = \nabla_q S(q)$, onde $S(q)$ é a função geratriz. Para o caso em que iremos considerar, sistemas com um grau de liberdade, qualquer curva suave no espaço de fases é uma variedade lagrangeana. A cada variedade lagrangeana \mathcal{C} associamos uma função geratriz $S(q)$, da qual podemos extrair a coordenada conjugada, $p = dS/dq$.

Em um espaço de configuração q_0 , a função de onda associada a uma variedade lagrangeana \mathcal{C}_0 pode ser escrita na forma padrão¹

$$\psi_0^{SC}(q_0) = A_0(q_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0(q_0)\right). \quad (3.1)$$

Esta forma particular de função de onda fica determinada por um amplitude $A_0(q_0)$ e por uma ação $S_0(q_0)$, ambas funções reais e suaves. Este tipo de estado semiclássico deve ser interpretado como a contribuição de ordem mais baixa em \hbar de um certo estado quântico. Consideraremos uma curva \mathcal{C}_0 que não contem cáusticas, i.e., a função $p_0(q_0) = dS_0/dq_0$ pode ser invertida. Desta maneira, a função geratriz é única, a menos de uma constante $S_0(q')$,

$$S_0(q_0) = S_0(q') + \int_{q'}^{q_0} p dq. \quad (3.2)$$

A integração deve ser feita ao longo da curva \mathcal{C}_0 , cujos extremos são q' e q_0 . Quando a curva \mathcal{C}_0 possuir cáusticas, podemos sempre dividi-lá em ramos livres de cáusticas. Neste caso, devemos atribuir para cada uma destas regiões uma contribuição do tipo (3.1), com ramos $p_j(q) = dS_j/dq$.

A dinâmica semiclássica do estado (3.1), para intervalos de tempos curtos o suficiente para garantir a ausência de cáusticas, preserva a forma semiclássica

$$\psi_t^{SC}(q) = A_t(q) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_t(q)\right). \quad (3.3)$$

¹O sobrescrito *SC* é a abreviação da palavra *SEMICLÁSSICO*.

A fase em instante posterior $S_t(q)$, da qual podemos determinar a variedade lagrangeana \mathcal{C}_t por meio da relação $p(q) = dS_t/dq$, é obtida quando resolvemos a equação de Hamilton-Jacobi

$$H\left(\frac{\partial S_t(q)}{\partial q}, q, t\right) + \frac{\partial S_t(q)}{\partial t} = 0, \quad (3.4)$$

com a condição de contorno inicial dada pela ação (3.2). A solução desta equação é a função principal de Hamilton. A forma explícita desta função fica em termos de uma integral de caminho ao longo da trajetória \mathcal{T} ,

$$S_t(q) = S_0(q_0) + \int_{\mathcal{T}} p dq - H dt. \quad (3.5)$$

A amplitude do estado (3.3) deve obedecer a equação de continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}[A_t(q)]^2 + \frac{\partial}{\partial q}([A_t(q)]^2 v_t(q)) = 0. \quad (3.6)$$

O campo de velocidades é dado por $v_t(q) = \partial H(q, p, t)/\partial p$. Uma vez que podemos interpretar $|\psi_t(q)|^2 = [A_t(q)]^2$ como um densidade, vemos que o transporte é dado por

$$A_t(q) = A_0(q_0) \left| \frac{\partial q}{\partial q_0} \right|^{-1/2}. \quad (3.7)$$

Esta relação é obtida quando usamos que $|\psi_t(q)|^2 dq = |\psi_0(q_0)|^2 dq_0$.

Para os nossos propósitos, é conveniente escrever a função geratriz (3.5) como uma integral de caminho ao longo da curva \mathcal{C}_t . O teorema de Poincaré-Cartan estabelece que a integral da diferencial $PdQ - Hdt$ em um circuito fechado e irredutível, no espaço de fases estendido, é invariante [15, 16]. Visto que a superfície determinada por este circuito fechado é composta pelas linhas rotacionais da forma $PdQ - Hdt$,

$$\oint P dQ - H dt = 0. \quad (3.8)$$

Considerando a curva \mathcal{C}_t , imagem da curva inicial \mathcal{C}_0 , podemos fazer um integral de caminho fechada no espaço de fases estendido - veja a figura 3.1. A curva fechada

consiste dos seguintes segmentos: \mathcal{C}_t no sentido horário, \mathcal{T} entre os instantes t e $t = 0$, \mathcal{C}_0 no sentido anti-horário e \mathcal{C}' entre os instantes $t = 0$ e t mantendo q' constante. Deste circuito, podemos concluir que

$$\int_{\mathcal{C}_t} P dQ - \int_0^t H(q', p', t') dt' = \int_{\mathcal{C}_0} P dQ + \int_{\mathcal{T}} P dQ - H dt. \quad (3.9)$$

A partir desta igualdade e da solução (3.5),

$$S_t(q) = \int_{q'}^q P dQ - \int_0^t H(q', p', t') dt' + S_0(q'). \quad (3.10)$$

A integração entre os extremos q' e q deve ser feita ao longo da curva \mathcal{C}_t . Note que

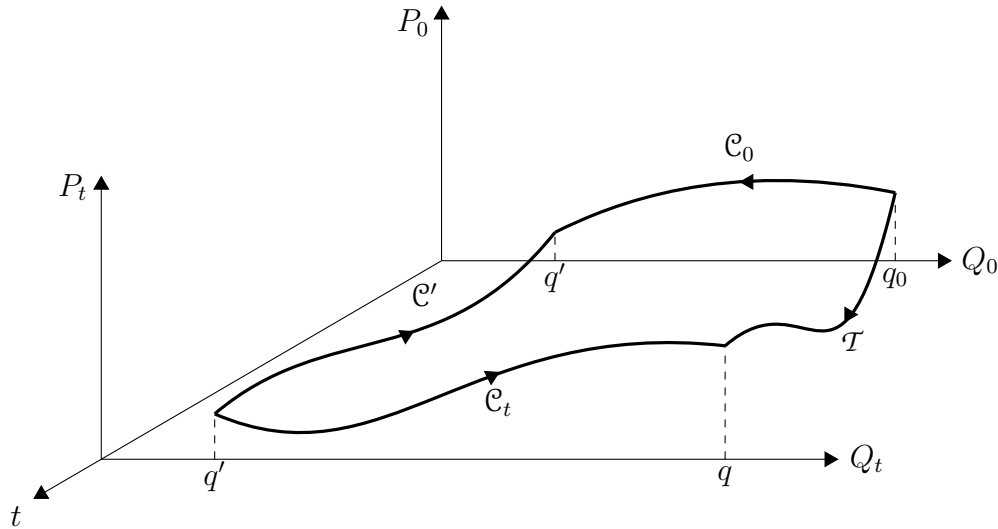


Figura 3.1: Diagrama que mostra um circuito fechado no espaço de fase estendido. O circuito consiste de quatro segmentos: as duas curvas \mathcal{C}_0 e \mathcal{C}_t , a órbita clássica \mathcal{T} e uma curva qualquer \mathcal{C}' com q' fixo.

a função geratriz escrita desta forma depende da coordenada q somente através da integral de caminho.

3.1.2 Função de Wigner no Limite Semiclássico

Nesta seção iremos deduzir, por meio do método de fase estacionária, a evolução semiclássica da função de Wigner de um estado gaussiano com incertezas $\Delta q = L$ e

$\Delta p = \ell = \hbar/2L$. A função de onda deste estado é a função gaussiana

$$\psi_0(q_0) = (2\pi L^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{q_0^2}{4L^2}\right). \quad (3.11)$$

Uma comparação deste estado com a função WKB padrão (3.1) revela uma amplitude gaussiana $\psi_0(q_0) = A_0(q_0)$ e uma fase $S_0(q_0) = 0$. Portanto, a variedade inicial será $p_0(q_0) = 0$. A evolução deste estado é representada por um outro estado na forma padrão (3.3).

A maneira de obter a função de Wigner a partir da função de onda $\psi_t(q)$ é usando a fórmula

$$W_t^{SC}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-2iuP/\hbar} \psi_t^*(Q-u) \psi_t(Q+u). \quad (3.12)$$

Substituindo a função de onda (3.3) nesta expressão, encontramos que

$$W_t^{SC}(X) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du A_t(Q-u) A_t(Q+u) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \phi(u, X)\right), \quad (3.13)$$

sendo que a fase é dada por

$$\phi(u, X) = S_t(Q+u) - S_t(Q-u) - 2Pu. \quad (3.14)$$

As funções geratrizes desta equação podem ser expressas em termos de uma integral de caminho ao longo da variedade \mathcal{C}_t , que neste caso é a imagem da reta $p_0(q_0) = 0$. Para isto, substituímos a fórmula (3.10),

$$\phi(u, X) = \int_{Q-u}^{Q+u} p dq - 2Pu. \quad (3.15)$$

O próximo passo é calcular o termo líder da função de Wigner (3.13) no limite assintótico em que $\hbar \rightarrow 0$. Neste regime, o integrando oscila rapidamente e podemos usar o método de fase estacionária. Este método consiste em guardar somente as contribuições dos pontos estacionários da fase no integrando (3.13). Os pontos estacionários u^* são encontrados a partir da primeira variação da fase, $d\phi(u^*, X)/du = 0$. Derivando a equação (3.15), obtemos a condição de centro

$$p(Q+u) + p(Q-u) = 2P. \quad (3.16)$$

Note que se u^* verifica a condição acima, $-u^*$ também tem que verificar. O par de pontos estacionários $\pm u^*$ nos permite definir

$$q_{\pm} = Q \pm u^* \quad \text{e} \quad p_{\pm} = \frac{dS_t(q_{\pm})}{dq}. \quad (3.17)$$

A condição de fase estacionária (3.16) é equivalente a condição de centros e cordas

$$x_{\pm} = \begin{pmatrix} p_{\pm} \\ q_{\pm} \end{pmatrix} = X \pm \frac{1}{2} \zeta, \quad (3.18)$$

sendo que $\zeta_q = 2u^*$. A fase calculada nos pontos estacionários, $\phi(\pm u^*, X)$, corresponde à área no espaço de fases entre a curva \mathcal{C}_t e a corda ζ . A área pode ser calculada de duas maneiras,

$$\mathcal{A}_t(X) = \int_{q_-}^{q_+} p dq - P \zeta_q = Q \zeta_p - \int_{p_-}^{p_+} q dp. \quad (3.19)$$

A segunda destas igualdades pode ser deduzida quando usamos a diferencial $d(pq) =$

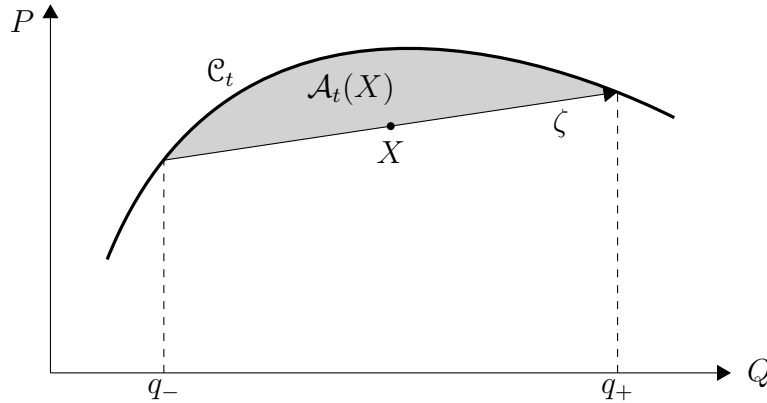


Figura 3.2: A área $\mathcal{A}_t(X)$ entre a curva \mathcal{C}_t e a corda ζ determina a fase da função de Wigner semiclássica $W_t^{sc}(X)$ no instante t .

$pdq + qdp$ e em seguida calculamos a integral por partes. Pode-se juntar a derivada de segunda ordem da fase (3.15), $\phi''(\pm u^*, X)$, com as amplitudes (3.7). A combinação

calculada nos pontos estacionários dá

$$\frac{A_t(q_+) A_t(q_-)}{|\phi''(\pm u^*, X)|^{1/2}} = A_0(q_+) A_0(q_-) \left| \frac{\frac{\partial q_0}{\partial q_+} \frac{\partial q_0}{\partial q_-}}{\frac{\partial p_+}{\partial q_+} - \frac{\partial p_-}{\partial q_-}} \right|^{1/2} = \frac{A_0(q_+) A_0(q_-)}{|v_+ \wedge v_-|^{1/2}}. \quad (3.20)$$

Nesta igualdade definimos os vetores tangentes $v_{\pm} = dX_{\pm}/dq_0$. As duas contribuições para o limite semiclássico da função de Wigner (3.13) são uma complexo conjugada da outra, determinadas por $\pm u^*$. Caso as amplitudes variem mais devagar com \hbar do que a fase, podemos aproximá-las por seus valores calculados nos pontos de fase estacionária (3.20). Assim, o resultado do método de fase estacionária em (3.13) fica

$$W_t^{sc}(X) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi\hbar}} \frac{A_0(q_+) A_0(q_-)}{|v_+ \wedge v_-|^{1/2}} \cos\left(\frac{\mathcal{A}_t(X)}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.21)$$

Este é o limite assintótico em que $\hbar \rightarrow 0$ da função de Wigner de um estado inicial gaussiano. Isto significa que em ordem mais baixa na constante de Planck, o resultado exato tem um dependência $W_t(X) = W_t^{sc}(X) + \mathcal{O}(\hbar^{1/2})$. Quando os vetores tangentes v_{\pm} forem paralelos, a fórmula (3.21) diverge. Isto pode ocorrer em dois casos: (i) no limite de pequenas cordas $|\zeta| \rightarrow 0$ e (ii) quando existirem duas ou mais cordas que passam pelo ponto X do espaço de fase. Iremos nos referir aos pontos X onde $W_t^{sc}(X)$ diverge como *pontos de cáustica da função de Wigner semiclássica*.

Esta análise semiclássica remonta o trabalho de Berry [43], que realizou a construção geométrica da função de Wigner semiclássica para os autoestados dos sistemas integráveis. Pouco tempo depois, Berry e Balazs estenderam o resultado para a evolução da função de Wigner de um estado inicial não-estacionário [4]. A diferença entre o resultado deles e o aqui apresentado é que nos escolhemos uma amplitude inicial diferente (3.11), apropriada para a evolução de um estado inicial gaussiano.

3.2 Propagação Semiclássica Uniforme

O procedimento usual para calcular a função de Wigner semiclássica nos seus pontos de cáustica é elaborar uma aproximação uniforme ou de transição [43], isto é, uma aproximação semiclássica não-singular numa região na vizinhança da cáustica. Entretanto, aqui iremos apresentar um método que nos permitirá obter uma aproximação não singular no espaço de fase todo. Este método consiste em usar a evolução de uma superposição entre um conjunto de estados de incerteza mínima.

3.2.1 Decomposição de Estados Gaussianos

Para sistemas com um grau de liberdade, é sempre possível decompor um estado quântico em termos de um superposição unidimensional entre um conjunto de estados de incerteza mínima. Esta propriedade foi demonstrada em [44]. Mais tarde, encontrou-se uma base ortonormal de estados que permite fazer a decomposição [45, 46, 47]. Outros trabalhos que estão relacionados com este assunto podem ser encontrados em [48, 49]. Esta decomposição unidimensional tem a vantagem de ser única. Para os nossos propósitos, usaremos a decomposição de um estado gaussiano em termos de uma superposição unidimensional de um conjunto de estados coerentes.

A afirmação do parágrafo anterior estabelece uma relação entre um estado gaussiano centrado na origem $|\gamma\rangle$, de incerteza $\Delta q = L$, e um subconjunto dos estados coerentes $|z\rangle$, que serão denotados por $|Q\rangle = |Q, \mathcal{P} = 0\rangle$. Os estados $|Q\rangle$ têm incertezas $\Delta q = d$ e estão localizados sobre o eixo Q do espaço de fase. O diagrama esquemático desta decomposição é mostrado na figura 3.3. A decomposição é dada por

$$|\gamma\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) |Q\rangle. \quad (3.22)$$

Esta superposição deve ter um peso $F_{L,d}(Q)$ para cada estado gaussiano $|Q\rangle$ da

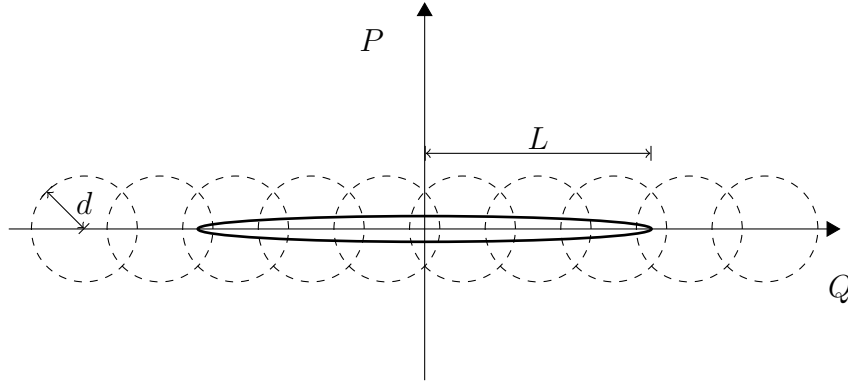


Figura 3.3: Diagrama da decomposição de um estado gaussiano no espaço de fases. A incerteza dos estados "redondos" valem $\Delta q = \Delta p = d$ e a do estado comprimido valem $\Delta q = L$ e $\Delta p = \ell = \hbar/2L$.

decomposição. Esta função também é uma gaussiana,

$$F_{L,d}(Q) = \left[\frac{L}{4\pi d(L^2 - d^2)} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{Q^2}{4(L^2 - d^2)}\right). \quad (3.23)$$

A relação (3.22) pode ser deduzida na representação de coordenadas. Para isto, considere a seguinte função de onda padrão:

$$\gamma(q) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} e^{-q^2/4}, \quad \gamma_{\Delta q}(q) = (\Delta q)^{-1/2} \gamma\left(\frac{q}{\Delta q}\right). \quad (3.24)$$

A demonstração é feita a partir da igualdade

$$e^{-q^2/4L^2} = \frac{L}{2\sqrt{\pi(L^2 - d^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} dQ e^{-Q^2/4(L^2 - d^2) - (q-Q)^2/4d^2}. \quad (3.25)$$

Esta fórmula é obtida quando completamos um quadrado e em seguida resolvemos uma integral gaussiana, sempre que $L \geq d$. Ao multiplicar o fator $(2\pi L^2)^{-1/4}$ em ambos os lados da igualdade (3.25), reconhecemos do lado esquerdo a função $\gamma_L(q)$ e do lado direito as funções $\gamma_d(q - Q)$. De fato, teremos a relação (3.22) na representação de coordenadas,

$$\gamma_L(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) \gamma_d(q - Q). \quad (3.26)$$

Esta relação estabelece que a função de onda $\gamma_L(q)$, com um desvio padrão $\Delta q = L$, pode ser escrita de maneira equivalente como uma superposição contínua do conjunto de gaussianas $\gamma_d(q - Q)$, todas com um desvio padrão $\Delta q = d$. As gaussianas usadas na superposição estão centradas no ponto Q da reta $P(Q) = 0$ no espaço de fase. Note a liberdade que temos em escolher o parâmetro d . A fórmula (3.26) também pode ser deduzida na representação dos momentos.

3.2.2 Aproximação de Órbitas Adjacentes (AOA)

O segundo passo do método de propagação semiclássica consiste em usar a dinâmica linearizada localmente no centro de cada um dos estados da decomposição. Isto é justificado porque as incertezas $\Delta q \sim \Delta p \sim \sqrt{\hbar}$ têm comprimentos pequenos, ou seja, comparável a escala quântica. Portanto, usaremos a aproximação de órbitas adjacentes para cada estado da superposição contínua (3.22).

A evolução temporal da decomposição (3.22) do estado gaussiano $|\gamma\rangle$, determinada pelo operador de evolução $\hat{U}_t = e^{-it\hat{H}/\hbar}$, pode ser representada da seguinte forma:

$$|\gamma_t\rangle = \hat{U}_t |\gamma\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) \hat{U}_t |Q\rangle. \quad (3.27)$$

Esta expressão é exata para qualquer dinâmica. No entanto, ao menos como uma aproximação para a evolução, podemos usar a aproximação de órbitas adjacentes para propagar cada um dos estados envolvidos na decomposição. Em outras palavras, cada estado inicial $|Q\rangle$ evoluirá com um operador $\hat{U}_t(Q)$ parametrizado por Q . Desta forma, o procedimento que adotamos consiste de dois passos, a decomposição e a propagação linear. Assim, o estado que resulta desta evolução pode ser escrito como

$$|\gamma_t\rangle \approx |\gamma_t^{AOA}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) \hat{U}_t(Q) |Q\rangle. \quad (3.28)$$

O estado $|\gamma_t^{AOA}\rangle$ serve como uma aproximação semiclássica do estado $|\gamma_t\rangle$. Os operadores de evolução temporal, na AOA (2.42), são:

$$\hat{U}_t(Q) = e^{i\Gamma_t(Q)/\hbar} \hat{T}_{z_t(Q)} \hat{M}_{S_t(Q)} \hat{T}_{z_0}^\dagger. \quad (3.29)$$

Usamos o vetor $Z_0 = (Q, 0)^T$. Assim como os estados coerentes $|Q\rangle$, os operadores $\hat{U}_t(Q)$ também ficam parametrizados por Q .

A aproximação semiclássica $|\gamma_t^{AOA}\rangle$ para o estado $|\gamma_t\rangle$ ficará melhor na medida em que $\hbar \rightarrow 0$. Este limite pode ser enunciado da seguinte maneira: Fazemos $\hbar \rightarrow 0$, mantendo constante o tempo t e também a incerteza L (independente de \hbar). Uma maneira de quantificar a validade da aproximação é usar a fidelidade

$$\mathcal{F}_t(\hbar) = \left| \langle \gamma_t^{AOA} | \gamma_t \rangle \right|^2, \quad \mathcal{F}_0(\hbar) = 1. \quad (3.30)$$

Por causa da decomposição (3.22), no instante inicial a fidelidade é igual a unidade. Portanto, teremos no estágio inicial de uma dinâmica caótica que

$$\mathcal{F}_t(\hbar \rightarrow 0) = 1 - \epsilon(t; \hbar; \kappa). \quad (3.31)$$

O parâmetro κ regula a largura dos estados gaussianos da decomposição, $d = \kappa \sqrt{\hbar/2}$. Podemos então dizer que a fidelidade da aproximação AOA pode ser garantida sob certas condições.

