

CORRELAÇÕES
NO
ESPAÇO DE FASE QUÂNTICO

EDUARDO ZAMBRANO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS - CBPF/MCTI
Rio de Janeiro, Brasil
2012

Tradução do manuscrito original em inglês da
Tese de doutorado submetida ao *Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF/MCTI*
sob orientação do Prof. **Alfredo Miguel Ozorio de Almeida**
para obter o título de Doutor em Física por
David Eduardo Zambrano Ramírez

2012

*“El futuro no es una página en
blanco, es una fé de erratas”*

Mario Benedetti

*A las mujeres que alegran mi vida
con su presencia...*

Doña Tere, Lili Sol & Bia.

Al equipo de micro...

mi Taita, Pepe, Pavel, & Danielito.

Agradecimentos

- Ao Alfredo: $\frac{\text{obrigado}}{\hbar}$, semiclassicalmente falando.
- A Alexis, Brigatti, Kini e Zapfe.
- A Rolando, Omar, Cagigas e Khodae.
- Aos professores Raúl, Caio, José H. e Ivan.
- Às bolsas da Capes, CNPq e FAPERJ.
- Ao pessoal da TEO/CFC: Almério, Rosângela, Bete² e Ricardo.
- A *'Der Bär, der Tiger und die anderen'*.
- Finalmente ao leitor.

Resumo

“Na minha opinião, se algo é tão complicado que não pode ser explicado em 10 segundos, então provavelmente não vale mesmo a pena saber”

Bill Watterson,
The Indispensable Calvin & Hobbes

Usamos o formalismo de Wigner-Weyl da mecânica quântica para estudar as correlações no espaço de fase. Nosso estudo centra-se nas correlações entre um estado e todas as suas possíveis translações no espaço de fase, que são tratadas tanto no regime quântico quanto no regime semiclássico. Definimos o conceito de *ponto cego* como os pontos no espaço de fase onde a correlação é zero. Mostramos que, independente da dimensão, os pontos cegos são uma propriedade dos estados sem uma simetria de reflexão pontual. Dedicamos especial atenção às superposições de estados coerentes. Neste tipo de estado os pontos cegos aparecem nas regiões clássicas e são produzidos pela interferência destrutiva de ondas planas. Particularmente, para tripletos de estados coerentes os pontos cegos estão sobre uma rede hexagonal. Esta rede, à sua vez, é formada por duas sub-redes oblíquas mutuamente ortogonais. Mostramos que, no limite Markoviano, os pontos cegos são hipersensíveis à descoerência induzida pelo contato com um ambiente externo. Além disso, avaliamos as distribuições semiclássicas típicas no espaço de fase (i.e. a função de Wigner e sua transformada de Fourier) para estados de energia quantizados tipo Bohr-Sommerfeld. Também resolvemos as cáusticas dessas distribuições para estudar a correlação e os pontos cegos ao nível semiclássico. As cáusticas destas distribuições são devidas à aproximação de fase estacionária. Obtemos também uma aproximação semiclássica em termos das médias clássicas para os momentos estatísticos daquelas distribuições. Nossos resultados são ilustrados numericamente para estados de Fock. Finalmente, na procura por pontos cegos para evoluções além das translações, estudamos semiclassicamente a *fidelidade quântica*. Deduzimos uma *representação a valor inicial* (IVR) para a fidelidade, que formaliza e generaliza a *representação de defase* (em inglês: *Dephasing Representation*) (ver Ref. [Van04]). Nossa IVR é válida inclusive para sistemas com dinâmica regular, para os quais os anteriores tratamentos não eram apropriados.

Abstract

“As far as I’m concerned, if something is so complicated that you can’t explain it in 10 seconds, then it’s probably not worth knowing anyway”

Bill Watterson,
The Indispensable Calvin & Hobbes

We use the Wigner-Weyl formalism of quantum mechanics to study quantum correlations in phase space. We focus on the correlations between a state and all its possible translations in phase space. This treatment is done in both the quantum and the semiclassical regimes. It leads us to define the concept of *blind spot*: The points where the correlation is zero. We show that, for any dimension, those points are a characteristic of states without a definite point-reflection symmetry (also known as inversion symmetry). Superpositions of coherent states are specially analyzed; blind spots appear in the classical regions as the points of complete destructive interference pattern of plane waves. In fact, for triplets of coherent states they are arranged on an hexagonal lattice, which consists of two mutually orthogonal sub-lattices. In the Markovian limit, we show their extreme sensitivity to decoherence induced by an environment. Moreover, we evaluate the typical semiclassical distributions in phase space (i.e. the Wigner function and its Fourier transform) for Bohr-quantized energy states and we resolve their corresponding caustics (arisen by the *short-wave approximation*), in order to realize the presence of blind spots at semiclassical level. We also obtain a semiclassical approximation for the distribution moments in terms of the classical averages. These results are illustrated in a numerical study of Fock states. Finally, seeking for the blind spots in the case of general evolution, beyond translations, we study the quantum fidelity or *Loschmidt echo* semiclassically. We obtain an Initial-Value Representation for the fidelity, which generalizes and formalizes the *Dephasing Representation* (see Ref. [Van04]). Our results hold even for regular dynamics, for which the previous treatments are not suitable.

Publicações

- E Zambrano and A M Ozorio de Almeida 2008 *Nonlinearity* **21** 783-802
- E Zambrano and A M Ozorio de Almeida 2009 *New Journal of Physics* **11** 113044 [14pp]
- E Zambrano and A M Ozorio de Almeida 2010 *J. Phys. A: Math. Theor.* **43** 205302 [11pp]
- E Zambrano and A M Ozorio de Almeida 2011 *Phys. Rev. E* **84**, 045201(R) [4pp]

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Mecânica Quântica no Espaço de Fase	5
2.1 Centros e cordas em mecânica clássica	6
2.2 Cordas e centros em mecânica quântica	11
2.2.1 Alguns exemplos de estados no espaço de fase	16
2.3 Outras representações no espaço de fase	18
3 Sistemas Quânticos Abertos no Limite Markoviano	20
3.1 Descoerência	21
3.2 A equação mestra de Lindblad	24
3.3 Equação de Lindblad no espaço de fase	26
4 Pontos cegos entre estados quânticos	30
4.1 Introdução	30
4.2 Linhas nodais reais e imaginárias	33
4.3 Superposições de estados coerentes	37
4.4 Rede hexagonal de pontos cegos	44
4.5 Pontos cegos e descoerência	46
4.6 Discussão	48
5 Teoria Semiclássica no Espaço de Fase	50
5.1 Introdução	51
5.2 Cordas curtas e momentos estatísticos	54
5.3 Fase estacionária para as quasi-distribuições	55
5.4 Aproximações uniformes para a função de Wigner	58

5.4.1	Catástrofe de cordas curtas da função de Wigner	59
5.4.2	Catástrofe de cordas longas da função de Wigner	60
5.5	Aproximação uniforme para a função de cordas	62
5.5.1	Regime de cordas longas para estados de Fock	64
5.6	Transição entre os regimes de cordas curtas e longas	66
5.6.1	Evolução não-linear de um estado de Fock	67
5.7	Discussão	69
6	Representação a Valores Iniciais para o Eco de Loschmidt	72
6.1	Introdução	74
6.2	Representação de defasagem	77
6.3	Dedução formal da IVR	80
6.4	Casos quadráticos	83
6.4.1	Perturbação linear	86
6.4.2	‘Comprimindo’ dois osciladores harmônicos	86
6.5	Discussão	88
7	Considerações Finais	90
A	Fase para cordas cruzadas	93
B	Regime Transicional	95
C	Representação a valores iniciais	98
D	Aproximação à primeira ordem	101

Introdução

*“Before I speak, I have something
important to say”*

Julius H. Marx

Hoje em dia, com o desenvolvimento de novas tecnologias a promessa de manipular de mecânica quântica está realizando-se ao poucos: Estamos testemunhando o surgimento da era quântica na nossa experiência cotidiana. Por exemplo, experimentos com ótica quântica [Leo97, Sch01, Alm07], armadilhas de átomos [Mir90, Tar93, Gio04], cavidades de microondas [Bru92, Har06, Köb11] e junções Josephson [Tes86, Hof09, Joh10] conseguem lidar com a interferência entre as funções de onda dos átomos individuais ou entre modos de uma cavidade ótica. Esta interferência pode ser medida e manipulada de uma maneira controlada. Até agora, estes experimentos têm sido realizados principalmente por estados muito simples, mas a teoria pode antecipar um futuro onde os estados mais delicados, como a superposição* de vários estados coerentes ou os estados excitados de oscilador anarmônico, podem interferir.

Por outro lado, sabe-se que a maior precisão permitida nas estimativas experimentais de parâmetros físicos é limitada pelos recursos energéticos utilizados no processo de medição [Cra46, Rao45, Gio04, Esc11]. Além disso, a extração de informação de um sistema quântico pode produzir um efeito de *retroalimentação* [Brag80, Gio04]: O estado depois da medição do sistema depende do resultado da medição (por exemplo, o *colapso da função de onda* [Mes72, Per93] corresponde à destruição completa do estado inicial). Estes efeitos de retroalimentação são superados (e em alguns casos evitados) pelas *medições quânticas não-demolidoras*† [Brag80], embora sua implementação constitua um verdadeiro desafio técnico (por exemplo *ver* Refs. [Lup07, Joh10] e Refs. contidas nelas.). Situações comuns que requerem a estimação de parâmetros muito pequenos são as medições de fase de alta precisão [Hue97] e a detecção de forças muito fracas

*Nesta tese o termo ‘superposição’ referi-á-se a *superposition* em inglês.

†Tradução do termo *non-demolition quantum measurements*

[Brag80, Cav80] (por exemplo, um detector de *ondas gravitacionais*). Em particular, o segundo corresponde ao monitoramento de um estado quântico ligeiramente deslocado em uma determinada direção devido à ação da dita força fraca.

Isso nos leva às perguntas: Como se pode distinguir entre dois estados quânticos diferentes? Qual é o limite experimental para discernir se dois estados são diferentes? Na prática, dois estados podem ser distinguidos pela sobreposição[‡] entre eles, como proposto nas Refs. [Bra94, Mar98, Nie00]. Assim que restringiremos nosso estudo ao problema da distinguibilidade usando a correlação entre dois estados de um sistema quântico[§]. Se cada um dos estados é representado pelos operadores de densidade $\hat{\rho}_A$ e $\hat{\rho}_B$, a correlação é definida como [Nie00, Ozo04]:

$$C_{AB} \equiv \frac{\text{tr } \hat{\rho}_A \hat{\rho}_B}{\sqrt{\text{tr } \hat{\rho}_A^2 \text{tr } \hat{\rho}_B^2}}, \quad (1.1)$$

onde tr denota o traço. Pela desigualdade de Schwartz, esta quantidade é sempre menor do que um e para estados puros essa correlação define uma distância no espaço de Hilbert[¶] e se reduz a

$$C_{AB} = |\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle|^2. \quad (1.2)$$

Esta abordagem pode ser simplificada se o par de estados é obtido a partir da evolução unitária de um estado inicial sob a ação de dois Hamiltonianos ligeiramente diferentes. Particularmente, o comportamento de C_{AB} como uma função do tempo pode refletir a natureza regular ou caótica do correspondente movimento clássico [Per84, Jal01, Eme02, Gor06].

Por exemplo, em um experimento de interferência típico de ótica quântica [Leo97, Alm07] é fácil obter uma transformação unitária que corresponde a uma translação (ou deslocamento) uniforme das variáveis do espaço de fase $x = (p, q)$ pelo vetor $\xi = (\xi_p, \xi_q)$. Este estado transladado pode então interferir com o original. Assim, dada uma superposição arbitrária (e normalizada) de um estado e sua translação, $a|\psi\rangle + b|\psi_\xi\rangle$, a probabilidade de obter o estado não transladado após uma medição no sistema é de $|a + b\langle\psi|\psi_\xi\rangle|^2$.

Medidas de tais probabilidades sobre um conjunto de cópias do mesmo sistema fornecem informação quântica detalhada. Assim a Eq. (1.2) para $|\Psi_A\rangle = |\Psi\rangle$ e $|\Psi_B\rangle = |\Psi_\xi\rangle$ define a *correlação no espaço de fase*. Esta grandeza será o principal objeto de estudo

[‡]Ao longo desta tese usaremos o termo ‘sobreposição’ para fazer referência ao termo em inglês *overlap*. Note-se que é um conceito diferente de superposição.

[§]Ressaltamos que a distinguibilidade de estados quânticos corresponde só ao primeiro estágio em uma montagem experimental construída para estimar um parâmetro. Na metrologia quântica, o processo completo requer uma escolha da estratégia de medição, a qual definida por um conjunto de *estimadores*, como amplamente explicado na Ref. [Esc11]. Esta parte da história da metrologia quântica vai além do objetivo desta tese.

[¶]Para estados mistos a noção de *distância* em termos da correlação C_{AB} não é apropriada. Neste caso, a *fidelidade de Bures* [Nie00], definida como $F_{AB} = \sqrt{\hat{\rho}_A^{1/2} \hat{\rho}_B \hat{\rho}_A^{1/2}}$ é usada. Para o escopo desta tese, a definição (1.1) será suficiente.

nesta tese. Evidentemente, a abordagem mais adequada para analisar essa correlação é um formalismo quântico no espaço de fase quântico. Usaremos o espaço de fase de Wigner-Weyl, porque é definido a partir de *translações e reflexões quânticas*.

Especificamente, estudaremos a transformada de Fourier simplética da função de Wigner, conhecida como a *função de cordas* ou como uma das *funções características quânticas*, a qual será definida no Capítulo 2. Além disso, outras representações da mecânica quântica no espaço de fase serão rapidamente enunciadas. Depois disso, vamos descrever brevemente o limite Markoviano dos sistemas abertos, Capítulo 3. Ao mesmo tempo, explicaremos a importância da correlação em um modelo simples de descoerência. No capítulo 4 procuraremos os zeros dessa correlação, então definiremos o conceito de *ponto cego* ao mesmo tempo que testaremos sua resposta à descoerência^{||}. A fim de estabelecer a presença de pontos cegos para os estados gerais, vamos estudar o aparecimento das linhas nodais das partes real e imaginária da função de cordas. Obtemos uma teoria onde a ortogonalidade entre os estados transladados é explicada, independente da dimensionalidade do sistema. Mostraremos que os pontos cegos são uma característica típica de estados não-simétricos e que geralmente aparecem para pequenos deslocamentos. Analisaremos em detalhe o caso de superposições de estados coerentes, onde os pontos cegos são devidos à interferência destrutiva de ondas planas associadas às contribuições individuais na função de cordas. Ao mesmo tempo, obteremos uma aproximação válida na vizinhança da origem, que permite mostrar a robustez dos pontos cegos sob *squeezing* e sob mudanças na amplitude e na fase relativa de cada estado coerente. Mostraremos que, na aproximação Markoviana, os zeros desaparecem muito mais rápido que o tempo de descoerência usual, e que a '*velocidade de levantamento*' depende da área que ocupa o estado no espaço de fase. Depois, no Capítulo 5, vamos estender nossa discussão para o regime semiclássico^{**} (este regime é definido como o caso quando as ações típicas do sistema são grandes em comparação com \hbar , a constante de Planck) para entender o papel da correlação no espaço de fase na transição clássica-quântica. Implementaremos aproximações uniformes com o intuito de resolver as *cáusticas* (ou singularidades) das distribuições semiclássicas, para assim proporcionar uma descrição completa da correlação no espaço de fase nas suas diferentes etapas definidas pela magnitude do deslocamento. Terminaremos estudando um caso com evolução geral, isto é, além de translações, introduzindo o conceito de *fidelidade* ou *eco de Loschmidt* (ver Capítulo 6^{††}). Esta grandeza mede a sensibilidade do sistema às perturbações, e, algumas vezes, pode ser diretamente associada a uma medida de descoerência. Como o nosso resultado principal, proporemos uma *representação a valores iniciais* para esta fidelidade, a qual generaliza alguns resultados anteriores, e ao mesmo tempo formaliza as teorias semiclássicas de fidelidade baseadas em trajetórias clássicas. Estabeleceremos o intervalo de validade da

^{||} A maior parte do capítulo 4 foi publicada previamente na Ref. Cite ZO-BS

^{**} Os resultados do Capítulo 5 foram publicados previamente nas Refs. [Zam08] e [Zam10].

^{††} Os principais resultados do Capítulo 6 estão publicados na Ref. [Zam11].

nossa teoria semiclássica para o eco e ilustraremos a sua aplicabilidade a sistemas com dinâmicas regulares, estendendo assim o escopo das abordagens anteriores, cuja aplicabilidade era comumente associada aos regimes caóticos. No capítulo 7 vamos resumir nosso trabalho e faremos uma discussão geral.

Mecânica Quântica no Espaço de Fase

“Habr  siempre un hombre tal que, aunque su casa se derrumbe, estar  preocupado por el Universo. Habr  siempre una mujer tal que, aunque el Universo se derrumbe, estar  preocupada por su casa”

Ernesto S bato,
Uno y el Universo

O formalismo do espao de fase permite que a mec nica qu ntica seja descrita utilizando o m ximo poss vel da linguagem cl ssica [Wig32, Lee95, Ozo98]. Al m disso, como o princ pio de incerteza de Heisenberg pro be o conceito de uma probabilidade conjunta em um ponto do espao de fase $x = (p, q)$, essa abordagem fornecer  quasi-distribui es no espao de fase, como por exemplo a fun o de Wigner [Wig32]. Todas elas t m interpreta es f sicas bastante sutis, mas devemos nos lembrar que elas s o meras ferramentas matem ticas para facilitar os c lculos.

Por outro lado, a geometria simpl tica, uma caracter stica t pica dos sistemas Hamiltonianos cl ssico, estabelece uma rela o estreita entre as transla es e as reflex es pontuais* no espao de fase. Ela fornece duas poss veis descri es da din mica, que se relacionam atrav s de uma transforma o de Legendre [Roy77, Gros78]. Podemos adaptar essa ideia ao formalismo qu ntico para obter as representa es de *Weyl* (ou de centros) e de *cordas* da mec nica qu ntica. Enquanto a primeira est  relacionada   reflex es pontuais, e inclui a fun o de Wigner [Wig32], a segunda est  relacionada a transla es e define o espao de Fourier das reflex es pontuais, que inclui a fun o caracter stica da distribui o de Wigner [Ozo98]. Como j  mencionado, ambas s o representa es completas da mec nica qu ntica em termos de quasi-distribui es no espao de fase, que

*Esta opera o, que corresponde a fazer uma reflex o com respeito a um ponto,   chamada de *invers o* na Ref. [Gros78].

fornecem informação simultânea sobre momento e posição. Elas também são apropriadas para descrever estados mistos, ao contrário das funções de onda usuais. Nesse capítulo, primeiramente revisitaremos a mecânica clássica em termos das variáveis de *centros* e de *cordas*, para estabelecer a estrutura básica que será utilizada no desenvolvimento da mecânica quântica no espaço de fase, conhecido como o formalismo de Wigner-Weyl. Introduziremos em seguida outras representações no espaço de fase.

2.1 Centros e cordas em mecânica clássica

No formalismo Hamiltoniano, um sistema físico clássico é caracterizado pela função real $H(x; t)$, conhecida como a Hamiltoniana, onde $x = (p, q)$ é um vetor de dimensão $2L$, e $q = (q_1, \dots, q_L)$ e $p = (p_1, \dots, p_L)$ são as posições e momentos, respectivamente. L é o número de graus de liberdade do sistema, que corresponde ao número mínimo de variáveis reais necessárias para descrever a posição do sistema. A evolução no tempo é dada pelas equações de Hamilton.

$$\dot{p} \equiv \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} \equiv \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (2.1)$$

Essas equações podem ser compactadas em

$$\dot{x} = J \frac{\partial H}{\partial x}, \quad (2.2)$$

onde J é a matriz simplética padrão de dimensão $2L \times 2L$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

e \mathbf{I} é a matriz identidade $L \times L$. A existência e a unicidade das soluções para as equações de movimento, (2.2), são garantidas porque elas são equações diferenciais de primeira ordem. Definimos o *produto simplético* entre dois vetores no espaço de fase $\xi = (\xi_p, \xi_q)$ e $\eta = (\eta_p, \eta_q)$ como:

$$\xi \wedge \eta \equiv \eta^T J \xi = \sum_{k=1}^L (\xi_p \eta_q - \xi_q \eta_p). \quad (2.4)$$

Como mostrado na Fig. 2.1, ele corresponde à área do paralelogramo formado pelos vetores ξ e η ; esse produto é invariante sob a evolução no tempo gerada pelo fluxo de um Hamiltoniano quadrático [Ozo88].

Definimos como uma constante de movimento uma função $F(x)$ definida no espaço de fase que não varia com o tempo, i.e.

$$\begin{aligned} \frac{dF(x)}{dt} &= \sum_{k=1}^L \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial F}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) = \sum_{k=1}^L \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \\ &= \{F, H\} = 0, \end{aligned} \quad (2.5)$$

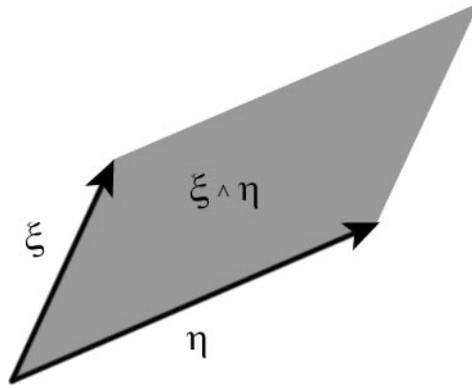


Figura 2.1: **Representação geométrica do produto simplético.** Ele é a área de um paralelogramo definido por ξ e η . Note que ele é um produto vetorial que segue a regra da mão esquerda.

onde $\{\cdot, \cdot\}$ denota o colchete de Poisson entre duas funções no espaço de fase.

De acordo com o teorema da integrabilidade de Liouville (veja Ref. [Arn79]), um sistema Hamiltoniano com L graus de liberdade é dito *integrável* se existem L constantes de movimento independentes, F_k para $k = 1, \dots, L$, que estão em *involução*. A independência entre as constantes de movimento significa que os vetores

$$\dot{x}_{F_k} = J \frac{\partial F_k}{\partial x}, \quad (2.6)$$

definidos pelo fluxo gerado pelas F_k 's são linearmente independentes. Dizemos que as constantes de movimento $\{F_k\}$ estão em involução se

$$\dot{x}_{F_k} \wedge \dot{x}_{F_s} = \{F_k, F_s\} = 0 \quad \text{para} \quad k \neq s. \quad (2.7)$$

Consideremos agora um sistema Hamiltoniano descrito pelas variáveis $x_- = (p_-, q_-)$. Uma mudança de variáveis

$$x_- = (p_-, q_-) \rightarrow x_+ = (p_+, q_+) = C(x_-), \quad (2.8)$$

tal que as equações de Hamilton se mantenham invariantes é chamada de uma *transformação canônica*. Usualmente, esse tipo de transformação permite que o sistema seja reescrito em termos de coordenadas mais adequadas que simplificam a sua descrição [Arn79, Gol80]. A evolução no tempo é um exemplo trivial de uma transformação canônica, já que as equações de movimento são satisfeitas para qualquer instante de tempo.

Uma transformação canônica pode ser especificada através de uma função geratriz S , que transforma o Hamiltoniano de acordo com:

$$x_- = (p_-, q_-) \rightarrow x_+ = (p_+, q_+) = C(x_-). \quad (2.9)$$

As variáveis são, portanto, determinadas localmente pelas seguintes relações[†]

$$q_+ = \frac{\partial S}{\partial p_+} \quad \text{e} \quad p_- = \frac{\partial S}{\partial q_-}. \quad (2.10)$$

Aqui, S pode ser uma função multivariada. As interseções entre diferentes ramos de S são singularidades das relações dadas acima porque p_- (ou q_-) divergem quando o cruzamento de ramos é atingido. Estes conjuntos singulares são chamados de *cáusticas*, em analogia às cáusticas em ótica [Nye91, Ber76], porque elas são singularidades na projeção da variedade lagrangiana sobre o plano das posições (ou dos momentos).

Uma descrição alternativa consiste em *duplicar* a dimensão do espaço de fase; i.e. em analisar a dinâmica em um *espaço de fase duplo*, onde a transformação canônica pode ser interpretada como o mapeamento entre as variáveis velhas $x_- = (p_-, q_-)$ e as variáveis novas $x_+ = (p_+, q_+)$. A escolha conveniente das variáveis duplas de posição e momento como $Q = (q_-, q_+)$ e $P = (-p_-, p_+)$ permite que relacionemos quaisquer transformações canônicas no espaço de fase de L dimensões com uma variedade lagrangiana no espaço de fase duplo, porque

$$\oint_{\Gamma} P \cdot dQ = \oint_{\gamma_+} p_+ \cdot dp_+ - \oint_{\gamma_-} p_- \cdot dq_- = 0, \quad (2.11)$$

onde $\Gamma = \gamma_- \times \gamma_+$, γ_+ e γ_- são circuitos[‡] reduzíveis nos correspondentes espaços de fase. De fato, a condição (2.11) é a definição de uma variedade lagrangiana.

Para a análise semiclássica, é apropriado a mudar as variáveis cartesianas (Q, P) para as variáveis de *centro-corda* (x, ξ) . A variável de centro é definida como o ponto médio entre x_- e x_+ e a corda é o vetor ligando os dois, explicitamente

$$x = \frac{x_+ + x_-}{2} \quad (2.12a)$$

$$\xi = x_+ - x_-. \quad (2.12b)$$

Essas novas variáveis permitem as seguintes reinterpretções de uma transformação canônica: como uma reflexão pontual com respeito a x ou como uma translação de ξ (veja Fig. 2.2). Essa interpretação é localmente válida.

Note que o Jacobiano da transformação (2.12) é igual a um. Como esperado, a corda e o centro são variáveis canonicamente conjugadas, e portanto existe uma função geratriz $S(x)$ tal que

$$\xi = -J \frac{\partial S}{\partial x}. \quad (2.13)$$

A matriz simplética J aparece porque x é estritamente conjugada a $-J\xi$ [Ozo98, Ozo09a], mas vamos lidar somente com a corda ξ por causa da sua interpretação geométrica. Podemos realizar uma transformação de Legendre em $S(x)$ para obter a função geratriz de

[†]Na realidade, essa relação é uma de quatro possíveis escolhas para o argumento da função geratriz. Ela corresponde a uma função geratriz do tipo 2, F_2 , no livro texto de H. Goldstein [Gol80].

[‡]Dizemos que um circuito é reduzível se ele pode ser continuamente deformado para um ponto.

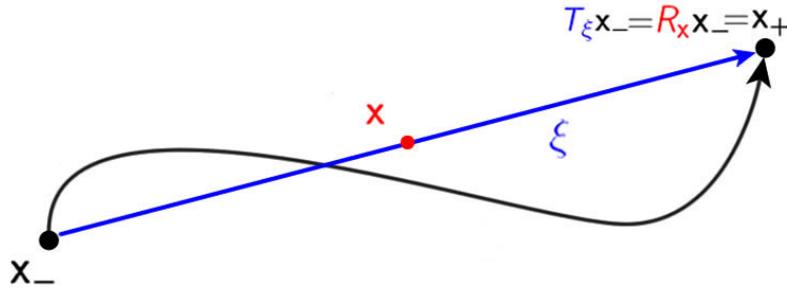


Figura 2.2: **Representação clássica de centros e cordas:** Qualquer transformação canônica $x_- \rightarrow x_+$ pode ser interpretada como uma reflexão com respeito ao centro x ou como um deslocamento pela corda ξ .

cordas

$$S(\xi) = S(x) + x \cdot J \frac{\partial S}{\partial x} = S(x) - x \wedge \xi, \quad (2.14)$$

e, portanto,

$$x(\xi) = J \frac{\partial S}{\partial \xi}. \quad (2.15)$$

O caso especial de Hamiltonianos quadráticos será muito importante porque suas aproximações semiclássicas, que serão discutidas nos Capítulos 5 e 6, são exatas. Um Hamiltoniano quadrático genérico é

$$H(x) = \frac{1}{2} x \mathcal{H} x + a \wedge x, \quad \text{onde} \quad \mathcal{H} = \frac{\partial^2 H}{\partial x^2}. \quad (2.16)$$

\mathcal{H} é a matriz Hessiana de H e a é um vetor constante. A função geratriz de centros associada ao fluxo Hamiltoniano de H para um tempo fixo t é dada por

$$S^t(x) = x B^t x + \alpha^t \wedge x, \quad (2.17)$$

onde o índice t enfatiza o fato de que a função geratriz é dependente do tempo. Usando a representação de Cayley de JB^t , temos que

$$JB^t = [\mathbf{I} - e^{J\mathcal{H}t}][\mathbf{I} + e^{J\mathcal{H}t}]^{-1}, \quad (2.18a)$$

$$\alpha^t = 2JB^t[J\mathcal{H}]^{-1}a. \quad (2.18b)$$

Note que essa relação entre H e S^t não é válida quando $H = 0$, quando ela se reduz a $S^t(x) = -ta \wedge x$.

Para o caso quadrático a variável de corda é dada por

$$\xi(x, t) = -2JB^t x + \alpha^t, \quad (2.19)$$

e, portanto, o mapa $x_- \rightarrow x_+$, gerado por (2.17) é

$$\begin{aligned} x_+ &= [\mathbf{I} + JB^t]^{-1} ([\mathbf{I} - JB^t]x_- + \alpha) \\ &= e^{tJ\mathcal{H}}x_- + [\mathbf{I} - e^{tJ\mathcal{H}}][J\mathcal{H}]^{-1}a. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Essa órbita é a mesma obtida através da integração das equações de movimento com (2.16) e condição inicial x_- .

Assim como para as variáveis usuais de momento e posição, a reciprocidade entre centros e cordas implica a existência de regiões no espaço de fase onde somente uma dessas representações é bem definida. Essa situação acontece quando o mapa $x \rightarrow \xi$, definido por $S(x)$, é singular, i.e. o Jacobiano é:

$$\left| \det \frac{\partial \xi}{\partial x} \right| = \left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right| \rightarrow \infty. \quad (2.21)$$

Essa equação define a cáustica (ou cáustica na representação de centros). A Fig. 2.3 mostra um exemplo genérico de uma cáustica tipo *dobra*. Fica claro que a cáustica é uma singularidade que decorre da projeção no plano x . Essas cáusticas ou singularidades

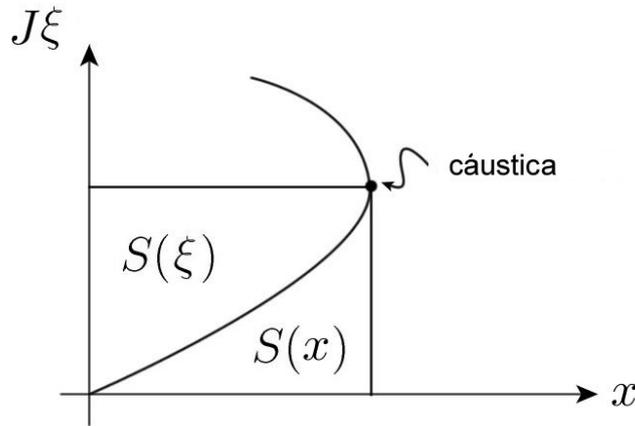


Figura 2.3: Representação geométrica das funções geratrizes de centros e cordas para uma variedade no espaço de fase duplo. As cáusticas são singularidades das projeções da variedade definida por S . Elas ocorrem nos pontos de transição entre os ramos da função geratriz. Aqui mostramos uma cáustica simples tipo dobra.

aparecem porque $S(x)$, em geral, é multivariada. Quando $S(x)$ é a função geratriz que define as soluções das equações de movimento (2.2), as cáusticas restringem o movimento no espaço de centros, i.e., o espaço x , e também separa os ramos de S . É simples mostrar que a transformação inversa $\xi \rightarrow x$ não é singular na cáustica de centros, já que

$$\det \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} = 0. \quad (2.22)$$

Portanto, na cáustica de centros é possível descrever o sistema utilizando a representação de cordas e vice-versa. Isso é uma consequência da reciprocidade entre centros e cordas, dada por uma transformação de Legendre.

Para finalizar essa seção, vamos mostra explicitamente as operações de reflexões pon-

tuais e translações no espaço de fase:

$$x_+ = R_x x_- \equiv -x_- + 2x \quad (2.23a)$$

$$x_+ = T_\xi x_- \equiv x_- + \xi, \quad (2.23b)$$

respectivamente. Além disso, essas operações no espaço de fase formam um grupo com a seguinte álgebra:

$$T_{\xi_2} \circ T_{\xi_1} = T_{\xi_1 + \xi_2}, \quad R_{x_2} \circ R_{x_1} = T_{2(x_2 - x_1)}, \quad (2.24a)$$

$$T_\xi \circ R_x = R_{x + \xi/2}, \quad R_x \circ T_\xi = R_{x - \xi/2}. \quad (2.24b)$$

Elevando ao quadrado o operador de reflexão pontual, obtemos a identidade nesse grupo.

2.2 Cordas e centros em mecânica quântica

No âmbito quântico, os estados de um dado sistema são representados por vetores (ou *kets*) no espaço de Hilbert \mathcal{H} , em vez de pontos no espaço de fase clássico [Mes72, Per93]. Admitimos que esses vetores, denotados por $|\psi\rangle$, são normalizados. Como os autovalores de operadores Hermitianos são números reais, podemos identifica-los com os resultados de medidas ideais. Podemos, portanto, relacionar os operadores Hermitianos com observáveis físicos. Por exemplo, o estado de uma partícula localizada em $q = q_0$ é representado por $|q_0\rangle$, onde $\hat{q}|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle$, e \hat{q} é o operador de posição.

A propriedade de normalização do estado tem importância crucial, porque possibilita uma interpretação probabilística da teoria quântica. Especificamente, consideremos um conjunto de autovetores do operador \hat{A} no espaço de Hilbert, i.e.

$$\hat{A}|\psi_k\rangle = a_k|\psi_k\rangle. \quad (2.25)$$

Admitindo que o conjunto $\{\psi_k\}$ forma uma base no espaço de Hilbert, qualquer estado do sistema quântico pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle \quad \text{onde} \quad \langle\psi_k|\psi_n\rangle = \delta_{kn}. \quad (2.26)$$

A probabilidade de obtermos o autovalor a_k para esse estado inicial $|\psi\rangle$ após uma medida (de von Neumann) do operador \hat{A} é, portanto, $|c_k|^2$, de forma que a probabilidade de obtermos qualquer autovalor a_k após a mesma medida será um.

A evolução de todos os estados para tempos finitos, em analogia com a as transformações canônicas clássicas, resulta da ação de um operador linear unitário \hat{U}_t :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_t|\psi(0)\rangle. \quad (2.27)$$

A unitariedade de \hat{U}_t é imposta para que a norma do estado e a probabilidade[§] seja preservada. No regime não-relativístico, a família de operadores de evolução \hat{U}_t são as soluções

[§]Uma discussão mais ampla sobre a interpretação probabilística da mecânica quântica pode ser encontrada nas Refs. [Per93, Mes72]

da equação Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_t = \hat{H} \hat{U}_t, \quad (2.28)$$

onde o operador Hamiltoniano \hat{H} é Hermitiano, isto é, $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Pode-se escrever a solução formal da Eq. (2.28) como na equação. (2.27) onde $\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$.

Uma representação mais geral para os estados quânticos é fornecida pelo *operador densidade* $\hat{\rho}$, que inclui a possibilidade de incerteza na preparação dos estados: Quando só se sabe que o sistema é composto por um conjunto de estados quânticos $\{|\psi_k\rangle\}$ com as respectivas probabilidades $\{\mathcal{P}_k\}$ com

$$\sum_k \mathcal{P}_k = 1.$$

Este tipo de estado é conhecido como um *estado misto* e não é adequadamente descrito por um simples vector no espaço de Hilbert; por isso, é necessário utilizar o operador densidade:

$$\hat{\rho} = \sum_k \mathcal{P}_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (2.29)$$

Este operador é Hermitiano, seus autovalores não são números não-negativos entre 0 e 1. Se o conjunto de estados $\{|\psi_k\rangle\}$ é ortonormal, então \mathcal{P}_k é o autovalor de $\hat{\rho}$ correspondente ao autoestado $|\psi_k\rangle$.

Os estados que podem ser representados por *kets*, cf. $|\psi\rangle$, em um espaço de Hilbert são chamados de *estados puros*, e seu operador de densidade, de acordo com (2.29), tem a forma $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$. Nestes casos $\hat{\rho}$ é idempotente, ou seja, $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, que é uma condição necessária e suficiente para o estado ser puro.

A equação de Schrödinger para o operador densidade $\hat{\rho}$ tem a forma

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}], \quad (2.30)$$

onde $[\hat{\rho}, \hat{H}] = \hat{\rho}\hat{H} - \hat{H}\hat{\rho}$ é o *comutador* entre \hat{H} e $\hat{\rho}$.

Agora vamos lembrar que, para sistemas com L graus de liberdade, o correspondente espaço de fase clássico é um espaço com $2L$ dimensões, com coordenadas $x = (p, q)$, onde L coordenadas são momentos e L são posições. As translações uniformes neste espaço, $x \rightarrow x + \xi$ definem o *espaço de cordas*, $\{\xi\}$. O correspondente operador quântico de translação (ou deslocamento) [¶] é

$$\hat{T}_\xi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{x} \wedge \xi\right) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} [\hat{p} \xi_q - \hat{q} \xi_p]\right), \quad (2.31)$$

transformam os estados de posição $|q\rangle$, e momento $|p\rangle$, como

$$|q\rangle \rightarrow \hat{T}_\xi |q\rangle = e^{i\xi_p (q+\xi_q/2)/\hbar} |q + \xi_q\rangle, \quad (2.32)$$

$$|p\rangle \rightarrow \hat{T}_\xi |p\rangle = e^{-i\xi_q (p+\xi_p/2)/\hbar} |p + \xi_p\rangle. \quad (2.33)$$

[¶]No contexto ótica \hat{T}_ξ é normalmente referido como o operador de *deslocamento* e é expresso em termos de operadores de criação e aniquilação do oscilador harmônico. Esta forma para o operador \hat{T}_ξ é inconveniente para a análise semiclassical desenvolvida nos capítulos posteriores desta tese.

Observe que o operador translação não é Hermitiano e que $\hat{T}_\xi^{-1} = \hat{T}_{-\xi} = \hat{T}_\xi^\dagger$. Para um estado puro, $|\Psi\rangle$, temos $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi_\xi\rangle$ e, no caso especial do estado fundamental do oscilador harmônico, isto é transportado para um estado coerente: $\hat{T}_\xi |0\rangle = |\xi\rangle$. Os estados coerentes serão definidos na próxima seção.

Dados os correspondentes operadores densidade para os estados puros, $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ e $\hat{\rho}_\xi = |\Psi_\xi\rangle\langle\Psi_\xi| = \hat{T}_\xi \hat{\rho} \hat{T}_{-\xi}$, a *correlação no espaço de fase quântico* é definida como o valor esperado do operador densidade do estado transladado com respeito ao estado inicial. Dado que o traço é invariante sob transformações unitárias, em termos do traço dos operadores densidade essa correlação é

$$C(\xi) = \frac{\text{tr } \hat{\rho} \hat{\rho}_\xi}{\text{tr } \hat{\rho}^2} = \frac{\text{tr } \hat{\rho} \hat{T}_\xi \hat{\rho} \hat{T}_{-\xi}}{\text{tr } \hat{\rho}^2}, \quad (2.34)$$

o que corresponde a tomar (1.1) para $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}$ e $\hat{\rho}_B = \hat{\rho}_\xi$. O ponto chave é que, para um estado quântico puro, temos que

$$C(\xi) = |\langle\Psi|\Psi_\xi\rangle|^2 \quad \text{onde} \quad |\Psi_\xi\rangle \equiv \hat{T}_\xi|\Psi\rangle, \quad (2.35)$$

então, os zeros desta correlação ocorrem nas interseções das linhas nodais das partes real e imaginária de $\langle\Psi|\Psi_\xi\rangle$, a qual é geralmente uma função complexa das cordas, como veremos no capítulo 4.

No presente contexto, é melhor deixar que os próprios operadores de translação representem qualquer operador quântico, ou seja, é conveniente utilizar as translações como uma base do espaço de operadores. No caso dos operadores de densidade,

$$\chi(\xi) = \text{tr } \hat{T}_{-\xi} \hat{\rho} = \langle\hat{T}_{-\xi}\rangle_{\hat{\rho}} \quad (2.36)$$

define a *função de cordas*, também conhecida como a *função de Weyl* [Cho98], ou uma das funções características quânticas [Leo97, Car99, Sch01]. Aqui $\langle\cdot\rangle_{\hat{\rho}}$ denota o valor esperado com respeito ao estado $\hat{\rho}$, assim a função $\chi(\xi)$ pode ser interpretada como o valor esperado do operador translação. Note-se que a função de cordas é uma representação completa de $\hat{\rho}$ e está normalizada como

$$\chi(0) = \text{tr } \hat{\rho} = 1, \quad (2.37)$$

e que $\chi(-\xi) = \chi^*(\xi)$, onde o asterisco indica o complexo conjugado. No caso de um estado puro que se reduz para

$$\chi(\xi) = \langle\Psi|\Psi_{-\xi}\rangle, \quad (2.38)$$

ou seja, que é igual à sobreposição da translação [Cho98, Ozo09a, Ozo98]. Em termos da representação de posição [Cho98, Ozo04]

$$\chi(\xi_q, \xi_p) = \int dq \langle q + \xi_q/2 | \hat{\rho} | q - \xi_q/2 \rangle e^{-i\xi_p \cdot q/\hbar}. \quad (2.39)$$

Esta expressão vem da representação de posição do operador translação:

$$\hat{T}_\xi = \int dq |q + \xi_q/2\rangle \langle q - \xi_q/2| e^{i\xi_p \cdot q/\hbar}. \quad (2.40)$$

A transformada de Fourier simplética, define a celebrada *função de Wigner* [Wig32],

$$W(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \text{FT}\{\chi(\xi)\} \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2L}} \int d\xi e^{-ix\wedge\xi/\hbar} \chi(\xi), \quad (2.41)$$

que é uma função real, porém pode ter valores negativos. Por isso é geralmente referida como uma *quasi-distribuição*. O fator adicional de $(2\pi\hbar)^{-L}$ é devido à normalização da função de cordas Eq. (2.37).

O fato de a função de Wigner pode ser escrita como

$$W(x) = \frac{1}{(\pi\hbar)^L} \text{tr } \hat{R}_x \hat{\rho}, \quad (2.42)$$

resulta da relação de Fourier entre o operador translação e o operador de reflexão pontual [Gros76, Roy77, Ozo98]:

$$2^L \hat{R}_x = \int \frac{d\xi}{(2\pi\hbar)^L} e^{ix\wedge\xi/\hbar} \hat{T}_\xi. \quad (2.43)$$

Em termos da representação de posição, temos que

$$W(x) = W(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\xi_q \langle q + \xi_q/2 | \hat{\rho} | q - \xi_q/2 \rangle e^{-ip \cdot \xi_q/\hbar}. \quad (2.44)$$

A correlação do espaço de fase coincide com a auto-correlação da função de Wigner [Ozo04, Ozo09a], isto é,

$$C(\xi) = 2\pi\hbar \int dx W(x) W(x - \xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\eta e^{i\eta\wedge\xi/\hbar} |\chi(\eta)|^2, \quad (2.45)$$

tal como se a função de Wigner fosse uma distribuição de probabilidade (positiva) e $\chi(\xi)$ fosse sua função característica. Para estados puros tem-se a surpreendente invariância de Fourier da correlação no espaço de fase [Cho98, Ozo04]

$$C(\xi) = |\chi(\xi)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\eta e^{i\eta\wedge\xi/\hbar} |\chi(\eta)|^2. \quad (2.46)$$

Essa relação terá consequências interessantes nos capítulos seguintes.

Os operadores quânticos de deslocamento e de reflexão já definidos obedecem uma álgebra semelhante aos seus análogos clássicos, com exceção de uma fase complexa:

$$\hat{T}_\xi \hat{T}_\eta = e^{i\xi\wedge\eta/\hbar} \hat{T}_{\xi+\eta} \quad \hat{R}_x \hat{R}_y = e^{-2ix\wedge y/\hbar} \hat{T}_{2(x-y)} \quad (2.47a)$$

$$\hat{T}_\xi \hat{R}_x = e^{-ix\wedge\xi/\hbar} \hat{R}_{x+\xi/2} \quad \hat{R}_x \hat{T}_\xi = e^{-ix\wedge\xi/\hbar} \hat{R}_{x-\xi/2}, \quad (2.47b)$$

e $\hat{R}_x^2 = \hat{1}$. Para completar, os traços destes operadores são

$$\text{tr } \hat{T}_\xi = (2\pi\hbar)^L \delta(\xi) \quad \text{e} \quad 2^L \text{tr } \hat{R}_x = 1. \quad (2.48)$$

Como mencionado anteriormente, tanto o operador de reflexão como o de translação definem representações completas da mecânica quântica: Qualquer operador \hat{A} pode ser expresso como uma combinação linear de \hat{T}_ξ ou \hat{R}_x ; explicitamente

$$\hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi A(\xi) \hat{T}_\xi = \frac{1}{(\pi\hbar)^L} \int dx A(x) \hat{R}_x, \quad (2.49)$$

onde

$$A(\xi) = \text{tr} \hat{T}_{-\xi} \hat{A} \quad \text{and} \quad A(x) = 2^L \text{tr} \hat{R}_x \hat{A} \quad (2.50a)$$

são chamados de símbolos de *cordas* e de *Weyl* do operador \hat{A} , respectivamente. Estas equações definem funções no espaço de fase que contêm toda a informação sobre o operador \hat{A} . Elas estão relacionados por meio de uma transformada de Fourier simplética

$$A(\xi) = \text{FT}\{A(x)\}, \quad (2.51)$$

como na Eq. (2.41). Especificamente, a função de cordas e a função de Wigner são representações do operador densidade $\hat{\rho}$ no espaço de fase.

Dentre outras vantagens, a função de Wigner é normalizada,

$$\int dx W(x) = \int dpdq W(p, q) = 1, \quad (2.52)$$

e suas distribuições marginais coincidem com as respectivas probabilidades:

$$\int dq W(x) = |\langle p|\Psi\rangle|^2 \quad \text{e} \quad \int dp W(x) = |\langle q|\Psi\rangle|^2. \quad (2.53)$$

O valor esperado de qualquer observável \hat{A} pode ser avaliado como se $W(x)$ e $\chi(\xi)$ fossem *distribuições clássicas*:

$$\text{tr} \hat{\rho} \hat{A} = \int dx A(x) W(x) = \int d\xi A(\xi) \chi(-\xi). \quad (2.54)$$

Dado um operador densidade $\hat{\rho}$, um estado deslocado por η , ou seja, $\hat{\rho}_\eta = \hat{T}_\eta \hat{\rho} \hat{T}_{-\eta}$ tem as seguintes distribuições

$$W_\eta(x) = W(x - \eta) \quad \text{e} \quad \chi_\eta(\xi) = e^{i\eta \wedge \xi / \hbar} \chi(\xi), \quad (2.55)$$

o que significa que a mudança da origem do espaço de fase unicamente altera a fase global da função de cordas. Estas relações conduzem à Eq. (2.45).

Os operadores de reflexão, \hat{R}_x , podem ser considerados como ‘generalizações’ do operador de paridade, \hat{R}_0 , que classicamente corresponde ao mapa de espaço de fase: $x \rightarrow -x$. Como \hat{R}_x é Hermitiano (além de ser unitário) e $(\hat{R}_x)^2 = \hat{1}$, este operador possui apenas dois autovalores, ± 1 , que definem um par de subespaços ortogonais do espaço de Hilbert, para cada escolha do centro de reflexão, x . Quando o estado é simétrico em relação a tal centro x , isto é $[\hat{\rho}, \hat{R}_x] = 0$, se tomarmos x como a origem do espaço, a função de cordas é real. Neste caso, a função de cordas é proporcional a um re-escalamento da função de Wigner:

$$W_\pm(x) = \pm 2^L \chi_\pm(-2x). \quad (2.56)$$

Aqui + (ou -) indica se o estado é par (ou ímpar) com relação a \hat{R}_x .

2.2.1 Alguns exemplos de estados no espaço de fase

A fim de proporcionar uma intuição sobre as quasi-distribuições no espaço de fase, nesta seção, vamos mostrar alguns exemplos de funções de Wigner e de cordas para estados quânticos típicos.

Estados coerentes

Os pacotes de onda de incerteza mínima são chamados de estados *coerentes* ou *quasi-clássicos*. Eles foram introduzidos por Schrödinger [Schr26], mas somente após o trabalho de Glauber sobre coerência em ótica [Gla63] sua importância e aplicações foram reveladas. Hoje em dia, eles são usados em uma ampla variedade de campos da física (*veja* por exemplo, [Kla85]). Os estados coerentes podem ser definidos como as translações no espaço de fase do estado fundamental, $|0\rangle$, do oscilador harmônico quântico de frequência ω , ou seja, $|\eta\rangle = \hat{T}_\eta|0\rangle$ onde $\eta = (\eta_p, \eta_q)$ é um vetor no espaço de fase. A função de onda deste estado coerente para um oscilador de frequência ω (e massa igual a um) é

$$\psi(q) \equiv \langle q|\eta\rangle = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\omega}{2\hbar}(q - \eta_q)^2 + \frac{i}{\hbar}\eta_p\left(q - \frac{\eta_q}{2}\right)\right], \quad (2.57)$$

de modo a que a função de cordas correspondente é

$$\chi_\eta(\xi) = \exp\left(i\frac{\eta \wedge \xi}{\hbar}\right) \exp\left[-\frac{\omega}{\hbar}\left(\frac{\xi_q}{2}\right)^2 - \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\xi_p}{2}\right)^2\right] \xrightarrow{\omega=1} e^{i\eta \wedge \xi/\hbar} e^{-\xi^2/4\hbar}, \quad (2.58)$$

que é uma Gaussiana complexa na origem, enquanto a sua função de Wigner é

$$W_\eta(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{\omega}{\hbar}(q - \eta_q)^2 - \frac{1}{\hbar\omega}(p - \eta_p)^2\right] \xrightarrow{\omega=1} \frac{1}{\pi\hbar} e^{-(x-\eta)^2/\hbar}, \quad (2.59)$$

i.e. uma Gaussiana centrada em η . Estas funções são ilustradas na Fig. 2.4. Se $\eta = 0$,

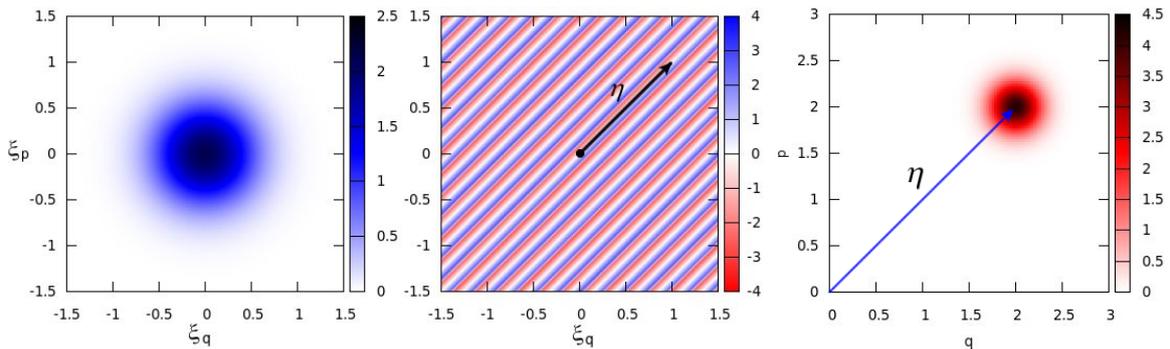


Figura 2.4: **As funções de cordas (esquerda e centro) e de Wigner (direita) para um estado coerente localizado em η .** A função de cordas é complexa, por isso mostramos a sua amplitude (esquerda) e sua fase (centro). Note-se que η aponta na direção em que a fase é constante. Aqui $\hbar = 1$.

obtemos a relação (2.56) para este caso.

Estado gato de Schrödinger

Agora vamos considerar a superposição de dois estados coerentes: $|\Psi^\pm\rangle = |\eta\rangle \pm |-\eta\rangle$. As funções de Wigner e de cordas correspondentes para o estado tipo gato de Schrödinger, definindo $\omega = 1$, são

$$W_\pm(x) = \frac{1}{2\pi\hbar(1 \pm e^{-\eta^2/\hbar})} \left[e^{-|x-\eta|^2/\hbar} + e^{-|x+\eta|^2/\hbar} \pm 2e^{-|x|^2/\hbar} \cos\left(\frac{2x \wedge \eta}{\hbar}\right) \right], \quad (2.60a)$$

$$\chi_\pm(\xi) = \frac{1}{4\pi\hbar(1 \pm e^{-\eta^2/\hbar})} \left[e^{-|\xi/2-\eta|^2/\hbar} + e^{-|\xi/2+\eta|^2/\hbar} \pm 2e^{-|\xi|^2/4\hbar} \cos\left(\frac{\xi \wedge \eta}{\hbar}\right) \right], \quad (2.60b)$$

respectivamente. A primeira consiste de duas distribuições Gaussianas centradas em $\pm\eta$ e um padrão de interferência localizado no meio, entre os dois picos Gaussianos. As oscilações são perpendiculares a η e a sua frequência aumenta com a separação $|2\eta|$. A segunda tem a mesma imagem, mas com uma interpretação inversa: As contribuições individuais de cada pacote coerente estão localizadas na origem, formando um padrão de interferência, enquanto que os termos cruzados são Gaussianas em $\pm 2\eta$. Estas funções são ilustradas na Fig. 2.5. Note-se que a simetria do estado gera uma função de cordas real de acordo com (2.56).

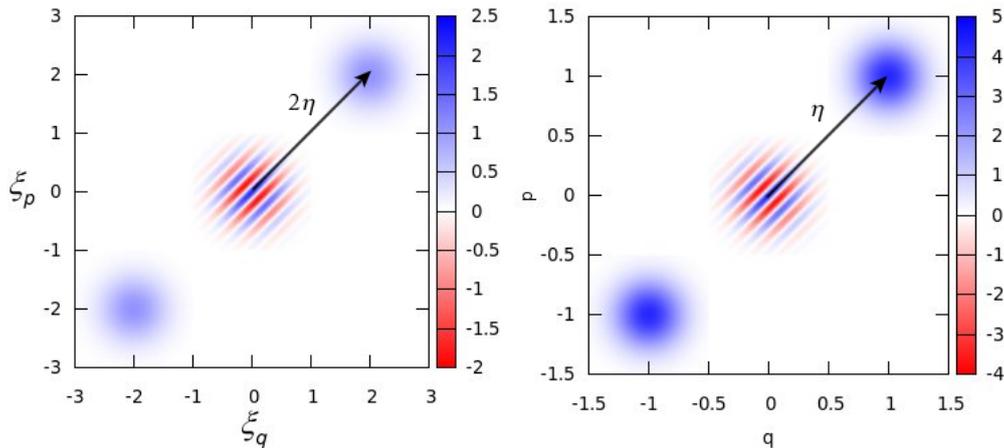


Figura 2.5: **Funções de cordas (esquerda) e de Wigner (direita) para um estado gato Schrödinger.** A simetria do estado dá uma função de cordas real. Note-se que η é perpendicular ao padrão oscilatório.

Estados de Fock

Consideremos agora os estados excitados do oscilador harmônico, conhecidos como *estados de Fock*, $|n\rangle$ para o inteiro $n \geq 0$. Eles são simétricos em relação à origem. A forma exata da função de Wigner, obtida por primeira vez por Grönewold [Grö46], para estes estados é

$$W_n(x) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-x^2/\hbar} L_n\left(\frac{2x^2}{\hbar}\right), \quad (2.61)$$

onde $L_n(\cdot)$ é o n -ésimo polinômio de Laguerre. Pela Eq. (2.56), podemos encontrar a função de cordas [Sch01, Ozo04]

$$\chi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{4\hbar}} L_n\left(\frac{\xi^2}{2\hbar}\right). \quad (2.62)$$

Note que estamos tomando as mesmas unidades para as posições e os momentos. Na Fig. 2.6 ilustra-se a função de cordas para $|5\rangle$.

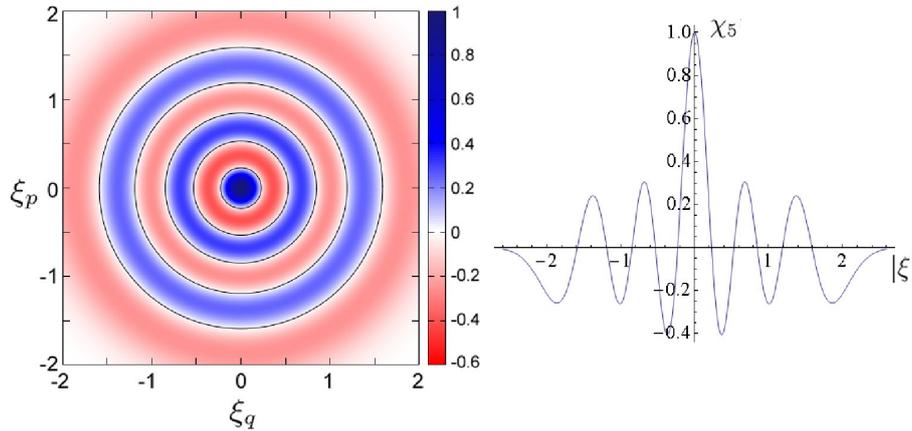


Figura 2.6: **Função de cordas para o quinto estado de Fock.** Tem simetria de reflexão e suas cinco linhas nodais correspondem a círculos. O painel da direita é um corte radial do painel da esquerda. Aqui $\hbar = 0.1$

Outra classe importante de estados são os *estados quantizados tipo Bohr-Sommerfeld*. Eles vem da quantização superfícies clássicas associadas a sistemas integráveis. Eles serão adequadamente definidos no Capítulo 5.