3.2.3 Função de Wigner na AOA

A função de Wigner do estado $|\gamma_t\rangle$, equação (3.27), é calculada por meio do valor esperado

$$\pi \hbar W_t(X) = \langle \gamma_t | \hat{R}_X | \gamma_t \rangle. \quad (3.32)$$

Esta é a função de Wigner para um estado $|\gamma_t\rangle$ arbitrário. Iremos apresentar uma maneira de calcular a função de Wigner do estado $|\gamma_t^{AOA}\rangle$, dado pela fórmula (3.28). De início, usamos a definição

$$\pi \hbar W_t^{AOA}(X) = \langle \gamma_t^{AOA} | \hat{R}_X | \gamma_t^{AOA} \rangle. \quad (3.33)$$

Um par de estados $|\mathcal{Q}_\pm\rangle$, depois de evoluídos por um instante t na aproximação AOA com os operadores (3.29), serão denotados por

$$|\gamma_t(\mathcal{Q}_\pm)\rangle = \hat{U}_t(\mathcal{Q}_\pm) |\mathcal{Q}_\pm\rangle. \quad (3.34)$$

Isto nos permite calcular a função de Wigner na AOA como

$$\pi\hbar W_t^{AOA}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ_+ \int_{-\infty}^{\infty} dQ_- F_{L,d}(Q_+) F_{L,d}(Q_-) \langle \gamma_t(Q_-) | \hat{R}_X | \gamma_t(Q_+) \rangle. \quad (3.35)$$

O procedimento permite calcular $W_t^{AOA}(X)$ como uma dupla integral ao longo do eixo Q do espaço de fases. O elemento de matriz que aparece dentro das integrais nada mais é do que o termo de correlação definido em (2.116). A partir desta observação, vemos que a expressão (3.35) pode ser compactada da seguinte forma:

$$W_t^{AOA}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ_+ \int_{-\infty}^{\infty} dQ_- F_{L,d}(Q_+) F_{L,d}(Q_-) C_t(X - \bar{X}_t) e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar}. \quad (3.36)$$

Vemos então que a função de Wigner na AOA é obtida através de uma média das correlações $C_t(X - \bar{X}_t) e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} = \langle \gamma_t(Q_-) | \hat{R}_X | \gamma_t(Q_+) \rangle / \pi\hbar$, sendo que a densidade de probabilidade a ser usada vale $F_{L,d}(Q_+) F_{L,d}(Q_-)$. A função de correlação é calculada segundo a fórmula (2.116),

$$C_t(X - \bar{X}_t) = [g_t(Q_{\pm})]^{-1} W_{\bar{\sigma}_t(Q_{\pm})}(X - \bar{X}_t) e^{i\Phi_t(X - \bar{X}_t; Q_{\pm})/\hbar}. \quad (3.37)$$

Esta função consiste do produto de uma amplitude com um termo de fase. O expoente é uma forma quadrática no vetor X . Contudo, nas variáveis de integração Q_{\pm} , a dependência é não-linear.

3.3 Modelo Parabólico

O modelo que apresentaremos nesta seção consiste de um hamiltoniano cúbico na variável P . A razão pela qual estudaremos este simples modelo é porque os sistemas clássico e quântico têm solução analítica. No caso quântico, a solução para a função de Wigner pode ser escrita em termos de uma função de Airy. Assim, temos a possibilidade de comparar o resultado quântico com as duas aproximações semiclássicas, a aproximação de fase estacionária e a aproximação de órbitas adjacentes.

O hamiltoniano do modelo parabólico em questão é o seguinte:

$$H = \frac{1}{3} \Lambda P^3. \quad (3.38)$$

As equações de Hamilton que determinam o movimento clássico são

$$\begin{pmatrix} \dot{P} \\ \dot{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \Lambda P^2 \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

A solução para o sistema de equações diferenciais acima, para uma dada condição inicial $X_0 = (P_0, Q_0)$, corresponde a um cisalhamento não linear,

$$X_t = \begin{pmatrix} P_0 \\ Q_0 + \Lambda t P_0^2 \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

A variável P é uma constante de movimento. Pretendemos analisar a evolução das distribuições de probabilidades. Devemos então procurar as distribuições de probabilidades clássicas que são soluções da equação de Liouville (1.7),

$$\frac{\partial}{\partial t} W_t^{CL}(X) = -\Lambda P^2 \frac{\partial}{\partial Q} W_t^{CL}(X), \quad (3.41)$$

com a condição inicial $W_0^{CL}(X)$. Esta equação diferencial parcial (EDP) contém somente um termo de transporte na direção Q do espaço de fase, (3.39), que tem uma dependência quadrática com a constante P . Não é difícil de ver que as soluções são dadas pelo transporte da distribuição inicial, $W_t^{CL}(X) = W_0^{CL}(Q - \Lambda t P^2, P)$.

A versão quântica deste modelo é obtida por meio da regra de quantização usual: $H(P) \rightarrow \hat{H}(\hat{p}) = \Lambda \hat{p}^3/3$. A evolução da função de Wigner é determinada pela equação de Wigner-Moyal (1.110), que neste caso é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial t} W_t(X) = -\Lambda P^2 \frac{\partial}{\partial Q} W_t(X) - \frac{\Lambda \hbar^2}{12} \frac{\partial^3}{\partial Q^3} W_t(X). \quad (3.42)$$

Note que além do termo de transporte aparece um outro termo de derivada de terceira ordem. Na versão quântica deste problema devemos resolver a EDP (3.42) para uma distribuição inicial $W_0(X)$.

3.3.1 Solução Analítica

Usaremos o fato de que os autoestados do operador \hat{p} são também autoestados de energia, $\hat{H}|p\rangle = \Lambda p^3/3|p\rangle$, com espectro contínuo. Evidentemente, o operador de evolução é diagonal na base de momentos:

$$\hat{U}(t)|p\rangle = \exp\left(-\frac{i}{3\hbar}\Lambda t p^3\right)|p\rangle. \quad (3.43)$$

Analisaremos a evolução de um estado comprimido em Q , que tem uma largura L na direção P do espaço de fase. Denotando este como $|\phi_0\rangle$, a função de onda $\phi_0(p) = \langle p|\phi_0\rangle$ na representação dos autoestados de momento é uma gaussiana da forma

$$\phi_0(p) = (2\pi L^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{p^2}{4L^2}\right). \quad (3.44)$$

Para este estado inicial, a evolução é calculada a partir da fórmula (3.43),

$$\phi_t(p) = (2\pi L^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{p^2}{4L^2} - \frac{i}{3\hbar}\Lambda t p^3\right). \quad (3.45)$$

A função de Wigner pode ser calculada a partir da expressão

$$\pi\hbar W_t(X) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-2isQ/\hbar} [\phi_t(P+s)]^* \phi_t(P-s). \quad (3.46)$$

Se inserirmos a função de onda $\phi_t(p)$, fórmula (3.45), na definição acima, encontraremos

$$\pi\hbar W_t(X) = e^{-P^2/2L^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{\sqrt{2\pi L^2}} e^{-2i/\hbar(\Lambda t s^3/3 - s[Q - Q_t(P)]) - s^2/2L^2}. \quad (3.47)$$

Nesta equação definimos a curva $Q_t(P) = \Lambda t P^2$, que determina uma parábola no espaço de fase. A solução pode ser escrita em termos da função de Airy porque a integral da equação (3.47) é uma representação integral da forma (B.12). A solução da EDP (3.42), que em $t = 0$ é uma função gaussiana, é dada pela expressão

$$\pi\hbar W_t(X) = \sqrt{2\pi\varepsilon} e^{-Q/2\Lambda t L^2 + \varepsilon^3/12} \text{Ai}\left(\frac{\varepsilon^2}{4} - \frac{[Q - Q_t(P)]}{L^2 \varepsilon \Lambda t}\right), \quad (3.48)$$

onde definimos o parâmetro

$$\varepsilon = \frac{1}{L^2} \left[\frac{\hbar}{2\Lambda t} \right]^{2/3}. \quad (3.49)$$

A solução (3.48) é dada por uma função de Airy deslocada e amortecida exponencialmente na direção Q . A função $W_t(X)$ assume valores positivos e negativos, sendo que as oscilações ocorrem na medida em que nos afastamos da curva $Q_t(P)$. Mais ainda, a função de Wigner oscila toda vez que a distância $Q - Q_t(P)$ ultrapassar um valor da ordem de $\hbar^{2/3}$.

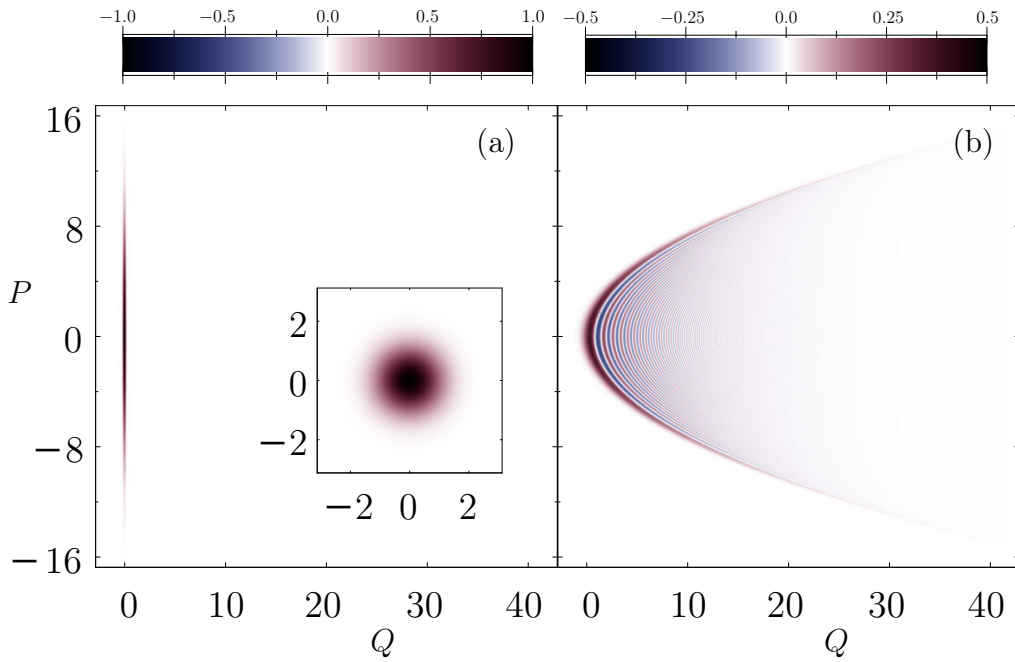


Figura 3.4: Função de Wigner $[\pi\hbar W_t(X)]$ do modelo parabólico. O quadro menor da figura (a) mostra um estado coerente “redondo”, de incertezas $\sigma_q = \sigma_p = 0.7$, o que determina a constante de Planck $\hbar = 1.0$. No instante inicial, figura (a), temos um estado comprimido em Q , com incerteza $L = 5.0$ na direção P . Na figura (b) mostramos o estado no instante $t = 6$, com um parâmetro $\Lambda = 0.03$.

No quadro menor da figura 3.4, mostramos um estado coerente “redondo”, $\sigma_q = \sigma_p = 0.7$. O estado gaussiano inicial, (3.44), de incertezas $\ell = 0.1$ e $L = 5.0$ nas

direções Q e P , respectivamente, é mostrado na figura (a). A figura (b) mostra a função de Wigner (3.48) no instante $t = 6$.

3.3.2 Aproximação de Fase Estacionária

O método WKB desenvolvido na introdução deste capítulo serve para calcular o termo líder $W_t^{sc}(X)$ da expansão assintótica em \hbar da função de Wigner (3.48). Inicialmente, a variedade lagrangeana considerada é a reta \mathcal{C}_0 no espaço de fase, determinada pela condição $Q_0(P) = 0$. A imagem desta reta é a parábola \mathcal{C}_t , determinada pelos pontos do espaço de fase que verificam $Q_t(P) = \Lambda t P^2$. Veja a ilustração na figura 3.5. Note que a concavidade depende do tempo, $Q_t''(P) = 2\Lambda t$. A aproximação WKB *primitiva* na forma padrão (3.3) é válida somente no lado côncavo desta variedade, ou seja, para $Q > Q_t(P)$, onde temos dois pontos estacionários distintos.

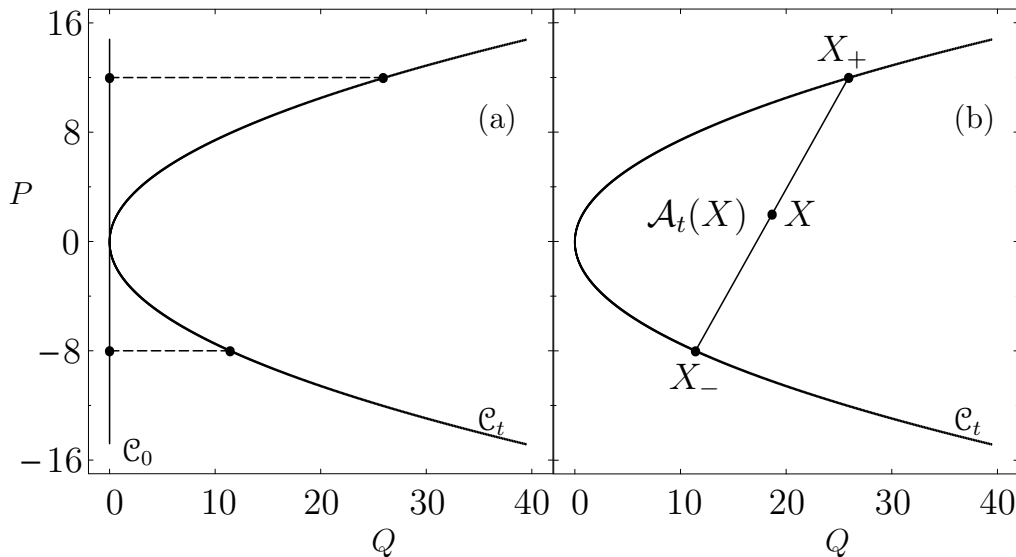


Figura 3.5: Variedade lagrangeana inicial $Q_t(P) = 0$ em $t = 0$ e a sua imagem $Q_t(P) = \Lambda t P^2$ em $t = 6$ (e $\Lambda = 0.03$), figura (a). Duas órbitas são mostradas. Na figura (b), mostramos os dois extremos X_{\pm} da corda que passa pelo ponto X . A área $\mathcal{A}_t(X)$ entre a corda $\zeta_t(X)$ e a parábola determina a fase da função de Wigner no ponto X .

Considere o ponto X do espaço de fase onde desejamos calcular o valor da função de Wigner semiclássica. Se usarmos a expressão (3.21), devemos então determinar os extremos $X_{\pm} \in \mathcal{C}_t$ da corda ζ_t que passa por X . Na figura 3.5 são mostrados os pontos em questão. Estes extremos são calculados por meio da relação implícita

$$X_{\pm} = \begin{pmatrix} P_{\pm} \\ Q_t(P_{\pm}) \end{pmatrix} = X \pm \frac{1}{2} \zeta_t(X). \quad (3.50)$$

O centro X vale simplesmente

$$X = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} P_+ + P_- \\ \Lambda t (P_+^2 + P_-^2) \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

A corda $\zeta_t(X) = X_+ - X_-$ que conecta os dois pontos, pode ser expressa em termos do centro,

$$\zeta_t(X) = \frac{2}{\sqrt{\Lambda t}} [Q - Q_t(P)]^{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 2\Lambda t P \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

A área compreendida entre a parábola $Q_t(P)$ e a corda $\zeta_t(X)$ pode ser calculada a partir da segunda fórmula em (3.19), de onde obtemos a expressão

$$\mathcal{A}_t(X) = \frac{4}{3\sqrt{\Lambda t}} [Q - Q_t(P)]^{3/2}. \quad (3.53)$$

Os vetores tangentes $dX_{\pm}/dP_0 = (1, 2\Lambda t P_{\pm})^T$ são calculados a partir da relação (3.50). Desta forma, o produto simplético $v_+ \wedge v_-$ pode ser escrito como

$$|v_+ \wedge v_-| = 4\sqrt{\Lambda t} [Q - Q_t(P)]^{1/2}. \quad (3.54)$$

Por último devemos calcular as amplitudes nas pré-imagens,

$$A_0(P_{\pm}) = (2\pi L^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{P_{\pm}^2}{4L^2}\right). \quad (3.55)$$

Com as três últimas equações, calculamos a função de Wigner semiclássica (3.21),

$$W_t^{SC}(X) = \frac{e^{-Q/2\Lambda t L^2}}{\pi L \sqrt{\hbar} (\Lambda t [Q - Q_t(P)])^{-1/4}} \cos\left(\frac{4 [Q - Q_t(P)]^{3/2}}{3\sqrt{\Lambda t}} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.56)$$

Esta função semiclássica é o termo líder da expansão assintótica, em que $\hbar \rightarrow 0$, da solução exata (3.48). Para mostrar isso basta usar a fórmula assintótica da

função de Airy (B.8). A função $W_t^{SC}(X)$ converge no lado côncavo da parábola, quando $Q > Q_t(P)$, e diverge quando o centro está próximo da variedade parabólica, $Q \rightarrow Q_t(P)$. Isto se deve ao fato de que os pontos estacionários da aproximação WKB colapsam num único ponto. Nos pontos de caústica da função de Wigner, o tamanho da corda que passa pelo ponto X tende a zero. Neste modelo em particular, o denominador $|v_+ \wedge v_-| = 2\Lambda t |\zeta_p|$ que aparece na fórmula (3.21) é proporcional ao tamanho da componente P da corda.

Uma maneira de mostrar quantitativamente a eficácia da aproximação WKB é tomar uma seção reta da função de Wigner no gráfico 3.4. Na figura 3.6 mostramos dois cortes: $W(Q = 5, P)$ em (a), que tem divergências na vizinhança dos pontos $P \approx \pm 5.0$, e $W(Q, P = 0)$ em (b), com uma única divergência em $P \approx 0.0$.

3.3.3 Função de Wigner na AOA

Nesta subseção vamos exemplificar a vantagem em usar o método da decomposição seguido da AOA. As cáusticas da função de Wigner semiclássica não são um problema. Esta aproximação é globalmente uniforme no espaço de fases.

O estado gaussiano inicial, fórmula (3.44), pode ser decomposto em estados gaussianos $\gamma_d(p - \mathcal{P})$, centrados sobre a reta $Q_0(P) = 0$. Usando uma densidade de probabilidade análoga à (3.26), teremos que

$$\phi_0(p) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{P} F_{L,d}(\mathcal{P}) \gamma_d(p - \mathcal{P}). \quad (3.57)$$

A evolução exata (3.45) do estado gaussiano de incerteza $\Delta q = L$ pode também ser expressa como

$$\phi_t(p) = e^{-i\Lambda t p^3/3\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{P} F_{L,d}(\mathcal{P}) \gamma_d(p - \mathcal{P}). \quad (3.58)$$

A aproximação de órbitas adjacentes consiste em usar a expansão em série do operador hamiltoniano (3.38), ao redor da variável \mathcal{P} , até ordem quadrática. Desta maneira, cada estado gaussiano da decomposição evoluirá com um operador hamil-

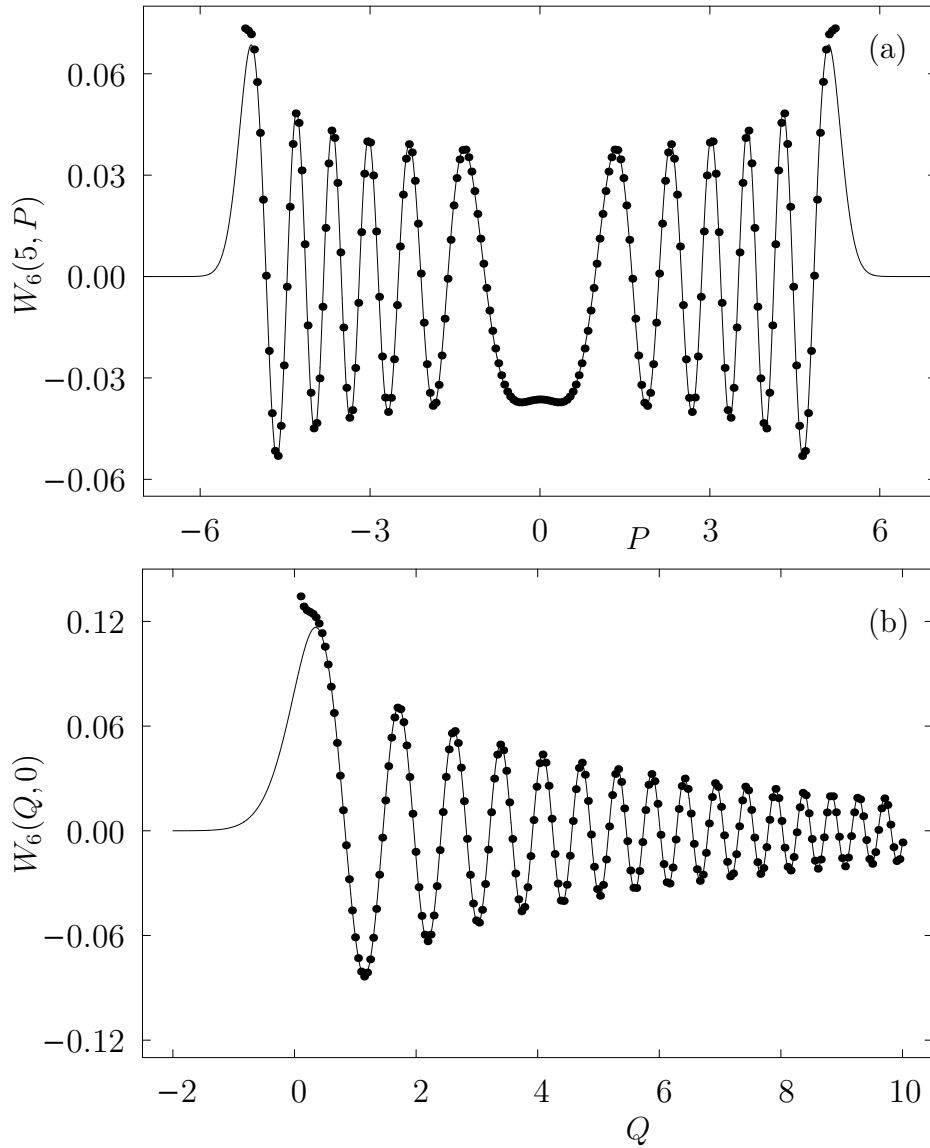


Figura 3.6: Seções da função de Wigner exata (linha contínua) vs aproximação WKB (pontos). Mostramos dois cortes da figura 3.4. Na figura (a) são mostradas as seções $W_t(Q = 5, P)$ e $W_t^{SC}(Q = 5, P)$. Vemos que próximo dos pontos $P \approx \pm 5.0$ a função $W_t^{SC}(Q = 5, P)$ diverge. Em (b) mostramos as seções $W_t(Q, P = 0)$ e $W_t^{SC}(Q, P = 0)$. A aproximação $W_t^{SC}(Q, P = 0)$ diverge em $P \approx 0.0$.

toniano da forma

$$\hat{H}^{AOA} = \frac{\Lambda}{3} \mathcal{P}^3 + \Lambda \mathcal{P}^2 (\hat{p} - \mathcal{P}) + \Lambda \mathcal{P} (\hat{p} - \mathcal{P})^2. \quad (3.59)$$

O operador de evolução na AOA, $\hat{U}_t^{AOA} = e^{-it\hat{H}^{AOA}/\hbar}$, também é diagonal na representação p :

$$\hat{U}_t^{AOA} |p\rangle = \exp\left(\frac{i\Lambda t}{3\hbar} [(p - \mathcal{P})^3 - p^3]\right) |p\rangle. \quad (3.60)$$

Na aproximação adotada, a superposição contínua dos estados $\gamma_d(p - \mathcal{P})$ em (3.58) fornece a seguinte função de onda:

$$\phi_t^{AOA}(p) = e^{-i\Lambda t p^3/3\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{P} F_{L,d}(\mathcal{P}) \gamma_d(p - \mathcal{P}) e^{i\Lambda t (p - \mathcal{P})^3/3\hbar}. \quad (3.61)$$

A função de onda $\phi_t^{AOA}(p)$ é uma aproximação semiclássica da função de onda $\phi_t(p)$. Do ponto de vista de uma transformação integral, vemos a presença de um fator de fase cúbico em (3.61) que não aparece em (3.58). Para valores $|p - \mathcal{P}| \lesssim d$, o produto $\gamma_d(p - \mathcal{P}) e^{i\Lambda t (p - \mathcal{P})^3/3\hbar}$ no integrando pode ser aproximado pela função $\gamma_d(p - \mathcal{P})$. Logo, na medida em que entramos no regime semiclássico, a *distância* entre as funções de onda $\phi_t(p)$ e $\phi_t^{AOA}(p)$ diminui. Para testar esta afirmação, calcularemos a fidelidade entre estes dois estados.

Fidelidade da AOA

Neste momento, quantificaremos a fidelidade da AOA com respeito a dinâmica quântica exata. A definição (3.30) pode ser expressa em termos das funções de onda como

$$\mathcal{F}_t(\hbar) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dp [\phi_t^{AOA}(p)]^* \phi_t(p) \right|^2. \quad (3.62)$$

A integração na variável p é uma integral de uma função gaussiana. Após alguns rearranjos, a fidelidade pode ser expressa da seguinte maneira:

$$\mathcal{F}_t(\hbar) = 2\pi\beta(\hbar) \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{P} \exp\left(\frac{i}{3} \mathcal{P}^3 - \frac{\beta(\hbar)}{2} \mathcal{P}^2\right) \right|^2. \quad (3.63)$$

Nesta expressão definimos o parâmetro

$$\beta(\hbar) = \left[\frac{\hbar}{\Lambda t} \right]^{2/3} \frac{L^2}{d^2(2L^2 - d^2)}. \quad (3.64)$$

A integração dentro do módulo da igualdade (3.63) pode ser escrita em termos de uma função de Airy; veja a relação (B.17). A fidelidade da AOA no modelo parabólico vale, finalmente,

$$\mathcal{F}_t(\hbar) = 2\pi\beta(\hbar) e^{\beta^3(\hbar)/6} \left[\text{Ai} \left(\frac{\beta^2(\hbar)}{4} \right) \right]^2. \quad (3.65)$$

Note que a largura usada na decomposição, $d = \kappa\sqrt{\hbar/2}$, depende da constante de Planck. Sempre podemos escolher o valor de κ , ou melhor, usar a largura que quisermos para os estados da decomposição. Mantendo L constante, podemos tomar o limite $\hbar \rightarrow 0$. Isto implica que a largura comprimida também tende a zero, $\ell = \hbar/2L^2 \rightarrow 0$. Neste regime temos $\beta(\hbar) = \hbar^{-1/3}(\Lambda t)^{2/3}\kappa^{-1/2} \gg 1$, o que nos permite usar a expansão assintótica (B.9) da função de Airy para argumentos positivos. No limite assintótico em que $\hbar \rightarrow 0$, a fidelidade (3.65) se comporta linearmente com a constante de Planck,

$$\mathcal{F}_t(\hbar) = 1 - \left[\frac{10}{6} (\Lambda t)^2 \kappa^{3/2} \right] \hbar + \mathcal{O}(\hbar^2). \quad (3.66)$$

No limite semiclássico, a fidelidade da AOA se mantém próxima de seu valor máximo. A aproximação melhora ainda mais na medida em que diminuimos o parâmetro κ , i.e., quando usamos estados gaussianos na decomposição que são comprimidos na direção P do espaço de fase.

A função de Wigner semiclássica na AOA é calculada a partir da função de onda no espaço dos momentos através da fórmula (3.46). Com efeito:

$$\pi\hbar W_t^{AOA}(X, t) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-2isQ/\hbar} [\phi_t^{AOA}(P - s)]^* \phi_t^{AOA}(P - s). \quad (3.67)$$

Na figura 3.7, comparamos a função de Wigner exata $W_t(X)$ com a versão semiclás-

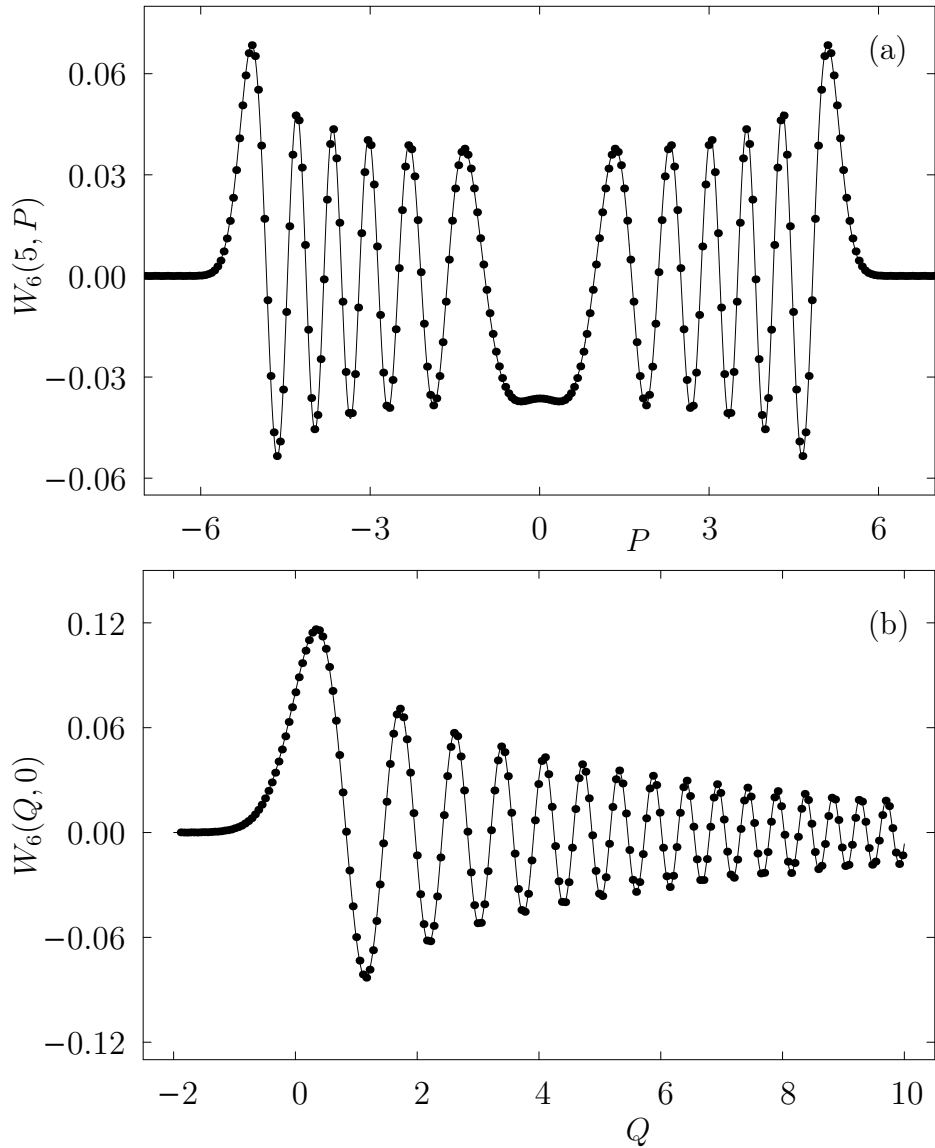


Figura 3.7: Seções da função de Wigner exata (linha contínua) vs AOA (pontos). Usamos 100 estados gaussianos de largura $d \approx 0.35$ na decomposição. Na figura (a) são mostradas as seções $W_t(Q = 5, P)$ e $W_t^{AOA}(Q = 5, P)$. Em (b) mostramos as seções $W_t(Q, P = 0)$ e $W_t^{AOA}(Q, P = 0)$. A aproximação adotada concorda de maneira excelente com a solução exata.

sica na AOA. Os parâmetros são os mesmo daqueles usados na figura 3.5. A função $W_t^{AOA}(X)$ foi calculada numericamente por meio de uma transformada de Fourier. A função de onda (3.61) foi calculada como uma superposição discreta de 100 estados gaussianos, cada um destes com uma dispersão igual a $d \approx 0.35$. Se calcularmos com estes parâmetros a fidelidade da aproximação, equação (3.65), encontraremos que $\mathcal{F} = 0.999166$.

No caso deste modelo integrável não-linear, mostramos a maneira de como calcular a função de Wigner semiclássica. A concordância dos métodos WKB e da decomposição seguida da AOA são excelentes. Na próxima seção iremos fazer a mesma análise semiclássica para um sistema caótico em particular.

3.4 Oscilador Harmônico Chutado (OHC)

Nesta seção, iremos testar de maneira sistemática a análise semiclássica em um sistema unidimensional não-autônomo, o oscilador harmônico chutado. A dinâmica deste modelo foi objeto de estudo na sua versão clássica [50] e também quântica [51]. Mais recentemente, foi analisada a interação deste modelo com um reservatório [12, 13, 14], o que possibilitou o estudo da transição quântico-clássico. A relevância deste modelo se deve ao fato de que há sua realização experimental em laboratório, ver por exemplo [13]. No que diz respeito à dinâmica semiclássica do OHC, já existem alguns estudos preliminares feitos no nosso grupo [52]. Nossa análise da função de Wigner irá mostrar que os estágios iniciais da dinâmica de um pacote de onda sob a ação do OHC pode ser descrita com base na construção geométrica de centros e cordas. Mais ainda, aplicaremos a aproximação uniforme construída a partir da AOA, que é uma aproximação semiclássica sem divergências para a função de Wigner.

O modelo consiste de um oscilador harmônico simples que recebe impulsos periódicos. Iremos focar no regime em que o modelo clássico exibe um regime predomi-

nante de forte caos, no qual o espaço de fases fica preenchido de uma rede estocástica. A dinâmica autônoma consiste de um oscilador harmônico, determinado pelo operador \hat{H}^{OH} definido em (2.1). Esta evolução livre ocorre durante um período τ , o período entre dois chutes consecutivos. O impulso instantâneo recebido pelo OH é dado por um potencial periódico na posição da partícula, $V(\hat{q}) = \epsilon \cos k\hat{q}$. O operador hamiltoniano do OHC é um operador de energia da forma que foi descrita em (2.47). Usualmente, os operadores canônicos são colocados em escala adimensional,

$$\begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} k\hat{q} \\ k\hat{p}/m\omega \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Esta escala determina a *constante de Planck efetiva*, ou a razão entre \hbar e a ação $m\omega/k^2$,

$$\hbar \mapsto \frac{k^2 \hbar}{m\omega}. \quad (3.69)$$

Isto pode ser verificado por meio das relações de comutação

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \mapsto \left[k\hat{q}, \frac{k}{m\omega}\hat{p} \right] = i\hbar \frac{k^2}{m\omega}. \quad (3.70)$$

No desenrolar desta seção, quando nos referirmos a constante de Planck, estaremos fazendo referência a constante de Planck efetiva, i.e., o valor do lado direito (3.69). Para ser mais específico, quando tomarmos o limite em que $\hbar \rightarrow 0$, isto significará considerar que a razão $\hbar k^2/m\omega \rightarrow 0$. Em palavras, a ação típica do sistema é muito maior do que a constante de Planck. Nos novos operadores canônicos, o hamiltoniano do oscilador harmônico chutado assume a seguinte forma:

$$\hat{H}_t^{OHC} = \frac{\omega}{2} [\hat{p}^2 + \hat{q}^2] + A \cos \hat{q} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau). \quad (3.71)$$

Este sistema representa um oscilador harmônico de massa m e frequência natural de oscilação ω , sendo chutada em intervalos regulares de tempo τ . A amplitude adimensional do chute vale $A = k^2\epsilon/m\omega$. Os parâmetros relevantes escolhidos são $A = 2.0$ e $\omega\tau = \pi/3$, ou melhor, o período entre dois chutes consecutivos vale $\tau = T/6$, um sexto do período de oscilação do OH.

O mapa não-linear determinado pelo símbolo de Weyl $H_t^{OHC}(X)$ do operador hamiltoniano (3.71), nas novas variáveis canônicas, é o seguinte:

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= \cos(\omega \tau) q_n + \text{sen}(\omega \tau) [p_n + A \text{sen} q_n] \\ p_{n+1} &= -\text{sen}(\omega \tau) q_n + \cos(\omega \tau) [p_n + A \text{sen} q_n]. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Esta solução corresponde a uma composição de uma rotação de um ângulo $\omega \tau$ com um cizalhamento não-linear na variável p .

3.4.1 Solução Numérica

No nível quântico, a dinâmica entre dois chutes consecutivos fica determinada pela aplicação de dois operadores unitários, um para o chute e outro para a rotação. O operador hamiltoniano (3.71) estabelece que o estado $|\psi_{n+1}\rangle$, imediatamente antes do chute $n + 1$, é obtido a partir do estado $|\psi_n\rangle$ por meio da seguinte relação:

$$|\psi_{n+1}\rangle = e^{-i\tau \hat{H}^{OH}/\hbar} e^{-iA \cos \hat{q}/\hbar} |\psi_n\rangle. \quad (3.73)$$

Em termos das funções de onda na representação de coordenadas, $\psi_n(q) = \langle q|\psi_n\rangle$, podemos expressar o mapeamento acima como uma fórmula de recorrência usual,

$$\psi_{n+1}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq' U_{\tau}^{OH}(q, q') e^{-iA \cos q'/\hbar} \psi_n(q'). \quad (3.74)$$

O núcleo do propagador acima, a menos de uma multiplicação de fase, é dado pelo propagador (2.4) do OH. Portanto, o mapa do OHC pode ser colocado na forma de uma *transformada de Fourier fracionária* [53]. Assim, podemos resolver a evolução por meio de consecutivas transformadas de Fourier. A partir da solução numérica da função de onda (3.74), calculamos a função de Wigner em um dado instante n ,

$$\pi \hbar W_n(X) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-2iPs/\hbar} [\psi_n(Q-s)]^* \psi_n(Q+s). \quad (3.75)$$

Esta integração é uma transformada de Fourier do elemento de matriz do operador densidade na base dos autoestados de posição, $[\psi_n(q-s)]^* \psi_n(q+s)$.

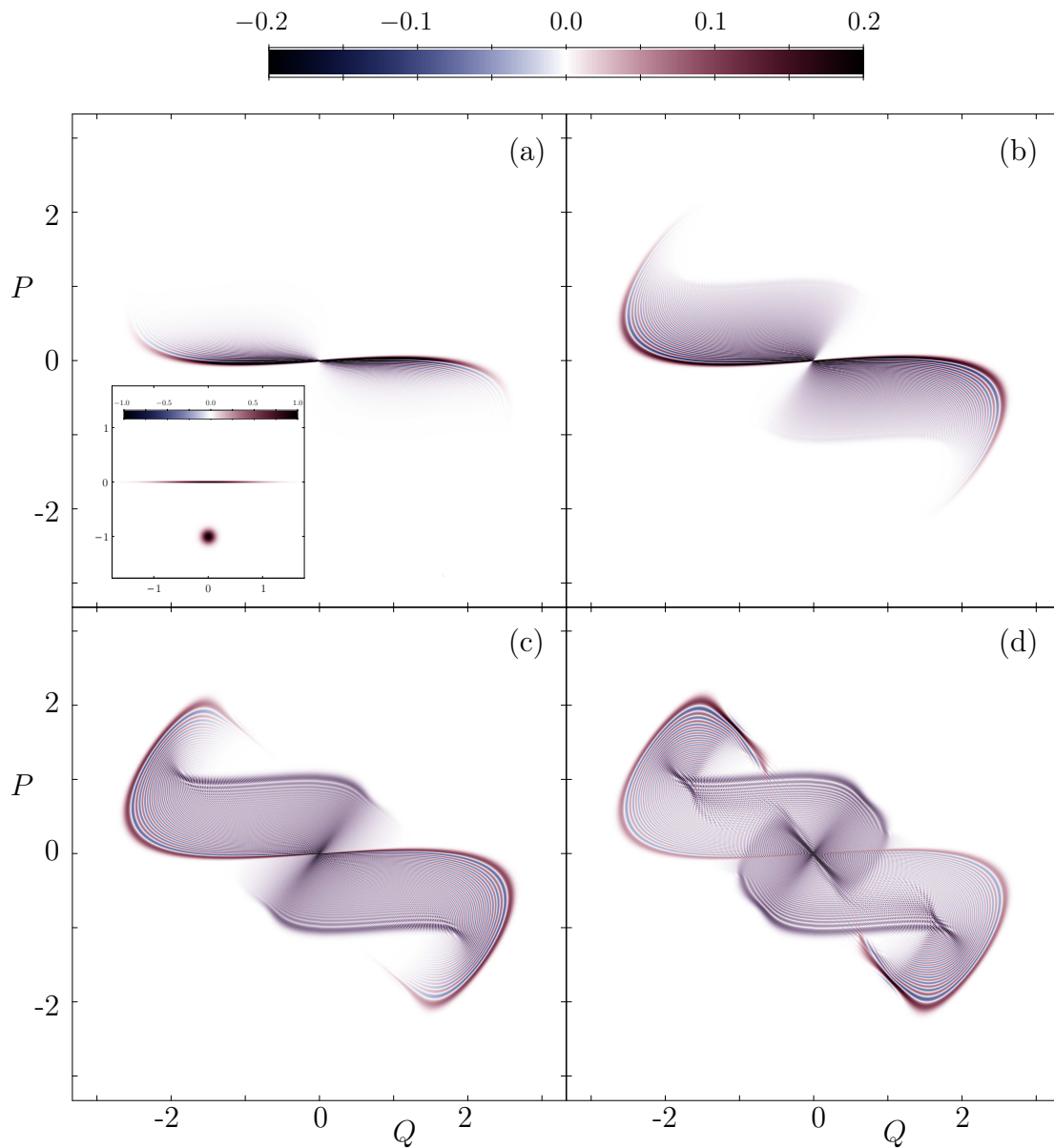


Figura 3.8: Solução exata da função de Wigner $[\pi\hbar W_n(X)]$ do OHC. A constante de Planck vale $\hbar = 0.0128$. No quadro menor (a) mostramos o estado inicial de largura $L = 0.565685$ bem como o estado redondo de largura $\sigma = 0.08$ (para comparação). Os quadros mostram diferentes estágios da evolução: Em (a) temos $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$ e (d) $n = 4$.

Lançaremos um estado gaussiano de mínima incerteza na origem do espaço de

fases,

$$\psi_0(q) = (2\pi L^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{q^2}{4L^2}\right). \quad (3.76)$$

A incerteza na direção Q do espaço de fase vale $\Delta q = L$. No quadro menor do gráfico (a) da figura 3.8, mostramos a função de Wigner do estado $\psi_0(q)$, de largura $L = 0.565685$. Neste mesmo quadro, para comparação, mostramos o estado redondo, $\sigma_q = \sigma_p = 0.08$ nas direções canônicas, o que determina o valor da constante de Planck $\hbar = 0.0128$. No estágio inicial, o estado irá se esticar/comprimir nas direções das variedades instável/estável do ponto fixo hiperbólico na origem. Nos primeiros chutes, a dinâmica segue aproximadamente linear, até a gaussiana atingir um tamanho comparável a escala de não-linearidade do sistema. Esta é uma escala clássica, ou seja, da ordem de \hbar^0 . A partir deste momento a dinâmica passa a distorcer o estado. No painel da figura 3.8 mostramos a propagação numérica da função de Wigner do estado (3.76). As figuras (a-d) são a evolução para $n = 1, 2, 3, 4$. Em virtude da simetria com respeito à origem do hamiltoniano (3.71) e do estado inicial (3.76), esta simetria é preservada pela evolução.

3.4.2 Aproximação de Fase Estacionária

A análise da propagação semiclássica do OHC é mais complicada do que a análise do modelo parabólico: (i) não temos uma solução analítica para a imagem da variedade lagrangeana inicial - esta deve ser calculada numericamente; (ii) a função de Wigner semiclássica $W_n^{SC}(X)$ contem cáusticas de dois tipos, de cordas curtas e de cordas longas. No segundo caso, existem pontos no espaço de fases que podem ter duas ou mais cordas, todas com um módulo finito.