2.3 Outras representações no espaço de fase

A função de Wigner e a sua transformada de Fourier não são as únicas maneiras de recuperar o conceito de espaço de fase na mecânica quântica. Na verdade, as coordenadas internas de um plano lagrangiano no espaço de fase duplo podem ser identificadas com variáveis de momento e de posição [Ozo09a]. Assim, em princípio, a dinâmica projetada em um plano lagrangiano no espaço de fase duplo define uma representação completa no espaço de fase. Particularmente, os símbolos de Weyl são definidos no plano identidade $x_+ = x_-$ e seu plano ortogonal define o *espaço das cordas*. No entanto, existem alguns casos em que um plano lagrangiano não define um espaço de fase, por exemplo, o plano das variáveis de configuração (Q_+, Q_-) .

Uma abordagem diferente para um espaço de fase é obtida usando os estados coerentes. Observamos que os estados coerentes formam uma base sobre-completa do espaço

de Hilbert, ou seja, o operador de identidade, pode ser decomposto como

$$\hat{1} = \frac{1}{\pi} \int d^2z |z\rangle\langle z|, \quad (2.63)$$

onde $|z\rangle$ é o estado coerente do oscilador harmônico com frequência ω localizado em (p, q) , com

$$z = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(q + i\frac{p}{\omega} \right) \quad \text{e} \quad d^2z = \frac{dqdp}{2\pi}. \quad (2.64)$$

Não obstante, mesmo que seja um conjunto de estados sobre-completo, um operador \hat{A} pode ser representado pela forma diagonal:

$$A_H(z) = \text{tr}|z\rangle\langle z|\hat{A} = \langle z|\hat{A}|z\rangle. \quad (2.65)$$

Esta função é conhecida como a *representação de Husimi* do operador \hat{A} . Para o operador densidade obtemos a *função de Husimi*:

$$\rho_H(z) = \frac{1}{\pi} \text{tr}|z\rangle\langle z|\hat{\rho} = \langle z|\hat{\rho}|z\rangle. \quad (2.66)$$

Entre as suas propriedades, é uma função normalizada real e não-negativa no espaço de fase, a saber

$$\int \rho_H(z) d^2z = 1. \quad (2.67)$$

Porém $H(z)$ não fornece as probabilidades marginais. Ela pode ser interpretada como uma *suavização* Gaussiana da função de Wigner correspondente, ou seja

$$\rho_H(p, q) = \int \frac{dq'dp'}{\pi\hbar} W(p', q') \exp \left[-\frac{m\omega}{\hbar}(q - q')^2 - \frac{1}{m\omega\hbar}(p - p')^2 \right]. \quad (2.68)$$

Leboeuf e Voros [Leb90, Leb95] verificaram que a natureza da distribuição dos zeros da função de Husimi de uma autofunção de um Hamiltoniano quântico no plano de fase está relacionada ao caráter caótico ou regular do correspondente movimento clássico. A característica importante é que esses zeros geralmente não se encontram na região clássica do estado (isto é, perto da variedade clássica), dado que a distribuição de Husimi tem um máximo suave sobre a região classicamente permitida, o qual expulsa os zeros nas vizinhanças da região clássica [Tos99].

Sistemas Quânticos Abertos no Limite Markoviano

“La memoria del corazón elimina los malos recuerdos y magnifica los buenos, y gracias a ese artificio, logramos sobrellevar el pasado.”

Gabriel García Márquez,
El coronel no tiene quien le escriba

A evolução unitária de sistemas quânticos, descrita pela equação de Schrödinger, assume que o sistema está completamente isolado de qualquer influência externa. Em geral, esta hipótese não é totalmente válida, já que o (inevitável) contato com sistemas externos pode afetar a preparação inicial, a evolução e os resultados finais dos experimentos. Os efeitos ambientais em sistemas quânticos são um dos principais desafios a vencer para implementação e manipulação de estados quânticos de uma forma controlada e, portanto, para o desenvolvimento de tecnologias quânticas, como o *computador quântico*.

Um *sistema quântico aberto* é tipicamente modelado como um sistema acoplado a um ambiente incontrolável. Este acoplamento pode induzir a dissipação de energia e *descoerência* *[Zur91, Giu96, Bra01]. O primeiro é intuitivamente devido aos fenômenos de atrito e termalização, também presentes no mundo clássico, enquanto o último é um efeito puramente quântico. A descoerência é considerada a responsável pelo surgimento de classicalidade nos sistemas quânticos [Zur91, Zur03, Giu96, Hor09]. Resumindo, a descoerência é o processo que apaga os termos de interferência entre as diferentes componentes de uma superposição quântica. Isso implica a perda de pureza do estado do

*Apesar de não termos definido o conceito de descoerência, é bom enfatizar que não estamos estabelecendo uma diferença entre dissipação e descoerência. Na verdade, a dissipação pode ser considerada como o resultado de um processo de descoerência.

sistema através da interação com um ambiente, quando o estado inicial do sistema for um estado puro.

Um sistema aberto é modelado por um sistema maior composto de dois sub-sistemas: sistema R e ambiente E (ver Fig. 3.1). Assim temos que lidar com um espaço de Hilbert

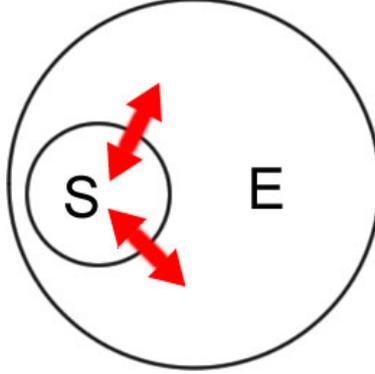


Figura 3.1: **Modelo do acoplamento entre sistema e ambiente.** S é o sistema, E é o ambiente e as flechas vermelhas representam a interação nos dois sentidos.

composto pelo produto direto de dois espaços: $\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$. Neste espaço de Hilbert total, assumimos que a equação de Schrödinger, Eq. (2.30), é válida para o operador densidade total de $\hat{\rho}_{\text{tot}}$, cuja evolução é gerada pelo Hamiltoniano total:

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{SE}, \quad (3.1)$$

onde \hat{H}_S e \hat{H}_E são os Hamiltonianos para S e E, respectivamente, e H_{SE} é a interação entre o sistema e o ambiente. Uma vez que o ambiente é assumido como sendo *incontrolável*, é desejável poder extrair informação sobre o sistema S sem exigir informação detalhada sobre a evolução do sistema total. Para fazer isso, vamos definir o *operador densidade reduzido* do sistema S como

$$\hat{\rho}_S \equiv \text{tr}_E \hat{\rho}_{\text{tot}} = \sum_{\{|k\rangle_E\}} \mathbb{E} \langle k | \hat{\rho}_{\text{tot}} | k \rangle_E, \quad (3.2)$$

onde $\{|k\rangle_E\}$ é uma base de \mathcal{H}_E e tr_E denota a traço sobre os estados do ambiente.

A princípio, pode-se assumir qualquer tipo de acoplamento entre o sistema e o ambiente. Para os fins do presente trabalho, vamos restringir nosso estudo ao *limite Markoviano* do acoplamento [Lin76, Giu96, Bra01, Bro04, Car99], isto é, consideraremos um banho térmico *sem memória*. Este limite nos conduz a *equação mestra de Lindblad*, a qual descreve a evolução do operador densidade reduzido.

3.1 Descoerência

Descoerência refere-se à perda de coerência entre os componentes de uma superposição quântica, devido á sua interação com um ambiente externo. Por exemplo, vamos consi-

derar dois estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$. Uma superposição deles é chamada coerente se tem uma relação de fase bem definida, ou seja, o estado

$$|\Psi_\sigma\rangle = |\psi_1\rangle + e^{i\sigma}|\psi_2\rangle \quad (3.3)$$

é uma superposição coerente se σ for constante ou pelo menos uma função determinística do tempo. Aqui estamos desconsiderando a constante de normalização. Em termos da função de onda $\Psi_\sigma(q) = \langle q|\Psi_\sigma\rangle$, a amplitude de probabilidade é

$$|\Psi_\sigma(q)|^2 = |\psi_1(q)|^2 + |\psi_2(q)|^2 + 2\Re\{e^{i\sigma}\psi_1(q)\psi_2^*(q)\}. \quad (3.4)$$

Vemos que a contribuição individual de cada função de onda não depende da fase σ e pode ser identificada como as densidades clássicas de probabilidade [Zur91, Bra01]. Agora, se o sistema está acoplado a um ambiente, este acoplamento pode produzir, entre outras possibilidades, flutuações aleatórias na fase[†] σ . Assim, neste caso a interferência, isto é o último termo na Eq. (3.4), tenderá a zero depois de um certo tempo. O desaparecimento destes termos de interferência, quando induzido pelo contato com um ambiente, é chamado de descoerência [Zur91, Giu96, Bra01].

Em um modelo simples, a descoerência pode ser interpretada como uma medida sobre o sistema S, se o ambiente é considerado como um detector. Para um acoplamento de *defasagem*[‡], ou seja, quando o Hamiltoniano do sistema comuta com o Hamiltoniano da interação, os autoestados do Hamiltoniano de interação \hat{H}_{SE} , são os estados de ‘*ponteiro*’[§] convenientes para este *aparelho de medição*, porque eles são estacionários, i.e. não evoluem no tempo [Lem11, Nie00]. Note que estamos desconsiderando o comportamento interno de cada subsistema gerado por \hat{H}_S e \hat{H}_E . Após o processo de medição espera-se que, sem importar o estado inicial do sistema total, o seu estado final será aproximadamente uma mistura exata dos estados de ponteiro. Isto significa que o operador densidade final será diagonal na base dos autoestados de \hat{H}_{SE} . Então a interação com o ambiente irá apagando termos de interferência: A interação conduz a regras superseleção induzidas pelo ambiente (ou *einseleção*[¶]) [Zur91, Zur03]. Este mecanismo é o paradigma aceito para o surgimento de classicalidade na mecânica quântica.

Para exemplificar como a einseleção aparece, vamos considerar que o sistema S é um sistema de *dois-níveis*. O espaço de Hilbert correspondente é gerado por $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, ou seja, o estado fundamental e um nível excitado, respectivamente. Agora, consideramos um estado genérico inicial

$$|\Psi_o\rangle_{\text{tot}} = [c_0|0\rangle + c_1|1\rangle] \otimes |e\rangle, \quad \text{com} \quad c_0^2 + c_1^2 = 1, \quad (3.5)$$

[†]Este tipo de processo é conhecido como *amortecimento da fase* [Nie00], ou em inglês conhecido como *phase damping*.

[‡]Tradução do termo *dephasing-type coupling*.

[§]Em inglês *pointer states*

[¶]Esta palavra é uma tradução libérrima do termo em inglês *einselection* ou *environment-induced selection*.

onde $|e\rangle$ é o estado inicial do ambiente. Por causa da interação entre S and E, depois de algum tempo t esperamos a seguinte evolução do sistema total:

$$|\Psi_o\rangle_{\text{tot}} = \left[c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \right] \otimes |e\rangle \mapsto c_0|0\rangle \otimes |e_a(t)\rangle + c_1|1\rangle \otimes |e_b(t)\rangle = |\Psi_f\rangle_{\text{tot}}. \quad (3.6)$$

Este estado final está emaranhado com os dois estados de ponteiro $|e_a(t)\rangle$ e $|e_b(t)\rangle$. Advertemos que este tipo de evolução ocorre apenas para *acoplamento de defasagem* [Lem11, Bre02]. Este processo é chamado de medição “*bit por bit*” [Zur03] e pode ser gerado por uma evolução unitária do operador densidade total. Note que os estados de ponteiro não necessariamente formam uma base para \mathcal{H}_E . Por exemplo, se o Hamiltoniano de interação é

$$\hat{H}_{\text{int}} = g \left[|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0| \right]_S \otimes [-\eta \wedge \hat{x}]_E, \quad (3.7)$$

onde g é o parâmetro real de acoplamento e η é um vetor no espaço de fase. \hat{H}_{int} gera uma evolução da forma da Eq. (3.6): para um tempo t , o estado inicial do ambiente se divide em dois estados:

$$|e_a(t)\rangle = \hat{T}_{-g\eta t}|e\rangle \quad \text{e} \quad |e_b(t)\rangle = \hat{T}_{g\eta t}|e\rangle. \quad (3.8)$$

Estes estados correspondem a translações de $\pm gt\eta$ do estado inicial $|e\rangle$. Assim, a matriz densidade reduzida para o sistema S no tempo t é:

$$\hat{\rho}_S^t = \begin{pmatrix} |c_0|^2 & c_1 c_0^* \langle e_b(t)|e_a(t)\rangle \\ c_0 c_1^* \langle e_a(t)|e_b(t)\rangle & |c_1|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

O desaparecimento dos termos fora da diagonal significa descoerência [Zur01, Giu96]. Então, a eficácia à descoerência pode ser medida por $\langle e_a(t)|e_b(t)\rangle$, isto é, a sobreposição dos dois estados condicionais do ambiente. No modelo particular (3.7), esta sobreposição pode ser expressa pela função de cordas $|e\rangle$, explicitamente

$$\langle e_a(t)|e_b(t)\rangle = \langle e|\hat{T}_{2gt\eta}|e\rangle = \chi_e(\xi) \Big|_{\xi=2gt\eta}. \quad (3.10)$$

Portanto, os zeros desta função de cordas estão relacionados com a descoerência do sistema S. Tenha-se em conta que este modelo de medição tem resurgimentos ou *revivals* da coerência.

Por outro lado, o princípio da incerteza de Heisenberg^{||} restringe o tamanho do menor *pixel* no espaço de fase. Uma olhada rápida nessa desigualdade fundamental pode conduzir erroneamente a afirmar que qualquer estrutura do espaço de fase na escala sub-Planckiana—áreas menores que \hbar —não tem sentido físico. No entanto, W. H. Zurek mostrou na Ref. [Zur01] que a função de Wigner possui estruturas de interferência em áreas sub-Planckianas, da ordem de

$$a \approx \frac{\hbar^2}{A}, \quad (3.11)$$

^{||}Este princípio afirma que as incertezas da posição Δq e do momento Δp obedecem a desigualdade $\Delta q \Delta p \geq \hbar$.

onde A é o suporte efetivo do estado no espaço de fase, ou seja, a área onde $W(x)$ é significativamente diferente de zero. Usando como base o modelo de medição acima enunciado, Zurek também provou que estas estruturas determinam a sensibilidade do sistema à descoerência, porque elas estão relacionadas com o menor deslocamento para o qual (3.10) é zero. Estes deslocamentos serão estudados em detalhe, em termos da função de cordas no Capítulo 4. Note-se que (3.11) é consequência de que \hbar é finito e que a condição (3.11) se não aplica para funções de distribuição clássica [Zur01, Ozo04].

Ressaltamos que o modelo acima de uma medição não é independente da base do espaço de Hilbert, tanto do sistema quanto do detector. Assim, uma mudança da base $\{|0\rangle, |1\rangle\} \rightarrow |+\rangle, |-\rangle\}$ produz um estado emaranhado final com um conjunto diferente de estados de ponteiro do detector. Por exemplo, se a nova base satisfaz as relações:

$$|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.12)$$

o membro do lado direito da Eq. (3.6) lê-se como

$$|\Psi_f\rangle_{\text{tot}} = |+\rangle \otimes |e_+\rangle + |-\rangle \otimes |e_-\rangle \quad \text{onde} \quad |e_{\pm}\rangle = \frac{c_0|e_0\rangle \pm c_1|e_1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.13)$$

Para eliminar esta dependência é necessário considerar um modelo que consiste em três sistemas: o sistema, o detector e outro ambiente externo, como mostrado nas Refs. [Zur91, Zur03].

Podemos resumir esta seção dizendo que a descoerência ocorre quando um sistema interage de forma termodinamicamente irreversível com o ambiente externo [Zur03, Giu96, Zur91].

3.2 A equação mestra de Lindblad

Nesta seção vamos deduzir a equação mestra de Lindblad ** seguindo a derivação contida na Ref. [Fis04]. Como mencionado anteriormente, vamos nos restringir ao caso de interações Markovianas entre o sistema e o ambiente.

Antes de iniciar com a derivação da equação mestra, vamos introduzir o conceito de *operação quântica*. Grosso modo, uma operação quântica é uma transformação linear e positiva \mathcal{G} sobre um operador de densidade $\hat{\rho}$ tal que a normalização do operador é preservada, isto é, $\text{tr} \mathcal{G}(\hat{\rho}) = 1$. Advertemos que esta não é uma definição rigorosa, mas será suficiente para nossos propósitos. Uma discussão mais aprofundada pode ser encontrada nas Refs. [Nie00, Fis04]. Um fato importante é que qualquer operação quântica pode ser expressa como

$$\mathcal{G}(\hat{\rho}) = \sum_k \hat{g}_k \hat{\rho} \hat{g}_k^\dagger \quad \text{onde} \quad \sum_k \hat{g}_k^\dagger \hat{g}_k = \hat{1}. \quad (3.14)$$

**Também conhecida como a equação mestra de Kossakowski-Lindblad [Kos72, Lin76].

Esta fórmula é conhecida como a *representação de Kraus* e os operadores $\{\hat{g}_k\}$ como os *operadores de Kraus* [Kra83, Nie00, Pre98, Fis04]. Em particular, a evolução temporal unitária define uma operação quântica.

Se $\hat{\rho}_S$ varia infinitesimalmente durante um tempo δt , podemos escrever

$$\sum_k \hat{g}_k \hat{\rho}_S(0) \hat{g}_k^\dagger = \hat{\rho}_S(\delta t) = \hat{\rho}_S(0) + \mathcal{O}(\delta t), \quad (3.15)$$

onde o membro esquerdo vem (3.14). Usaremos uma aproximação Markoviana para a evolução temporal para assim obter uma equação para o operador densidade reduzido $\hat{\rho}_S$. Agora a pergunta que fica é: quais são os operadores de Kraus no limite Markoviano?

Primeiro, vamos discutir o significado físico da aproximação Markoviana. Espera-se que a evolução do sistema reduzido dependa do tempo de resposta do acoplamento com o ambiente. Para levar isso em conta, definimos τ_S como a escala de tempo característica na qual o operador densidade reduzido do sistema evolui livremente, τ_E a escala de tempo na qual as correlações entre o estados reduzidos do sistema e do ambiente são esquecidas pelo ambiente e δt como a escala de tempo típica na qual podemos observar e extrair informação sobre o sistema. Uma hipótese plausível consiste em considerar que δt é muito menor que τ_S . Isso nos permite lidar com uma evolução *quase* contínua no tempo para o sistema reduzido, o que significa que o operador densidade reduzido evolui infinitesimalmente no intervalo de tempo δt . Outra hipótese conveniente é assumir que $\delta t \gg \tau_E$, pois no caso contrário a evolução do sistema pode depender das suas configurações para tempo anteriores. Assim o ambiente evolui suficientemente rápido de modo que *esquece* todas a informações sobre os estados anteriores do sistema S. Estas condições sobre δt definem o *limite Markoviano* [Lin76, Kos72, Giu96, Car99]. Tendo em conta as suposições acima, pode-se tomar o primeiro dos operadores de Kraus, denotado por \hat{g}_0 , como uma evolução unitária e infinitésima mais uma evolução geral, isto é

$$\hat{g}_0 = \left[\hat{1}_S - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t \right] + \hat{K} \delta t. \quad (3.16)$$

Aqui \hat{K} e \hat{H} são operadores Hermitianos. Os outros operadores de Kraus podem ser escritos como

$$\hat{g}_k = \sqrt{\delta t} \hat{L}_k, \quad \text{para} \quad k \geq 1. \quad (3.17)$$

A princípio, os operadores \hat{L}_k são arbitrários. Eles são conhecidos como *operadores de Lindblad* e não precisam ser nem unitários nem Hermitianos. Aplicando a condição de normalização dos operadores de Kraus (3.14), temos que

$$\hat{1}_S = \hat{1}_S + \left(2\hat{K} + \sum_k \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \right) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2). \quad (3.18)$$

Segue-se que

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \sum_k \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \quad (3.19)$$

e portanto

$$\hat{\rho}_S(\delta t) = \hat{\rho}_S(0) - \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_S(0)] + \sum_k \left[\hat{L}_k \hat{\rho}_S(0) \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{\rho}_S(0), \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \} \right] \right) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2). \quad (3.20)$$

Finalmente, quando tomamos o limite de $\delta t \rightarrow 0$ obtemos a equação mestra de Lindblad [Lin76, Kos72]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_S] - \frac{1}{2\hbar} \sum_j \left(2\hat{L}_j \hat{\rho}_S \hat{L}_j^\dagger - \hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j \hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S \hat{L}_j^\dagger \hat{L}_j \right). \quad (3.21)$$

Se a representação de Kraus de $\hat{\rho}(t)$ consiste de um só operador como (3.16), então $\hat{K} = 0$ e a evolução unitária tipo Schrödinger, Eq. (2.30), é recuperada. Assim, imediatamente podemos interpretar \hat{H} na Eq. (3.21) como o Hamiltoniano do sistema fechado S . No entanto, podemos obter a mesma equação de Lindblad para um Hamiltoniano diferente de \hat{H} . Para ver isto, é só considerar a transformação

$$\hat{L}_k \rightarrow \hat{L}_k + \ell_k \hat{1}_S \quad \text{and} \quad \hat{H} \rightarrow \hat{H} + \frac{1}{2i} \sum_k \left(\ell_k^* \hat{L}_k - \ell_k \hat{L}_k^\dagger \right) + b \hat{1}_S, \quad (3.22)$$

onde $\{\ell_k\}$ e b são escalares arbitrários. Então a equação de movimento para este novo Hamiltoniano é igual à Eq. (3.21). A equação de Lindblad também é invariante sob qualquer transformação unitária nos operadores de Lindblad. Para outras propriedades da equação mestra de Lindblad recomenda-se ver por exemplo as Refs. [Pre98, Car99, Fis04].

Como exemplos da equação mestra da Lindblad, podemos citar o caso de uma partícula de poeira interagindo com moléculas do ar ou com radiação. Desprezando a força gravitacional, o Hamiltoniano da partícula de poeira é $\hat{H} = p^2/2m$. Sob estas condições, a interação com o meio dependerá da posição da partícula, de modo que o operador de Lindblad é dado por $\hat{L} = g \hat{q}$, onde g é o parâmetro de acoplamento. Este exemplo encontra-se mais detalhado na Ref. [Giu96]. Outro exemplo típico na ótica é o caso de um campo eletromagnético interagindo com um banho térmico de fótons. O campo é modelado por um oscilador harmônico $\hat{H} = \omega(p^2 + q^2)/2$, enquanto os operadores de Lindblad são $\gamma(\bar{n} + 1)\hat{a}/2$ e $\gamma\bar{n}\hat{a}^\dagger/2$, onde \hat{a}^\dagger e \hat{a} são os operadores de criação e aniquilação, \bar{N} é o número médio de fótons térmicos na frequência ω do modo da cavidade à temperatura T e γ é a taxa de amortecimento [Car99].

3.3 Equação de Lindblad no espaço de fase

Como uma primeira aplicação do formalismo do espaço de fase, vamos resolver a equação mestra de Lindblad analiticamente para o caso particular no qual os operadores de Lindblad são proporcionais aos operadores de posição e/ou de momento. O desenvolvimento desta seção segue o trabalho da Ref. [Bro04].

Consideremos a Eq. (3.21) assumindo que cada operador \hat{L}_j é uma função linear dos operadores de momento \hat{p} e/ou de posição \hat{q} e que o Hamiltoniano \hat{H} , é quadrático. Omitindo o subíndice S , a equação mestra no espaço das cordas lê-se como

$$\frac{\partial \chi_t(\xi)}{\partial t} = \{H(\xi), \chi_t(\xi)\} - \alpha \xi \cdot \frac{\partial \chi_t(\xi)}{\partial \xi} - \frac{1}{2\hbar} \sum_j [(l'_j \cdot \xi)^2 + (l''_j \cdot \xi)^2] \chi_t(\xi), \quad (3.23)$$

onde

$$L_j(x) = (l'_j + \iota l''_j) \cdot x \quad \text{e} \quad H(x) = \frac{1}{2} x^T \mathcal{H} x \quad (3.24)$$

são as representações de Weyl de \hat{L}_j e \hat{H} e

$$\alpha \equiv \sum_j l''_j \wedge l'_j \quad (3.25)$$

é o *coeficiente de dissipação*. Note que pelo fato de $H(x)$ ser quadrático, a Eq. (3.23) é uma equação de Fokker-Planck. A solução para esta equação é dada por um produto de dois fatores: Um deles é a função de cordas evoluida unitariamente pelo Hamiltoniano \hat{H} :

$$\chi_u(\xi, t) = \chi_0(\xi(t)), \quad \text{onde} \quad \xi(t) = e^{\alpha t} M_t \xi, \quad (3.26)$$

onde χ_0 é a distribuição inicial e $M_t = e^{J\mathcal{H}t}$. O coeficiente de dissipação conduz a uma expansão clássica não-Hamiltoniana ($\alpha > 0$) ou a uma contração ($\alpha < 0$) no plano das cordas. Na ausência de dissipação, isto é, $\alpha = 0$, χ_u se propaga classicamente como uma distribuição de Liouville^{††}, tal como evolui a função de Wigner. Este fator é multiplicado por uma função Gaussiana, que depende apenas do Hamiltoniano e dos coeficientes de Lindblad, mas é independente da função de cordas inicial, assim, a solução da Eq. (3.23) é [Bro04]

$$\chi_t(\xi) \propto \chi_u(\xi, t) \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \xi^T \Pi_t \xi\right), \quad (3.27)$$

onde

$$\Pi_t = \sum_j \int_0^t dt' e^{2\alpha(t'-t)} M_{t'-t}^T \left[l'_j l'_j{}^T + l''_j l''_j{}^T \right] M_{t'-t}, \quad (3.28)$$

Alguns trabalhos anteriores já estudaram o caso especial em que o sistema e o ambiente consistem em osciladores harmônicos [Aga71, Dod85, San87, Dio02].

Por outro lado, a partir da Eq. (3.27), podemos ver que a função de Wigner reduzida é dada pela convolução da função de Wigner evoluida unitariamente $W_u = \text{FT}\{\chi_u\}$, com uma distribuição Gaussiana, cuja largura aumenta no tempo. Explicitamente

$$W_t(x) \propto \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{M}_t}} \int dy W_u(e^{-\alpha t} y) \exp\left[-\frac{1}{2\pi\hbar} (y - x_{-t})^T \tilde{\mathcal{M}}_t^{-1} (y - x_{-t})\right], \quad (3.29)$$

^{††}A equação de Liouville clássica é

$$\frac{d\rho}{dt} = \{H, \rho\},$$

onde $\rho(x, t)$ é uma distribuição clássica no espaço de fase e H é o Hamiltoniano clássico. Se $\mathbf{x}(t)$ são as órbitas geradas pelo fluxo de H , a solução da equação de Liouville pode ser escrita como $\rho(t) = \rho_o(\mathbf{x}(t))$ onde ρ_o é a distribuição inicial para $t = 0$.

onde

$$x_t = e^{-\alpha t} M_t x, \quad \mathcal{M} = J^T M_t J \quad \text{e} \quad \tilde{\mathcal{M}} = -\mathcal{M}_{-t}. \quad (3.30)$$

Essencialmente, o efeito do acoplamento Markoviano com o ambiente é um *cross-graining* da função de Wigner unitariamente evoluida W_u com uma janela Gaussiana que se torna mais larga a medida que o tempo avança.