Para calcular a função de Wigner semiclássica devemos contruir o esqueleto clássico do sistema. Isto consiste em analisar a evolução da reta $P(Q) = 0$, próximo do subespaço instável do ponto fixo hiperbólico na origem do espaço de fase. Os retratos da função de Wigner que aparecem na figura 3.8 são os estágios iniciais

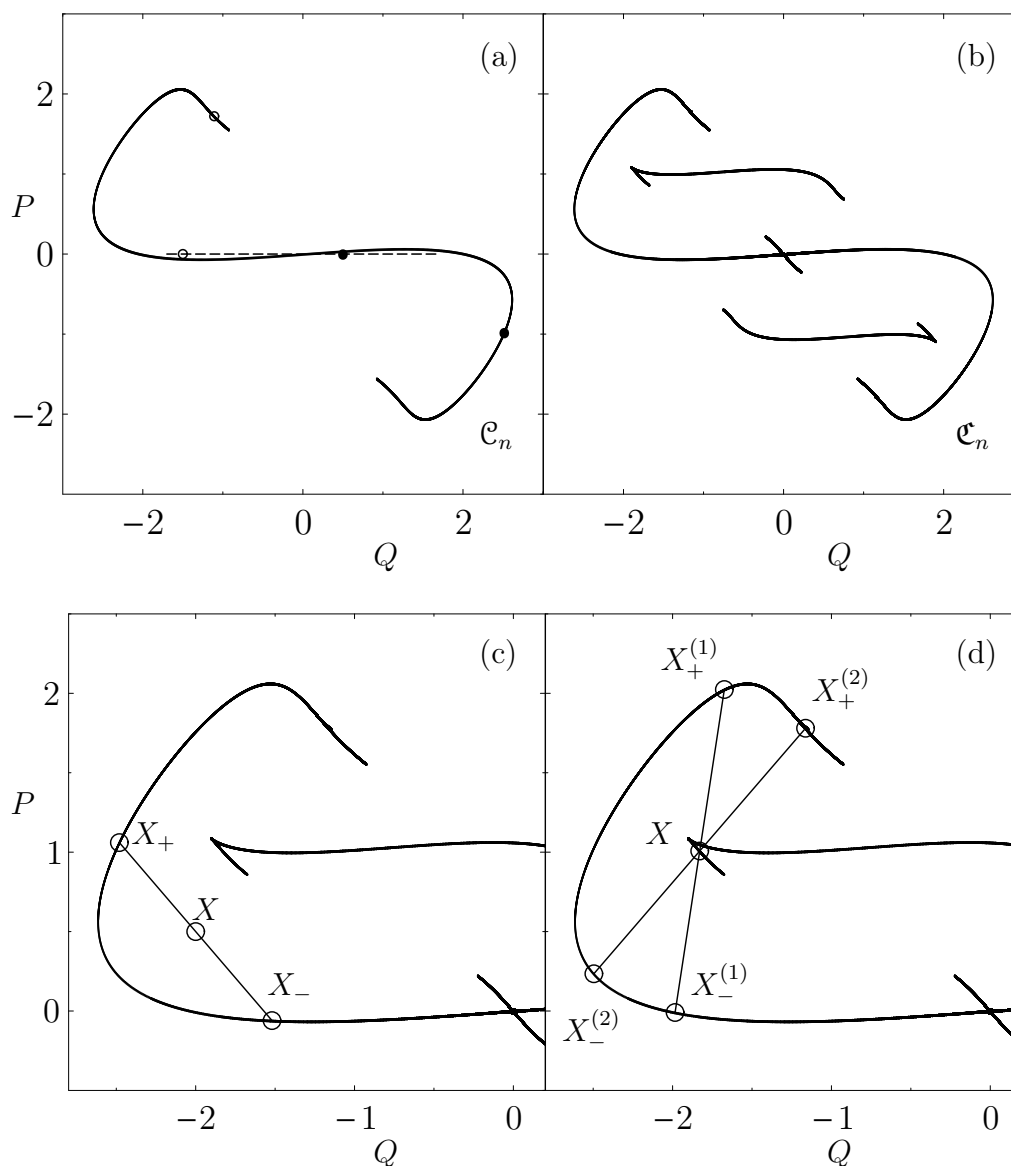


Figura 3.9: Variedade lagrangeana inicial \mathcal{C}_0 (linha tracejada), $P_0(Q) = 0$ em $n = 0$, e a sua imagem \mathcal{C}_n em $n = 3$ (linha contínua), figura (a). Duas órbitas são mostradas, uma inicialmente no ponto $X_0 = (0.5, 0)$ (pontos cheios) e outra em $X_0 = (-1.5, 0)$ (círculos). Na figura (b) mostramos todos os pontos de cáustica da função de Wigner semiclássica $W_n^{SC}(X)$. Na figura (c) mostramos o centro $X = (2, -0.5)$ e os extremos X_{\pm} da corda, que não pertence à cáustica. Um outro centro $X = (-1.83, 1)$, figura (d), e os extremos $X_{\pm}^{(1,2)}$ das cordas $\zeta_t^{(1,2)}(X)$. Este é um ponto de cáustica que corresponde a cordas longas da função de Wigner semiclássica.

da evolução de um estado gaussiano. O estado inicial é esticado no segmento que corresponde aproximadamente à variedade instável (unidimensional). O quadro (a) da figura 3.9 mostra o segmento de reta \mathcal{C}_0 , que varia no intervalo $|Q| \leq 1.7$, em linha tracejada. Esta reta corresponde à $P_0(Q) = 0$. A imagem \mathcal{C}_n do segmento de reta inicial, calculada a partir das equações de Hamilton (3.72) para $n = 3$, é mostrado em linha contínua. Duas órbitas clássicas são mostradas, uma lançada em $X_0 = (0.5, 0)$ e outra em $X_0 = (-1.5, 0)$. O que podemos ver nos quadros (c) e (d) da figura 3.8 é que o filamento parece semelhante à variedade instável mostrada no quadro (a) da figura 3.9. Mais ainda, o quadro (b) mostra todos os pontos de cáustica da função de Wigner semiclássica $W_n^{SC}(X)$, para o instante $n = 3$. Se denotarmos o conjunto de pontos do espaço de fase que são cáusticas de $W_n^{SC}(X)$, no instante n , pelo conjunto $X \in \mathfrak{C}_n$, veremos que a cáustica consiste de várias partes: (i) a própria variedade clássica, $\mathfrak{C}_n^{(1)} = \mathfrak{M}_n$, que corresponde a coalescência de cordas nulas, $|\zeta| \rightarrow 0$, e (ii) um outro subconjunto $\mathfrak{C}_n^{(2)}$, que corresponde a coalescência de cordas de tamanho finito. Todos os pontos de cáustica têm os vetores tangentes v_{\pm} aos extremos X_{\pm} paralelos, i.e., $v_+ \wedge v_- = 0$. O subconjunto $\mathfrak{C}_n^{(1)}$ são as cáusticas que surgem quando o centro X tende à curva \mathcal{C}_n . Neste limite o comprimento da corda tende à zero e os vetores tangentes ficam paralelos. Veja o quadro (c) da figura 3.9. Para os pontos que estão em $\mathfrak{C}_n^{(2)}$ não há o colapso da corda. Por exemplo, o centro X do quadro (d) na figura 3.9 tem mais de uma corda de tamanho finito. A aproximação semiclássica simples da função de Wigner por meio do método WKB dependente do tempo diverge nos pontos pertencentes ao conjunto \mathfrak{C}_n . Isto ocorre porque os pontos estacionários em (3.13) colapsam num único ponto. Neste caso, deve-se elaborar uma aproximação uniforme [43].

Uma aproximação de transição simples permite que possamos expressar a função de Wigner semiclássica perto da cáustica $\mathfrak{C}_n^{(1)}$. Iremos usar uma expressão para poder atravessar a variedade lagrangeana ao longo de um seção reta $Q = Q_*$. Primeiro,

aproximamos localmente a variedade \mathcal{C}_n por uma parábola, $P_n(Q) \approx P_* + P'_*(Q - Q_*) + P''_*(Q - Q_*)^2/2$. A fase no integrando (3.13) é expressa como um polinômio cúbico. Depois, usamos que a amplitude pode ser aproximada por $A_n(Q) \approx A_n(Q_*)$, ou seja, não tem variações significativas. Nestas circunstâncias, se atravessarmos a variedade ao longo da reta $Q = Q_*$, e assumindo que $P''_* > 0$, então teremos que [54, 55]

$$W_n^{SC}(P, Q_*) \approx \frac{2A_n^2(Q_*)}{(\hbar P''_*)^{1/3}} \text{Ai} \left(-\frac{2(P - P_*)}{(\hbar P''_*)^{1/3}} \right). \quad (3.77)$$

Este resultado necessita do valor da segunda derivada P''_* , que pode ser calculada, por exemplo, por meio do método de mínimos quadrados usual.

Nos gráficos 3.10, em (a) para $n = 2$ e (b) para $n = 3$, mostramos a comparação da função de Wigner exata (linha contínua) com a aproximação de fase estacionária $W_n^{SC}(X)$ (pontos). Calculamos numericamente os ingredientes contidos na fórmula (3.21). Nos dois instantes, $n = 2, 3$, a concordância longe das cáusticas clássicas é perfeita. Calculamos também a aproximação de transição (3.77), que é mostrada nos gráficos 3.10 em quadrados. Perto da cáustica esta aproximação também é perfeita.

3.4.3 Função de Wigner na AOA

Considere a decomposição do estado gaussiano $\psi_0(q)$, fórmula (3.76), em termos dos estados gaussianos $\gamma_d(q - Q)$. A decomposição (3.26) estabelece que

$$\psi_0(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) \gamma_d(q - Q). \quad (3.78)$$

A propagação semiclássica é obtida por meio da aproximação de órbitas adjacentes para as gaussianas $\gamma_d(q - Q)$, que neste caso consiste em fazer a expansão em série de Taylor do $\cos q'$ até ordem quadrática na equação (3.74) ao redor da órbita clássica Q_n . A trajetória do centro das gaussianas da decomposição são calculadas com o mapa clássico (3.72). A aproximação usada será satisfatória desde que a propagação seja aproximadamente linear. Uma maneira de quantificar esta aproximação

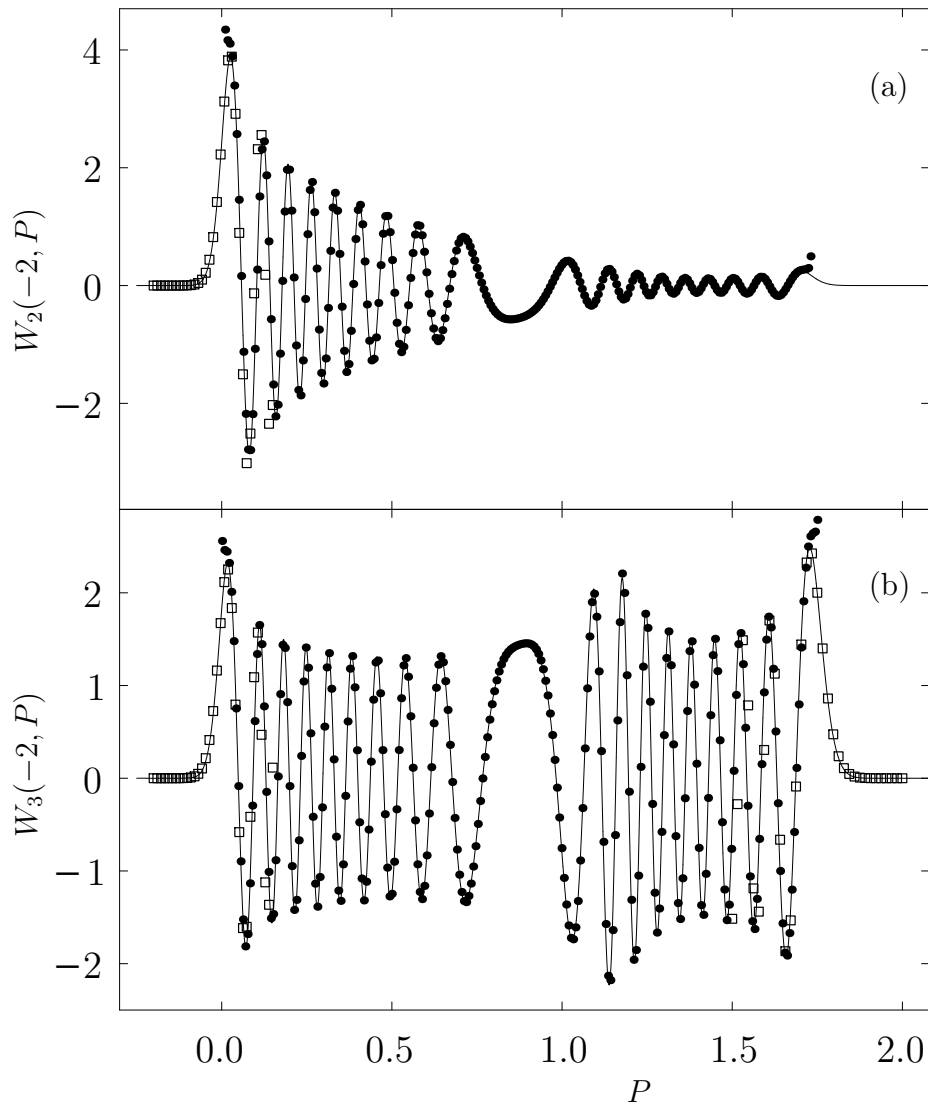


Figura 3.10: Seções da função de Wigner exata (linha contínua) vs WKB (pontos). Na figura (a) são mostradas, para $n = 2$, as seções $W_n(Q = -2, P)$ e $W_n^{sc}(Q = -2, P)$. Em (b) mostramos as mesmas seções para $n = 3$. A aproximação adotada, longe das cústicas, coincide ponto a ponto com a solução exata. A aproximação de transição, (3.77), aparece em quadrados e funciona muito bem perto da cústica.

é seguir a trajetória clássica X_n e o valor esperado $\langle \hat{x}_n \rangle$. Na figura 3.11 mostramos a trajetória, lançada inicialmente no ponto $Z_0 = \langle \hat{x}_0 \rangle = (2, 0)$, do OHC clássico e do valor esperado do operador de posição $\langle \hat{q}_n \rangle = \int dq q |\psi_n(q)|^2$. Os valores passam

a se afastar a partir do instante $n = 7$. Portanto, esperamos que a aproximação deva ser satisfatória somente nos instantes iniciais, $n < 7$. Mais ainda, a evolução linearizada das gaussianas $\gamma_d(q - Q)$ também são funções gaussianas. No instante em que as não-linearidades comecem a distorcer as gaussianas da decomposição, a aproximação ficará menos acurada.

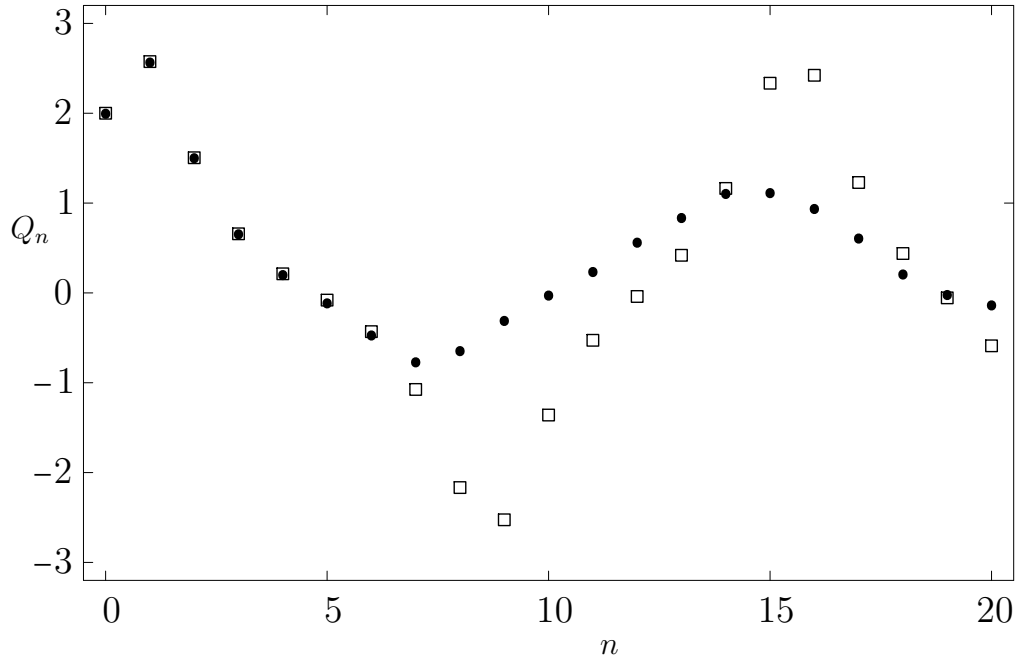


Figura 3.11: Posição Q_n do OHC clássico (quadrados) e o valor esperado $\langle \hat{q}_n \rangle$ do OHC quantizado (pontos). A coordenada inicial vale $Z_0 = \langle \hat{x}_0 \rangle = (2, 0)$. A distância entre os pontos passa a ser apreciável a partir de $n = 7$.

Em um instante posterior n , a decomposição (3.78) passa a ser uma superposição contínua da forma

$$\psi_n^{AOA}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ F_{L,d}(Q) \psi_n^{AOA}(q, Q). \quad (3.79)$$

Os estados envolvidos nesta superposição tem uma evolução dada pelo mapa

$$\psi_{n+1}^{AOA}(q, Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq' U_{\tau}^{AOA}(q, q'; Q_n) \psi_n^{AOA}(q', Q), \quad (3.80)$$

sendo que

$$U_{\tau}^{AOA}(q, q'; Q_n) = U_{\tau}^{OH}(q, q') e^{-iA/\hbar[\cos Q_n - (q' - Q_n) \sin Q_n - (q' - Q_n)^2 \cos Q_n/2]}. \quad (3.81)$$

As funções de onda iniciais são as gaussianas $\gamma_d(q - Q)$. A função de onda semiclássica (3.79) é uma aproximação da solução exata (3.74). Uma maneira de quantificar o erro cometido pode ser feita com a definição (3.30), que mede a fidelidade do estado $\psi_n^{AOA}(q)$ com respeito ao estado $\psi_n(q)$. Em termos das funções de onda na

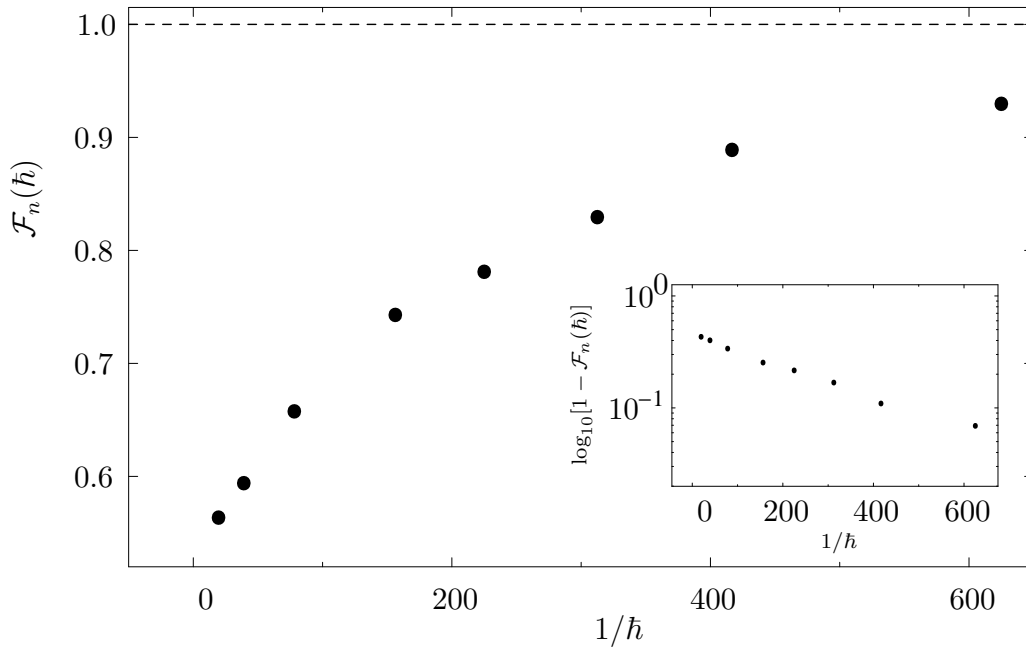


Figura 3.12: Fidelidade $\mathcal{F}_n(\hbar)$ da aproximação semiclássica como função de $1/\hbar$, no instante $n = 3$. O gráfico menor, numa escala Linear-Log, mostra $\log_{10}[1 - \mathcal{F}_n(\hbar)]$ vs $1/\hbar$. Portanto, na medida em que $\hbar \rightarrow 0$, a fidelidade tende exponencialmente ao seu valor máximo.

representação de coordenadas, a fidelidade pode ser expressa como

$$\mathcal{F}_n(\hbar) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq [\psi_n^{AOA}(q)]^* \psi_n(q) \right|^2. \quad (3.82)$$

No gráfico 3.12 temos o valor de $\mathcal{F}_n(\hbar)$ no instante $n = 3$. Na medida em que diminuimos a constante de Planck, a fidelidade aumenta de forma exponencial. Isto

é confirmado pelo gráfico menor em 3.12, que mostra o valor $\log_{10}(1 - \mathcal{F}_n(\hbar))$ numa escala Log-Linear.

A maneira na qual calculamos o estado $\psi_n^{AOA}(q)$, fórmula (3.79), é fazendo a discretização da integral (superposição contínua). A evolução dos estados $\psi_n^{AOA}(q, Q)$, dada pelo mapa (3.80), é calculada para cada uma das gaussianas da decomposição. Em seguida, calculamos o estado $\psi_n^{AOA}(q)$. A função de Wigner na AOA é definida da seguinte maneira:

$$\pi\hbar W_n^{AOA}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-2iPs/\hbar} [\psi_n^{AOA}(Q-s)]^* \psi_n^{AOA}(Q+s). \quad (3.83)$$

Nos gráficos 3.13, comparamos um corte da função $W_n^{AOA}(Q = -2, P)$ com a solução exata $W_n(Q = -2, P)$. Usamos 768 estados gaussianos na decomposição. Em (a), com $n = 2$, temos uma concordância ponto a ponto; em (b), para $n = 3$, a aproximação consegue reproduzir a fase das oscilações mas não amplitude em todo eixo P . Somente para $P > 1.4$ a aproximação coincide com o valor exato. A razão pela qual existe uma discrepância para $P < 1.4$, se deve ao fato de que a não-linearidade afeta mais as gaussianas da decomposição que caem na dobra inferior do filamento, veja o quadro (c) do gráfico 3.8. Nas cáusticas de cordas curtas, subconjunto de pontos $\mathfrak{C}_n^{(1)}$, a função $W_n^{AOA}(X)$ é bem comportada. A vantagem deste método é não ter que fazer aproximações para regiões separadas, como é o caso do método WKB. Escolhemos uma outra seção, $W_n(Q = -1.83, P)$, mostrada no gráfico 3.14. Neste corte, a função de Wigner contém cáustica do subconjunto $\mathfrak{C}_n^{(2)}$. Novamente a aproximação apresenta uma discrepância na amplitude. Mesmo assim, esta é robusta na vizinhança das cáusticas. Como está mostrado no gráfico 3.12, na medida entramos no regime semiclássico (reduzindo \hbar), a aproximação aumenta a sua fidelidade. Uma outra maneira de verificar a validade da AOA no regime semiclássico é calcular a distância *média no espaço de fases* entre as funções

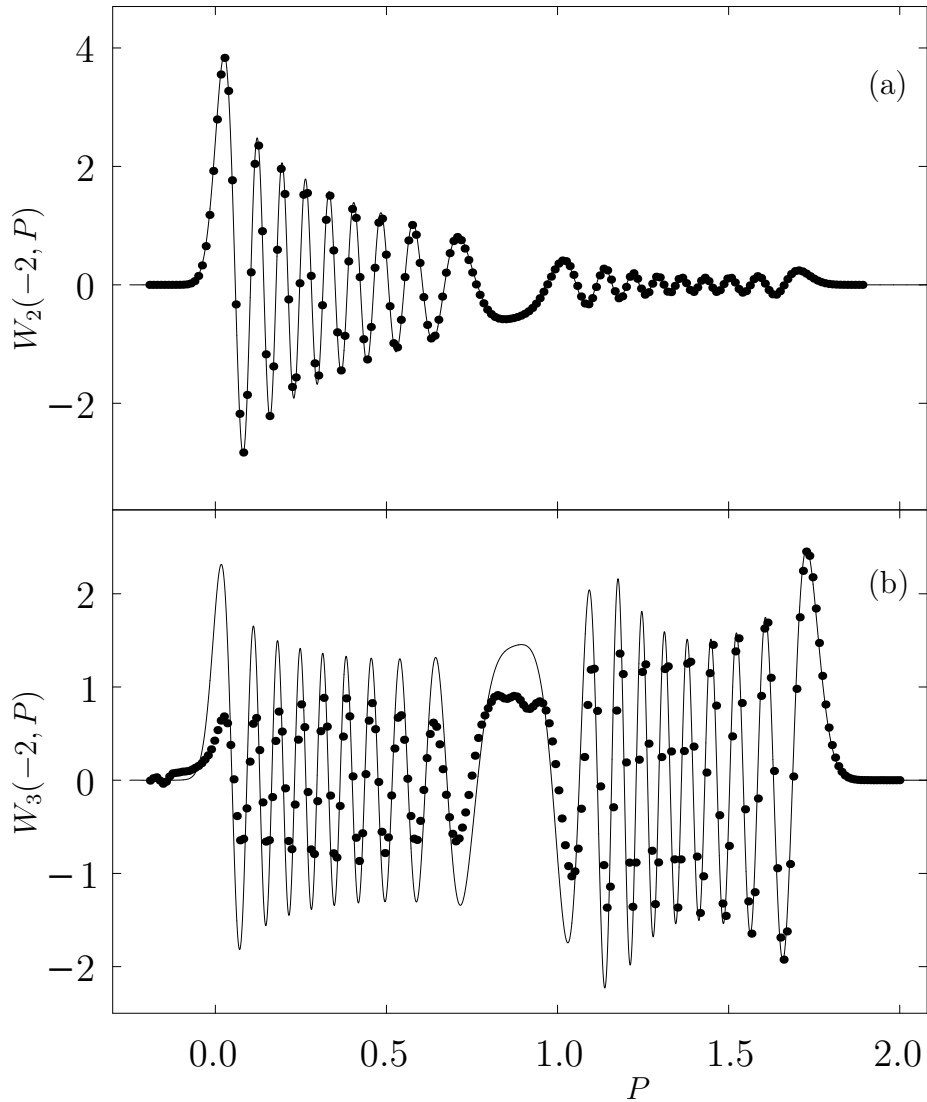


Figura 3.13: Seções da função de Wigner exata (linha contínua) vs AOA (pontos). Na figura (a) são mostradas, para $n = 2$, as seções $W_n(Q = -2, P)$ e $W_n^{AOA}(Q = -2, P)$. Em (b) mostramos as mesmas seções para $n = 3$. Em (a) a aproximação coincide ponto a ponto com a solução exata, mesmo na vizinhança das cáusticas. Entretanto, em (b) a aproximação consegue reproduzir a fase mas não a amplitude da função de Wigner.

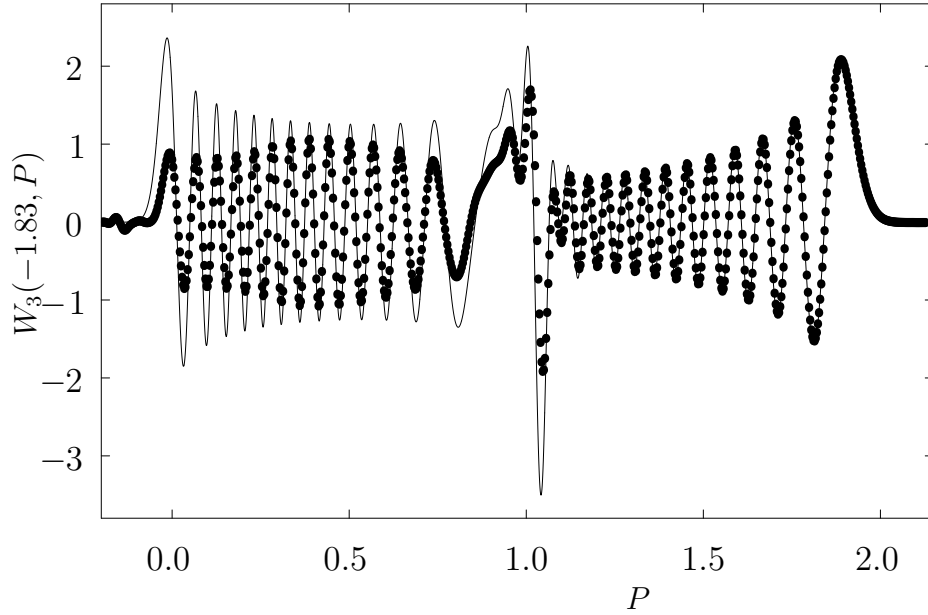


Figura 3.14: Seções da função de Wigner exata (linha contínua) vs AOA (pontos). Mostramos, para $n = 3$, as seções $W_n(Q = -1.83, P)$ e $W_n^{AOA}(Q = -1.83, P)$. A aproximação consegue reproduzir a fase mas não a amplitude da função de Wigner.

exata e semiclássica. Considere a seguinte definição:

$$\mathcal{D}_n(\hbar) = \int_{-\infty}^{\infty} dX |W_n(X) - W_n^{AOA}(X)|^2. \quad (3.84)$$

O valor desta distância avalia a acurácia da função de Wigner $W_n^{AOA}(X)$ com respeito à função $W_n(X)$. No gráfico 3.15, podemos ver que no instante $n = 3$, a distância diminui gradualmente. Do gráfico menor, mostrado em escala Log-Log, podemos concluir que a distância (3.84) tem um decaimento numa lei de potência.

Resumindo, neste capítulo mostramos com a teoria WKB que a função de Wigner de um sistema caótico pode ser construída a partir de quantidades geométricas clássicas. Elaboramos também uma aproximação baseada na AOA, que é uma aproximação suave, ou seja, globalmente uniforme. Verificamos que no regime semiclássico esta aproximação é satisfatória.

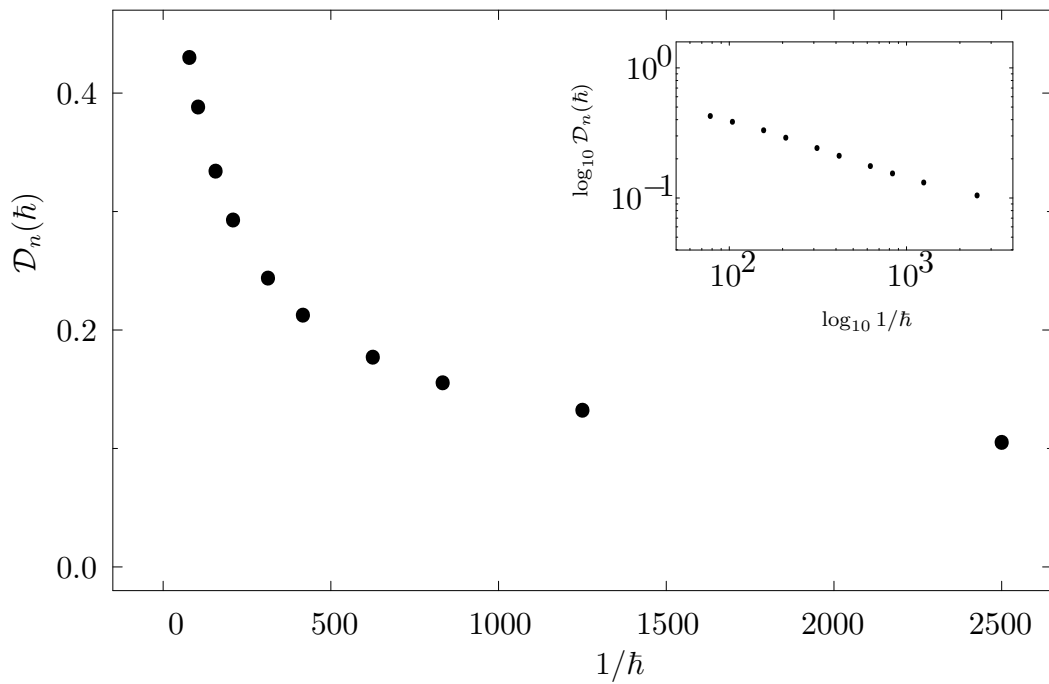


Figura 3.15: A distância média $\mathcal{D}_n(\hbar)$ da AOA como função de $1/\hbar$, no instante $n = 3$. O gráfico menor, numa escala Log-Log, mostra $\log_{10} \mathcal{D}_n(\hbar)$ vs $\log_{10} 1/\hbar$. No limite em que $\hbar \rightarrow 0$, a distância média entre $W_n(X)$ e $W_n^{AOA}(X)$ diminui.

Capítulo 4

Descoerência no Limite Semiclássico

”Decoherence is a process of continuous measurement-like interaction between the system and an (external or internal) environment. Its effect is to invalidate the superposition principle in the Hilbert space of a open system. It leads to very different stability properties for various pure states. The environment destroys the vast majority of the superpositions quickly, and - in the case of macroscopic objects - almost instantaneously.”

W. H. Zurek, *Decoherence and Einselection*, p. 312 [56].

Em diversas áreas da física se investiga quais são as consequências para um sistema quântico que interage com um reservatório (ou ambiente). Isto ocorre quando o sistema físico não pode ser isolado totalmente do ambiente ao seu redor. A abordagem usual para descrição de um sistema quântico aberto é feita por meio das equações mestras. Este tipo de descrição aparece, por exemplo, na modelagem dos sistemas de ótica quântica [57, 58, 59]. Por outro lado, a descrição de um sistema aberto por meio das integrais de caminho, elaborada por Feynman e Vernon [60, 61], determina o propagador do sistema. O modelo de Caldeira e Leggett [62] utilizou este formalismo para um protótipo de reservatório, que posteriormente foi usado por Weiss [63] para descrever o fenômeno da dissipação em sistemas de física do estado

sólido. O fenômeno físico mais flagrante que surgiu a partir desta investigação passou a ser conhecido como descoerência [56, 64], ou seja, a aniquilação das coerências quânticas.

Com o objetivo de analisar com detalhes os mecanismos da descoerência, sistemas muito simples foram estudados numericamente. Em particular, foi analisada a evolução de um estado coerente sob a ação de sistemas caóticos quantizados, o oscilador harmônico chutado [12, 13, 14] e o oscilador de Duffing forçado [8, 9, 10, 11].

O propósito deste capítulo é incluir o efeito da descoerência na teoria semiclássica uniforme apresentada no capítulo anterior. No caso da teoria WKB dependente do tempo, Ozorio de Almeida [65] calculou uma expressão para a função de Wigner semiclássica que leva em conta a descoerência. A maneira pela qual vamos incluir a descoerência será usando a equação mestra de Lindblad [66]. Estudaremos apenas um sistema quântico que interage com um *reservatório térmico puramente difusivo*, ou seja, sem considerar perdas de energia do sistema para o reservatório. Nossa abordagem será parecida com aquela encontrada em [67, 68, 69]. No entanto, o principal resultado deste capítulo utiliza a aproximação de órbitas adjacentes (AOA) para a dinâmica interna, e como veremos, resulta em uma descrição similar àquela que foi calculada por meio das integrais de caminho [70] e também com a teoria WKB [65].

4.1 Equação Mestra

A dinâmica de um sistema quântico que interage com um reservatório deve considerar a evolução unitária do sistema composto (o sistema reduzido mais um reservatório). O reservatório pode ser representado por um outro subsistema, como por exemplo, uma coleção de osciladores harmônicos. O operador hamiltoniano total contém um termo para cada subsistema e um outro termo de interação. O acoplamento é usualmente representado por um termo de interação linear nas variáveis

dos dois subsistemas (e.g., a posição do sistema reduzido e a posição dos osciladores no banho térmico). Eliminando as variáveis do reservatório por meio de um traço parcial e fazendo certas aproximações [71], encontra-se uma equação mestra para o operador densidade do sistema reduzido. Esta evolução (não unitária) deve preservar as propriedades do operador densidade, ou seja, a positividade, a hermiticidade e a norma. Em geral, a dinâmica de um sistema quântico aberto não é markoviana porque o reservatório tem um tempo de memória finito (i.e., guarda "informação" sobre os estados anteriores do sistema reduzido). Contudo, vamos utilizar uma equação mestra na *aproximação markoviana*, na qual o reservatório não tem memória. Neste regime, a equação mestra assume a forma geral dada pela equação de Lindblad [66]. A vantagem desta equação é que não precisaremos fazer nenhum modelo específico para o reservatório, e sendo assim, nossa análise semiclássica será válida para uma certa classe de sistemas quânticos abertos na aproximação markoviana.

A equação de Lindblad fica determinada por um operador hamiltoniano \hat{H}_t e pelos operadores de Lindblad \hat{L}_j ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} &= \mathcal{L}_H(t) \hat{\rho} + \mathcal{L}_L \hat{\rho} \\ &\equiv -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_t, \hat{\rho}] - \frac{1}{2\hbar} \sum_{j=1}^M \left(\hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j - 2 \hat{L}_j \hat{\rho} \hat{L}_j^\dagger \right). \end{aligned} \quad (4.1)$$

O gerador infinitesimal $\mathcal{L}(t) = \mathcal{L}_H(t) + \mathcal{L}_L$ que aparece no lado direito desta equação tem uma contribuição associada ao operador hamiltoniano e outra aos operadores de Lindblad. A solução formal da equação de Lindblad é dada por um semi-grupo (SG) dinâmico¹ $\mathcal{M}(t, t_0)$, ou seja,

$$\mathcal{M}(t, t_0) = \overrightarrow{T} \exp \left(\int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}(\tau) \right). \quad (4.2)$$

O semi-grupo dinâmico é calculado a partir do gerador $\mathcal{L}(t)$ definido na equação (4.1). O resultado da aplicação de um semi-grupo em um operador é um outro

¹Os semi-grupos dinâmicos na versão quântica são a generalização dos semi-grupos de Markov para uma álgebra não-comutativa [66, 71, 72, 73]

operador, e em virtude das propriedades da equação de Lindblad, preserva as propriedades do operador densidade. O semi-grupo $\mathcal{M}(t, t_0)$ tem a seguinte regra de composição:

$$\mathcal{M}(t, \tau) \mathcal{M}(\tau, t_0) = \mathcal{M}(t, t_0), \quad t > \tau > t_0. \quad (4.3)$$

No caso em que o gerador infinitesimal \mathcal{L} é independente do tempo, a relação acima se reduz a igualdade $\mathcal{M}(t - \tau) \mathcal{M}(\tau - t_0) = \mathcal{M}(t - t_0)$. Uma analogia entre os sistemas quânticos isolados permite-nos definir o propagador adjunto, apropriado para a descrição de Heisenberg. Desta forma, temos o mapa adjunto

$$\mathcal{M}^\dagger(t, t_0) = \overleftarrow{T} \exp \left(\int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}^\dagger(\tau) \right), \quad (4.4)$$

com um operador de ordenamento temporal anticronológico. Na equação acima aparece o gerador infinitesimal adjunto, que fica determinado por meio do traço $\text{Tr} \left[\hat{A} (\mathcal{L}(t)\hat{\rho}) \right] = \text{Tr} \left[(\mathcal{L}(t)\hat{A}) \hat{\rho} \right]$.

No caso particular em que o sistema está isolado, a evolução é dada pelo operador unitário. A equação de von Neumann (1.108) é determinada por um gerador infinitesimal definido pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \mathcal{L}_H(t) \hat{\rho} \equiv -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}_t, \hat{\rho} \right]. \quad (4.5)$$

Ao tratar uma evolução unitária, temos a solução calculada a partir do operador de evolução (1.109),

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) = \mathcal{M}_H(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) &= \overleftarrow{T} \exp \left(\int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}_H(\tau) \right) \hat{\rho}(t_0), \\ &= \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0). \end{aligned} \quad (4.6)$$

O operador hamiltoniano depende do par canônico de operadores e possivelmente do tempo, $\hat{H}_t = \hat{H}(t; \hat{q}, \hat{p})$. Uma fórmula que será usada mais na frente será a covariância metapléctica determinada por um operador hamiltoniano quadrático, $\hat{H} = \hat{x} \cdot \mathbf{H}_t \hat{x} / 2$. Neste caso, temos a identidade

$$\mathcal{M}_H^\dagger(t, t_0) \hat{T}_\xi = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{T}_\xi \hat{U}(t, t_0) = \hat{T}_{[\mathbf{S}(t, t_0)]^{-1} \xi}. \quad (4.7)$$

Na última igualdade aparece a matriz simplética $\mathbf{S}(t, t_0) = e^{\int_{t_0}^t dt' \mathbf{J}H_{t'}}$ porque usamos a covariância metaplética (1.84).

Reservatório Difusivo

Um reservatório térmico puramente difusivo é aquele que se encontra numa temperatura muito alta, e como consequência, o sistema reduzido não perde energia para os graus de liberdade do reservatório. Formalmente, esta configuração fica determinada pela escolha de operadores de Lindblad hermitianos $\hat{L}_j = \hat{L}_j^\dagger$. Neste regime, a parte proveniente do gerador \mathcal{L}_L da equação mestra (4.1) pode ser simplificada,

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_t, \hat{\rho}] - \frac{1}{2\hbar} \sum_{j=1}^M [\hat{L}_j, [\hat{L}_j, \hat{\rho}]]. \quad (4.8)$$

Esta equação é válida para qualquer observável \hat{L}_j . No entanto, nesta tese vamos restringir a nossa discussão para uma combinação linear dos operadores \hat{q} e \hat{p} , escrita com o produto simplético (1.4) na fórmula compacta,

$$\hat{L}_j = \lambda_j \wedge \hat{x}. \quad (4.9)$$

Os operadores de Lindblad lineares aparecem com frequência na modelagem dos sistemas quânticos abertos por meio da equação de Lindblad. Neste caso, o gerador infinitesimal \mathcal{L}_L pode ser denotado por

$$\mathcal{L}_L = -\frac{1}{2\hbar} \sum_{j=1}^M \mathcal{C}_j^2 \hat{\rho} \quad \text{sendo que} \quad \mathcal{C}_j \hat{\rho} \equiv [\hat{L}_j, \hat{\rho}]. \quad (4.10)$$

Note que a aplicação $\mathcal{C}_j^2 = \mathcal{C}_j \circ \mathcal{C}_j$ é a composição dos comutadores.

Agora podemos calcular a solução da equação mestra (4.8) para o caso particular em que $\hat{H}_t = 0$. Consideraremos o caso de um único \hat{L}_j . Neste caso a solução é dada pelo semi-grupo $\mathcal{M}_{L_j}(t) \equiv e^{t\mathcal{L}_{L_j}} = e^{t\mathcal{C}_j^2}$. A partir desta última igualdade, demonstraremos que o semi-grupo pode ser escrito em termos de uma operação que envolve os operadores de translação. Considere a seguinte identidade:

$$e^{t\mathcal{C}_j^2} = (2\pi\hbar t)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} du_j \exp\left(-\frac{u_j^2}{2\hbar t} - \frac{i u_j}{\hbar} \mathcal{C}_j\right). \quad (4.11)$$

Esta relação é facilmente verificada quando usamos a expansão em série da exponencial imaginária e calculamos sucessivas integrais gaussianas. Uma vez que os operadores de Lindblad estão escritos de forma adequada em (4.9), encontramos para o semi-grupo a seguinte expressão:

$$\mathcal{M}_{L_j}(t) \hat{\rho} = (2\pi\hbar t)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} du_j \exp\left(-\frac{u_j^2}{2\hbar t}\right) \hat{T}_{u_j \lambda_j} \hat{\rho} \hat{T}_{u_j \lambda_j}^\dagger. \quad (4.12)$$

Esta operação é chamada de *semi-grupo gaussiano*. Este tipo de SG quântico é discutido no artigo de revisão de Spohn [74] (veja também as referências contidas nesse artigo). Quando aplicamos o SG gaussiano em um operador de translação \hat{T}_ξ , o resultado pode ser calculado com a identidade (1.45), porque $\hat{T}_{u_j \lambda_j} \hat{T}_\xi \hat{T}_{u_j \lambda_j}^\dagger = \hat{T}_\xi e^{-i u_j \xi \wedge \lambda_j / \hbar}$,

$$\mathcal{M}_{L_j}(t) \hat{T}_\xi = \hat{T}_\xi (2\pi\hbar t)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} du_j \exp\left(-\frac{u_j^2}{2\hbar t} - \frac{i u_j}{\hbar} \xi \wedge \lambda_j\right). \quad (4.13)$$

Ao calcularmos a integral gaussiana na equação acima, veremos que

$$\mathcal{M}_{L_j}(t) \hat{T}_\xi = \hat{T}_\xi \exp\left(-\frac{t}{2\hbar} [\xi \wedge \lambda_j]^2\right). \quad (4.14)$$

Logo, o efeito causado pela aplicação do SG gaussiano em um operador de translação é multiplicar por uma função gaussiana. Pode-se demonstrar que dois SG's da forma (4.12) comutam, isto é,

$$e^{t(\mathcal{L}_{L_j} + \mathcal{L}_{L_{j'}})} = \mathcal{M}_{L_j} \mathcal{M}_{L_{j'}} = \mathcal{M}_{L_{j'}} \mathcal{M}_{L_j}. \quad (4.15)$$

Isto é uma consequência da relação de comutação $[\hat{L}_j, \hat{L}_{j'}] = i\hbar \lambda_{j'} \wedge \lambda_j \hat{1}$ entre dois operadores de Lindblad $\hat{L}_j = \lambda_j \wedge \hat{x}$ e $\hat{L}_{j'} = \lambda_{j'} \wedge \hat{x}$, que pode ser calculada com as regras canônicas de comutação. Finalmente, podemos expressar a solução da equação mestra (4.8) com $\hat{H}_t = 0$. Usando a soma de geradores (4.10), escrevemos o SG na forma de um produto

$$\mathcal{M}_L(t) \equiv e^{t\mathcal{L}_L} = \prod_{j=1}^M e^{t\mathcal{L}_{L_j}}. \quad (4.16)$$

Quando aplicado a um operador de translação teremos:

$$\mathcal{M}_L(t) \hat{T}_\xi = \hat{T}_\xi \exp \left(-\frac{t}{2\hbar} \sum_{j=1}^M [\xi \wedge \lambda_j]^2 \right). \quad (4.17)$$

Este resultado é obtido pela atuação de diversos SG's como na equação (4.14).