Note que o determinante de $\tilde{\mathcal{M}}_t$ aumenta com o tempo, então a função de Wigner se tornará positiva sobre todo o espaço de fase depois de um certo tempo. Especificamente a convolução na Eq. (3.29) é precisamente a transformação da função de Wigner W_u para sua representação de Husimi quando a função Gaussiana atinge a largura \hbar (ver Eq. (2.68)). Denotamos por τ_p o tempo no qual isso acontece. Como a função de Husimi é positiva definida, podemos afirmar que $W_t \geq 0$ para qualquer $t > \tau_p$. Após este *tempo de positividade* as interferências quânticas da função de Wigner desaparecem. Esta é a manifestação da descoerência no espaço de fase e τ_p fornece uma medida do tempo de descoerência. Na verdade, a função de Wigner nunca pode ser positiva antes do tempo τ_p , a menos que o estado inicial seja positivo, como por exemplo, no caso particular de um estado coerente [Bro04]. A Fig. 3.2 mostra a evolução de um *oscilador harmônico amortecido*

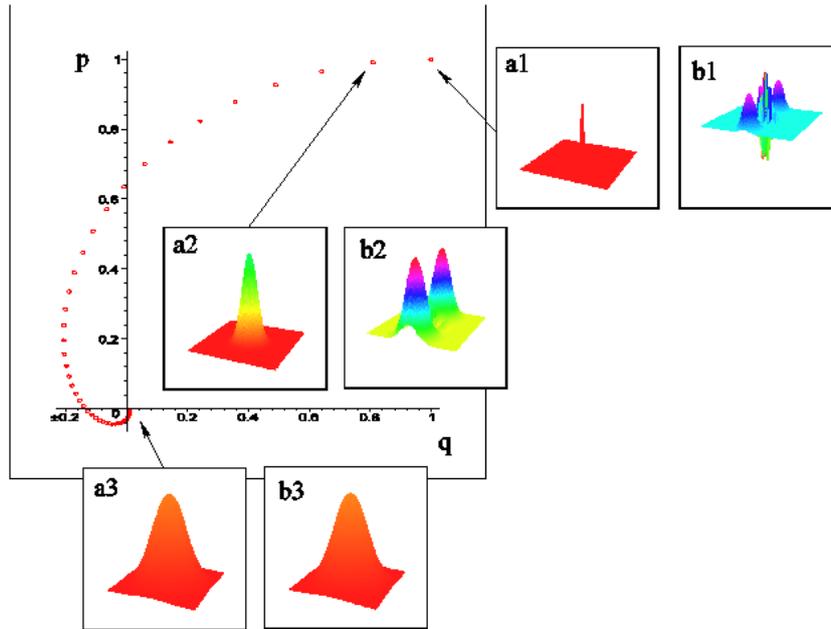


Figura 3.2: **Evolução temporal de um oscilador harmônico quântico com amortecimento.** Mostra-se as fotografias em diferentes instantes de tempo para duas funções de Wigner iniciais diferentes: a) uma função δ de Dirac e b) um gato de Schrödinger. Após o tempo de positividade τ_p , ambos esses estados são iguais a uma função Gaussiana. A órbita clássica (pontos vermelhos) no espaço de fase é também mostrada. Esta figura é uma cortesia de Olivier Brodier.

amortecido para dois estados iniciais diferentes: a1, uma função δ de Dirac e b1, um gato

de Schrödinger, e sua órbita no espaço de fase. Depois de um tempo suficientemente longo, a função de Wigner de ambos os estados convertem-se em funções Gaussianas (*ver* painéis a3 e b3), tal como foi anteriormente obtido nas Refs. [Zur93, Paz93]. Uma configuração intermediária é mostrada nos painéis a2 e b2.

Pontos Cegos entre Estados Quânticos

“La ceguera es una forma de soledad”

Jorge Luis Borges

Neste capítulo estudamos a sobreposição de um estado quântico estendido com a sua imagem transladada. Verifica-se que esta sobreposição pode oscilar e que pode-se ter ortogonalidade completa inclusive para pequenos deslocamentos. Isto ocorre genericamente em pontos isolados. Deste modo, o conceito de *ponto cego* surge referindo-se a pontos no espaço de fase onde a sobreposição entre dois estados quânticos é zero. Testa-se a resposta destes pontos à descoerência —na aproximação Markoviana e para o ambiente de fótons térmicos— mostrando-se que eles são extremamente sensíveis: a descoerência levanta pontos cegos e os transforma em mínimos de correlação em vez de zeros. Foca-se no caso de uma superposição de estados coerentes, onde os pontos cegos dependem fortemente das localizações e amplitudes dos estados que compoem dita superposição, mas são apenas fracamente afetados por mudanças nas fases relativas e pelas possíveis compressões (ou *squeezings*) dos componentes. Os pontos cegos de um tripleto de estados coerentes são especiais, eles se localizam perto de uma rede hexagonal formada por duas sub-redes quasi-ortogonais: O mesmo tripleto quando colocado sobre um nó de uma sub-rede será quasi-ortogonal ao tripleto original e a qualquer tripleto colocado sobre a outra sub-rede.

4.1 Introdução

A interferência entre estados quânticos não tem equivalência clássica. De fato, é uma das características contra-intuitivas da mecânica quântica. A maneira mais simples para gerar interferência entre estados é superpondo um estado e a sua translação em posição ou em momento —isto pode ser realizado experimentalmente usando uma fenda dupla, dentre outras técnicas. Neste caso se produzem franjas mais finas, quanto maior for a separação entre os estados. Isto é, uma separação maior em posição gera franjas menores

nas intensidades de momento e vice-versa, de acordo com o princípio da incerteza de Heisenberg. Assim, aparecem as oscilações na função de Wigner, que representa o estado sobreposto no espaço de fase: Se ambos os estados têm funções de Wigner individuais que são localizadas no espaço de fase, as oscilações entre eles são mais pronunciadas se os estados individuais forem suficientemente separados. As franjas desaparecem à medida que os estados aproximam-se mutuamente.

A sobreposição entre um par de estados, tais como aqueles produzidos em um interferômetro, oscila como uma função do tamanho do deslocamento. Mesmo que geralmente se esperam grandes sobreposições para translações pequenas, pode-se inclusive obter ortogonalidade completa com o estado inicial, como veremos nas seções seguintes. Ao aumentar a extensão do estado, este efeito é incrementado, assim a ortogonalidade é obtida para uma translação menor. Os deslocamentos para os quais a sobreposição é zero serão chamados de *pontos cegos quânticos* ou simplesmente *pontos cegos*.

Um deslocamento pode ser gerado continuamente por uma interação com um sistema quântico de dois níveis, como foi mostrado no modelo de descoerência da Seção 3.1. Naquele caso, os pontos cegos estavam relacionadas com a noção de descoerência. Em geral, a ação de um Hamiltoniano linear fornece esse tipo de translação. As oscilações na sobreposição de um estado inicial com todas as suas translações pode então ser usado para medir algum parâmetro embutido no Hamiltoniano linear que gera a dita evolução. Isto abre uma gama de possíveis aplicações em metrologia quântica [Cav80, Gio04]. Por outro lado, sabe-se que a precisão na estimatção de um parâmetro em um sistema quântico está limitada pelos recursos de energia. Por exemplo, se $\delta\gamma$ é a precisão na estimatção do parâmetro γ e N o número de estados envolvidos no processo de medição, o *limite quântico padrão*[†] impõe que $\delta\gamma$ escala como $\mathcal{O}(N^{-\frac{1}{2}})$. Este limite pode ser superado[‡] obtendo o limite máximo, o chamado *limite de Heisenberg*. Aparentemente, este limite máximo nas estimatções, mesmo para os sistemas abertos, foi obtido na Ref. [Esc11a]. Este limite está relacionado com a *desigualdade de Cramér-Rao* [Rao45, Cra46]. Mais detalhes sobre esses limites de medição vão além do escopo desta tese. Para os leitores interessados recomendamos *ver* as Refs. [Gio04, Esc11a, Esc11] e Refs. contidas nelas.

Aqui estudaremos a estrutura da sobreposição de estados genéricos estendidos com todas as suas possíveis translações. Algumas perguntas são formuladas nesta direção: A sobreposição é especialmente sensível à descoerência? Quão delicada é a sobreposição às mudanças entre as amplitudes e as fases relativas de uma superposição de estados coerentes para que um ponto cego surja ou desapareça? Ao comprimir os estados que formam dita superposição continuaremos tendo pontos cegos? Outros estados estendidos, como estados excitados de osciladores anarmônicos, apresentam pontos cegos?

Em resumo, verificamos que os pontos cegos são uma característica geral de qualquer

[†]Tradução libérrima do termo *standard quantum limit*.

[‡]Por exemplo, na Ref. [Tos06] isto é feito usando um estado específico inicial: o *estado bússola*, ou seja, uma superposição de 4 estados coerentes.

estado quântico estendido. Se o estado tem uma simetria de paridade generalizada, isto é, se é invariante sob reflexões com respeito a um ponto no espaço de fase, os zeros da sobreposição podem ocorrer ao longo de linhas contínuas—para um grau de liberdade—em vez de em pontos isolados. Para estados gerais, estes zeros ocorrem genericamente em pontos isolados, e tem-se padrões regulares ou irregulares de pontos cegos que manifestam as delicadas propriedades ondulatórias da mecânica quântica. As estruturas que emergem lembram as estruturas sub-Planckianas [Zur01]. Como uma consequência notável da pureza do estado, a invariância das correlações com respeito à transformada de Fourier simplética [Cho98, Ozo04, Ozo09a] se manifestará em uma clara conjugação entre escalas grandes e pequenas no espaço de fase. Esta invariância será essencial para a análise a seguir.

Em princípio, os zeros apresentados aqui podem ser observados diretamente por meio da manipulação e interferência de estados quânticos simples, como realizado em ótica quântica [Leo97, Sch01]. Outro ponto importante é que apesar de serem genericamente isolados, os pontos cegos não são limitados pela analiticidade da correlação, como acontece com os zeros da função de Bargmann [§], e portanto com os zeros da função de Husimi [Leb90]. Ao contrário daqueles zeros que muitas vezes se encontram em regiões evanescentes [Tos99], os pontos cegos aparecem imersos em um fundo de correlações máximas.

Primeiro vamos estudar as linhas nodais das partes real e imaginária da função de cordas. A interseção entre estas linhas determinará pontos cegos isolados, na ausência de uma simetria de reflexão. Depois, desenvolveremos uma teoria para os pontos cegos de superposições de estados coerentes ou de estados comprimidos, i.e. estados gato Schrödinger e suas generalizações. Tais superposições de estados coerentes recentemente se tornaram experimentalmente acessíveis [Hof09]. Acontece que no caso de um tripleto de estados coerentes temos que os pontos cegos formar um padrão regular sobre uma rede hexagonal, quaisquer que sejam as amplitudes, fases relativas e localizações dos três estados que compõem a superposição.

Em contraste com a robustez dos pontos cegos de estados puros com respeito a qualquer variação estrutural do estado, eles são notavelmente sensíveis à descoerência. Observamos isto comparando o tempo de levantamento dos pontos cegos com o tempo em que as oscilações da função de Wigner desaparecem. Este tempo de desaparecimento é tomado às vezes como um indicador da perda de coerência quântica. Note-se também que a desaparecimento de oscilações finas na função de Wigner corresponde ao decaimento da sua função característica para argumentos grandes, e que a região que vamos analisar é a de argumentos pequenos. Assim, um operador densidade pode ainda ter regiões negativas em sua função de Wigner, embora qualquer vestígio de seus pontos cegos tenha sido exterminado.

[§]A função de Bargmann é a parte (inteira) holomorfa da função de Husimi [Vor89]

4.2 Linhas nodais reais e imaginárias

Dado um estado $|\psi\rangle$ (ou $\hat{\rho}$), definimos um ponto cego como um ponto no espaço de fase ξ_b tal que $C(\xi_b) = 0$. Nosso objetivo é encontrar a estrutura dos zeros de $C(\xi)$. Note-se que ela não é obtida diretamente da função de Wigner. Como $W(x)$ é real, seus zeros ficam ao longo das suas linhas nodais. Esta estrutura nodal da função de Wigner torna-se uma superfície nodal de codimensão-1 para espaços de fase de $L > 1$ dimensões.

Por outro lado, note que a simetria de reflexão não é uma condição necessária para a invariância de Fourier simplética das correlações no espaço de fase. É uma característica de todos os estados puros [Cho98, Ozo04, Ozo09a]:

$$\text{FT}\{C(\xi)\} = C(\xi) = |\chi(\xi)|^2, \quad (2.46)$$

o que significa que os pontos cegos coincidem com os zeros da função de cordas quando o estado for puro. Assim, daqui em diante, vamos nos restringir aos estados puros, assim, em princípio, não distinguiremos entre a intensidade da função de cordas e a correlação no espaço de fase $C(\xi)$.

Pela Eq. (2.46), vemos que existe uma conjugação entre as escalas grandes e pequenas para estado puros, levando à estruturas sub-Planckianas [Zur01] com correlações consideráveis sobre uma área maior do que a constante de Planck, \hbar . As estruturas em escalas grandes implicam vetores de onda grandes para as oscilações de $W(x)$ e igualmente para as oscilações das partes real e a imaginária de $\chi(\xi)$. Estas funções, como mostraremos logo, são reais e tem linhas nodais que se aproximam à origem a medida que a extensão total do estado é incrementada. Depois disto, faltaria então mostrar que em geral essas linhas nodais se cruzam transversalmente.

Para a função de cordas, nenhuma restrição obriga às linhas nodais das suas partes real e imaginárias coincidirem, por isso, normalmente, elas se cruzam em zeros isolados. No caso geral, estas se tornam superfícies de codimensão 2. Mostraremos depois como as partes real e imaginária da função de cordas estão relacionadas, respectivamente, com a parte diagonal e não-diagonal do operador densidade em uma decomposição do operador densidade em subespaços de paridade definida pelo operador \hat{R}_0 , ou qualquer outro operador de reflexão, \hat{R}_x .

Primeiro, qualquer estado puro $|\psi\rangle$ pode ser decomposto em um par de estados com paridade definida, uma componente ímpar $|\psi_i\rangle$ e uma par $|\psi_p\rangle$, onde $|\psi_i^x\rangle$ e $|\psi_p^x\rangle$ são autoestados de \hat{R}_x , por -1 e 1 , respectivamente. O correspondente operador densidade para este estado puro pode então ser decomposto em um par de componentes: Uma parte diagonal $\hat{\rho}_D$ e uma não-diagonal $\hat{\rho}_N$ com respeito a \hat{R}_x , definidas por:

$$\hat{\rho} = \underbrace{(|\psi_i^x\rangle\langle\psi_i^x| + |\psi_e^x\rangle\langle\psi_p^x|)}_{\hat{\rho}_D} + \underbrace{(|\psi_i^x\rangle\langle\psi_p^x| + |\psi_e\rangle\langle\psi_i^x|)}_{\hat{\rho}_N}. \quad (4.1)$$

Esta decomposição pode ser realizada para estados mistos: As contribuições diagonais, ou não diagonais de cada estado puro que compõe a mistura são sumadas. De fato, uma

mistura estatística de estados $\{|\psi_k\rangle\}$ é dada por

$$\hat{\rho} = \sum_k \mathcal{P}_k \hat{|\psi_k\rangle}\langle\psi_k|, \quad \text{onde} \quad \sum_k \mathcal{P}_k = 1. \quad (2.29)$$

e pode ser escrita na forma (4.1).

Sabe-se que o valor da função de Wigner em um ponto x é definido pelos termos diagonais na descomposição em relação ao \hat{R}_x [Roy77, Ozo09a]:

$$W(x) = \frac{1}{\pi\hbar} [\langle\psi_p^x|\psi_p^x\rangle - \langle\psi_i^x|\psi_i^x\rangle]. \quad (4.2)$$

Esta relação é resultado de inserir (4.1) na definição (2.42). Evidentemente, estes termos 'diagonais' que compõem $\hat{\rho}_D$ têm paridade definida, ou seja

$$[\hat{R}_x, |\psi_i^x\rangle\langle\psi_i^x|] = [\hat{R}_x, |\psi_p^x\rangle\langle\psi_p^x|] = 0. \quad (4.3)$$

Logo, tomando x como a origem do espaço e dado que a representação de cordas deste operador densidade centro-simétrico $\hat{\rho}_D^0$ é um mero redimensionamento de sua função de Wigner (ver Eq. (2.56)), a componente diagonal da função de cordas é uma função real. Por conveniência o sub-índice 0 será omitido, e então tem-se que

$$\chi_D(\xi) = \text{tr} \hat{\rho}_D \hat{T}_{-\xi} = \text{tr} \left([|\psi_i\rangle\langle\psi_i| + |\psi_p\rangle\langle\psi_p|] \hat{T}_{-\xi} \right). \quad (4.4)$$

Este fato não implica que a representação de cordas de $\hat{\rho}_N$ seja uma função puramente imaginária, embora isto seja realmente o caso. Para ver isso, primeiro combinam-se as Eqs. (2.47) para $x = 0$, para obter

$$\hat{R}_0 \hat{T}_\xi \hat{R}_0 = \hat{T}_{-\xi}. \quad (4.5)$$

Denotamos por $\chi_N(\xi)$ à função de cordas *não-diagonal* com relação a \hat{R}_0 , i.e.

$$\chi_N(\xi) = \text{tr} \left\{ \hat{T}_{-\xi} |\psi_i\rangle\langle\psi_p| + \hat{T}_{-\xi} |\psi_p\rangle\langle\psi_i| \right\}. \quad (4.6)$$

Portanto

$$\begin{aligned} \chi_N(\xi) &= \langle\psi_i|\hat{T}_{-\xi}|\psi_p\rangle + \langle\psi_p|\hat{T}_{-\xi}|\psi_i\rangle \\ &= \langle\psi_i|\hat{R}_0\hat{T}_\xi\hat{R}_0|\psi_p\rangle + \langle\psi_p|\hat{R}_0\hat{T}_\xi\hat{R}_0|\psi_i\rangle \\ &= -\chi_N^*(\xi), \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde o asterisco indica o complexo conjugado. Então $\Re\{\chi_N\} = 0$. Resumindo, mostramos que

$$\Re\{\chi(\xi)\} = \chi_D(\xi) \quad \text{e} \quad \Im\{\chi(\xi)\} = \chi_N(\xi). \quad (4.8)$$

Agora, dado que $\chi(-\xi) = \chi^*(\xi)$, temos finalmente que

$$\chi_D(-\xi) = \chi_D(\xi) \quad \text{e} \quad \chi_N(-\xi) = -\chi_N(\xi), \quad (4.9)$$

assim, as partes real e imaginária da função de cordas são funções par e ímpar, respectivamente. Isto pode ser observado na Fig. 4.7 para o caso de uma superposição de três estados coerentes.

Independente do estado, a parte imaginária da sua função de cordas é zero na origem, porque $\text{tr} \hat{\rho}_N = 0$, por isso a origem sempre está sobre uma linha nodal imaginária. Em contraste, a parte real da função de cordas atinge lá seu valor máximo, para $\text{tr} \hat{\rho}_D = 1$. Como será mostrado com uma aproximação ao redor da origem, o cenário genérico dos zeros da função de cordas provem de uma linha nodal imaginária que atravessa a origem e que corta transversalmente as linhas nodais reais que evitam a origem. Para estados centro-simétricos, ou seja, aqueles para os quais o comutador

$$[\hat{\rho}, \hat{R}_x] = 0 \text{ para algum centro de reflexão } x, \quad (4.10)$$

a parte imaginária da função de cordas é identicamente zero. Então $\chi(\xi)$ é essencialmente um redimensionamento da função de Wigner (*ver* Eq. (2.56)), portanto os seus zeros também se encontram ao longo das linhas nodais, em vez de pontos isolados. Assim, os estados simétricos são exceções importantes para o quadro genérico de linhas nodais que se cruzam transversalmente perto da origem. No entanto, qualquer quebra de simetria, mesmo que pequena, isola os zeros para pontos cegos, embora $|\chi(\xi)|^2$ continue sendo muito pequeno ao longo de suas linhas nodais reais.

Pode-se argumentar que a decomposição em subespaços de paridade definida é totalmente dependente da escolha do centro de reflexão como a origem; e portanto, as partes real e imaginária da função de cordas não são invariantes com respeito a um deslocamento de origem. Porém, o efeito de tal translação da origem consiste em um fator de fase de acordo com a Eq. (2.55). No entanto, este fator de fase não altera os pontos cegos, porque esse fator de fase é global, de modo que podemos ainda decompor a função de cordas para o mesmo par de componentes (com o mesmo deslocamento na fase) e suas linhas nodais ainda se cruzarão nos mesmos pontos cegos (*ver* e.g. Figs. 4.1, 4.2 e 4.7).

Uma interpretação alternativa é considerar as transformadas cosseno e seno simpléticas, $\mathfrak{c}(\xi)$ e $\mathfrak{s}(\xi)$ da função de Wigner. Elas coincidem com as partes real e imaginária de $\chi(\xi)$, respectivamente. De acordo com a definição (2.38), podemos construir os operadores Hermitianos

$$\hat{\mathfrak{c}}_\xi = \frac{\hat{T}_\xi + \hat{T}_{-\xi}}{2} = \cos\left(\frac{\xi \wedge \hat{x}}{\hbar}\right) \quad \text{e} \quad \hat{\mathfrak{s}}_\xi = \frac{\hat{T}_\xi - \hat{T}_{-\xi}}{2i} = \sin\left(\frac{\xi \wedge \hat{x}}{\hbar}\right), \quad (4.11)$$

de maneira que

$$\mathfrak{c}(\xi) = \text{tr} \hat{\rho} \hat{\mathfrak{c}}_\xi = \langle \hat{\mathfrak{c}}_\xi \rangle_{\hat{\rho}} \quad \text{e} \quad \mathfrak{s}(\xi) = \text{tr} \hat{\rho} \hat{\mathfrak{s}}_\xi = \langle \hat{\mathfrak{s}}_\xi \rangle_{\hat{\rho}}. \quad (4.12)$$

Estas transformadas podem ser interpretadas como generalizações dos potenciais $\cos(kq)$ e $\sin(kq)$, no contexto de átomos frios iluminados por ondas estacionárias de lasers [Harp55, Aub80], onde k é o vetor de onda do laser e q é a coordenada de posição. Quando o estado

$|\psi\rangle$ tem um centro de simetria, então $s(\xi) = 0$, de modo que $\chi(\xi) = c(\xi)$ [Ozo04, Zam09, Zam10].

Como $c(0) = \text{tr } \hat{\rho} \hat{t}_0 = \chi(0) = 1$, a origem está sobre uma linha nodal de $s(\xi)$. Em uma vizinhança da origem, a função de cordas pode ser aproximada por

$$\begin{aligned} \chi(\xi) &= \langle \hat{T}_{-\xi} \rangle_{\hat{\rho}} \simeq \left\langle 1 - \frac{i}{\hbar} \xi \wedge \hat{x} - \frac{1}{\hbar^2} (\xi \wedge \hat{x})^2 + \dots \right\rangle_{\hat{\rho}} \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \xi \wedge \langle \hat{x} \rangle_{\hat{\rho}} - \frac{1}{\hbar^2} \langle (\xi \wedge \hat{x})^2 \rangle_{\hat{\rho}} + \dots \end{aligned} \quad (4.13)$$

Assim, a linha nodal de $s(\xi)$ que atravessa a origem é localmente paralela à direção de do vetor $\langle \hat{x} \rangle_{\hat{\rho}}$. Por outro lado, como a origem é um máximo local da função de cordas, as linhas nodais de $c(\xi)$ para cordas pequenas evitam a origem. Segue-se da Eq. (4.13) que a linha nodal real mais próxima em torno da origem, se negligenciarmos termos de ordem superior, é dada aproximadamente por

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle (\xi \wedge \hat{x})^2 \rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{\hbar^2} \langle \hat{q}^2 \rangle_{\hat{\rho}} \xi_p^2 + \langle \hat{p}^2 \rangle_{\hat{\rho}} \xi_q^2 - \langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle_{\hat{\rho}} \xi_q \xi_p = 1, \quad (4.14)$$

que pode ser compactado em notação matricial:

$$\xi^T J^T K_{\hat{\rho}} J \xi = \hbar^2, \quad (4.15)$$

onde

$$K_{\hat{\rho}} \equiv \begin{bmatrix} \langle \hat{p} \rangle_{\hat{\rho}} & \frac{1}{2} \langle \hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p} \rangle_{\hat{\rho}} \\ \frac{1}{2} \langle \hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p} \rangle_{\hat{\rho}} & \langle \hat{q} \rangle_{\hat{\rho}} \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

A matriz $K_{\hat{\rho}}$ é conhecida como matriz de covariância de Schrödinger [Schr26, Ozo09a], e seu determinante estabelece a extensão do estado no espaço de fase, isto é,

$$\det K_{\hat{\rho}} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.17)$$

Esta desigualdade é a versão symplecticamente invariante do princípio da incerteza de Heisenberg. A linha nodal de $c(\xi)$ é então aproximada por uma elipse (4.15) e o ponto cego mais próximo está perto do seu ‘diâmetro’ que é paralelo a $\langle \hat{x} \rangle_{\hat{\rho}}$. É importante notar que a presente estimativa para o par de *pontos cegos mais próximos da origem* depende apenas dos primeiros e segundos momentos da distribuição de Wigner, e que é inútil tentar fazer uma expansão de Taylor (4.13) para encontrar outras ortogonalidades. Finalmente, destacamos o fato de que a Eq. (4.15) é equivalente à relação das áreas sub-Planckianas, Eq. (3.11), obtida por Zurek em Ref. [Zur01]: Associamos $|\xi|^2$ com a área de sub-Planckiana e $|\det K_{\hat{\rho}}|$ com a área A na Eq. (3.11), i.e. o tamanho do estado no fase de espaço.

Todas as considerações nesta seção são facilmente adaptadas a sistemas com vários graus de liberdade: A origem em um espaço de fase de mais dimensões encontra-se sobre uma superfície nodal imaginária de codimensão-1 e esta superfície genericamente intersecta as superfícies nodais da parte real da função de cordas ao longo de superfícies de

codimensão 2. Portanto, os zeros na sobreposição de duas cópias transladadas do mesmo estado estarão genericamente sobre pontos cegos isolados quando projetados sobre superfícies bidimensionais arbitrárias no espaço de fase de muitas dimensões. Assim, a probabilidade de que um grupo contínuo de translações a partir da origem e ao longo de uma linha reta se aproxime de um ponto de sobreposição zero, não depende do número de graus de liberdade. Isso certamente vale para sistemas centro-simétricos. Genericamente, os pontos cegos se encontram próximos à origem para todos os estados estendidos, pois a invariância das correlações de espaço de fase com respeito a transformada de Fourier simplética, Eq. (2.46), é válida, independentemente do número de graus de liberdade.

4.3 Superposições de estados coerentes

Antes de embarcar no estudo de superposições gerais de estados coerentes, é interessante rever algumas propriedades de casos mais simples. Em primeiro lugar, um único pacote Gaussiano, como mostrado na Fig. 2.4 no Capítulo 2, não tem pontos cegos, porque a parte real da sua função de cordas nunca é zero. Na verdade, a correlação $C(\xi)$ tende a zero somente se $|\xi| \rightarrow \infty$.

Contrariamente a isto, a simetria do estado gato de Schrödinger (ou 2-gato) $|\Psi_\eta^1\rangle$ produz uma função real de cordas cujas linhas nodais são paralelas a η (veja Fig. 2.5 no Capítulo 2). Este caso é especialmente patológico: Quebrando a simetria dos coeficientes do par de estados coerentes, geram-se linhas nodais retas na parte imaginária da função de cordas que são localmente paralelas às linhas reais nodais na vizinhança da origem. A Fig. 4.1 mostra a intensidade de dois estados 2-gato: (*superior*) o caso simétrico e (*inferior*) um outro formado por dois pacotes Gaussianos com amplitudes diferentes. Ao contrário do primeiro, a parte imaginária do segundo não é nula em todos os lugares, e os seus zeros não coincidem com as linhas (verdes) nodais de sua parte real. Aqui as linhas nodais da função de cordas reduzem-se a pontos isolados a meio caminho entre o padrão de interferência e os picos de fora. Olhando para as intensidades na Fig. 4.1, é complicado reconhecer qual estado é simétrico e qual não é. No entanto, isso pode ser notado na diferença na amplitude dos picos de fora.