4.2 Dinâmica Linear

A evolução de um sistema quântico sob a ação de um operador hamiltoniano quadrático independente do tempo segue a evolução clássica. Isto é uma consequência da covariância metapléctica da função de Wigner, fórmula (1.113). Para esta classe de sistemas, devemos utilizar um polinômio da forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{x} \cdot \mathbf{H} \hat{x}, \quad (4.18)$$

sendo que a matriz da forma quadrática $\mathbf{H} \in \hat{R}^2 \times \hat{R}^2$ é uma matriz simétrica independente do tempo. Neste caso o gerador infinitesimal da equação de Lindblad $\mathcal{L} = \mathcal{L}_H + \mathcal{L}_L$ é independente do tempo. Sem perda de generalidade, usaremos $t_0 = 0$.

A solução na forma de um SG dinâmico (4.2), com um operador hamiltoniano (4.18), é dada por

$$\hat{\rho}(t) = \mathcal{M}(t) \hat{\rho}(0) = e^{t(\mathcal{L}_H + \mathcal{L}_L)} \hat{\rho}(0). \quad (4.19)$$

A maneira na qual calcularemos a solução acima é fazendo uma discretização do tempo, dividindo em N passos o intervalo finito $t = N\Delta t$. A solução será obtida quando calcularmos o limite em que $\Delta t \rightarrow 0$. De acordo com a fórmula de Trotter [75], podemos escrever o seguinte limite:

$$\mathcal{M}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} [\mathcal{M}_L \mathcal{M}_H]^N. \quad (4.20)$$

A dinâmica que resulta do SG na equação (4.19) pode então ser tratada como o limite de sucessivas evoluções infinitesimais. Introduziremos dois mapas, cada um

devido a uma das contribuições,

$$\mathcal{M}_H = e^{\Delta t \mathcal{L}_H} \quad \text{e} \quad \mathcal{M}_L = e^{\Delta t \mathcal{L}_L} = \prod_{j=1}^M e^{\Delta t \mathcal{L}_{L_j}}. \quad (4.21)$$

Note que neste caso $\mathcal{M}_H^\dagger = e^{-\Delta t \mathcal{L}_H}$. Podemos inverter a ordem da aplicação dos mapas infinitesimais que aparecem em (4.20) porque $\mathcal{M}_H \mathcal{M}_H^\dagger = \hat{1}$. A aplicação sucessiva dos SG's definidos em (4.21) pode aparecer como

$$[\mathcal{M}_L \mathcal{M}_H]^N = (\mathcal{M}_H)^N \left[\overset{\leftarrow}{T} \prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \right], \quad (4.22)$$

sendo que

$$\tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) = (\mathcal{M}_H)^{-n} \mathcal{M}_L (\mathcal{M}_H)^n = e^{-n\Delta t \mathcal{L}_H} e^{\Delta t \mathcal{L}_L} e^{n\Delta t \mathcal{L}_H}. \quad (4.23)$$

Utilizando explicitamente a fórmula (4.7) da covariância metapléctica para os operadores de translação, calculamos a aplicação de do SG gaussiano (4.12) no operador densidade inicial,

$$e^{n\Delta t \mathcal{L}_{L_j}} \hat{\rho}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du_{j,n}}{\sqrt{2\pi\hbar\Delta t}} e^{-u_{j,n}^2/2\hbar\Delta t} \hat{T}_{u_{j,n} \lambda_j(n)} \hat{\rho}(0) \hat{T}_{u_{j,n} \lambda_j(n)}^\dagger, \quad (4.24)$$

onde definimos, com a matriz simplética $\mathbf{S}_{n\Delta t} = e^{n\Delta t \mathbf{JH}}$,

$$\lambda_j(-n) \equiv \mathbf{S}_{-n\Delta t} \lambda_j = [\mathbf{S}_{n\Delta t}]^{-1} \lambda_j. \quad (4.25)$$

O SG gaussiano passa a ser parametrizado pelo tempo $n\Delta t$. No entanto, este permanece na forma (4.12), associado a um operador de Lindblad linear. Isto permite retirar o ordenamento temporal da equação (4.22) porque os SG gaussianos comutam entre si (4.15),

$$[\mathcal{M}_L \mathcal{M}_H]^N = (\mathcal{M}_H)^N \left[\prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \right]. \quad (4.26)$$

Ao calcular para a equação acima o limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, a solução (4.19) passa a ser escrita como

$$\hat{\rho}(t) = e^{t \mathcal{L}_H} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \right] \hat{\rho}(0). \quad (4.27)$$

Considere a função característica $\chi_0(\xi) = \text{Tr} [\hat{\rho}(0) \hat{T}_{-\xi}]$, equação (1.114), no instante inicial $t_0 = 0$. Podemos escrever o operador densidade como uma expansão em termos dos operadores de translação (1.118),

$$\hat{\rho}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \chi_0(\xi) \hat{T}_{\xi}. \quad (4.28)$$

Desta forma poderemos reescrever novamente a solução (4.27),

$$\hat{\rho}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \chi_0(\xi) e^{t\mathcal{L}_H} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \right) \hat{T}_{\xi}. \quad (4.29)$$

Calcularemos a aplicação de cada um dos n mapas difusivos na equação acima com a fórmula (4.24) e com a propriedade (4.14). O resultado é o seguinte:

$$\tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \hat{T}_{\xi} = \hat{T}_{\xi} \exp \left(-\frac{\Delta t}{2\hbar} \sum_{j=1}^M [\xi \wedge (\mathbf{S}_{n\Delta t}^{-1} \lambda_j)]^2 \right). \quad (4.30)$$

Calculamos o resultado de uma das aplicações que aparece em (4.29). A composição das N aplicações é dada pela relação

$$\prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \hat{T}_{\xi} = \hat{T}_{\xi} \exp \left(-\frac{\Delta t}{2\hbar} \sum_{n,j=1}^{N,M} [\xi \wedge (\mathbf{S}_{n\Delta t}^{-1} \lambda_j)]^2 \right). \quad (4.31)$$

Vemos que a soma na exponencial desta equação é a discretização de uma integral. No limite em que $N \rightarrow \infty$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \tilde{\mathcal{M}}_L(n\Delta t) \hat{T}_{\xi} = \hat{T}_{\xi} \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_{j=1}^M \int_0^t d\tau [\xi \wedge (\mathbf{S}_{-\tau} \lambda_j)]^2 \right). \quad (4.32)$$

O resultado para o operador densidade (4.29) pode ser calculado com a covariância metaplética (4.7). Finalmente, chegamos na seguinte solução:

$$\hat{\rho}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \chi_0(\xi) \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \int_0^t d\tau [\xi \wedge (\mathbf{S}_{-\tau} \lambda_j)]^2 \right) \hat{T}_{[\mathbf{S}_t \xi]}. \quad (4.33)$$

Fazendo a mudança de variáveis $\xi' = \mathbf{S}_t \xi$ nesta solução, podemos encontrar a função característica no instante t . A solução da equação de Lindblad, em termos da função característica, é dada pela função

$$\chi_t(\xi) = \chi_0(\mathbf{S}_{-t} \xi) \exp \left(-\frac{1}{2\hbar^2} \xi \cdot \mathbf{N}_t \xi \right), \quad (4.34)$$

sendo que a matriz $\mathbf{N}_t \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ é calculada por meio da equação

$$\mathbf{N}_t = \hbar \sum_{j=1}^M \int_0^t d\tau [\mathbf{J} \mathbf{S}_{t-\tau} \lambda_j] [\mathbf{J} \mathbf{S}_{t-\tau} \lambda_j]^T \geq 0. \quad (4.35)$$

Portanto, a evolução da função característica é dada pela multiplicação de seu valor inicial propagado linearmente (de $t = 0$ até t) com uma função gaussiana. De fato, esta função representa um estado porque a matriz \mathbf{N}_t é positiva para qualquer t porque $\lambda \lambda^T \geq 0$ é uma matriz positiva. A evolução da matriz de correlação ϱ_t , definida em (1.95), pode ser calculada a partir da função característica (4.34). O resultado é obtido quando calculamos as derivadas de segunda ordem da função característica (1.117),

$$\varrho_t = \mathbf{S}_t \varrho_0 \mathbf{S}_t^T + \mathbf{N}_t, \quad (4.36)$$

com a condição inicial ϱ_0 . Vemos então que além da dispersão do estado, dada pela transformação unitária $\mathbf{S}_t \varrho_0 \mathbf{S}_t^T$, aparece um termo de ruído². Logo, o acoplamento com um reservatório faz com que a evolução do estado contenha um termo de difusão \mathbf{N}_t . Esta matriz de correlação está de acordo com o resultado dos *canais gaussianos* de Lindblad [76].

A função de Wigner é calculada como a transformada de Fourier de $\chi_t(\xi)$, fórmula (1.67),

$$W_t(X) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi \wedge X / \hbar} \chi_t(\xi). \quad (4.37)$$

²Note que poderíamos ter usado a equação mestra adjunta de (4.8) para calcular os valores médios contidos na definição (1.95) da matriz de correlação [71].

Substituindo a função característica (4.34) na equação acima e usando a função $\chi_0(\xi)$ em termos da função de Wigner inicial $W_0(X')$, fórmula (1.66), temos

$$W_t(X) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX'}{2\pi\hbar} W_0(X') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi\hbar} e^{-\xi \cdot [\mathbf{S}_t^T \mathbf{N}_t \mathbf{S}_t] \xi / 2\hbar^2 - i\xi \cdot \mathbf{J} [X - \mathbf{S}_t X'] / \hbar}. \quad (4.38)$$

Ao calcularmos a integral gaussiana e em seguida fazer uma mudança de variáveis, encontramos o resultado na forma de uma convolução da função de Wigner no instante inicial $W_0(X')$ com uma função gaussiana,

$$W_t(X) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\det \mathbf{N}_t}} \int_{-\infty}^{\infty} dX' W_0(\mathbf{S}_{-t} [X - X']) e^{-\frac{1}{2} X' \cdot [-\mathbf{J} \mathbf{N}_t \mathbf{J}]^{-1} X'}. \quad (4.39)$$

Portanto, a evolução na forma de uma convolução indica que ao longo do tempo a função de Wigner passa a ser suavizada, isto é, as oscilações da função de Wigner começam a ser apagadas. Isto pode ser entendido melhor quando notamos que *a função de Husimi é a convolução da função de Wigner com uma certa gaussiana*. Como a função de Husimi é positiva em todo o espaço de fase, em algum instante a função de Wigner vai ser positiva. Este instante pode ser chamado de tempo de positividade, ou seja, o tempo decorrido para que a função de Wigner evoluída fique positiva. Este fenômeno é chamado de descoerência, ou seja, a perda das coerências quânticas do estado.

Resumindo, encontramos na aproximação markoviana e com a propagação linear que a solução da função de Wigner é calculada como uma convolução do estado inicial e uma gaussiana. Este resultado é o mesmo daquele encontrado em outros trabalhos [67, 68, 69]. A diferença é que consideramos um reservatório puramente difusivo, no qual não há perda de energia. Na próxima seção, vamos usar esta derivação para o caso de um hamiltoniano dependente do tempo na AOA.

4.3 Propagador Semiclássico na Aproximação Markoviana

Nesta seção vamos utilizar o propagador semiclássico \hat{U}_t^{AOA} , definido em (2.42) com o operador hamiltoniano dependente do tempo \hat{H}_t^{AOA} , para a evolução de um estado coerente $|\mathcal{Z}\rangle$. A evolução do estado coerente na aproximação linear é dada por $|\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle = \hat{U}_t^{AOA} |\mathcal{Z}\rangle$. Assim, a evolução unitária pode ser compactada da seguinte forma:

$$\hat{\rho}_t^{AOA} = \mathcal{M}_H(t, 0) |\mathcal{Z}\rangle\langle\mathcal{Z}| = |\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle\langle\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})|. \quad (4.40)$$

Considere a definição (4.2), em que $\mathcal{L}_H(t)$ depende explicitamente do tempo, dado que é determinado pela hamiltoniana aproximada até segunda ordem em X na vizinhança da trajetória clássica. Podemos separar o SG dinâmico em duas partes, de maneira análoga a descrição de interação, da seguinte forma:

$$\mathcal{M}(t, 0) = \overrightarrow{T} \exp \left(\int_0^t d\tau \mathcal{L}_L + \mathcal{L}_H(\tau) \right) \equiv \mathcal{M}_H(t, 0) \tilde{\mathcal{M}}_L(t, 0), \quad (4.41)$$

em que

$$\tilde{\mathcal{M}}_L(t, 0) = \overleftarrow{T} \exp \left(\int_0^t d\tau \mathcal{M}_H^\dagger(\tau, 0) \mathcal{L}_L \mathcal{M}_H(\tau, 0) \right). \quad (4.42)$$

A segunda igualdade de (4.41) pode ser facilmente demonstrada derivando em ambos os lados e verificando que este SG é a solução da equação de Lindblad (4.8) para um operador hamiltoniano \hat{H}_t^{AOA} . O mapa (4.41) é similar ao que aparece na solução (4.27). A solução $\hat{\rho}(t) \equiv \mathcal{M}(t, 0) |\mathcal{Z}\rangle\langle\mathcal{Z}|$ pode também ser calculada com a definição (4.41) e com o fato de que $\mathcal{M}_H^\dagger(t, 0) \mathcal{M}_H(t, 0) = \hat{1}$,

$$\hat{\rho}(t) = \bar{\mathcal{M}}_L(t, 0) |\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})\rangle\langle\gamma_t^{AOA}(\mathcal{Z})|. \quad (4.43)$$

Na igualdade acima escrevemos o operador densidade no instante t de maneira que primeiro aplicamos a evolução unitária, fórmula (4.40), e depois a difusão. O novo mapa é escrito na seguinte forma:

$$\bar{\mathcal{M}}_L(t, 0) = \mathcal{M}_H(t, 0) \mathcal{M}_L(t, 0) \mathcal{M}_H^\dagger(t, 0). \quad (4.44)$$

Não é difícil demonstrar que

$$\bar{\mathcal{M}}_L(t, 0) = \prod_{j=1}^M \exp \left(\int_0^t d\tau \mathcal{M}_H(t, \tau) \mathcal{L}_{L_j} \mathcal{M}_H^\dagger(t, \tau) \right), \quad (4.45)$$

onde usamos a comutação entre os SG gaussianos. Usando este SG escrito como uma soma, discretizando o tempo $\tau_n = n\Delta t$,

$$\bar{\mathcal{M}}_L(t, 0) = \prod_{n,j=1}^{N,M} e^{\Delta t \mathcal{L}_{L_j}(t, \tau_n)}, \quad (4.46)$$

podemos escrever para cada instante τ_n a expressão

$$e^{\Delta t \mathcal{L}_{L_j}(t, \tau_n)} \hat{\rho} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du_{j,n}}{\sqrt{2\pi\hbar\Delta t}} e^{-u_{j,n}^2/2\hbar\Delta t} \hat{T}_{u_{j,n} \lambda_j(n)} \hat{\rho} \hat{T}_{u_{j,n} \lambda_j(n)}^\dagger, \quad (4.47)$$

onde

$$\lambda_j(n) \equiv \mathbf{S}(t, t_n) \lambda_j. \quad (4.48)$$

Na última igualdade usamos a propriedade da matriz inversa $\mathbf{S}^{-1}(t_n, t_0) = \mathbf{S}(t_0, t_n)$ e a regra da composição de grupo $\mathbf{S}(t, t_0) \mathbf{S}(t_0, t_n) = \mathbf{S}(t, t_n)$ das matrizes simpléticas.

De acordo com os últimos resultados e com o estado $\hat{\rho}_t^{AOA}$ definido em (4.40), teremos a solução $\hat{\rho}(t)$ a partir das equações (4.43) e (4.47) na forma

$$\hat{\rho}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\prod_{n,j=1}^{N,M} du_{n,j}}{(2\pi\hbar\Delta t)^{NM/2}} \exp \left(- \sum_{n,j=1}^{N,M} \frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t} \right) \hat{T}_{\mu_{n,j}(t)} \hat{\rho}_t^{AOA} \hat{T}_{\mu_{n,j}(t)}^\dagger, \quad (4.49)$$

em que

$$\mu_{n,j}(t) = \sum_{n,j=1}^{N,M} u_{n,j} \mathbf{S}(t, t_n) \lambda_j. \quad (4.50)$$

Na solução (4.49) desprezamos os termos no argumento da exponencial da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)$, que é exata quando tomamos o limite $\Delta t \rightarrow 0$. O operador densidade em um instante de tempo t é expresso em termos da função característica (1.118). Calcularemos $\chi_t(\xi) = \text{Tr} \left[\hat{\rho}(t) \hat{T}_{-\xi} \right] / 2\pi\hbar$, usando a propriedade cíclica do traço e a fórmula (4.14),

$$\chi_t(\xi) = \frac{\text{Tr} \left[\hat{\rho}_t^{AOA} \hat{T}_{-\xi} \right]}{2\pi\hbar} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n,j=1}^{N,M} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du_{n,j}}{(2\pi\hbar\Delta t)^{NM/2}} e^{\frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{i}{\hbar} \xi \wedge \mu_{n,j}(t)}. \quad (4.51)$$

A partir disto, calculamos as integrais gaussianas,

$$\chi_t(\xi) = \frac{\text{Tr} \left[\hat{\rho}_t^{AOA} \hat{T}_{-\xi} \right]}{2\pi\hbar} \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left(-\frac{\Delta t}{2\hbar} \sum_{n,j=1}^{N,M} (\xi \wedge [\mathbf{S}(t, t_n) \lambda_j])^2 \right). \quad (4.52)$$

O limite envolvido pode ser calculado, de tal forma que passamos de uma soma para uma integral no tempo. A solução, na forma final, é a seguinte:

$$\chi_t(\xi) = \frac{\text{Tr} \left[\hat{\rho}_t^{AOA} \hat{T}_{-\xi} \right]}{2\pi\hbar} \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_{j=1}^M \int_0^t d\tau (\xi \wedge [\mathbf{S}(t, \tau) \lambda_j])^2 \right). \quad (4.53)$$

Utilizando a expressão explícita da função característica de um estado coerente, verificamos que de fato o estado continua a ser uma função gaussiana,

$$\chi_t(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left(-\frac{1}{8} \xi \cdot \varrho_t^{-1} \xi + \frac{i}{\hbar} \xi \wedge \mathbf{Z}_t \right), \quad (4.54)$$

em que

$$\varrho_t^{-1} = [\mathbf{S}(t, 0) \sigma^2 \mathbf{S}^T(t, 0)]^{-1} + \frac{4}{\hbar^2} \mathbf{N}_t, \quad (4.55)$$

e

$$\mathbf{N}_t = \hbar \sum_{j=1}^L \int_0^t d\tau [\mathbf{J}\mathbf{S}(t, \tau) \lambda_j] [\mathbf{J}\mathbf{S}(t, \tau) \lambda_j]^T. \quad (4.56)$$

Podemos calcular a função de Wigner a partir da transformada de Fourier da função (4.54). O resultado é o seguinte:

$$W_t(X) = \frac{1}{\pi\hbar\sqrt{\det \varrho_t}} \exp \left(-\frac{1}{2} (X - \mathbf{Z}_t) \cdot [-\mathbf{J} \varrho_t \mathbf{J}] (X - \mathbf{Z}_t) \right). \quad (4.57)$$

Note que este estado é uma gaussiana, na forma da equação (1.106). Temos duas conclusões imediatas com desta solução: (i) o centro do estado se move na trajetória clássica \mathbf{Z}_t e (ii) o efeito do acoplamento com um reservatório é dado pela adição de uma matriz de difusão \mathbf{N}_t na matriz de correlação do estado coerente $|\mathcal{Z}\rangle$.