O estado *bússola* —quatro gaussianas localizadas nos vértices de um quadrado— foi utilizado por Zurek em suas trabalho sobre estruturas sub-Planckianas. Como discutimos na Seção 3.1, a descoerência pode estar relacionada com os pontos de ortogonalidade no modelo particular estudado. Zurek mostrou essas ortogonalidades em termos de funções de Wigner. No entanto, a forma mais adequada é usando a representação de cordas. Na Fig. 4.2 mostram-se os zeros para o estado bússola: Eles determinam uma grade na vizinhança da origem, cuja célula unitária é menor do que \hbar ; assim os zeros ficam numa escala sub-Planckiana. Se alteramos a amplitude das componentes Gaussianas, estes zeros se reduzem a pontos isolados na região intermédia entre a origem e os picos exter-

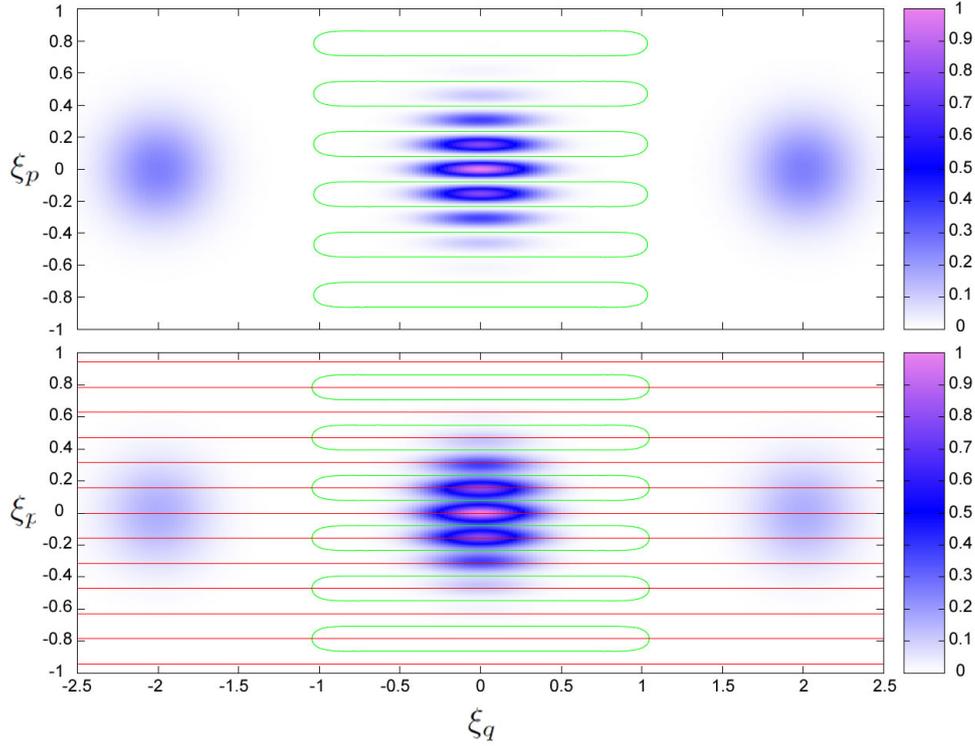


Figura 4.1: **Intensidade da função de cordas para um estado 2-gato não-simétrico** (Superior). O estado gato simétrico é real de modo que, os zeros da função de cordas se encontram ao longo das linhas nodais (verdes). (Inferior) O gato não-simétrico tem zeros em pontos isolados: Aqui um pacote Gaussiano tem duas vezes a amplitude do outro. As linhas verdes (amarelas) são as linhas nodais da parte real (imaginária) de $\chi(\xi)$. Aqui $\hbar = 0.5$.

nos, tal como no caso do estado gato de Schrödinger. Observamos que as grades verdes e vermelhas ao redor da origem, no painel direito da Fig. 4.2, não se cruzam mutuamente. Uma ampliação da Fig. 4.2 revela um conjunto de cruzamentos evitados entre as linhas nodais das partes real e imaginária da função de cordas, conforme mostrado na Fig. 4.3.

Agora, vamos nos concentrar numa superposição genérica de estados coerentes localizados nos vetores no espaço de fase $\{\eta_k\}$:

$$|\Psi^N\rangle = \mathcal{N} \sum_{k=0}^N a_k |\eta_k\rangle = \mathcal{N} [a_0 |0\rangle + a_1 |\eta_1\rangle + \dots + a_N |\eta_N\rangle], \quad (4.18)$$

onde a constante de normalização é:

$$\mathcal{N}^{-2} = \left(\sum_{k,s=0}^N a_k a_s^* \exp \left[-\frac{|\eta_k - \eta_s|^2}{4\hbar} + i \frac{\eta_k \wedge \eta_s}{2\hbar} \right] \right). \quad (4.19)$$

Resonadores supercondutores não-lineares entre outras técnicas [Hof09, Mir90, Tar93,

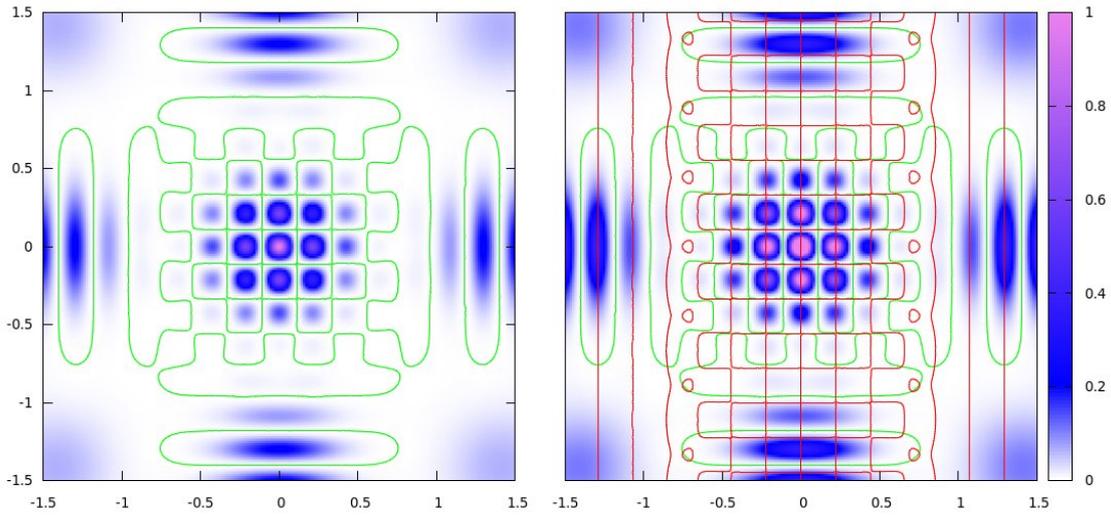


Figura 4.2: **Intensidade da função de cordas para um estado bússola** (esquerda) O caso simétrico é real. As linhas nodais desenham uma grade nas proximidades da origem (ver as linhas verdes). (direita) Estado bússola assimétrico: Os dois estados componentes superiores tem uma amplitude 1.3 vezes maior do que os outros dois. As linhas verdes (vermelhas) são as linhas nodais da parte real (imaginária) de $\chi(\xi)$. Quebrando a simetria, os zeros de $\chi(\xi)$ são reduzidos a pontos isolados longe da origem. Aqui $\hbar = 0,05$.

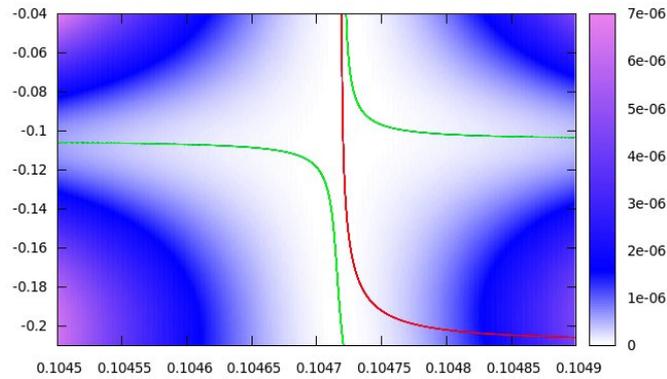


Figura 4.3: **Cruzamentos evitados das linhas nodais de um estado bússola.** Esta é a ampliação da figura. 4.2 perto de um cruzamento evitado entre as linhas nodais reais (verdes) e as imaginárias (vermelhas) da função de cordas. Aqui $\hbar = 0,05$.

Bru92] podem sintetizar este tipo de superposições. A translação deste estado é então

$$\begin{aligned}
 |\Psi_\xi^N\rangle &\equiv \hat{T}_\xi |\Psi^N\rangle = \sum_{k=0}^N a_k |\eta_k + \xi\rangle \\
 &= \mathcal{N} [a_0 |\xi\rangle + a_1 e^{i\xi \wedge \eta_1 / \hbar} |\eta_1 + \xi\rangle + \dots + a_N e^{i\xi \wedge \eta_N / \hbar} |\eta_N + \xi\rangle],
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

mais uma fase global. Assim, na correlação, $C(\xi)$, é preciso tratar $(N + 1)^2$ termos da

forma $\langle \eta_m | \eta_m + \xi \rangle$. Note-se que cada termo diagonal, $\langle \eta_m | \eta_m + \xi \rangle$, determina as correlações internas para um único estado coerente $|\eta_m\rangle$.

A função de Wigner e a função de cordas de um multipletto de estados coerentes podem ser divididas em termos diagonais e não diagonais, como por exemplo a função Wigner é

$$W^N(x) = \frac{\mathcal{N}^2}{\pi\hbar} \sum_{k,s=0}^N a_k a_s^* W_{ks}(x), \quad (4.21)$$

onde

$$W_{ks}(x) = \exp \left[-\frac{|\frac{\eta_k + \eta_s}{2} - x|^2}{\hbar} + \frac{i}{\hbar}(\eta_k - \eta_s) \wedge x + \frac{i}{2\hbar} \eta_s \wedge \eta_k \right]. \quad (4.22)$$

Aqui fica claro que os termos ‘*individuais*’ $W_k(x)$, são picos Gaussianos localizados no centro de cada estado coerente η_k , enquanto que os termos $W_{ks}(x)$ estão representados por franjas de interferência, localizadas a meio caminho entre η_k e η_s . Essencialmente, temos o mesmo esboço da Fig. 2.5, exceto alterando a origem para o ponto médio entre η_k e η_s . Este padrão é estruturalmente estável em relação a variações dos coeficientes de $|\Psi^N\rangle$.

Por outro lado, para a função de cordas tem-se uma situação semelhante, mas com uma interpretação totalmente diferente. A função de cordas é dada por

$$\chi^N(\xi) = \mathcal{N}^2 \sum_{k,s=0}^N a_k a_s^* \chi_{ks}(\xi), \quad (4.23)$$

onde

$$\chi_{ks}(\xi) = \exp \left[-\frac{|\eta_k - \eta_s - \xi|^2}{4\hbar} + \frac{i}{2\hbar} [(\eta_k + \eta_s) \wedge \xi + \eta_k \wedge \eta_s] \right].$$

As correlações internas dos estados coerentes individuais se sobrepõem na vizinhança da origem, enquanto as correlações cruzadas geram Gaussianas complexas centradas nos vetores $\pm(\eta_k - \eta_s)$, como mostrado na Fig. 4.4.

Note que esta decomposição para a função de Wigner e de cordas dá a falsa impressão de que um par de estados coerentes formam os ‘blocos de construção’ fundamentais no espaço de fase e assim para os pontos cegos. No entanto, mostraremos que a distribuição de pontos cegos muda drasticamente pela adição de um estado único e coerente no multipletto inicial.

Olhando para cordas curtas, pode-se apreciar a estrutura simples que suporta o padrão de pontos cegos. Primeiro, considere os termos diagonais da função de Wigner, ou seja, os picos Gaussianos $W_k(x)$. Mesmo que os estados Gaussianos estejam comprimidos de diferentes maneiras, como mostrado na Fig. 4.5, a largura de cada contribuição é da ordem de $\mathcal{O}(\hbar^{\frac{1}{2}})$, onde se considera \hbar como um parâmetro pequeno, isto é, as larguras são muito menores do que as separações, $|\eta_m - \eta_n|$, que são da ordem de $\mathcal{O}(\hbar^0)$. Em conjunto,

[¶]Para simplificar a notação usamos $W_k(x)$ em vez de $W_{kk}(x)$.

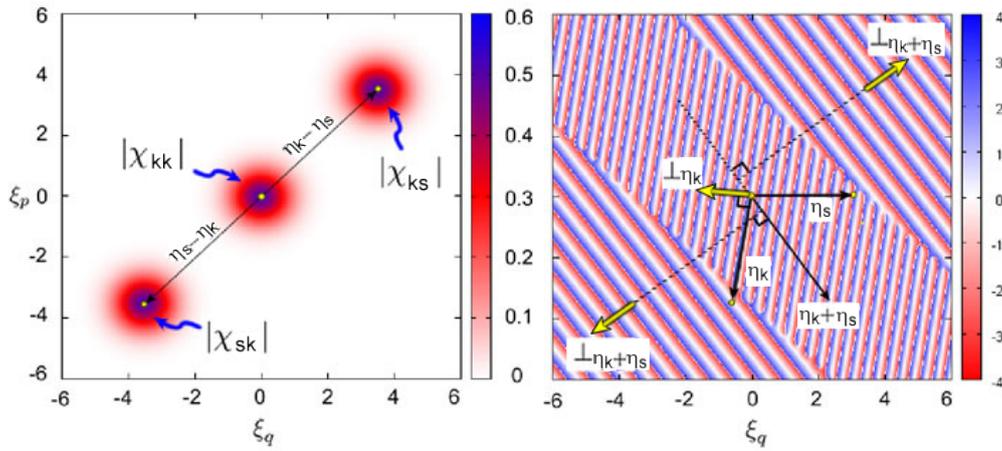


Figura 4.4: **Função de cordas para um par de estados Gaussianos em η_k e η_s .** A intensidade (fase) é mostrada no painel esquerdo (direito). Observe que as oscilações de fase são perpendiculares aos vetores η_k e $\eta_k + \eta_s$ respectivamente. A intensidade não está normalizada porque este esboço é meramente ilustrativo.

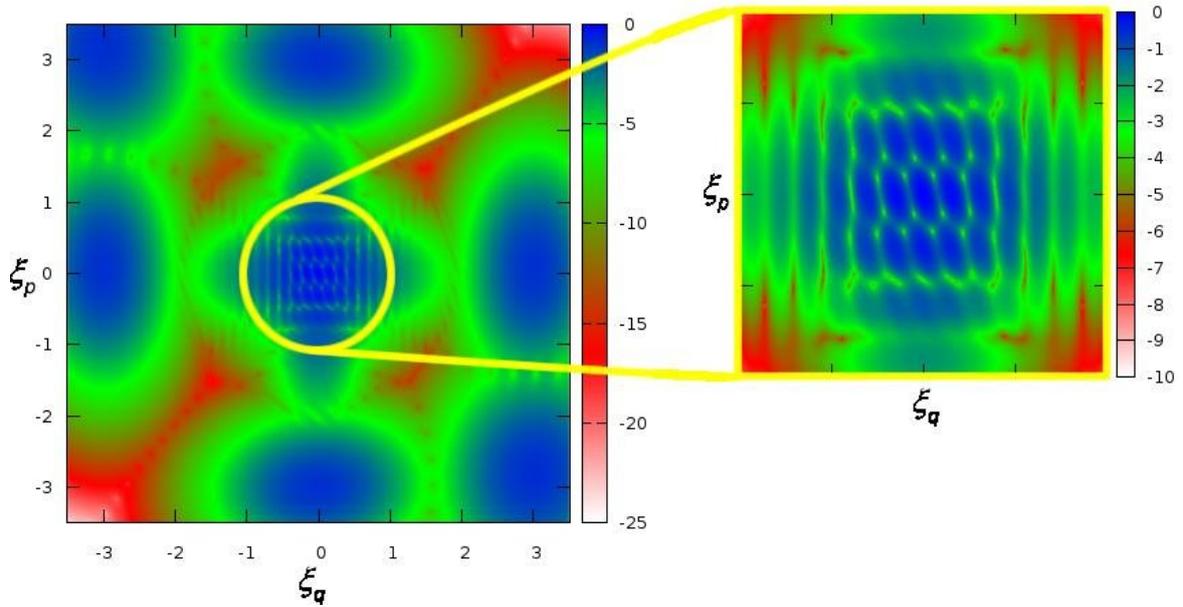


Figura 4.5: **Pontos cegos para um triplo de Gaussianas comprimidas.** Intensidade logarítmica de um triplo de estados Gaussianos. O painel da direita é uma ampliação do da esquerda. No painel à direita, podemos observar um conjunto de pontos cegos, i.e. os pequenos pontos verdes que formam uma grade hexagonal.

esta parte positiva da função total $W^N(x)$ pode ser identificada com a função de Wigner para o estado

$$\hat{\rho}_{\text{mixed}} \propto \mathcal{N}^2 \sum_{k=0}^N |a_k|^2 |\eta_k\rangle \langle \eta_k|, \quad (4.24)$$

i.e. o estado misto obtido a partir do mesmo conjunto de estados coerentes generalizados. Explicitamente

$$W_{\text{mixed}}^N(x) \propto |a_0|^2 W_0(x) + |a_1|^2 W_1(x - \eta_1) + \dots + |a_N|^2 W_N(x - \eta_N), \quad (4.25)$$

onde escolheu-se $\eta_0 = 0$. Assim, a função de cordas correspondente ao estado misto, resulta de uma transformada de Fourier simplética:

$$\chi_{\text{mixed}}^N(\xi) \propto \sum_{k=0}^N |a_k|^2 \chi_k(\xi) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \eta_k \wedge \xi\right). \quad (4.26)$$

Assim como para $W_k(x)$, cada uma das funções de cordas de cada estado coerente, $\chi_k(\xi)$, tem uma largura $\mathcal{O}(\hbar^{1/2})$, porém está centrada na origem. Então, dentro de uma vizinhança

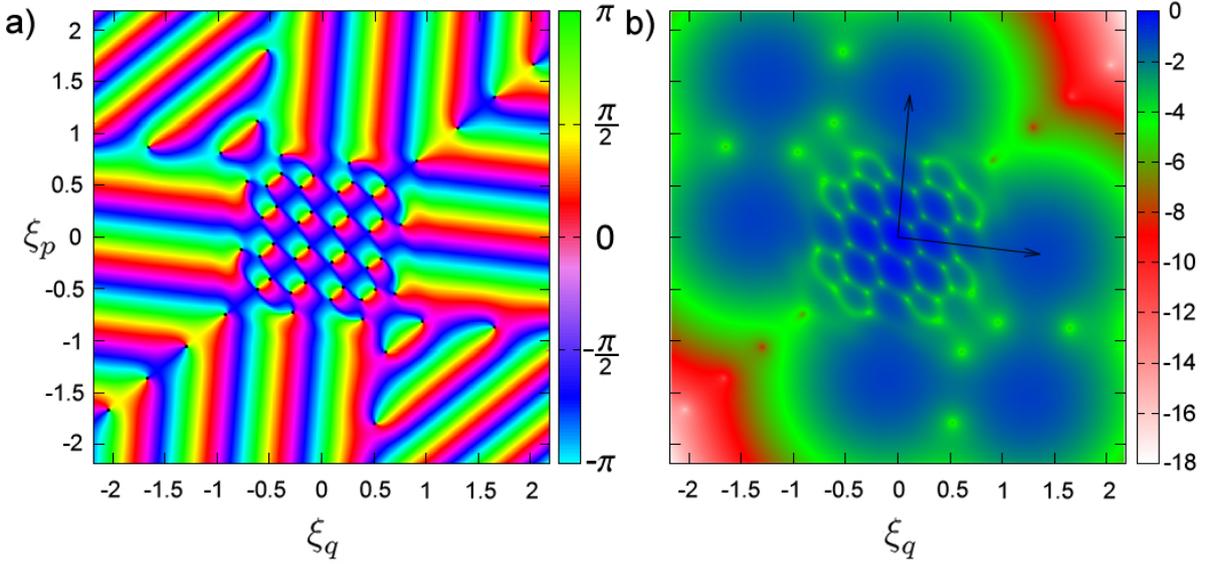


Figura 4.6: **Função de cordas para um triplo de estados coerentes: Fase a) e b) intensidade** As correlações para escalas grandes aparecem como um hexágono de Gaussianas (pontos azuis grandes em b)), enquanto que os termos diagonais produzem um padrão ao redor da origem. Os pontos pretos (singularidades da fase) em a), ou os máximos em b), são os pontos cegos, formando uma rede hexagonal perto da origem. As flechas indicam onde os estados que formam o triplo estão localizados.

da origem de escala pequena $\mathcal{O}(\hbar)$, podemos aproximá-las por larguras infinitas, levando para a função de cordas aproximada:

$$\chi^N(\xi) \approx \sum_{k=0}^N |a_k|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \eta_k \wedge \xi\right), \quad (4.27)$$

que é independente das fases relativas na superposição. De fato, estas fases relativas estão contidas nos números complexos $\{a_k\}$ e assim a Eq. (4.27) só depende das intensidades $|a_k|^2$. Esta expressão é análoga à amplitude de um padrão de difração de

espalhadores pontuais com pesos $|a_k|^2$, colocados em η_k (exceto por uma rotação de $\pi/2$, por causa do produto simplético). Elevando ao quadrado estas *intensidades de difração*, obtemos a aproximação de *cordas pequenas* para a correlação,

$$C(\xi) \rightarrow |\chi^N(\xi)|^2, \quad \text{para} \quad \xi \rightarrow 0. \quad (4.28)$$

Os zeros aproximados podem ser então lidos diretamente de $\chi^N(\xi)$. Por outro lado, note que cada zero corresponde a uma singularidade da fase da função de cordas e, portanto, é um deslocamento de onda [Nye74]. A fase para a função de cordas de um tripleto de estados coerentes (com $\hbar = 0,075$), com os mesmos pesos e cujos vértices estão localizados em $(0,0)$, $(1,5,-0,1)$ e $(0,2,1,5)$ é mostrado na Fig. 4.6a. As singularidades nos pontos cegos são apresentadas como pontos pretos na Fig. 4.6a: A vizinhança contém todos os possíveis valores para a fase. O gráfico correspondente das intensidades logarítmicas é apresentado na Fig. 4.6b. A Fig. 4.7 mostra as partes real e imaginária do mesmo estado na Fig. 4.6. Isso não seria estranho se (4.27) realmente representasse um padrão de difração.

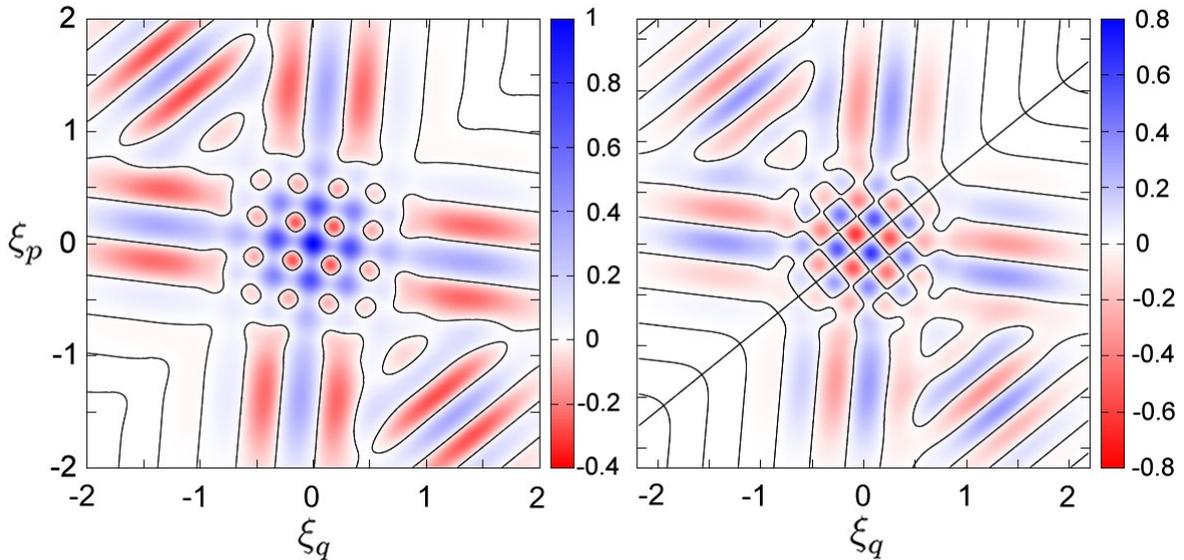


Figura 4.7: **As partes real (esquerda) e imaginária (direita) da função de cordas para um tripleto de estados coerentes.** *Note-se a paridade definida par (ímpar) da parte real (imaginária). Os pontos cegos estão localizados na intersecção das linhas contínuas nodais (linhas pretas) ambas as figuras.*

Porém é a interpretação alternativa como um campo de correlações para a mesma fonte, que assume um sentido paradoxal: Os zeros deste padrão indicam a presença de pontos cegos na sobreposição do multipletto original com as suas translações. A relevância do ‘*padrão de difração*’ para a correlação reside na invariância à transformada de Fourier simplética que este apresenta.

Para uma mistura estatística de estados coerentes, a correlação é exclusivamente a transformada de Fourier simplética da intensidade da função de cordas (diferente da Eq.

(4.27)), o que faz que os zeros desapareçam.

Na verdade, (4.26) não tem os termos cruzados χ_{ks} , então, a transformada de Fourier simplética desta intensidade gera um conjunto de picos Gaussianos longe da origem que, da mesma forma que acontece para a função de Wigner em (4.25), não tem franjas de interferência em torno da origem. Em outras palavras, a aproximação ao redor da origem consiste em negligenciada a parte exterior da função de cordas do estado puro completo, mostrado na Fig. 4.6. Esta parte exterior garante a invariância de Fourier de $C(\xi)$, apesar de que seu efeito direto sobre o padrão de difração é insignificante. Na verdade, cada termo não-diagonal $\chi_{ks}(\xi)$, que contribui na função de cordas é uma Gaussiana (complexa), com largura $\mathcal{O}(\hbar^{\frac{1}{2}})$, e centrada em $\eta_k - \eta_s$. Assim, os picos longe da origem formam o hexágono exterior da Fig. 4.6 b, correspondentes às oscilações externas na Fig. 4.6a. Como a separação entre os pares de estados coerentes no multipletto é de $\mathcal{O}(\hbar^0)$, temos que os máximos exteriores (longe da origem) perturbam, de forma levemente exponencial, o padrão de difração central.

4.4 Rede hexagonal de pontos cegos de um tripleto de estados coerentes

Vimos que o caso comumente escolhido $N = 1$ é não-genérico, ou seja, o estado gato de Schrödinger[†], nas vizinhanças da origem, tem um contínuo de pontos cegos ou nenhum. Geralmente, os zeros da correlação são isolados, mas são aparecem num padrão periódico para $N = 2$. Para ver isto, considere cada termo da Eq. (4.27) como um vetor de comprimento $|a_k|^2$ no plano complexo. Então a condição para que uma dada corda, ξ_0 , especifique um ponto cego é que os $N + 1$ vetores formem um polígono fechado, como mostrado na Fig. 4.8. No entanto, um triângulo é o único polígono que é completamente determinado (dentro de simetrias discretas) pelos comprimentos respectivos dos seus lados. Para N suficientemente grande, as distribuição de zeros pode ser aproximada pela distribuição de zeros de ondas aleatórias complexas, de modo que os pontos cegos são as interseções linhas nodais aleatórias [Lon57].

Para $N = 2$, i.e. um tripleto de estados coerentes, as três intensidades $|a_n|^2$ determinam um único triângulo no plano complexo. Escolhendo o primeiro vetor na direção horizontal, $\theta_0 = 0$, os outros ângulos são dados pela lei dos cossenos, ou seja,

$$\theta_1 = \pi \pm \arccos \left[\frac{|a_0|^2 + |a_1|^2 - |a_2|^2}{2|a_0 a_1|} \right], \quad (4.29a)$$

$$\theta_2 = \pi \pm \arccos \left[\frac{|a_0|^2 + |a_2|^2 - |a_1|^2}{2|a_0 a_2|} \right], \quad (4.29b)$$

para valores permitidos da função arcocosseno, como mostrado na Fig. 4.8. Para cada

[†]É importante ressaltar que o índice de k na Eq. (4.18) começa do 0.

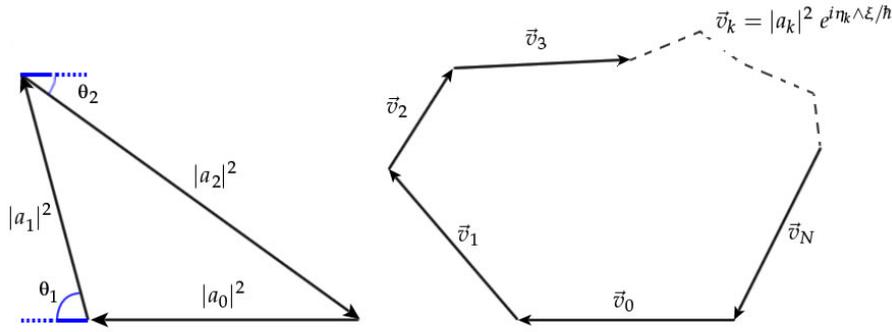


Figura 4.8: **Polígono que especifica os pontos cegos de um multipletto de $N + 1$ estados coerentes na aproximação ao redor da origem.** Os pontos cegos ocorrem quando os vetores $\{\vec{v}(\xi)\}$ formam um polígono fechado. (Esquerda) Para um tripleto corresponde a um triângulo. Isso nos permite ‘pavimentar’ o plano das cordas produzindo uma rede regular de pontos cegos.

escolha de sinal nas Eqs. (4.29), temos que a solução do par de equações lineares,

$$\theta_1 + 2\pi k_1 = \frac{\eta_1 \wedge \xi_0}{\hbar} \quad \text{para } k_1 \text{ inteiro,} \quad (4.30a)$$

$$\theta_2 + 2\pi k_2 = \frac{\eta_2 \wedge \xi_0}{\hbar} \quad \text{para } k_2 \text{ inteiro,} \quad (4.30b)$$

determina duas sub-redes oblíquas de pontos cegos, $\xi_0(k_1, k_2)$: Os pontos verdes e amarelos na Fig. 4.9b. Estas duas formam um reticulado hexagonal, mostrado na Fig. 4.9. É claro que um tripleto localizado sobre uma das sub-redes é quasi-ortogonal a qualquer tripleto será ortogonal localizado na outra sub-rede. A *estrela de Davi* inscrita dentro do hexágono de picos fora da origem Fig. 4.9, por sua vez define um hexágono interior, que é apenas um re-escalamento dos hexágonos que formam a rede de pontos cegos na Fig. 4.9 b. Se $a_0 = a_1 = a_2$, estes hexágonos, mostrados na Fig. 4.10 estão relacionados pelo fator de escala:

$$\Lambda = \frac{2|\eta \wedge \zeta|}{\pi \hbar}. \quad (4.31)$$

Este é um exemplo da conjugação entre as escalas grandes e pequenas gerada pela invariância de Fourier das correlações. Para estados coerentes bem separados, i.e. os componentes de $\eta_k - \eta_s$ são de ordem $\mathcal{O}(\hbar^0)$, os desvios de $C(\xi)$ da rede são pequenos, como mostrado na Fig. 4.9b. Isto é, cada pequeno ponto verde ou amarelo ‘contém’ um zero.

É importante ressaltar que os coeficientes de uma superposição de estados permanecem invariantes durante uma evolução unitária, enquanto que, por exemplo, as posições dos estados coerentes generalizados podem estar se movendo. Assim, uma medição experimental de um par de zeros de correlação, $\xi_0(t)$, em qualquer momento, pode em princípio ser introduzido no par de Eqs. (4.30) para resolver o problema inverso, isto é, para obter as posições dos estados coerentes: $\eta_k(t)$.

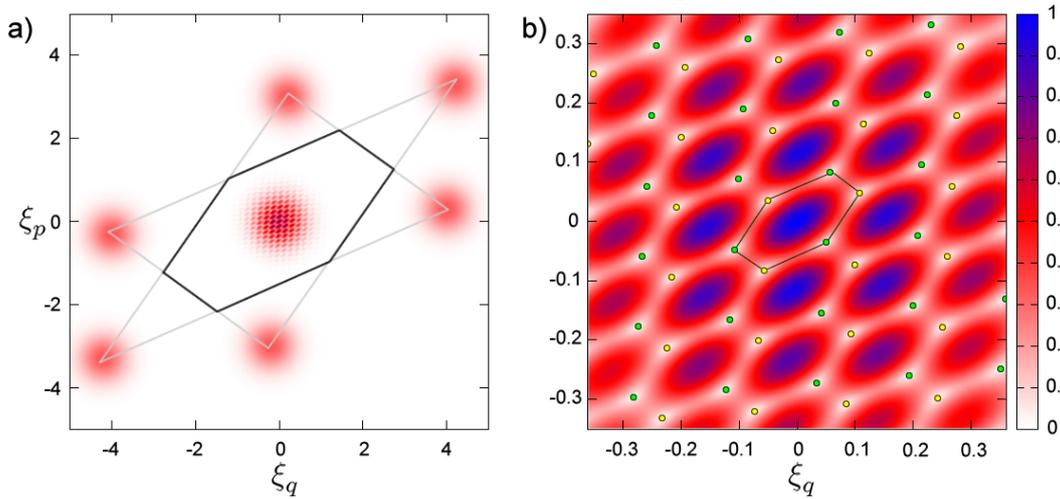


Figura 4.9: **Sub-redes quasi-ortogonais.** *a) Intensidade linear da função de cordas e b) uma ampliação de a) na vizinhança da origem. A rede hexagonal de pontos cegos é formada por duas sub-redes oblíquas (pontos verdes e amarelos, respectivamente). O hexágono preto em a) é um re-escalamento dos hexágonos da rede de pontos cegos. Aqui os estados estão localizados em $(0,0)$, $(-4,0.3)$ e $(0.2,3)$, $\hbar = 0,075$ e as amplitudes na superposição são iguais.*

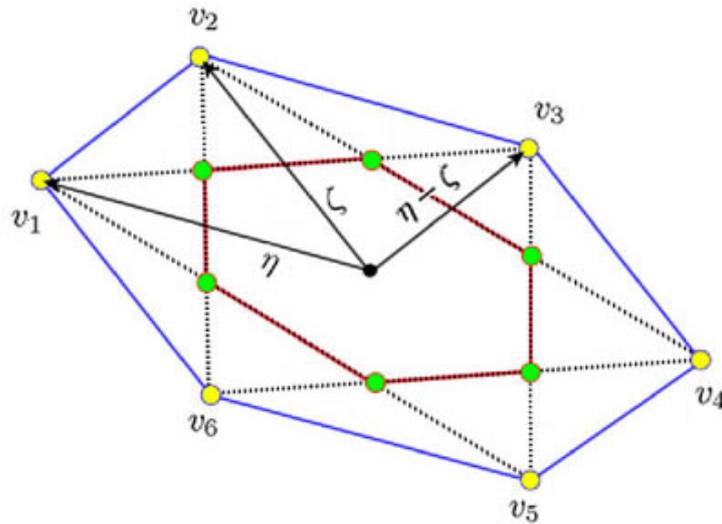


Figura 4.10: **Esqueleto geométrico da rede hexagonal de pontos cegos para um triplo de estados coerentes.** *Os pontos \vec{v}_k são paralelos aos termos de interferência da função de cordas. O hexágono interior é um re-escalamento da célula unitária da rede de pontos cegos.*

4.5 Pontos cegos e descoerência

A interação com um ambiente externo aleatório evolui um estado puro em um estado misto. Como foi mencionado no capítulo 3, a função de Wigner de um estado estendido

gradualmente perde suas franjas de interferência e torna-se positiva em todos os lugares, sem importar o estado inicial [Bro04, Dio02], seja um multipletto de estados coerentes ou autoestados excitados de um oscilador anarmônico. Este processo, visto na representação de cordas, é traduzidos como uma queda na amplitude de $\chi(\xi)$ para todas as cordas fora de uma vizinhança de área \hbar em torno da origem. No entanto, os pontos cegos são estruturas que se encontram dentro desta suposta *região clássica*. Não é *a priori* claro como pontos cegos e as oscilações perto da origem são afetados pela descoerência. O ponto crucial é que, neste caso, já não é possível identificar o quadrado da função de cordas com as correlações no espaço de fase, ou seja, devemos usar

$$C(\xi) \propto \text{FT}\{|\chi(\xi)|^2\} \quad (2.45)$$

para estados mistos. Mesmo assim, a teoria quântica dos sistemas abertos não é, de forma alguma, completa como é a descrição da evolução quântica unitária de sistemas fechados. Mostremos que as correlações observáveis, $C(\xi)$, são excepcionalmente sensíveis à descoerência, mesmo que $\chi(\xi)$ preserve sua estrutura oscilatória e seus zeros.

A possibilidade de deduzir a estrutura local e completa das correlações, $C(\xi, t)$, diretamente a partir da função de cordas existe para a classe especial e importante das evoluções quânticas Markovianas. Usamos a solução explícita para a equação mestra de Lindblad da função de cordas, Eq. (3.27). Portanto, $|\chi(\xi, t)|^2$ também fatora de tal maneira que a solução é $|\chi_u(\xi, t)|^2$ multiplicado pelo quadrado de uma função Gaussiana. A transformada de Fourier simplética fornece a correlação evoluida como a convolução,

$$C(\xi, t) = |\chi_u(\xi, t)|^2 * \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\xi^T \Pi_t \xi\right], \quad (4.32)$$

porque $\chi_u(\xi)$ ainda representa um estado puro e, portanto,

$$\text{FT}\{|\chi_u(\xi, t)|^2\} = |\chi_u(\xi, t)|^2. \quad (4.33)$$

Como um resultado deste ‘coarsegraining’ da função positiva $|\chi_u(\xi, t)|^2$, os zeros de correlação são levantados no tempo. A Fig. 4.11 ilustra vários retratos instantâneos do perfil da função de correlação para diferentes tempos quando o Hamiltoniano interno é igual a zero. Então $\chi_u(\xi, t)$ é constante no tempo. No entanto, os pontos cegos podem ser detectados como mínimos locais, permanecendo até um *tempo de levantamento* τ_l , o qual depende da disposição dos estados coerentes, como mostrado na Fig. 4.11b. Este tempo é atingido quando a correlação $C(\xi, t)$ se aproxima de seu envelope Gaussiano. A definição

$$\tau_l = \frac{\hbar}{A} \tau_p, \quad (4.34)$$

onde A é a área do triplete e τ_p é o *tempo positividade* da função de Wigner [Dio02, Bro04] fornece uma boa estimativa do tempo de levantamento. De fato, os pontos pretos na Fig. (4.11) b foram calculados usando a expressão acima.

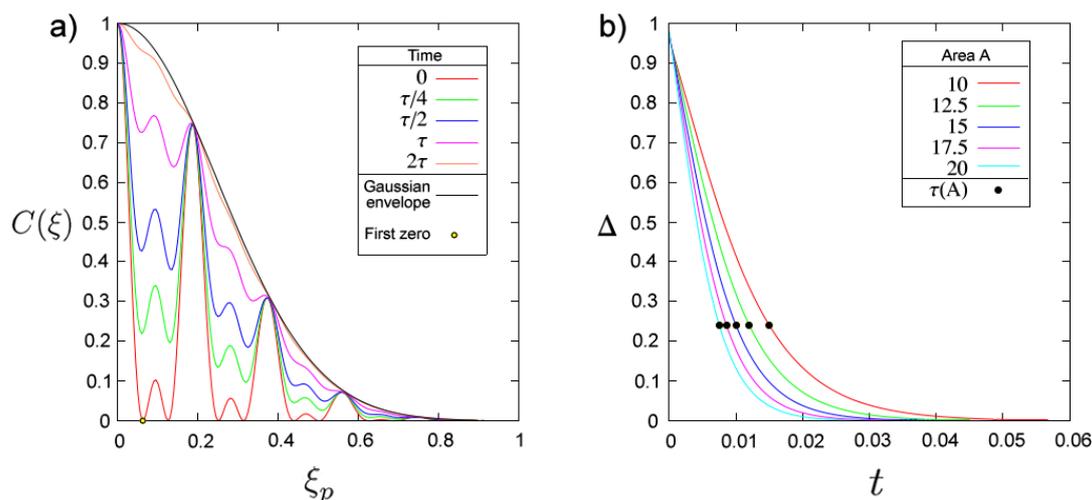


Figura 4.11: **Efeito da descoerência nos zeros da correlação.** *Evolução Markoviana da correlação no espaço de fase para um tripleto localizado em $(0,0)$, $(0,d)$ e $(d,0)$, ao longo da linha $\xi_p = -\xi_q/2$. Neste caso $\chi_u(\xi,t) = \chi(\xi,0)$ e os operadores de Lindblad são \hat{p} e \hat{q} , respectivamente. Em a) os zeros são levantados a medida que o tempo transcorre. Eles viram mínimos locais e são distinguíveis somente até o tempo de levantamento τ_l . Aqui, $d = 5$, assim que a área do tripleto é $A = 12,5$ e $\hbar = 0,075$. b) Mostra a diferença Δ entre a correlação no espaço de fase e seu ‘envelope’ Gaussiano como uma função do tempo para o primeiro zero. O estado tem a mesma configuração que a usada em a), mas varia-se a área, $A = d^2/2$, do tripleto.*

Temos aqui um exemplo escolhido muito especial, onde $H = 0$, ou seja, $\chi_u(\xi,t)$ não evolui no tempo e no ambiente formado por fótons térmicos, assim como mantém os mínimos de correlação acima dos pontos cegos. No entanto, a relação entre os tempos de descoerência (4.34) se mantém mesmo se a área $A(t)$ do estado de não seja constante no tempo. Lembrando que τ_p mede o *tempo de sobrevivência* das franjas de interferência na função de Wigner, encontramos que o tempo de sobrevivência para os mínimos de correlação que indica pseudo-pontos cegos para sistemas abertos, é muito menor se $A \gg \hbar$. Assim, a estrutura oscilatória que dá origem a pontos cegos para pequenos deslocamentos é muito mais sensível a descoerência que as franjas da função de Wigner.

4.6 Discussão

A quase-ortogonalidade entre um estado e as suas imagens evoluídas é uma propriedade quântica notável com aplicações na teoria da descoerência [Alo04] e metrologia quântica [Tos06, Gio04, Esc11]. No entanto, os métodos em estudos anteriores não resolveram a questão de saber se ortogonalidade completa também é acessível.

Neste capítulo mostrado que os pontos cegos, que denotam que a sobreposição é nula,

surtem dentro de uma vizinhança da origem. Esta propriedade depende basicamente da matriz de covariância Schrödinger: Quanto maior determinante desta matriz os pontos cegos ficam mais próximos da origem.

A função de cordas retrata um estado puro, exibindo sua sobreposição com todas as suas translações possíveis. Contrário a considerações *ingênuas*, em nenhum caso, o decaimento no módulo quadrado da sobreposição é suave dentro de uma área \hbar ao redor da origem. De fato, os pontos cegos correspondem aos ‘entalhes’ sobre um fundo de correlações máximas. Isto os torna detectáveis. Eles funcionam como indicadores muito sensíveis da coerência quântica, igualmente que os zeros da função de Husimi [Leb90, Tos99]. Esta última tem os seus zeros em regiões evanescentes [Tos99], onde são difíceis de distinguir.

Mostramos como a interação entre a função de cordas, as simetrias reflexão e a invariância Fourier da correlações no espaço de fase determinar estruturas gerais que são válidas para qualquer exemplo específico. Estudamos com detalhe os tripletos de estados coerentes. Estes estados encontram-se na classe genérica onde os pontos cegos são pontos isolados. Porém são os únicos estados que possuem pontos cegos ordenados sobre uma rede periódica, na vizinhança da origem. Também usamos estes estados para mostrar o contraste entre a robustez da rede de pontos cegos sob evoluções unitárias e a sua extrema sensibilidade à descoerência.

Teoria Semiclássica no Espaço de Fase

*“Acredito que errado é aquele que
fala correto e não vive o que diz”*

Fernando Anitelli

A transição entre a descrição clássica e quântica dos sistemas físicos é abordada neste capítulo. Para esse fim, estudamos o limite assintótico $\hbar \rightarrow 0$, conhecido como *regime semiclássico*; este limite deve ser interpretado como o regime onde as ações típicas de um sistema físico são muito maiores do que \hbar . Avaliaremos as funções de Wigner e de cordas para um *estado* quantizado tipo Bohr-Sommerfeld usando aproximações de *comprimento de onda curta* [Mas65, Din73]. Este tipo de aproximação fornece um elo entre os *ossos clássicos* (órbitas, ação, estabilidade, etc) e os *tecidos quânticos* (amplitude de transição, interferência, descoerência, escalas quântica, etc) do sistema.

As aproximações semiclássicas têm tipicamente *cáusticas*, isto é conjuntos singulares onde a aproximação não é válida. Assim como nas cáusticas encontradas na ótica, estas cáusticas têm importância crucial, pois em suas vizinhanças as amplitudes geralmente atingem os valores máximos. Então, vamos refinar as expressões semiclássicas simples, a fim de descrever as vizinhanças das cáusticas. Embora, a função de Wigner semiclássica para um auto-estado de energia tipo Bohr-quantizado tem uma cáustica ao longo da curva clássica correspondente, no caso de um único grau de liberdade, a função de cordas semiclássica tenha uma cáustica ao longo da curva conjugada definida como o conjunto dos diâmetros, isto é, as cordas máximas da curva original. Se a curva for convexa, sua curva conjugada também é convexa, e como resultado teremos uma cáustica tipo *dobra*. A aproximação uniforme através desta cáustica descreve a transição sofrida pela sobreposição do estado com a sua translação, desde um regime oscilatório para pequenas cordas até um regime evanescente, passando por um máximo próximo à cáustica. Outras cáusticas da função de Wigner e função de corda também serão estudadas.

A origem é uma singularidade não genérica para a função de cordas, a qual será tratada de maneira diferente. Essa aproximação será importante para dar conta da

presença de pontos cegos na teoria semiclássica. Ao mesmo tempo, obteremos uma aproximação semiclássica para os momentos estatísticos da função de Wigner em termos das médias sobre a curva clássica.

5.1 Introdução

O ponto de partida é a expressão geral *Wentzel-Kramers-Brillouin* (WKB) para a função de onda [Vle28, Mas65, Ozo88, Gut90]

$$\langle q|\psi_I\rangle = N \sum_k \left| \det \frac{\partial^2 S_k(q, I)}{\partial q \partial I} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_k(q, I) + i\beta_k \right]. \quad (5.1)$$

Em toda esta seção, assumiremos que os caminhos clássicos são definidos como as curvas de nível da variável ação $I(x)$, tal que $S_k(q, I)$ corresponde aos k -ésimo ramo da função de geratriz da transformação canônica $(p, q) \mapsto (I, \theta)$, onde (I, θ) são as variáveis de ângulo-ação. N é a constante de normalização global. A fase adicional β_k é a correção Maslov [Mas65], introduzida para explicar a mudança de fase ganha quando um *ponto de retorno clássico* é cruzado [Ozo88, Lit95, Haa91]. Os pontos de retorno coincidem com as cáusticas da função de onda WKB (5.1). A Fig. 5.1 ilustra a estrutura do espaço de fase da função de onda WKB: A ação S_k como a área simplética delimitada pela curva clássica. A escolha do ponto inicial q_0 é arbitrária, e a ação associada ao ramo k é definida como

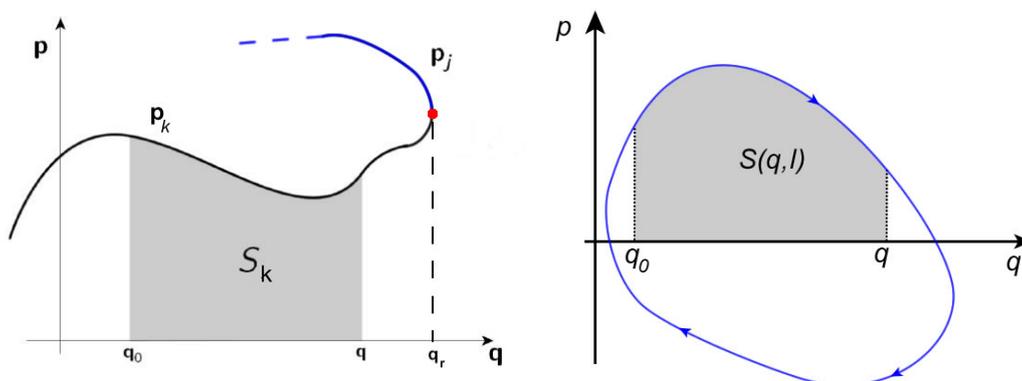


Figura 5.1: **Interpretação geométrica da função geratriz $S_k(q, I)$ para o k -ésimo ramo.** A ação é mostrada para uma variedade aberta (à esquerda) e uma fechada (à direita). Em ambos os casos q_0 é a posição inicial usada para definir S_k . A cáustica da função WKB está no ponto de retorno clássico q_r , que separa os ramos k (linha preta) e j (linha azul).

$$S_k(q, I) = \int_{q_0}^q p_k(Q, I) dQ, \quad \frac{\partial S_k}{\partial I} = \theta_k, \quad \frac{\partial S_k}{\partial q} = p_k, \quad (5.2)$$

de modo que a amplitude na Eq. (5.1) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^2 S_k(q, I)}{\partial q \partial I} = \frac{\partial p_k}{\partial I}(q) = \left[\frac{\partial I}{\partial p}(p_k(q), q) \right]^{-1}. \quad (5.3)$$

A princípio, assumiremos que a curva clássica é fechada e convexa, de modo que haverá sempre um único par de ramos para a função de ação. Esta característica será invariante sob de qualquer transformação linear canônica, dado que tanto a função de cordas quanto a função de Wigner são covariantes com respeito a esse tipo de mudanças de coordenadas no espaço de fase. Também é importante lembrar que a curva fechada deve satisfazer a *condição de quantização de Bohr-Sommerfeld*:

$$\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{para } n \text{ inteiro.} \quad (5.4)$$

Por isso, os estados (5.1) geralmente são chamados de estados quantizados tipo Bohr-Sommerfeld. Uma primeira abordagem para a função de Wigner desses estados é considerar que ela é igual a uma função δ de Dirac sobre a curva clássica correspondente no espaço de fase [Ber77]. Na verdade, esta simples aproximação reproduz os valores esperados para observáveis clássicos que se comportam suavemente. No entanto, esta aproximação é absolutamente insuficiente para a descrição de efeitos de interferência delicados. Então, neste caso, é necessário recorrer a aproximações semiclássicas mais refinadas no espaço de fase, tais como na Ref. [Ber77].

Vamos tratar a correlação de estados WKB, cuja função de cordas pode ser aproximada semiclassicamente por [Ozo04, Ozo09a]

$$\chi(\xi) = \sum_k \chi_k(\xi) = N^2 \sum_k \alpha_k(\xi) e^{i\sigma_k(\xi)/\hbar}, \quad (5.5)$$

onde k enumera os pontos estacionários da função de cordas e as amplitudes e as fases na soma acima estão determinadas por uma curva clássica, tal como será descrito nas seções seguintes. O mesmo acontece para a aproximação semiclássica da função de Wigner [Ber77]

$$W(x) = \sum_k W_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Re \left\{ \sum_k a_k(x) e^{iA_k(x)/\hbar} \right\}. \quad (5.6)$$

A soma acima é realizada sobre os pontos estacionários da função de Wigner e o símbolo $\Re\{\cdot\}$ denota a parte real *. Além disso, a relação de Fourier entre este par de representações é refletida na reciprocidade semiclássica entre os centros e as cordas. Ou seja, os pontos estacionários da função de cordas definem os centros

$$x_k(\xi) = J \frac{\partial \sigma_k}{\partial \xi} \quad (5.7)$$

enquanto os pontos estacionários da função Wigner definem as cordas

$$\xi_k(x) = -J \frac{\partial A_k}{\partial x}. \quad (5.8)$$

*De fato, não é necessário colocar explicitamente a parte real em (5.6), mas aqui queremos enfatizar que $W(x)$ é real.

Destacamos que a reciprocidade entre as relações (5.7) e (5.8) corresponde a versão semiclássica da reciprocidade entre as equações clássicas (2.14) e (2.13). Tipicamente, para os autoestados de energia, a curva clássica associada é uma curva de nível para o correspondente Hamiltoniano clássico, dado pela quantização de Bohr-Sommerfeld [Vle28, Mas65, Ozo88, Gut90]. Desta forma, as Eqs. (5.5) e (5.6) são representações alternativas das funções de onda WKB.

No entanto, as distribuições de Wigner e de cordas na região clássica na vizinhança da curva quantizada possuem cústicas, onde a teoria semiclássica mais simples perde sua validade. No caso da função de Wigner, esta cústica é o conjunto de todos os centros de reflexão sobre a curva quantizada, isto é, assim que o centro x aproxima-se da curva, as duas interseções da curva refletida com a curva clássica coalescem. Esta cústica é genérica e já foi resolvida no tratamento original de Berry [Ber77].

Em contraste, a região clássica no espaço de cordas é a vizinhança da origem, independente da forma da curva quantizada. A origem é uma cústica altamente não-genérica, pois todos os pontos da curva quantizada *intersectam-se* com a curva deslocada no limite em que $\xi \rightarrow 0$, ou seja, ambas as curvas coincidem. Agora, para deslocamentos suficientemente grandes, de maneira que a translação da curva clássica não intersecte a curva original, as correlações no espaço de fase são desprezíveis. A transição entre estes dois regimes: um oscilatório e um evanescente ocorre ao longo de uma cústica (não-clássica) onde a função de cordas atinge amplitudes máximas locais e a aproximação semiclássica 5.5 não é válida. Para estabelecer a descrição completa da transição do regime oscilatório para a região onde a sobreposição é desprezível é necessário refinar a aproximação semiclássica simples através de uma uniformização [Zam08]. Assim, iremos desenvolver uma teoria para unir a região de cordas curtas com a região oscilatória para ter uma descrição geral para a função de cordas de um estado tipo Bohr-Sommerfeld para um grau de liberdade.

Não obstante, é difícil incluir as vizinhanças da origem no espaço de cordas em uma teoria semiclássica, dado que esta região contém informação importante sobre o estado quântico: As derivadas da função de cordas, avaliadas na origem, especificam todos os momentos estatísticos de posição e momento e seus produtos.

Para um estado de Bohr-quantizado, os momentos estatísticos podem ser identificados com médias clássicas sobre a curva clássica correspondente, o que é uma justificativa para considerar uma área de tamanho \hbar ao redor da origem do espaço de cordas como uma região *clássica*. Em contrapartida, alguns pontos de ortogonalidade entre o estado e sua translação ficam na mesma vizinhança, o que mostra que a correspondência clássico não pode ser feita diretamente. No caso geral, onde o estado não tem simetria de reflexão, a ortogonalidade ocorre para pontos isolados, como foi estudado no Capítulo 4. No presente capítulo estendemos esta análise para estados Bohr-quantizados.

No limite de pequenos deslocamentos, $\xi \rightarrow 0$, as correlações no espaço de fase atingem seu valor máximo, $C(0) = 1$. Conforme as translações aumentam, um regime oscilatório

é alcançado. Finalmente, uma cáustica é encontrada entre a transição deste regime oscilatório e uma região de decaimento evanescente na correlação.

5.2 Cordas curtas e momentos estatísticos

Consideremos um estado semiclássico WKB (5.1). A função de cordas para um estado WKB, obtido trasladando este estado, e tendo em conta (2.38), é dada pela soma

$$\chi_w(\xi) = \sum_{jk} \chi_{jk}(\xi), \quad (5.9)$$

onde os termos χ_{jk} são dados por

$$\chi_{jk}(\xi) = N^2 \int dQ \left| \det \left[\frac{\partial^2 S_j}{\partial q \partial I}(Q_+) \frac{\partial^2 S_k}{\partial q \partial I}(Q_-) \right] \right|^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} [S_j(Q_+) - S_k(Q_-) - \xi_p Q] + (\beta_j - \beta_k)}, \quad (5.10)$$

com $Q_{\pm} \equiv Q \pm \frac{\xi q}{2}$. Assim, a forma oscilatória semiclássica para cada termo em (5.9) resulta da avaliação das integrais (5.10) por fase estacionária. Este tipo de aproximação será explicada na seção 5.3. Por enquanto estamos preocupados com o limite em que a translação é tão pequena que a fase entre os pontos estacionários não é maior do que a constante de Planck.

Pela invariância simplética da função de cordas [Ozo98], sem perda de generalidade podemos escolher ξ paralelo ao eixo vertical. Neste caso, $Q_+ = Q_- = Q$ na Eq. (5.10). Então, a diferença de fase entre os ramos superior e inferior da curva clássica é apenas a área da curva como uma função de Q , que será grande mas não será estacionária. Assim, podemos desprezar esses termos cruzados ficando apenas com os termos ‘*diagonais*’ na Eq. (5.9), obtendo

$$\sum_k \chi_{kk}(\xi) = N^2 \sum_k \int dQ \left| \det \frac{\partial \theta_k}{\partial q} \right| e^{\frac{i}{\hbar} \xi_p Q} = N^2 \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i \xi_p Q(\theta)/\hbar}. \quad (5.11)$$

Mais uma vez, utilizando a invariância simplética, o lado direito da equação acima pode ser identificado com a aproximação semiclássica da função de cordas para cordas curtas, introduzida na Ref. [Ozo04]:

$$\chi_s(\xi) \simeq \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{ix(\theta) \wedge \xi / \hbar} = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{i[p(\theta)\xi_q - q(\theta)\xi_p] / \hbar}. \quad (5.12)$$

Esta aproximação assume que a curva clássica é especificada pelas variáveis de ânguloção, isto é, $I(p, q) = \mathcal{I}$ ou equivalentemente $x(\theta) \equiv (p(\theta), q(\theta))$.