4.4 Função de Wigner na AOA

O resultado desta seção utiliza a aproximação semiclássica (AOA) para a evolução de um estado inicial gaussiano decomposto em termos dos estados coerentes (3.22),

em um sistema acoplado a um reservatório difusivo. O operador densidade inicial que vamos utilizar é dado por

$$|\gamma\rangle\langle\gamma| = \int_{-\infty}^{\infty} dQ_+ \int_{-\infty}^{\infty} dQ_- F_{L,d}(Q_+) F_{L,d}(Q_-) |Q_-\rangle\langle Q_+|. \quad (4.58)$$

Em última análise, precisaremos evoluir um diádico da forma $\hat{\rho}^{(\pm)} \equiv |Q_-\rangle\langle Q_+|$. A parte unitária da evolução é calculada segundo o propagador semiclássico

$$\mathcal{M}_H^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)} = \hat{U}_t^{AOA}(Q_-) \hat{\rho}^{(\pm)} \hat{U}_t^{\dagger AOA}(Q_+) = |\gamma_t^{AOA}(Z_-)\rangle\langle\gamma_t^{AOA}(Z_+)|. \quad (4.59)$$

Em analogia com a equação (4.43), podemos escrever a solução

$$\mathcal{M}^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)} = \bar{\mathcal{M}}_L^{(\pm)}(t) |\gamma_t^{AOA}(Z_-)\rangle\langle\gamma_t^{AOA}(Z_+)| \equiv \bar{\mathcal{M}}_L^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)AOA}, \quad (4.60)$$

contanto que

$$\bar{\mathcal{M}}_L^{(\pm)}(t) = \mathcal{M}_H^{(\pm)}(t) \mathcal{M}_L^{(\pm)}(t) \mathcal{M}_H^{(\pm)\dagger}(t). \quad (4.61)$$

Usaremos que o mapa que aparece em (4.61), aplicado no diádico, pode ser escrito de uma maneira compacta a partir da discretização do tempo com em (4.49),

$$\mathcal{M}^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\prod_{n,j=1}^{N,M} du_{n,j}}{(2\pi\hbar\Delta t)^{NM/2}} \exp\left(-\sum_{n,j=1}^{N,M} \frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t}\right) \hat{T}_{\mu_1(t)} \hat{\rho}^{(\pm)AOA} \hat{T}_{\mu_2(t)}^\dagger. \quad (4.62)$$

Na equação acima desprezamos os termos no argumento da exponencial da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)$. No limite em que $\Delta t \rightarrow 0$ está fórmula é exata. Definimos $t_n = n\Delta\tau$ e também

$$\mu_{\pm}(t) \equiv \sum_{n,j=1}^{N,M} u_{n,j} \mathbf{S}_{\pm}(t, t_0) \mathbf{S}_{\pm}^{-1}(t_n, t_0) \lambda_j = \sum_{n,j=1}^{N,M} u_{n,j} \mathbf{S}_{\pm}(t, t_n) \lambda_j. \quad (4.63)$$

Nesta definição usamos a propriedade $\mathbf{S}_{\pm}^{-1}(t_n, t_0) = \mathbf{S}_{\pm}(t_0, t_n)$ e a regra da composição de grupo $\mathbf{S}_{\pm}(t, t_0) \mathbf{S}_{\pm}(t_0, t_n) = \mathbf{S}_{\pm}(t, t_n)$. A partir daqui não conseguiremos calcular a difusão. Entretanto, se utilizarmos

$$v_{\pm}(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,j=1}^{N,M} u_{n,j} [\mathbf{S}_+(t, t_n) \pm \mathbf{S}_-(t, t_n)] \lambda_j \equiv \sum_{n,j=1}^{N,M} u_{n,j} \mathbf{V}_{\pm}(t, t_n) \lambda_j, \quad (4.64)$$

poderemos reescrever o mapa de uma maneira diferente

$$\mathcal{M}^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\prod_{n,j=1}^{N,M} du_{n,j}}{(2\pi\hbar\Delta t)^{NM/2}} \exp\left(-\sum_{n,j=1}^{N,M} \frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t}\right) \hat{T}_{v_+(t)} \hat{T}_{v_-(t)} \hat{\rho}_t^{(\pm)AOA} \hat{T}_{v_-(t)} \hat{T}_{v_+(t)}^\dagger. \quad (4.65)$$

Nesta equação também estamos desprezando termos porque estamos considerando $\Delta t \rightarrow 0$. A solução para a contribuição da função característica

$$\chi_t^{(\pm)}(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \text{Tr} \left[\mathcal{M}^{(\pm)}(t) \hat{\rho}^{(\pm)} \hat{T}_{-\xi} \right] \quad (4.66)$$

é a seguinte:

$$\chi_t^{(\pm)}(\xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\prod_{n,j=1}^{N,M} du_{n,j}}{(2\pi\hbar\Delta t)^{NM/2}} \exp\left(-\sum_{n,j=1}^{N,M} \frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t}\right) \langle \gamma_t^{AOA}(Z_+) | \hat{T}_{v_-(t)} \hat{T}_{v_+(t)}^\dagger \hat{T}_{-\xi} \hat{T}_{v_+(t)} \hat{T}_{v_-(t)} | \gamma_t^{AOA}(Z_-) \rangle. \quad (4.67)$$

A parte correspondente a v_+ é o deslocamento (1.45), de onde encontramos

$$\hat{T}_{v_+(t)}^\dagger \hat{T}_{-\xi} \hat{T}_{v_+(t)} = \hat{T}_{-\xi} e^{-i\xi \wedge v_+(t)/\hbar}. \quad (4.68)$$

Utilizaremos o operador de translação escrito como a transformada de Fourier do operador de reflexão, fórmula (1.49), para calcular com as identidades (1.52) e (1.53), a seguinte relação:

$$\hat{T}_{v_-(t)} \hat{R}_X \hat{T}_{v_-(t)} = \hat{R}_X e^{-i v_-(t) \wedge 2X/\hbar}. \quad (4.69)$$

Utilizaremos a partir de agora a definição que aparece na equação (3.36), $C_t(X - \bar{X}_t) e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} = \langle \gamma_t^{AOA}(Z_+) | \hat{R}_X | \gamma_t^{AOA}(Z_-) \rangle / \pi\hbar$. O resultado da difusão pode ser calculado, a partir das duas últimas relações, de onde obtemos

$$\chi_t^{(\pm)}(\xi) = e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX}{2\pi\hbar} e^{-i\xi \wedge X/\hbar} C_t(X - \bar{X}_t) \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n,j=1}^{N,M} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{du_{n,j}}{\sqrt{2\pi\hbar\Delta t}} \exp\left(-\frac{u_{n,j}^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{i u_{n,j}}{\hbar} (v_+(t) \wedge \xi + v_-(t) \wedge 2X)\right) \right]. \quad (4.70)$$

Calculando cada uma das integrais gaussianas, obtemos

$$\chi_t^{(\pm)}(\xi) = e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX}{2\pi\hbar} e^{-i\xi X/\hbar} C_t(X - \bar{X}_t) \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left(-\frac{\Delta t}{2\pi} \sum_{n,j=1}^{N,M} ([\mathbf{V}_+(t, t_n) \lambda_j] \wedge \xi + [\mathbf{V}_-(t, t_n) \lambda_j] \wedge 2X)^2 \right). \quad (4.71)$$

No limite em que $N \rightarrow \infty$, mantendo $t = N\Delta\tau$ fixo, a solução final para $\chi_t^{(\pm)}(\xi)$ é a seguinte:

$$\chi_t^{(\pm)}(\xi) = e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX}{2\pi\hbar} e^{-i\xi X/\hbar - \mathcal{D}(X, \xi)/2\hbar} C_t(X - \bar{X}_t), \quad (4.72)$$

sendo que com $L_j(X_{\pm}) \equiv \lambda_j \wedge \mathbf{S}_{\pm}^{-1}(t, \tau)[X \pm \xi/2]$, podemos escrever

$$\mathcal{D}(X, \xi) = \sum_{j=1}^M \int_0^t d\tau [L_j(X_+) - L_j(X_-)]^2. \quad (4.73)$$

A definição da distância $\mathcal{D}(X, \xi)$ entre os símbolos de Weyl dos operadores de Lindblad está relacionada com a descoerência [65, 70]. Isto determina que no limite semiclássico, o processo de descoerência estabelece um decaimento exponencial da amplitude, que depende da distância entre as funções $L_j(X_{\pm})$ calculadas nos extremos da corda (que no instante t) passa pelo ponto X . Em particular, a contribuição dos termos diagonais da equação (4.72), $\mathbf{S}_+(t, t_0) = \mathbf{S}_-(t, t_0)$, são obtidos para uma única linearização (como na seção anterior) e a distância $\mathcal{D}(X, \xi) \rightarrow \xi \cdot \mathbf{N}_t \xi / \hbar$. Assim, recuperamos a solução da função característica da seção anterior (4.54). Enquanto as contribuições diagonais são dadas por convoluções, as contribuições não diagonais são amortecidas.

A função de Wigner $W_t^{(\pm)}(X)$ é calculada como a transformada de Fourier da função (4.72). Com efeito:

$$W_t^{(\pm)}(X) = e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX'}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi\hbar} e^{-i\xi \wedge [X - X']/\hbar - \mathcal{D}(X, \xi)/2\hbar} C_t(X' - \bar{X}_t). \quad (4.74)$$

Vemos então que no regime markoviano, a função de Wigner na aproximação AOA (3.36) pode ser calculada por meio da equação

$$W_t^{AOA}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} dQ_+ \int_{-\infty}^{\infty} dQ_- F_{L,d}(Q_+) F_{L,d}(Q_-) e^{i[\Gamma_t(Q_+) - \Gamma_t(Q_-)]/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX'}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi\hbar} e^{-i\xi\wedge[X-X']/\hbar - \mathcal{D}(X,\xi)/2\hbar} C_t(X' - \bar{X}_t). \quad (4.75)$$

Portanto, apresentamos uma maneira de propagar a função de Wigner de um sistema acoplado com um reservatório difusivo no limite semiclássico. Nesta configuração, encontramos uma descrição para a descoerência no espaço de fase. A vantagem deste resultado é não conter singularidades, i.e., este é uniforme em todo o espaço de fase.

Capítulo 5

Conclusão

Descrevemos de forma quantitativa a evolução semiclássica de um estado gaussiano aplicando dois métodos, usando a teoria WKB dependente do tempo e a aproximação uniforme construída com a AOA. Acreditamos que este é o primeiro trabalho sobre a propagação dos estados gaussianos sob a ação de uma dinâmica caótica que usou explicitamente a teoria WKB dependente do tempo [77].

Adaptamos a idéia de Berry e Balazs [4] com o objetivo de propagar um estado gaussiano por meio da teoria WKB dependente do tempo. Para fazermos isto, consideramos uma amplitude inicial gaussiana e usamos o fato de que numa dinâmica caótica a variedade instável fornece o suporte para a função de onda WKB inicial. Mostramos que com este esquema a amplitude e a fase da função de Wigner semiclássica são calculadas a partir das propriedades geométricas da evolução desta variedade lagrangeana. Esta descrição tem um forte apelo geométrico, e para intervalos de tempo não muito longos pode ter uma excelente concordância com a solução quântica. Isto foi verificado quando comparamos as seções da função de Wigner na aproximação semiclássica com a solução numérica do oscilador harmônico chutado no regime de caos forte. O declínio da aproximação WKB deve ocorrer em um tempo que diverge como $\log \hbar$ [54, 78], ou talvez, como alguma lei de potência de \hbar [79, 80, 81]. Com o passar do tempo, os mecanismos que esticam e dobram a variedade fazem com que a aproximação semiclássica não possa ser mais aplicada. Isto

ocorre porque começam a surgir estruturas na variedade instável na escala quântica, isto é, da ordem de \hbar (em um grau de liberdade). Em suma, os *estágios iniciais* da dinâmica (caótica) de um estado gaussiano podem ser quantitativamente descritos com a teoria WKB dependente do tempo.

Observamos que na aproximação WKB a função de Wigner diverge na vizinhança dos pontos de cáustica. Como estamos interessados em um método semiclassico que possa ser usado em aplicações práticas, prosseguimos de forma a elaborar uma aproximação uniforme construída com a propagação linear dos estados coerentes. Este método utiliza a decomposição do estado inicial, na qual os estados coerentes envolvidos têm sua evolução aproximada pelo método AOA. Neste esquema, a função de Wigner é não-singular em todo ponto do espaço de fase, i.e., não contém pontos de cáustica, e portanto, pode ser muito útil para aplicações¹. Calculamos a função de Wigner na AOA para o oscilador harmônico chutado e a comparamos com certas seções da solução exata da função de Wigner. Vimos que nos estágios iniciais a função de Wigner pode ser bem aproximada por este método, sendo que a fase é melhor reproduzida do que a amplitude. A concordância é satisfatória em regiões do espaço de fase na qual os estados da decomposição que participam da superposição nesta região se mantêm aproximadamente gaussianos. Em certas regiões, a distorção não-linear daqueles estados que participam da superposição faz com que a aproximação por meio da propagação linear não seja muito boa. Isto explica a discordância da amplitude da função de Wigner na AOA quando comparada com a solução exata. Diminuindo a constante de Planck efetiva do oscilador harmônico chutado, mostramos que a fidelidade do estado na aproximação AOA, com respeito a evolução exata, tende assintoticamente ao seu valor máximo. Mais ainda, calculamos a distância média (no espaço de fase) entre as funções de Wigner exata e

¹Existe no grupo de caos quântico do CBPF um estudo da aproximação AOA que foi dirigido para o oscilador harmônico chutado [52]. Nesta tese mostramos como aplicar este esquema para qualquer sistema caótico.

semiclássica, confirmando a acurácia da aproximação na medida em que entramos cada vez mais no regime semiclássico ($\hbar \rightarrow 0$).

Conforme foi observado no exemplo numérico (OHC), cada uma das aproximações adotadas tem suas vantagens e desvantagens. Podemos afirmar que a função de Wigner na AOA é mais sensível as não-linearidades clássicas do que o resultado obtido com a teoria WKB. No entanto, a aproximação WKB para a função de Wigner contém cáusticas. Ao invés de desenvolvermos uma teoria WKB uniforme ou de transição para cada região na vizinhança da cáustica (local), o método elaborado com a AOA é globalmente uniforme.

Na aproximação markoviana, mostramos como calcular a função de Wigner na AOA. Observamos que o resultado obtido nesta tese é similar a dois outros trabalhos existentes na literatura [65, 70]. O próximo passo, provavelmente, seria incluir a dissipação neste resultado usando operadores de Lindblad não-hermitianos. A razão pela qual deduzimos esta fórmula é porque pretendemos aplicar a aproximação AOA no estudo da transição quântico-clássico. Concretamente, uma possível continuação desta tese será elaborar uma dedução analítica para dependência da taxa de crescimento da entropia linear com o expoente de Lyapunov. Existem evidências numéricas deste fato para o oscilador de Duffing forçado [9, 10].

Outras possíveis continuações deste trabalho são: (i) Demonstrar, numericamente, que a evolução quântica exata de um estado gaussiano “redondo” permite usar, após um certo tempo, a teoria WKB dependente do tempo [77]. Feito isto, pode-se investigar a descoerência dos estados gaussianos [65]. (ii) Uma questão que ficou em aberto é a relação entre as duas aproximações semiclássicas usadas no capítulo 3, isto é, tentar demonstrar analiticamente que o termo assintótico ($\hbar \rightarrow 0$) da função de Wigner nas duas aproximações fornece o mesmo resultado. (iii) Uma abordagem elegante seria usar o método das gaussianas congeladas (*frozen gaussians*) desenvolvida por Heller [48]. Por fim, (iv) uma aplicação interessante das teorias

semiclássicas apresentadas nesta tese seria o *echo de Loschmidt*, como foi analisado em [82].

Apêndice A

Representações Integrais

Este apêndice contém algumas fórmulas que foram utilizadas ao longo desta tese. Aqui vamos discutir brevemente as distribuições delta, as transformadas de Fourier de uma função gaussiana e a integral de Fresnel.

Distribuição Delta

A distribuição delta para o caso multidimensional, usando os vetores reais $X, X', \xi \in \mathbb{R}^{2N}$ no espaço de fase, pode ser definida pela representação integral

$$\delta(X - X') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2N}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{i}{\hbar} \xi \wedge (X - X')\right). \quad (\text{A.1})$$

A propriedade mais importante desta distribuição é a seguinte:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX' f(X') \delta(X - X') = f(X). \quad (\text{A.2})$$

Note que a distribuição delta multidimensional desacopla em distribuições unidimensionais, $\delta(X) = \delta(P) \delta(Q)$.

Integral gaussiana

Considere uma matriz complexa simétrica $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{2N} \times \mathbb{C}^{2N}$, com autovalores complexos $\kappa_j(\mathbf{A})$, $j = 1, \dots, 2N$. Mais ainda, iremos supor que a parte real da matriz é positiva semidefinida, $\text{Re} \mathbf{A} \geq 0$, o que significa que a forma quadrática

$X \cdot \text{Re} \mathbf{A} X \geq 0$ para todo $X \in \mathbb{R}^{2N}$ - ou simplesmente que $\text{Re} \kappa_j(\mathbf{A}) \geq 0$, $j = 1, \dots, 2N$. Para um vetor $\xi \in \mathbb{R}^{2N}$ e $a > 0$, é válido o resultado para a seguinte integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX \exp \left(-\frac{1}{2a} X \cdot \mathbf{A} X - i \xi \cdot X \right) = \frac{(2\pi a)^N}{[\det \mathbf{A}]^{1/2}} \exp \left(-\frac{a}{2} \xi \cdot \mathbf{A}^{-1} \xi \right). \quad (\text{A.3})$$

A demonstração desta fórmula pode ser encontrada no livro do Folland [24]. A raiz quadrada do determinante

$$[\det \mathbf{A}]^{-1/2} = |\det \mathbf{A}|^{-1/2} \exp(-i \text{Ind} \mathbf{A}), \quad (\text{A.4})$$

fica determinada pela escolha do corte do plano complexo

$$\text{Ind} \mathbf{A} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2N} \arg \kappa_j(\mathbf{A}), \quad |\arg \kappa_j(\mathbf{A})| \leq \frac{\pi}{2}. \quad (\text{A.5})$$

Este corte fica logo acima do *semi-eixo real negativo*, como é mostrado na figura A.1. As duas soluções para a raiz quadrada de $\kappa_j(\mathbf{A})$ são

$$[\kappa_j(\mathbf{A})]^{1/2} = |\kappa_j(\mathbf{A})|^{1/2} e^{i \arg \kappa_j(\mathbf{A})/2} \quad (\text{A.6})$$

e

$$[\kappa_j(\mathbf{A})]^{1/2} = |\kappa_j(\mathbf{A})|^{1/2} e^{i \arg \kappa_j(\mathbf{A})/2 + \pi}. \quad (\text{A.7})$$

No entanto, somente uma destas encontra-se no intervalo (A.5).

Integral de Fresnel

Considere agora que a matriz da forma quadrática que aparece na equação (A.3) é uma matriz cuja parte real é nula. Dado que a matriz \mathbf{A} é simétrica, sempre podemos colocá-la em uma forma diagonal usando uma matriz ortogonal $\mathbf{O} = \mathbf{O}^T$, i.e., $\mathbf{O} \mathbf{A} \mathbf{O}^T = \text{diag}(a_1, \dots, a_{2N})$. Podemos facilmente calcular $\det(-i \mathbf{A}) = \det(-i \mathbf{D}) = (-i a_1) \cdots (-i a_{2N})$. Decorre então que a razão vale

$$\frac{[\det(-i \mathbf{A})]^{1/2}}{|\det \mathbf{A}|^{1/2}} = \prod_{j=1}^{2N} \left[-i \frac{a_j}{|a_j|} \right]^{1/2}. \quad (\text{A.8})$$

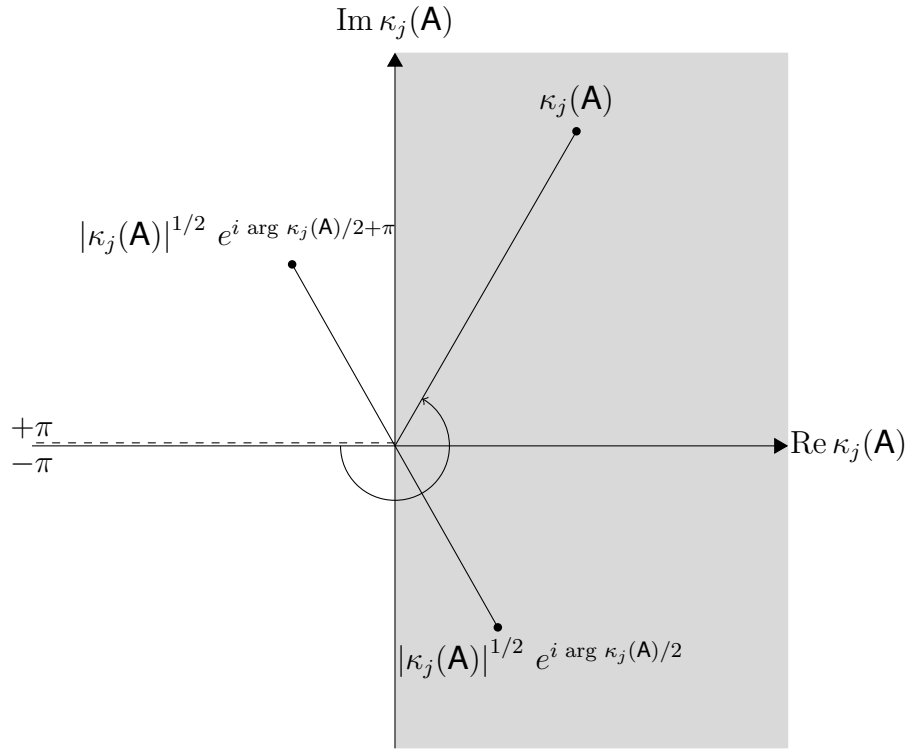


Figura A.1: O corte do plano complexo fica logo acima do semi-eixo real negativo e por esta razão a raiz quadrada de $\kappa_j(\mathbf{A})$ deve estar no intervalo tal que $|\kappa_j(\mathbf{A})/2| \leq \pi/2$. Este intervalo estabelece que a raiz $[\kappa_j(\mathbf{A})]^{1/2}$ escolhida deve estar no semi-plano real positivo (área hachurada).

O número imaginário puro que aparece do lado direito da igualdade deve assumir os valores $-i a_j/|a_j| = \mp i$ para a_j positivo ou negativo, respectivamente. Segundo a definição do corte (A.5) do plano complexo $\sqrt{\pm i} = e^{\pm i\pi/4}$,

$$\frac{[\det(-i\mathbf{A})]^{1/2}}{|\det \mathbf{A}|^{1/2}} = \exp\left(-\frac{i\pi}{4} \sum_{j=1}^{2N} \frac{a_j}{|a_j|}\right), \quad (\text{A.9})$$

e portanto, a relação que encontramos é

$$[\det(-i\mathbf{A})]^{1/2} = |\det \mathbf{A}|^{1/2} \exp\left(-\frac{i\pi}{4} \text{sgn } \mathbf{A}\right). \quad (\text{A.10})$$

A função sinal de uma matriz \mathbf{A} é a seguinte:

$$\text{sgn } \mathbf{A} = \sum_{j=1}^{2N} \frac{a_j}{|a_j|} = \zeta_+ - \zeta_-, \quad (\text{A.11})$$

sendo ζ_+ e ζ_- o número de autovalores positivos e negativos da matriz \mathbf{A} , respectivamente. Esta função assume valores inteiros, $\text{sgn} : \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{Z}$, que ficam no intervalo $-N \leq \text{sgn } \mathbf{A} \leq N$. Com este resultado, podemos obter o limite da fórmula (A.3) em que a parte real da matriz da forma quadrática vai a zero. A integral da exponencial puramente imaginária vale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX \exp\left(\frac{i}{2\hbar} X \cdot \mathbf{A} X\right) = \frac{(2\pi\hbar)^N}{|\det \mathbf{A}|^{1/2}} \exp\left(\frac{i\pi}{4} \text{sgn } \mathbf{A}\right). \quad (\text{A.12})$$

A demonstração desta fórmula pode ser encontradas no apêndice A do livro do Folland [24].