A fórmula (5.12) é válida para qualquer escolha da direção da corda pequena ξ [Ozo04]. Ela descreve as características puramente clássicas do estado, na medida em que é a transformada simplética de Fourier exata da ‘*aproximação clássica*’ da função de Wigner,

$$2\pi W(x) = \delta(I(p, q) = \mathcal{I}), \quad (5.13)$$

proposta por Berry na Ref. [Ber77]. Aqui δ denota a função δ de Dirac, enquanto $I(x)$ são as L variáveis de ação para um sistema integrável de L graus de liberdade e \mathcal{I} é o conjunto de valores de ação quantizados de acordo com a condição (5.4). No entanto, é mais preciso considerar esta forma da função de Wigner como uma extrapolação da forma correta da aproximação da função de cordas para deslocamentos arbitrariamente grandes. De fato, mostraremos que a versão de cordas pequenas codifica alguma informações sobre a ortogonalidade quântica, bem como os momentos estatísticos clássicos.

Sabemos que as funções características contêm informações completas sobre todos os momentos estatísticos de uma distribuição clássica [Luk60] e o mesmo vale para a transformada de Fourier simplética da função de Wigner. Assim, a definição da função de cordas (2.36) permite calcular os momentos estatísticos de \hat{p} e \hat{q} , na forma de derivadas da função de cordas, a saber

$$\langle \hat{p}^n \rangle = \text{tr } \hat{p}^n \hat{\rho} = (-i\hbar)^n \left. \frac{\partial^n \chi}{\partial \xi_q^n} \right|_{\xi=0} \quad \text{e} \quad \langle \hat{q}^n \rangle = \text{tr } \hat{q}^n \hat{\rho} = (i\hbar)^n \left. \frac{\partial^n \chi}{\partial \xi_p^n} \right|_{\xi=0}. \quad (5.14)$$

Por outro lado, se soubermos todos os momentos estatísticos, então conheceremos a função de cordas, porque a expansão em série de Taylor da função de cordas é dada por

$$\chi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{(i\hbar)^n} \binom{n}{n-k} \langle \mathcal{M}(\hat{q}^{n-k} \hat{p}^k) \rangle \xi_q^k \xi_p^{n-k}, \quad (5.15)$$

onde,

$$\mathcal{M}(\hat{q}^n \hat{p}^k) = \frac{1}{n+k} \sum_{P_{nk}} \hat{q}^n \hat{p}^k \quad (5.16)$$

e P_{nk} denota todas as permutações possíveis de produtos de \hat{q}^n e \hat{p}^k . A Eq. (5.16) corresponde à simetrização do produto $\hat{q}^n \hat{p}^k$, sendo a característica mais importante dos símbolos Weyl [Car99, Lee95], o que garante a invariância simplética da função de cordas [Ozo88, Ozo98].

De acordo com a Eq. (5.14) e (5.12), para uma dada parametrização do toro clássico, os momentos estatísticos são obtidos por meio da avaliação de integrais da forma

$$\langle q^n \rangle \sim \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} [q(\theta)]^n \quad \text{e} \quad \langle p^n \rangle \sim \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} [p(\theta)]^n. \quad (5.17)$$

Estas fórmulas correspondem aos valores clássicos esperados de potências da posição e do momento. Assim, os momentos estatísticos podem também ser obtidos diretamente a partir da aproximação clássica da função de Wigner, mesmo que esta não seja apropriada para outros cálculos mais refinados.

5.3 Fase estacionária para as quasi-distribuições

A expressão WKB (5.1) pode ser inserida nas Eqs. (2.39) e (2.44), de modo que, em cada caso, obtemos uma soma de integrais da forma (5.9) e (5.10). No limite semiclássico, estas

integrals são dominadas pelos seus *pontos de fase estacionária* ou *pontos estacionários*. Independentemente da necessidade que que estes pontos estejam suficientemente isolados, de modo a permitir a avaliação das integrals pelo *método de fase estacionária*, precisamos entender a construção geométrica que os define.

Em ambos os casos, na função de Wigner e na de cordas, cada ponto estacionário define um par de valores q^\pm , que são as q -coordenadas de um par de pontos x^\pm sobre a curva clássica. No caso da função de cordas, cada x^- é a intersecção da curva clássica com a sua translação uniforme pelo vetor $-\xi$, enquanto $x^+ = x^- + \xi$. Esta geometria é exibida na Fig. 5.2a, que mostra que cada cordas tem duas *realizações* sobre uma curva convexa fechada. Assim, esta construção para uma curva convexa sempre especifica um par de centros $x_1(\xi)$ e $x_2(\xi)$ para cada corda ξ cujos extremos podem ser colocados sobre a curva.

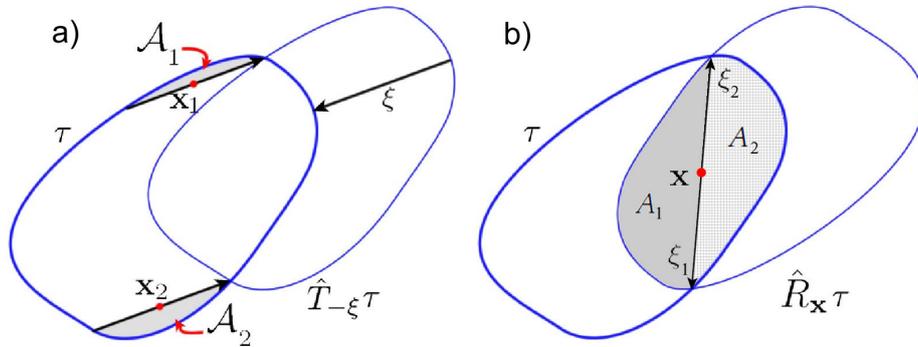


Figura 5.2: **Translação clássica a) e reflexão b) de uma curva de Bohr-quantizada.** Semiclassicamente, a intersecção entre a curva original e a curva transformada determina os pontos estacionários e a fase semiclassica é dada pela área delimitada pelas duas curvas (a área sombreada em ambos os casos).

No caso da função de Wigner, em vez de uma translação, a curva clássica é refletida com respeito a um ponto x . Isso define um par de intersecções, x^+ e x^- , e duas *cordas estacionárias* $\xi = \pm(x^+ - x^-)$ para os quais x é o centro. Então, os pontos estacionários são as coordenadas de posição para este par de cordas. Esta geometria é mostrada na Fig. 5.2b. Por conseguinte, haverá, pelo menos, um par de cordas $\pm\xi(x)$, para cada centro de reflexão de uma curva fechada.

Ao inserir a função de onda WKB (5.1) na Eq. (2.44), obtemos

$$W(x) = \sum_{jk} W_{jk} \quad (5.18)$$

onde

$$W_{jk}(x) = \frac{N^2}{2\pi\hbar} \int d\xi_q \left| \det \left[\frac{\partial I}{\partial p}(p_j(q^+), q^+) \frac{\partial I}{\partial p}(p_k(q^-), q^-) \right] \right|^{\frac{1}{2}} e^{i[S_j(q^+, I) - S_k(q^-, I) - p\xi_q + \beta_j - \beta_k]/\hbar} \quad (5.19)$$

A avaliação da integral em (5.19) por fase estacionária pode geralmente ser obtida a partir de um único ramo da ação da função geratriz para uma curva fechada, isto é,

$j = k$. A fase estacionária é metade da área entre a curva e a sua reflexão, A_1 ou A_2 na Fig. 5.2b, exceto por uma correção de Maslov. Denotamos a fase como $A_j(x)$ para a j -ésima corda estacionária, ξ_j . Isto é válido mesmo para mais de um grau de liberdade, onde o estado WKB é suportado por uma variedade lagrangiana em vez de uma curva [Lit95].

No caso da função de cordas, cada fase estacionária é dada pela construção ilustrada na Fig. 5.3. Ao contrário da função de Wigner, a função de cordas depende explicitamente

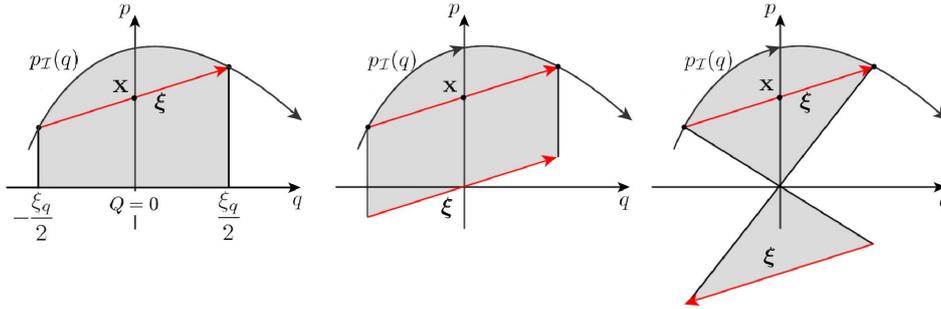


Figura 5.3: Algumas interpretações geométricas para a fase semiclássica de função de cordas. Consideramos um único ramo da função WKB. A fase estacionária em si é determinada pela área sombreada, nos três casos. (Figura tomada da Ref. [Ozo04]).

da escolha da origem do espaço de fase, e portanto uma translação $x \mapsto x + \eta$ produz uma mudança de acordo com a fórmula exata (2.55). Porém a construção geométrica da Fig. 5.3 é covariante com respeito a transformações canônicas lineares homogêneas.

As amplitudes das aproximações semiclássicas anteriores são melhor expressas em termos da variável de ação, $I(x)$, que define a curva fechada e que é a variável conjugada ao ângulo $\theta(x)$ ao longo da curva. Se definimos a variável de ação transportada como

$$I^\pm = I(x \pm \xi/2), \quad (5.20)$$

então, em geral, o colchete de Poisson

$$\{I^+, I^-\} = \frac{\partial I^+}{\partial x} \wedge \frac{\partial I^-}{\partial x} \neq 0, \quad (5.21)$$

resulta ser igual às expressões nas amplitudes em (5.5) e (5.6), a saber

$$a(x) = |\{I^+, I^-\}|^{-\frac{1}{2}} = \alpha(\xi). \quad (5.22)$$

A diferença entre considerar a amplitude como uma função de x ou de ξ depende de qual variável é fixada em (5.22). Isso muda apenas o sinal do colchete de Poisson. Aqui, a Eq. (5.22) tem o mesmo valor para as duas representações, cordas e centros, se o par específico de pontos de (x^-, x^+) for o mesmo sobre a curva fechada.

Podemos interpretar estas amplitudes de outra maneira se identificarmos da variável de ação $I(x)$ com um Hamiltoniano clássico, como em (2.2). Então, a curva fechada torna-

se uma trajetória, tangente ao vetor velocidade no espaço de fase, \dot{x} , e

$$\{I^-, I^+\} = \dot{x}^- \wedge \dot{x}^+, \quad (5.23)$$

como é mostrado na Fig. 5.4. Daqui temos que as amplitudes $\alpha_j(\xi)$ (ou $a_j(x)$), dependem

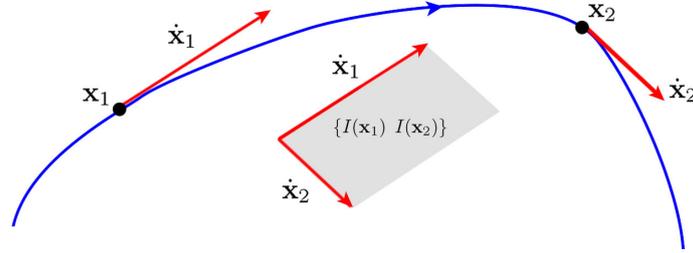


Figura 5.4: **Interpretação geométrica para as amplitudes semiclássicas tanto da Wigner função quanto da função da cordas.** Estas amplitudes são dadas em termos do colchete de Poisson entre os vetores tangentes nas intersecções da curva original e sua reflexão (Wigner) ou sua translação (cordas).

do grau de transversalidade da intersecção entre a curva e sua translação, ou sua reflexão [Ber77, Ozo04] e assim elas divergem nas cáusticas, onde \dot{x}^+ e \dot{x}^- são vetores paralelos. Assim, as aproximações de fase estacionária para a função de cordas e a função de Wigner são:

$$\chi(\xi) = \sqrt{2\pi\hbar} \sum_j |\{I_j^+(\xi), I_j^-(\xi)\}|^{-\frac{1}{2}} e^{i(\mathcal{A}_j + x_j \wedge \xi)/\hbar + i\beta_j}, \quad (5.24a)$$

$$W(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Re \sum_j |\{I_j^+(x), I_j^-(x)\}|^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathcal{A}_j/\hbar + i\beta_j} \quad (5.24b)$$

onde \mathcal{A}_j e A_j são as áreas ilustradas na Fig. 5.2, respectivamente. As somas acima são feitas sobre todos os pontos estacionários. Observamos que a função de Wigner é de ordem $\sim \hbar^{-\frac{1}{2}}$, enquanto que a função de cordas é de $\sim \hbar^{\frac{1}{2}}$.

5.4 Aproximações uniformes para a função de Wigner

A curva clássica é em si é uma singularidade da função de Wigner semiclássica (5.24b), pois os dois pontos estacionários na Fig. 5.5 colaescem, esta é a *cáustica de corda curta*. Além disso, a medida que a função de Wigner é avaliada em um ponto x que se encontra cada vez mais dentro da curva fechada convexa clássica, uma cáustica é atingida, tipicamente tem-se um ‘*triângulo*’ cujos vértices são *cúspides* [Ber77]. Dentro desse triângulo existem três cordas para cada centro, como mostrado na Fig. 5.5. No contexto do teorema de classificação de Thom, estes conjuntos singulares são conhecidos como catástrofes [Tho75]. Qualquer caminho dirigido ao interior da curva entra no triângulo através de um de cáustica tipo dobra que une dois pontos de cúspide. Os pontos que definem a

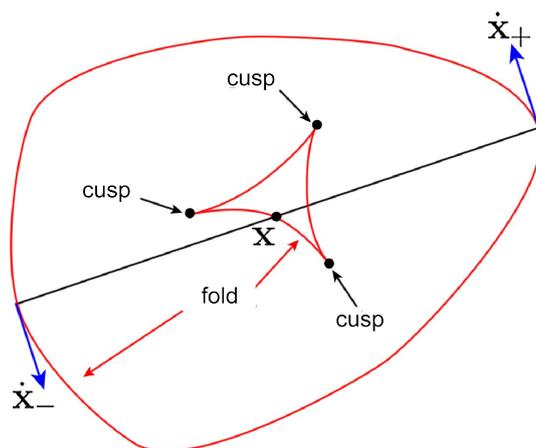


Figura 5.5: **Catástrofes da função de Wigner para uma curva fechada.** A curva clássica é por si só uma dobra (a catástrofe de cordas curtas). Outra curva singular fica no interior da curva e é composta de dobras e cúspides (a catástrofe de cordas longas). Os pontos sobre a catástrofe correspondem aos centros dos diâmetros da curva clássica.

cáustica $\{x_i\}$ são os centros dos diâmetros locais da curva, como mostrado na Fig. 5.5. Esta é a *cáustica de cordas longas* da Eq. (5.24b).

5.4.1 Catástrofe de cordas curtas da função de Wigner

Para uma curva convexa, a soma em (5.24b) tem apenas dois termos e suas respectivas fases estacionárias são de $A_1 = -A_2$. Ao utilizar o método de aproximação uniforme proposto por Chester, Friedman e Ursell [Che57] para avaliar a integral (5.19), obtemos uma expressão que permanece válida e finita, mesmo para um valor de x sobre a curva clássica [Ber77]:

$$W(x) = \frac{N^2 \sqrt{8} \left[\frac{3}{2} A_1(x) \right]^{\frac{1}{6}}}{\hbar^{\frac{2}{3}} \{I^+, I^-\}^{\frac{1}{2}}} \text{Ai} \left(- \left[\frac{3}{2} \frac{A_1(x)}{\hbar} \right] \right), \quad (5.25)$$

onde $\text{Ai}(\cdot)$ é a função de Airy [Abr64]. Note-se que esta expressão é de ordem $\hbar^{-\frac{2}{3}}$, isto quer dizer que é maior do que (5.24b) quando $\hbar \rightarrow 0$. Assim a função de Wigner tem um máximo local sobre a cáustica, como é esperado. Na verdade, inserindo a expansão assintótica da função de Airy [Abr64]:

$$\text{Ai}(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{1}{2}} (-z)^{-\frac{1}{4}} \cos \left(\frac{2}{3} (-z)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right), \quad (5.26)$$

na expressão (5.25), recuperamos a aproximação de fase estacionária, dado que $A_\xi(x) \gg \hbar$:

$$W(x) \rightarrow \frac{\sqrt{2} N^2 \cos(A_1(x)/\hbar - \pi/4)}{\sqrt{\pi \hbar} \{I^+, I^-\}^{\frac{1}{2}}}. \quad (5.27)$$

Esta é a fórmula original obtida por Berry, mencionada na Seção 5.1. O método de aproximação uniforme será explicado na seguinte subsecção.

5.4.2 Catástrofe de cordas longas da função de Wigner

Até agora, assumimos que a contribuição de cada ponto de fase estacionária para as integrais que definem as funções de Wigner ou de cordas, pode ser obtida considerando um único ramo da função de onda WKB. Assim, $j = k$ em (5.19) e esse *ramo único* sempre pode ser obtido através de uma rotação no espaço de fase.

No entanto, esta simplificação de considerar um único ramo não é possível para a cáustica a cordas máximas, onde (5.22) também diverge para ambas as representações, pois as pontas da corda fixa se tornam pontos de retorno para a função WKB neste limite. Assim, é necessário estudar este limite escolhendo apropriadamente os eixos de coordenadas do espaço de fase, de tal maneira que é os termos cruzados da função de ação sejam estacionários para a fase (5.19). Por causa disso, será importante levar em conta a relação entre as fases dos dois ramos quando um ponto de retorno é cruzado [Ozo88, Haa91]:

$$\langle q | \psi_I \rangle = N \left[\left| \det \frac{\partial S_+(q, I)}{\partial q \partial I} \right|^{\frac{1}{2}} e^{iS_+(q, I)/\hbar} + e^{i\pi/2} \left| \det \frac{\partial S_-(q, I)}{\partial q \partial I} \right|^{\frac{1}{2}} e^{iS_-(q, I)/\hbar} \right], \quad (5.28)$$

onde $\pi/2$ é a fase de Maslov e N é a constante de normalização. A avaliação das áreas das funções de cordas e de Wigner para esta geometria encontra-se explicada no Apêndice A.

A aproximação uniforme da função de Wigner que derivaremos está associada à coalescência do par de cordas, ξ_1 e ξ_2 na Fig. 5.6, as quais aparecem quando x está dentro do interior do 'triângulo' de cáusticas da Fig. 5.5. Vamos nos referir a esta catástrofe como a cáustica de *diâmetros*, pois ξ_1 e ξ_2 coalescem quando elas forem diâmetros locais da curva clássica. Longe dos pontos de cúspides, a contribuição de uma terceira corda ξ_3 na Fig. 5.6, ainda pode ser avaliada pelo método de fase estacionária, obtendo-se a simples contribuição semiclássica:

$$W_3(x) = \frac{2\sqrt{2}N^2}{\sqrt{\pi\hbar}} \frac{\cos\left(\frac{A_3}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I(x + \xi_3/2), I(x - \xi_3/2)\}|^{-\frac{1}{2}}}. \quad (5.29)$$

Esta expressão é obtida a partir de um único ramo WKB, isto é tomando $j = k$ na Eq. (5.19). Isso também pode ser derivado a partir de dois ramos diferentes $j \neq k$ (girando as coordenadas do espaço de fase) na mesma integral que envolve a contribuição conjunta do par de cordas ξ_1 e ξ_2 , que coalescem no diâmetro ξ_D .

Esta imagem de cordas cruzadas é essencial para a aproximação uniforme que vamos a implementar. Agora faremos um mapeamento da integral na região correspondente às cordas ξ_1 e ξ_2 para a forma normal da *integral de difração tipo dobra* [Din73, Ber76]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz g(z; x) e^{i\left[\frac{z^3}{3} - \zeta z\right]}. \quad (5.30)$$

Assim

$$W(x) = W_3(x) + 2\Re \left\{ \frac{N^2}{2i\pi\hbar} \exp\left(i\frac{\Sigma A}{2\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dz g(z; x) e^{i\left[\frac{z^3}{3} - \zeta z\right]} \right\}. \quad (5.31)$$

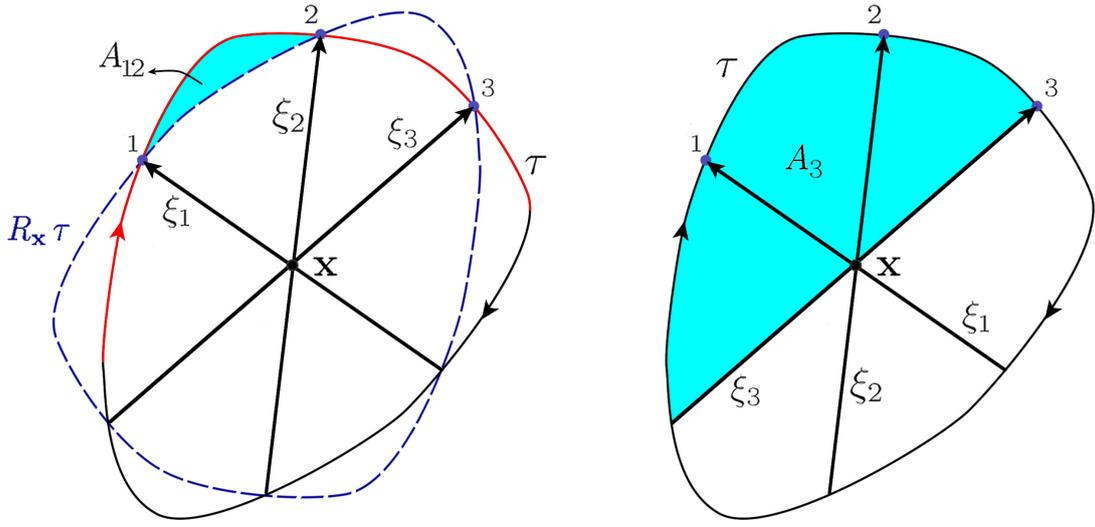


Figura 5.6: **Cordas estacionárias perto da catástrofe de cordas longas da função de Wigner.** As áreas estacionárias A_j para cada corda estacionária são exibidas. A diferença de fase para as cordas coalescentes ξ_1 e ξ_2 é a área simplética A_{12} limitada entre os extremos das cordas.

Os parâmetros desta transformação são dados por

$$\Sigma A = A_1(x) + A_2(x), \quad \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}(x) = \frac{A_{12}(x)}{2\hbar} = \frac{A_1(x) - A_2(x)}{2\hbar}, \quad (5.32)$$

onde A_{12} é a área simplética delimitada pela curva fechada e a sua reflexão entre as extremidades das cordas ξ_1 e ξ_2 , como mostra a Fig. 5.6. Lembrando que

$$I_j^\pm(x) = I\left(x \pm \frac{\xi_j}{2}\right),$$

podemos definir

$$\Delta I_{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} - |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad \Sigma I_{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} + |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.33)$$

Assim, após de uma aproximação linear para a amplitude em (5.31), temos que

$$g(z, x) = \sqrt{2\hbar} \left(\zeta^{\frac{1}{4}} \Sigma I_{12} + \frac{z}{\zeta^{\frac{1}{4}}} \Delta I_{12} \right), \quad (5.34)$$

de modo que, a função de Wigner é dada por [Zam08]

$$W(x) = W_3(x) + 2\sqrt{2}N^2 \left[\frac{\left[\frac{3}{4}A_{12}\right]^{\frac{1}{6}} \Sigma I_{12} \sin\left(\frac{\Sigma A}{2\hbar}\right) \text{Ai}\left(-\left[\frac{3A_{12}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right)}{\hbar^{\frac{2}{3}}} - \frac{\Delta I_{12} \cos\left(\frac{\Sigma A}{2\hbar}\right) \text{Ai}'\left(-\left[\frac{3A_{12}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right)}{\hbar^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{4}A_{12}\right]^{\frac{1}{6}}} \right]. \quad (5.35)$$

O comportamento perto da cáustica é descrito corretamente em termos da função de Airy e sua derivada, $\text{Ai}'(\cdot)$. Este termo é uma característica nova em comparação com a aproximação uniforme para a função de Wigner para cordas curtas (5.25), onde não aparece a causa da simetria de reflexão. Lembremos que a função de Wigner também tem cúspides, que são catástrofes de ordem superior, porém essa aproximação vai além de nossa presente abordagem.

Atravesando a cáustica tipo dobra de maneira que o centro x fique fora do *triângulo* de cáusticas, as cordas coalescentes desaparecem e apenas fica o termo W_3 , coincidindo com a aproximação de fase estacionária mais simples [Ber77]

Para as regiões onde $A_{12} \gg \hbar$, podemos substituir a função de Airy e sua derivada pelas suas formas assintóticas para argumentos negativos grandes [Abr64], ou seja, pela Eq. (5.26) e

$$\text{Ai}'(-x) \rightarrow \frac{x^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (5.36)$$

obtendo

$$W(x) = \frac{4N^2}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{\sin\left(\frac{A_1}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_1^+, I_1^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\sin\left(\frac{A_2}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_2^+, I_2^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\cos\left(\frac{A_3}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_3^+, I_3^-\}|^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (5.37)$$

que é uma soma de termos oscilatórios, cada um com uma fase diferente, como na Eq. (5.6). Esta forma assintótica é uma superposição de cada uma das aproximações por fase estacionária para cada corda estacionária.

5.5 Aproximação uniforme para a função de cordas

Colocando a função de onda (5.28) em (2.39), obtemos quatro integrais para avaliar. Uma escolha apropriada da orientação dos eixos de coordenadas, de maneira que ambas realizações das cordas sejam cruzadas, reduz a função de cordas (5.28) a uma única integral

$$\chi(\xi) = N^2 \int dq \left| \det \left[\frac{\partial I}{\partial p}(p_+(q^+), q^+) \frac{\partial I}{\partial p}(p_-(q^-), q^-) \right] \right|^{\frac{1}{2}} e^{i[S_+(q^+, I) - S_-(q^-, I) - \xi p \cdot q] \hbar + i\pi/2}. \quad (5.38)$$

Aqui $q^\pm q = \pm \xi_q/2$. Como dito anteriormente, esta geometria pode ser obtida por uma rotação no espaço de fase. O cálculo das áreas respectivas para cada corda encontra-se no Apêndice A.

Já construímos a aproximação de fase estacionária para a função de cordas, Eq. (5.24a), a qual possui duas cordas estacionárias. Vamos permitir que este par de pontos estacionários de (5.38) coalesçam em uma única corda ξ_D , que corresponde a um *diâmetro* da curva fechada, isto é, uma corda máxima, para a qual a amplitude semiclássica (5.22) diverge. No caso de uma curva convexa, o conjunto formado por estes diâmetros forma a cáustica e não temos singularidade de ordem maior. Assim esta cáustica possui uma

geometria mais simples do que a correspondente no caso da função de Wigner, que foi estudada na Seção anterior.

Podemos também simplificar o cálculo escolhendo apropriadamente a origem. Temos essa liberdade devido à Eq. (2.55). A origem mais apropriada é o ponto médio entre os centros das duas realizações corda sobre o toro, como mostrado na Fig. 5.7.

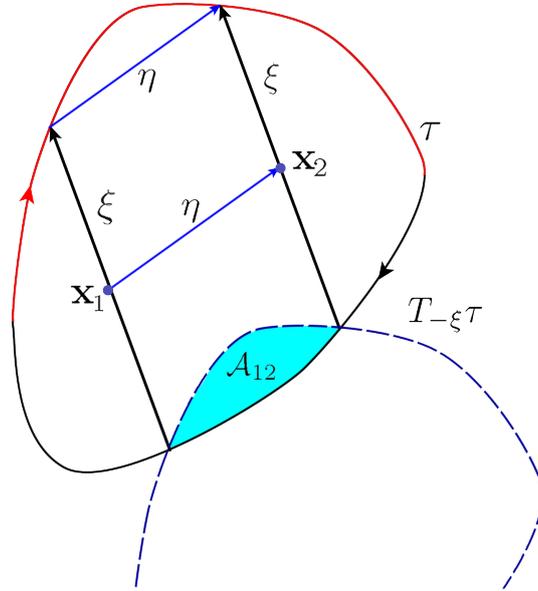


Figura 5.7: **Fase para a aproximação uniforme da função de cordas.** A diferença nas áreas, \mathcal{A}_{12} , coincide com a área entre a curva fechada e sua translação. Essa área é zero quando ξ torna-se um diâmetro e sua corda conjugada $\eta \equiv x_1 - x_2 \rightarrow 0$. A escolha mais simples para a origem do espaço de fase é no ponto médio entre x_1 e x_2 .