Uma outra expressão que será útil é a matriz inversa de uma matriz complexa. Considere a relação

$$[\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} = [\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} [\mathbf{B} - i\mathbf{C}] [\mathbf{B} - i\mathbf{C}]^{-1}. \quad (\text{A.13})$$

A parte real da matriz $[\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1}$ vale

$$\text{Re} [\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} = [\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} \mathbf{B} [\mathbf{B} - i\mathbf{C}]^{-1} = [\mathbf{B} + \mathbf{C}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}]^{-1}, \quad (\text{A.14})$$

e a parte imaginária vale

$$\text{Im} [\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} = -[\mathbf{B} + i\mathbf{C}]^{-1} \mathbf{C} [\mathbf{B} - i\mathbf{C}]^{-1} = -[\mathbf{C} + \mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}]^{-1}. \quad (\text{A.15})$$

Apêndice B

Funções de Airy

Uma função especial bastante estudada na literatura de física semiclássica é a função de Airy. Essa função é a solução da seguinte equação diferencial:

$$\frac{d^2}{dz^2} f(z) - z f(z) = 0. \quad (\text{B.1})$$

As três soluções não triviais desta equação [83] podem ser escritas como

$$f_n(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_n} d\eta \exp\left(-\frac{1}{3}\eta^3 + \eta z\right), \quad n = 1, 2, 3. \quad (\text{B.2})$$

A integração é feita no plano complexo com $\eta = r + i s$ e $d\eta = dr ds$. Os contornos de integração possíveis \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 e \mathcal{C}_3 são mostrados na figura B.1. Note que o plano complexo está dividido em três setores,

$$-\frac{\pi}{6} < \arg(\eta) < \frac{\pi}{6}, \quad \frac{\pi}{2} < \arg(\eta) < \frac{5\pi}{6}, \quad -\frac{5\pi}{6} < \arg(\eta) < -\frac{\pi}{2}, \quad (\text{B.3})$$

e que cada um dos contornos começa no infinito de um setor e termina no infinito de um dos outros dois setores. Mais ainda, qualquer deformação do contorno \mathcal{C}_1 , i.e., um contorno que começa no infinito do último dos setores em (B.3) e que termina no infinito do primeiro dos setores em (B.3) determina uma mesma solução $f_1(z)$. Analogamente, contornos que são deformações de \mathcal{C}_2 fornecem uma mesma solução $f_2(z)$ e contornos que são deformações de \mathcal{C}_3 fornecem uma mesma solução $f_3(z)$.

A solução $f_1(z) = \text{Ai}(z)$ é usualmente chamada de função de Airy de *primeira espécie*, ou simplesmente função de Airy. As duas outras soluções $f_2(z)$ e $f_3(z)$

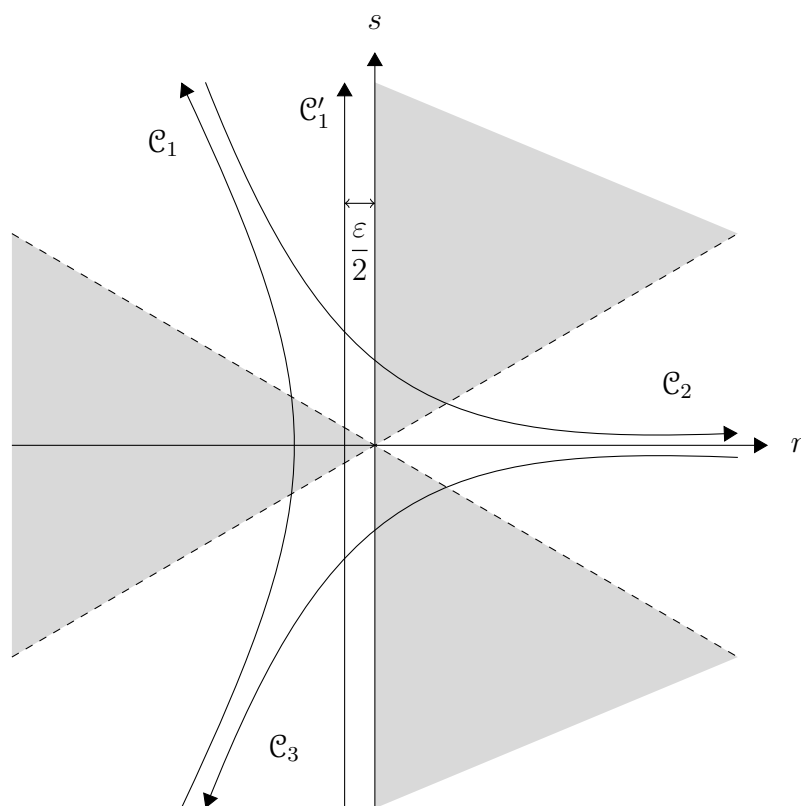


Figura B.1: Contornos \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 e \mathcal{C}_3 para as representações integrais da função de Airy. O Contorno \mathcal{C}'_1 é contruído quando deformamos o contorno \mathcal{C}_1 no eixo imaginário s e depois o deslocamos para $-\varepsilon/2 + i s$.

podem ser escritas em termos da função de Airy. A relação entre $f_2(z)$ e a função de Airy é dada por

$$f_2(z) = e^{-2\pi i/3} \text{Ai}(z e^{-2\pi i/3}), \quad (\text{B.4})$$

e entre $f_3(z)$ e a função de Airy por

$$f_3(z) = e^{2\pi i/3} \text{Ai}(z e^{2\pi i/3}). \quad (\text{B.5})$$

Pode-se elaborar uma outra solução da equação (B.1), linearmente independente da função $\text{Ai}(z)$, definindo $\text{Bi}(z) = i[f_2(z) - f_3(z)]$, conhecida com função de Airy de *segunda espécie*. A função de Airy tende assintoticamente a zero para $z \rightarrow \pm \infty$ enquanto que a função $\text{Bi}(z)$ diverge para tais valores.

Em especial, nosso interesse é uma função de argumento real $z = x \in \mathbb{R}$, o que permite deformar o contorno \mathcal{C}_1 no eixo imaginário, $\text{Im } \eta = s$ e $\text{Re } \eta = 0$. Quando usamos este contorno e fazemos a mudança $-i\eta = s$, o resultado é a função de Airy real

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left(\frac{i}{3}s^3 + i s x\right). \quad (\text{B.6})$$

Esta definição está devidamente normalizada. Pode-se usar o fato de que esta função é real para reescrevê-la como

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} ds \cos\left(\frac{1}{3}s^3 + s x\right). \quad (\text{B.7})$$

Na parte (a) da figura B.2 é mostrado o gráfico da função de Airy. Para valores de $x > 0$ a função decai enquanto que para valores $x < 0$ a função apresenta oscilações antes de decair para zero. Para valores negativos e grandes ($x \leq -1$) vale a fórmula assintótica

$$\text{Ai}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-x)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-x)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{B.8})$$

Quando $x \gg 1$, a expansão assintótica é dada por

$$\text{Ai}(x) \sim \frac{x^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{2x^{3/2}}{3}\right) \left[1 - \frac{5}{72} \left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)^{-1} + \dots\right] \quad (\text{B.9})$$

Em especial, temos a possibilidade de escrever a função delta como um limite da função de Airy,

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a} \text{Ai}\left(\frac{x}{a}\right). \quad (\text{B.10})$$

Nesta equação temos a versão unidimensional da distribuição delta (A.1).

Quando estudamos o modelo parabólico no capítulo 2, nos deparamos com uma representação integral da forma

$$I_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left(\frac{i}{3}s^3 + i s x - \frac{\varepsilon}{2}s^2\right). \quad (\text{B.11})$$

A função integral $I_\varepsilon(x)$ pode ser expressa em termos da função de Airy. Basta considerar a deformação do contorno \mathcal{C}_1 no eixo imaginário s e em seguida deslocá-lo para o eixo $-\varepsilon/2 + i s$, com um valor ε constante. O contorno \mathcal{C}'_1 que acabamos

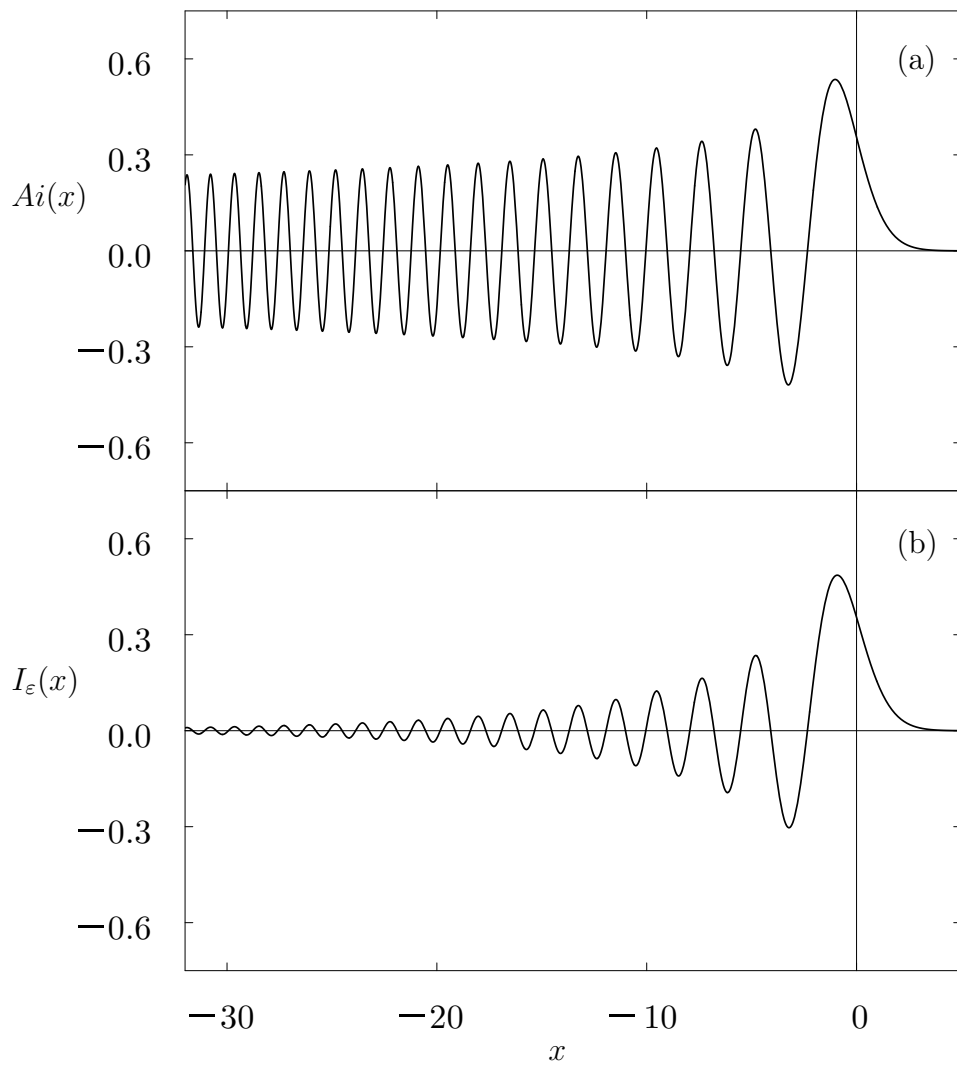


Figura B.2: Na parte (a) temos o gráfico da função de Airy. Na parte (b) mostramos o gráfico da função $I_\varepsilon(x)$ para $\varepsilon = 0.1$, fórmula (B.11). A função $I_\varepsilon(x)$ decai à zero mais rapidamente do que a função $Ai(x)$ para valores $x < 0$.

de definir é mostrado na figura B.1, e fica no primeiro dentre os setores definidos em (B.3). Para calcular tal integração usamos a definição da função de Airy (B.2) para um argumento real em particular,

$$\text{Ai} \left(x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}'_1} d\eta \exp \left(-\frac{1}{3} \eta^3 + \eta \left[x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right] \right). \quad (\text{B.12})$$

O contorno \mathcal{C}'_1 é determinado pelo eixo $-\varepsilon/2 + i s$, paralelo ao eixo imaginário, sendo que a parte imaginária s varia de $-\infty$ a $+\infty$. Assim, a função de Airy fica determinada pela seguinte integral de contorno:

$$\text{Ai} \left(x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\varepsilon/2-i\infty}^{-\varepsilon/2+i\infty} d(-i\eta) \exp \left(-\frac{1}{3} \eta^3 + \eta \left[x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right] \right). \quad (\text{B.13})$$

Com a mudança de variável $-i\eta = s + i\varepsilon/2$ conseguimos expressar a integral como

$$\text{Ai} \left(x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp \left(\frac{i}{3} \left(s + \frac{i\varepsilon}{2} \right)^3 + i \left(s + \frac{i\varepsilon}{2} \right) \left[x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right] \right). \quad (\text{B.14})$$

O polinômio que aparece no argumento da exponencial pode também ser escrito como

$$\frac{i}{3} \left(s + \frac{i\varepsilon}{2} \right)^3 + i \left(s + \frac{i\varepsilon}{2} \right) \left[x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right] = \frac{i}{3} s^3 + i s x - \frac{\varepsilon}{2} s^2 - \frac{\varepsilon^3}{12} - \frac{\varepsilon}{2} x, \quad (\text{B.15})$$

e portanto,

$$\text{Ai} \left(x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right) = \exp \left(-\frac{\varepsilon^3}{12} - \frac{\varepsilon}{2} x \right) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp \left(\frac{i}{3} s^3 + i s x - \frac{\varepsilon}{2} s^2 \right). \quad (\text{B.16})$$

Na última igualdade apareceu a função integral (B.11) que nada mais é do que um amortecimento de uma função de Airy *deslocada*,

$$I_\varepsilon(x) = \exp \left(\frac{\varepsilon}{2} x + \frac{\varepsilon^3}{12} \right) \text{Ai} \left(x + \frac{\varepsilon^2}{4} \right). \quad (\text{B.17})$$

No painel (b) da figura B.2 é mostrado o gráfico da função $I_\varepsilon(x)$ com $\varepsilon = 0.1$. Note que o amortecimento faz com a função $I_\varepsilon(x)$ tenda à zero com mais rapidez do que a função $\text{Ai}(x)$.

Referências

- [1] J. B. Keller, SIAM Review **27**, 485 (1985).
- [2] V. P. Maslov and M. V. Fedoriuk, *Semi-classical Approximation in Quantum Mechanics* (D. Reidel Publishing Company, 1981).
- [3] R. G. Littlejohn, J. Stat. Phys. **68**, 7 (1992).
- [4] M. V. Berry and N. L. Balazs, J. Phys. A **12**, 625 (1979).
- [5] J. H. V. Vleck, Proc. Nac. Acad. Sci. USA **14**, 178 (1928).
- [6] M. V. Berry, Phyl. Trans. R. Soc. **287**, 237 (1977).
- [7] W. H. Zurek and J. P. Paz, Phys. Rev. Lett. **72**, 2508 (1994).
- [8] S. Habib, K. Shizume, and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. **80**, 4361 (1998).
- [9] D. Monteoliva and J. P. Paz, Phys. Rev. Lett. **85**, 3373 (2000).
- [10] D. Monteoliva and J. P. Paz, Phys. Rev. E **64**, 056238 (2001).
- [11] B. D. Greenbaum, S. Habib, and K. Shizumi, CHAOS **15**, 033302 (2005).
- [12] A. R. R. Carvalho, R. L. de Matos Filho, and L. Davidovich, Phys. Rev. E **70**, 026211 (2004).
- [13] A. R. R. de Carvalho, *Caos, descoerência, proteção de estados e a transição quântico-clássico para íons aprisionados* (Tese de doutorado, UFRJ, 2005).

-
- [14] F. Toscano, R. L. de Matos Filho, and L. Davidovich, *Phys. Rev. A* **71**, 010101 (2005).
- [15] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer, New York, 1978).
- [16] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization* (Benjamin, Reading, MA, 1968).
- [17] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko, *Classical Mechanics* (Addison Wesley, 2002), 3rd ed.
- [18] A. M. Ozorio de Almeida, *Phys. Rep.* **295**, 265 (1998).
- [19] H. Weyl, *The theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1950).
- [20] J. E. Moyal, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45**, 99 (1949).
- [21] B. Mehlig and M. Wilkinson, *Ann. Phys. (Lpz.)* **10**, 541 (2001).
- [22] M. Combescure, *J. Phys. A* **38**, 2635 (2005).
- [23] M. A. de Gosson, *Lett. Math. Phys.* **72**, 129 (2005).
- [24] G. B. Folland, *Harmonic Analysis in Phase Space* (Pinceton University Press, 1989).
- [25] H. P. Robertson, *Phys. Rev.* **34**, 163 (1929).
- [26] A. S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (North-Holland, 1982).
- [27] E. C. G. Sudarshan, C. B. Chiu, and G. Bhamathi, *Phys. Rev. A* **52**, 43 (1995).

-
- [28] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
- [29] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 123 (1984).
- [30] L. G. Lutterbach and L. Davidovich, Phys. Rev. Lett. **78** (1997).
- [31] L. Davidovich, in *Decoherence and Entropy in Complex Systems*, edited by H.-T. Elze (Springer, Berlin, 2004), p. 268.
- [32] U. Leonhardt and H. Paul, Phys. Rev. A **48**, 4598 (1993).
- [33] K. E. Cahill and R. J. Glauber, Phys. Rev. **177**, 1882 (1969).
- [34] A. Royer, Phys. Rev. A **15**, 449 (1977).
- [35] J. R. Klauder and B.-S. Skagerstam, *Coherent states: Applications in physics and mathematical physics* (World Scientific Publishing, 1985).
- [36] E. J. Heller, J. Chem. Phys. **62**, 1544 (1975).
- [37] E. J. Heller, in *Chaos and Quantum Physics*, edited by M.-J. G. et al (Les Houches, Session LII, 1991), p. 547.
- [38] R. G. Littlejohn, Phys. Rep. **138**, 193 (1986).
- [39] M. V. Berry, N. L. Balazs, M. Tabor, and A. Voros, Ann. Phys. **122**, 26 (1979).
- [40] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer, New York, 2001), 2nd ed.
- [41] P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics* (Oxford University Press, 1947).
- [42] M. V. Berry, in *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, edited by G. Iooss, R. H. G. Helleman, and R. Stora (North-Holland, Amsterdam, 1983), p. 171.

- [43] M. V. Berry, Phil. Trans. R. Soc. London Ser. A **287**, 237 (1977).
- [44] K. E. Cahill, Phys. Rev. **138**, B 1566 (1965).
- [45] S. Szabo, P. Adam, J. Janszky, and P. Domokos, Phys. Rev. A **53**, 2698 (1996).
- [46] J. Janszky and A. V. Vinogradov, Phys. Rev. Lett. **64**, 16 (1990).
- [47] P. Domokos, P. Adam, and J. Janszky, Phys. Rev. A **50**, 4293 (1994).
- [48] E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 2923 (1981).
- [49] A. Kenfack, J. M. Rost, and A. M. O. de Almeida, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 1645 (2004).
- [50] G. M. Zaslavsky, *Weak chaos and quasi-regular patterns* (Cambridge University Press, 1992).
- [51] G. P. Berman, Nonlinearity **4**, 543 (1991).
- [52] F. A. N. Nicacio, *Propagação Semiclássica em Sistemas caóticos* (Dissertação de mestrado, CBPF, 2006).
- [53] G. A. Kells, Phys. Rev. A **70**, 015203 (2004).
- [54] P. G. Silvestrov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. E **65**, 035208 (2002).
- [55] M. A. Alonso and G. W. Forbes, J. Opt. Soc. Am. A **17**, 2288 (2000).
- [56] W. H. Zurek, in *Decoherence: Theoretical, Experimental, and Conceptual Problems*, edited by P. Blanchard, D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, and I.-O. Stamatescu (Springer, Berlin, 1998), p. 309.
- [57] H. Carmichael, *An Open Systems Approach to Quantum Optics* (Springer-Verlag, 1993).

- [58] M. A. Scully and M. S. Zubary, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, 1997).
- [59] Y. Yamamoto and A. Imamoglu, *Mesoscopic Quantum Optics* (John Wiley & Sons, 1999).
- [60] R. P. Feynman and F. L. Vernon, *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
- [61] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [62] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica A* **121** (1983).
- [63] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [64] W. H. Zurek, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715 (2003).
- [65] A. M. O. de Almeida, *J. Phys. A* **36**, 67 (2003).
- [66] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [67] L. Diósi and C. Kiefer, *J. Phys. A* **35**, 2675 (2002).
- [68] F. Intravaia, S. Maniscalco, and A. Messina, *Phys. Rev. A* **67**, 042108 (2003).
- [69] O. Brodier and A. M. Ozorio de Almeida, *Phys. Rev. E* **69**, 016204 (2004).
- [70] W. T. Strunz, *J. Phys. A* **30**, 4053 (1997).
- [71] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2002).
- [72] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic, London, 1976).
- [73] K. Lendi and R. Alicki, *Quantum Dynamical Semigroups* (Springer-Verlag, 1984).

-
- [74] H. Spohn, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 569 (1980).
- [75] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (John Wiley & sons, 1981).
- [76] G. Lindblad, *J. Phys. A* **22**, 5059 (2000).
- [77] R. N. P. Maia, F. Nicacio, R. O. Vallejos, and F. Toscano (2007), arXiv:0707.2423v1[nlin.CD].
- [78] R. Schubert, *Commun. Math. Phys.* **256**, 239 (2004).
- [79] S. Tomsovic and E. J. Heller, *Phys. Rev. E* **68**, 038201 (2003).
- [80] P. G. Silvestrov and C. W. Beenakker, *Phys. Rev. E* **68**, 038202 (2003).
- [81] R. Schubert, arXiv:0705.0134v1 [math-ph].
- [82] N. R. Cerruti and S. Tomsovic, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 054103 (2002).
- [83] N. Bleistein and R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals* (Dover, New York, 1989).