Ao invés de avaliar (5.38) por fase estacionária, esta integral é mapeada para a forma normal de uma catástrofe de difração tipo dobra (5.30), assim

$$\chi(\xi) = N^2 \exp\left(i\frac{\Sigma\mathcal{A}}{2\hbar} + i\frac{\pi}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} du g(u; \xi) e^{i\left[\frac{u^3}{3} - \zeta u\right]}, \quad (5.39)$$

onde definimos

$$\Sigma\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2, \quad \frac{2}{3}\zeta(\xi)^{\frac{3}{2}} = \frac{\mathcal{A}_{12}}{2\hbar} = \frac{\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_2 + \eta \wedge \xi}{2\hbar}. \quad (5.40)$$

A fase \mathcal{A}_{12} é o principal ingrediente na presente aplicação do método de aproximação uniforme. Geometricamente é definida como a área entre a curva fechada e sua translação, como mostrado na Fig. 5.7. Na cáustica, a corda $\xi = \xi_D$ é máxima e sua corda conjugada [Ozo04]: $\eta = x_1 x_2 \rightarrow 0$, conforme ilustrado na Figura. 5.7.

Assim, recordando a definição da ação transportada (5.20) para cada realização da corda, definimos

$$\Delta I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} - |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad \Sigma I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} + |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.41)$$

de modo que obtemos

$$g(u; \xi) \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(\zeta^{\frac{1}{4}} \Sigma I^{12} + \frac{u}{\zeta^{\frac{1}{4}}} \Delta I^{12} \right). \quad (5.42)$$

Finalmente, lembrando a definição da variável intermediária ζ em termos das áreas indicadas na Eq. (5.40), temos que a aproximação para a função de cordas é

$$\chi(\xi) = \sqrt{2\pi} N^2 e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar} \left[\frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{\frac{1}{6}} \Sigma I^{12}}{i\hbar^{-\frac{1}{3}}} \text{Ai} \left(- \left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) - \frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{-\frac{1}{6}} \Delta I^{12}}{\hbar^{-\frac{2}{3}}} \text{Ai}' \left(- \left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) \right]. \quad (5.43)$$

A função de Airy $\text{Ai}(-\zeta)$ oscila com amplitude cada vez maior à medida que aumenta seu argumento e depois decai exponencialmente para valores positivos de $-\zeta$. Por outro lado, o máximo na amplitude obtido quando $\zeta \rightarrow 0$, indica a presença de uma singularidade da amplitude semiclássica. Nesta região o segundo termo, o que depende de $\text{Ai}'(-\zeta)$ pode ser desprezado (*ver* Apêndice B). Uma nova característica desta aproximação uniforme é que a fase $\Sigma\mathcal{A}/\hbar$ ao longo da cáustica, que será importante para separar a contribuição de cada realização no regime oscilatório. De fato, no caso em que as fases semiclássicas de cada corda sejam significativamente maiores do que a constante de Planck, as funções em (5.43) podem ser substituídas pelas suas formas assintóticas para argumentos negativos grandes [Abr64] (*ver* Eqs. (5.26) e (5.36)) a fim de recuperar a função de cordas no regime oscilatório (5.5):

$$\chi(\xi) \rightarrow \sqrt{2\pi\hbar} N^2 e^{i\pi/2} \left[\frac{\exp(i[\frac{\mathcal{A}_1}{\hbar} - \frac{\pi}{4}])}{|\{I_1^+, I_1^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\exp(i[\frac{\mathcal{A}_2}{\hbar} + \frac{\pi}{4}])}{|\{I_2^+, I_2^-\}|^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (5.44)$$

Este resultado corresponde à soma das contribuições de cada realização da corda na aproximação de fase estacionária da função de cordas em (5.24a), onde considerou-se que cada realização da corda encontra-se em um único ramo da função de onda WKB.

5.5.1 Regime de cordas longas para estados de Fock

Como exemplo ilustrativo da teoria desenvolvida na seção anterior, consideremos os estados de Fock definidos na Seção 2.2.1. Sua variedade clássica é uma circunferência centrada na origem, i.e. o estado tem simetria de reflexão. A condição de quantização (5.4) para esses círculos define

$$\pi(p^2 + q^2) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.45)$$

A função exata da corda é dada por (2.62). Agora, por cordas curtas, $\xi \ll \hbar$,

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) \simeq J_0 \left(\frac{\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|}{\hbar} \right), \quad (5.46)$$

fornece uma boa aproximação para a função de cordas [Ozo04], onde J_0 , é a função de Bessel de ordem zero [Abr64]. A forma assintótica da função de Bessel para grandes valores [Abr64] conduz a

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) \simeq \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\pi\mathcal{I}|\xi|}} \cos\left(\frac{\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|}{\hbar} - \frac{3\pi}{4}\right). \quad (5.47)$$

Podemos comparar este resultado com o regime oscilatório (5.44). Em primeiro lugar, devido à simetria, a área de uma realização da corda é complementar à área da outra realização, e fazendo uma integral simples temos que a fase semiclássica é dada por

$$\mathcal{A}(\xi) = 2\pi\mathcal{I} - |\xi|\sqrt{2\mathcal{I} - \left(\frac{|\xi|}{2}\right)^2} - 4\mathcal{I} \arcsin\left(\frac{|\xi|/2}{\sqrt{2\mathcal{I}}}\right). \quad (5.48)$$

Esta geometria é ilustrada na Fig. 5.8. Além disso, a simetria iguala o colchete de Poisson

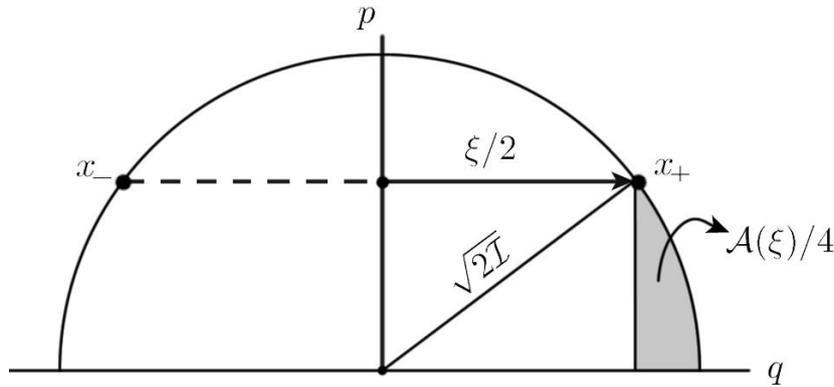


Figura 5.8: **Cálculo de $\mathcal{A}(\xi)$ para um estado de Fock.** O toro clássico corresponde a um círculo de raio $\sqrt{2\mathcal{I}}$, de acordo com a Eq. (5.45).

para cada realização da corda, de modo que o termo que contém a derivada da função de Airy é zero. Os colchetes de Poisson são avaliados como

$$\{I^+, I^-\} = |\xi|\sqrt{2\mathcal{I} - \left(\frac{|\xi|}{2}\right)^2}, \quad (5.49)$$

de modo que, a aproximação uniforme para a função de cordas torna-se

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) = (-1)^n \frac{\sqrt{2\pi}N^2 \left[\frac{3}{4}\mathcal{A}(\xi)\right]^{\frac{1}{6}}}{\hbar^{-\frac{1}{3}}|\xi|^{\frac{1}{2}}} \left[2\mathcal{I} - \frac{|\xi|^2}{4}\right]^{-\frac{1}{4}} \text{Ai}\left(-\left[\frac{3\mathcal{A}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right). \quad (5.50)$$

Daqui vemos que o comportamento assintótico da função de Airy, extrapolado para cordas curtas é

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) = (-1)^n \frac{\sqrt{2\pi\hbar}N^2}{\sqrt{2\mathcal{I}|\xi|}} \cos\left(\frac{\mathcal{A}}{2\hbar} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (5.51)$$

Note que para cordas muito pequenas, o argumento na função de Bessel (5.46) $\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|$ é aproximadamente metade da área complementar da intersecção entre o círculo e sua translação.

Assim, o limite assintótico de função de cordas para a cáustica de cordas longas reproduz a função de cordas perto da origem no caso de estados de Fock, em uma região intermediária. Além disso, imediatamente obtemos a constante de normalização $N^2 = 1/2\pi$. Podemos substituir este valor em (5.37) fora da cáustica, onde as duas cordas coalescentes desaparecem, assim recuperamos a aproximação de fase estacionária para uma única corda único que permanece na função de Wigner [Ber77] fora do triângulo na Fig. 5.5.

5.6 Transição entre os regimes de cordas curtas e longas

Na seção 5.2 derivamos a aproximação “clássica”(5.12), que funciona dentro de uma vizinhança da origem, mas não é válida na região entre a origem e as cáusticas de diâmetros. Por outro lado, o regime de cordas longas é descrito em termos de funções de Airy, Eq. (5.43), onde se tem um comportamento oscilatório perto da origem até atingir a cáustica de diâmetros, a qual é seguida por um regime assintótico evanescente quando $|\xi| \rightarrow \infty$. Porém esta aproximação uniforme não dá conta da cáustica na origem.

Existem duas razões pelas quais a técnica da aproximação uniforme padrão, envolvendo uma transformação da integral (5.12) para uma integral mais simples (cf. [Ber76, Din73]), não pode ser usada para a cáustica na origem. Primeiro, está o fato de ter um número infinito de pontos estacionários do expoente (5.10) quando $\xi = 0$. Por esta razão dizemos que a origem é uma cáustica não genérica (no sentido do teorema de classificação de Thom [Ber76, Tho75]). Além disso, a condição de que o parâmetro \hbar^{-1} seja grande, essencial para expansões assintóticas de integrais [Din73], não é satisfeita para o caso de valores pequenos $|\xi|$, onde o comportamento da integral é dado por (5.12), porque

$$\frac{|\xi|}{\hbar} \sim 1. \quad (5.52)$$

Para descrever o regime de transição (entre cordas curtas e longas), propomos então a seguinte expressão (semiclássica) para a função de cordas:

$$\chi_{sc}(\xi) = \chi_s(\xi) - SP[\chi_s](\xi) + SP[\chi_w](\xi). \quad (5.53)$$

Aqui χ_s é a integral (5.12), χ_w é dado pelas Eqs. (5.9) e (5.10) e $SP[\cdot]$ denota a aproximação de fase estacionária. Observe que $\chi_s(\xi)$ foi derivada a partir de uma aproximação de corda curta para $\chi_w(\xi)$, mas, devido ao fato de que $\xi \wedge x(\theta)$ é uma função não linear da variável de integração θ , a integral (5.12) também pode ser avaliada por fase estacionária.

Na verdade, as duas integrais em (5.53) que são avaliadas pelo método de fase estacionária devem se cancelar na vizinhança da origem. Por outro lado, o termo médio $SP[\chi_s]$

cancela χ_s para valores grandes de $|\xi|$, isto é, na região onde a avaliação fase estacionária é válida. A aproximação de fase estacionária para χ_w é (5.24a). Por outro lado, para χ_s temos que

$$SP[\chi_s](\xi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell} \frac{[x''(\theta_{\ell}(\xi)) \wedge \xi]^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} x(\theta_{\ell}(\xi)) \wedge \xi + i\frac{\pi}{4} \text{sign}(x''(\theta_{\ell}(\xi)) \wedge \xi) \right], \quad (5.54)$$

onde ℓ enumera os pontos fixos de χ_s , que geometricamente podem ser vistos como os pontos onde o vetor ξ é tangente à curva clássica. Assim, inserindo as aproximações de fase estacionária (5.24a) e (5.54) na Eq. (5.53), chegamos a uma aproximação geral que é válida sobre todo o espaço de fase.

5.6.1 Evolução não-linear de um estado de Fock

A fim de testar a aproximação geral (5.53), estudaremos a função de cordas de um conjunto de estados, evoluindo sob a ação de um Hamiltoniano cúbico:

$$H(p) = \alpha_3 p^3 + \alpha_2 p^2 + \alpha_1 p + \alpha_0. \quad (5.55)$$

A evolução clássica é então determinada por

$$p(t) = p(0) \quad \text{e} \quad q(t) = q(0) + (3\alpha_3 p^2 + \alpha_2 p + \alpha_1)t. \quad (5.56)$$

Para um tempo fixo $t \geq 0$, a função de ação é

$$I(p, q, t) = (q - [3\alpha_3 p^2 + 2\alpha_2 p + \alpha_1]t)^2 + p^2, \quad (5.57)$$

de modo que a curva clássica que suporta o estado evoluído corresponde à curva de nível

$$I(p, q, t) = \mathcal{I}. \quad (5.58)$$

Para $t = 0$, escolhemos um estado de Fock, $|n\rangle$ (ver (2.62)). Dado que χ_n é real, esta função terá linhas nodais circulares, cujos raios são de tamanho \hbar vezes as raízes do n -ésimo polinômio de Laguerre, como mostrado na Fig. 2.6. A evolução clássica gerada pelo Hamiltoniano (5.55) quebra a simetria do estado de Fock original, por causa do termo cúbico. Para estes estados, a aproximação para a primeira linha nodal Eq. (4.15), fornece um círculo de raio $\sqrt{\hbar/(n + \frac{1}{2})}$. Este resultado difere da linha nodal exata em $\sim 18\%$ de precisão. Portanto, como mencionado anteriormente, a aproximação (4.15) dá apenas uma estimativa qualitativa para a primeira linha nodal.

A função de cordas exata para $t > 0$ é obtida a partir de (2.38):

$$\chi(\xi, t) = \langle \psi(t) | \hat{T}_{-\xi} | \psi(t) \rangle = \int dp \psi_n^*(p_+) e^{-\frac{i}{\hbar}(t[H(p_+) - H(p_-)] - p\xi_q)} \psi_n(p_-), \quad (5.59)$$

onde $p_{\pm} \equiv p \pm \xi_p/2$,

$$\psi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n \left(\frac{p}{\sqrt{\hbar}} \right) e^{-\frac{p^2}{2\hbar}} \quad (5.60)$$

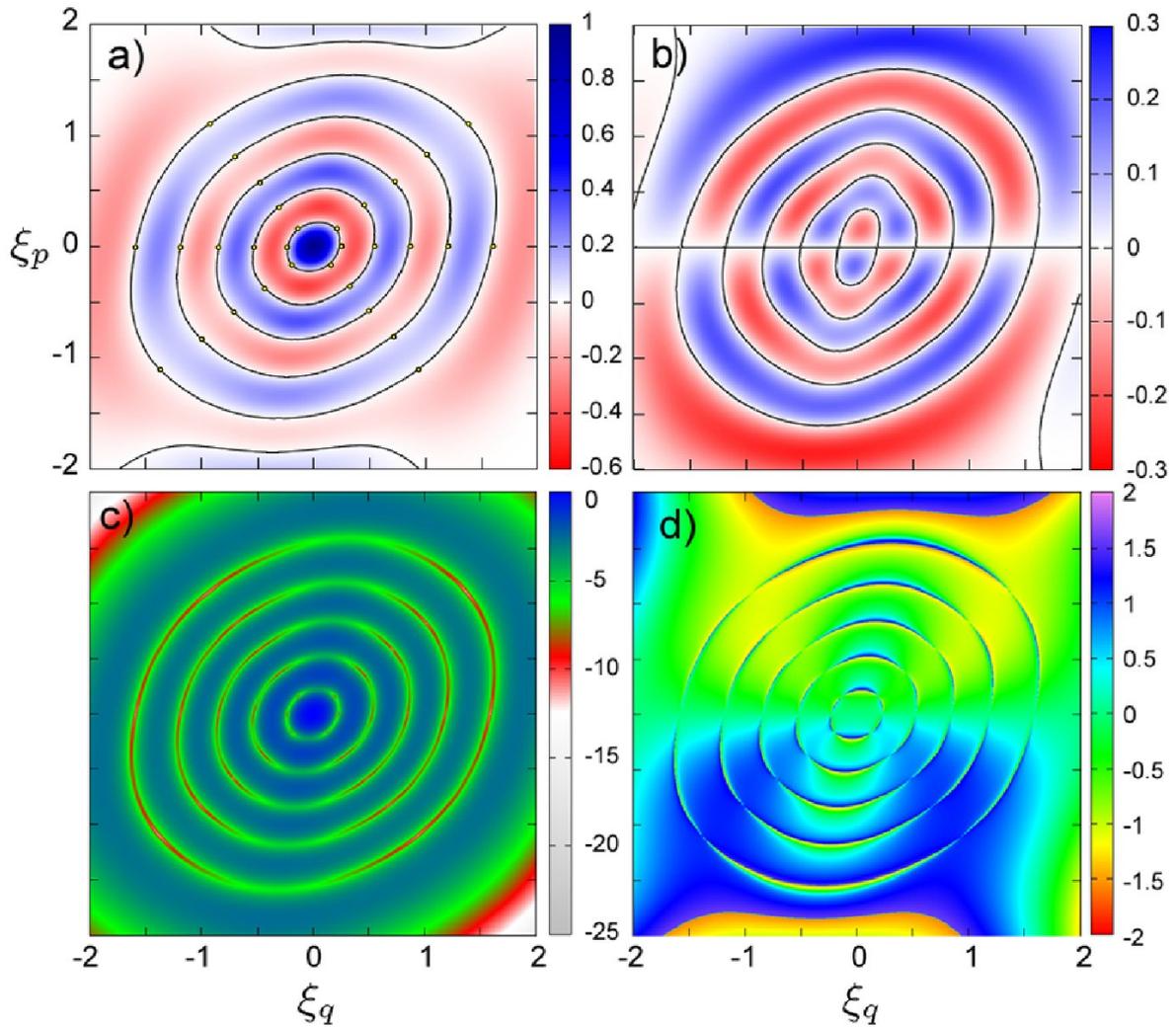


Figura 5.9: A função de cordas para o estado de Fock deformado $e^{-i\hat{H}t/\hbar}|5\rangle$. Na resolução desta figura, a diferença entre a aproximação semiclássica e a função exata é indiscernível. As linhas pretas são as curvas de nível para as partes real a) e imaginária b) para $\chi(\xi) = 0$. c) É a intensidade logarítmica e d) é a fase. Os pontos em a) mostram a localização dos pontos cegos. Aqui $\hbar = 0, 1$, $t = 0, 1$ e $\alpha_2 = \alpha_1 = 1$.

é o estado de Fock n na representação de momentos e $H_n(\cdot)$ é o n -ésimo polinômio de Hermite [Abr64].

Para qualquer $t > 0$, a simetria de reflexão é quebrada, assim, a função de cordas não tem mais uma paridade definida globalmente, o que implica que a parte imaginária não é nula. Como mostrado na Fig. 5.9, a expressão (5.53) descreve adequadamente o comportamento da função de cordas para cordas curtas e longas. Claramente (5.24a) não é válida quando ξ tende a um diâmetro da curva clássica, porém essa singularidade é resolvida usando a aproximação uniforme (5.43). Podemos reconhecer as partes real (Fig. 5.9 a) e imaginária (Fig. 5.9 b) da função de cordas por sua paridade, par e ímpar,

respectivamente. Além disso, constatamos a presença de pontos cegos e singularidades na fase (Fig. 5.9 d)).

O ponto cego mais próximo da origem, que pode ser aproximadamente especificado pelos primeiros e segundos momentos estatísticos, Eqs. (4.13) e (4.15), resulta do cruzamento da menor das curvas fechadas na Fig. 5.9 com a linha nodal que atravessa a origem na Fig. 5.9 b). É curioso que as interseções onde acontecem os outros pontos cegos parecem sugerir linhas retas radiais, neste exemplo particular.

A comparação detalhada das intensidades para a nossa aproximação semiclássica da função de cordas (5.53) com o resultado exato é mostrada na Fig. 5.10. Mostra-se um corte radial da Fig. 5.9, a qual apresenta uma sequência de pontos cegos. Observa-se uma cáustica — singularidade de diâmetros — na borda esquerda da figura. Ela surge do fato de que a aproximação de fase estacionária não descreve essa cáustica de cordas longas, mas esta divergência pode ser corrigida pela aproximação uniforme (5.43).

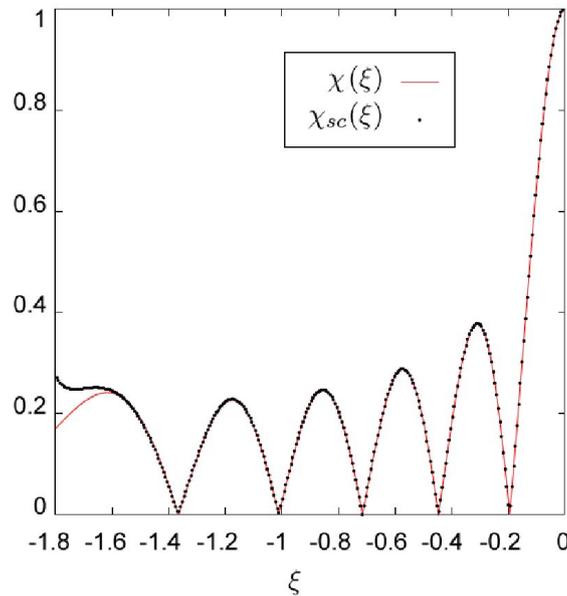


Figura 5.10: **Comparação entre as intensidades da função de cordas exata e semiclássica para um estado de Fock evoluído** $e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\bar{5}\rangle$. *Mostra-se um corte ao longo da linha $\xi_p = 0,8172\xi_q$. Podemos observar uma sequência de pontos cegos. Aqui $\hbar = 0,1$, $t = 0,1$.*

5.7 Discussão

Mostramos que o comportamento tanto da função de Wigner quanto da função de cordas perto da singularidade de cordas longas pode ser descrito pela função de Airy e a sua derivada. Embora, o termo que contém a derivada da função de Airy torna-se desprezível em pontos muito próximos da cáustica, ele adiciona uma contribuição importante na ex-

pansão das distribuições semiclássicas que recupera a região oscilatória, coincidindo com o método de fase estacionária. A forma da cáustica de diâmetros no espaço de fase de centros onde a função de Wigner semiclássica é singular é diferente da cáustica no espaço de cordas. No segundo caso, a cáustica está formada pelo conjunto de todos os diâmetros, ξ_D , isto é as cordas máximas da curva original. Esta cáustica de diâmetros é simétrica com respeito à origem e é também convexa. Sem assumir que a curva original seja convexa, a simetria será preservada, porque $-xi_D$ também é um diâmetro, porém podem aparecer cáustica mais complexas do que dobras, tal como aquelas que acontecem na cáustica de diâmetros vistas no espaço de centros $x_D = x(\xi_D)$. Esta cáustica de Wigner tem cúspides mesmo no caso de curvas convexas [Ber77].

Para estados puros, vamos resumir o comportamento da função de cordas para qualquer translação: *a*) um máximo na origem; *b*) um regime oscilatório, obtido como uma soma de termos de fase estacionária para cada realização da corda; *c*) a região perto da corda maximal, ou seja do diâmetro ξ_D , que pode ser expressa em termos da função de Airy e da sua derivada, na qual a amplitude maximal, finalmente, *d*) uma região evanescente para cordas maiores do que o diâmetro local, que é descrita pelas formas evanescentes da função de Airy e sua derivada. Como consideramos unicamente estados puros, a correlação no espaço de fase (2.34) é dada pelo módulo quadrado da função de cordas. Assim, utilizando a forma assintótica da aproximação uniforme para a função de cordas no regime semiclássico, encontramos que a correlação no espaço de fase é de aproximadamente

$$C(\xi) = 2\pi\hbar \left[\{I_1^+, I_1^-\}^{-1} + \{I_2^+, I_2^-\}^{-1} + 2\{I_1^+, I_1^-\}^{-\frac{1}{2}} \{I_2^+, I_2^-\}^{-\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\mathcal{A}_{12}}{\hbar}\right) \right], \quad (5.61)$$

na região oscilatória longe da cáustica, ou seja, temos uma soma de dois termos, cada um associado a uma realização da corda mais um termo que representa a interferência. Esta fórmula fornece uma interpretação semiclássica para a invariância da correlação em relação à transformada de Fourier simplética [Ozo04]. Um ponto importante é que a região próxima ao pico nas correlações no espaço de fase, depois do qual as correlações decaem, é apenas o módulo ao quadrado da *forma de transicional* da aproximação uniforme (5.43), que está deduzida no Apêndice B. Mesmo que a Eq. (5.61) admita a possibilidade de $C(\xi) = 0$, como (5.61) é uma aproximação que não é válida próximo à origem não podemos afirmar que concorda com a presença de pontos cegos no sentido da Eq. (4.13).

Como os estados Bohr-quantizados estão de acordo com a aproximação (4.15), o conhecimento de um número finito de momentos determina a função de cordas desses estados perto da origem. No entanto, essa aproximação é insuficiente para descrever as oscilações complexas, por exemplo um padrão de pontos cegos. Porém, apresentamos uma aproximação semiclássica para a função de cordas de estados Bohr-quantizados e verificamos sua acurácia, sem incluir a cáustica exterior que foi tratada na Seção 5.5. Na ausência de simetria de reflexão a função da corda é uma função totalmente complexa, o que leva a uma estrutura mais rica do que a exibida pela função de Wigner

correspondente. Como no caso de superposições de pacotes de onda Gaussianos [Zam09], esperamos que pontos cegos não sobrevivam para um sistema aberto sob uma evolução Markoviana. No entanto, espera-se que eles desapareçam de $C(\xi)$ antes das regiões negativas da função de Wigner.

Representação a Valores Iniciais para o Eco de Loschmidt

“El tiempo es una mentira que han inventado los viejos”.

Joaquín Sabina

Nos capítulos anteriores, estudamos as correlações para estados deslocados. Foram caracterizados os diferentes regimes, dependendo do deslocamento, e da transição entre eles (*ver* Capítulo 5). Analisamos também os zeros desta correlação e sua sensibilidade quando o estado inicial é mudado e também vimos sua resposta quando o sistema encontra-se em contato com um ambiente externo (*ver* Capítulo 4). O próximo passo é estudar a correlação no caso das evoluções gerais, ou seja considerar a Eq. (1.1) para uma evolução unitária do estado inicial $\hat{\rho}$ gerada por um Hamiltoniano geral \hat{H} . Neste caso, a correlação é dada por

$$C(t) = \frac{\text{tr } \hat{\rho} \hat{\rho}_t}{\text{tr } \hat{\rho}^2} \quad \text{onde} \quad \hat{\rho}_t = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho} e^{i\hat{H}t/\hbar}. \quad (6.1)$$

Observe que, para tempos muito pequenos, as exponenciais podem ser substituídas por uma série de Taylor de primeira ordem em t , para obter a forma aproximada

$$C(t) \stackrel{t \rightarrow 0}{\approx} 1 - \frac{t^2}{\hbar^2} \frac{\text{tr} [\hat{\rho}^2 \hat{H}^2 - \hat{\rho} \hat{H} \hat{\rho} \hat{H}]}{\text{tr } \hat{\rho}^2} = 1 + \frac{t^2}{2\hbar^2} \frac{\text{tr} [\hat{\rho}, \hat{H}]^2}{\text{tr } \hat{\rho}^2} \leq 1. \quad (6.2)$$

Para um estado misturado $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, a correlação para tempos pequenos se reduz a

$$C(t) \stackrel{t \rightarrow 0}{\approx} 1 - \frac{t^2}{2\hbar^2} \left(\langle\psi|\hat{H}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle^2 \right). \quad (6.3)$$

Observe que o último termo contém a variância do Hamiltoniano \hat{H} .

A correlação $C(t)$ coincide com a *probabilidade de sobrevivência* para o estado inicial de $\hat{\rho}$ [Hel91]. Como na mecânica clássica, esperamos que esta correlação dependa da natureza regular ou caótica do Hamiltoniano [Per84, Eme02]. Por exemplo, em trabalhos

anteriores foi analisada a correlação (6.1) para $\hat{H} = \hat{H}_o + \delta H$, ou seja, uma perturbação sobre o Hamiltoniano \hat{H}_o , e para $\hat{\rho}$ sendo um autoestado de \hat{H}_o [Van03a] em sistemas de uma dimensão. Devido à separação exponencial das órbitas clássicas na presença de caos, a probabilidade de sobrevivência de um sistema caótico clássico deve tender exponencialmente para zero. Além disso, este mecanismo de separação exponencial é fundamental para entender o surgimento da irreversibilidade temporal a partir das equações de movimento clássicas que são simétricas com respeito à transformação $t \rightarrow -t^\dagger$. Portanto, através da combinação de resolução finita dos experimentos reais e a separação exponencial, uma operação de inversão temporal parece ser praticamente impossível de ser realizada depois um certo tempo [Per84, Per93]. Este argumento não é aplicável às evoluções quânticas. Qualquer erro na preparação de um estado quântico não cresce devido ao fato que a evolução Hamiltoniana é unitária: O produto escalar de quaisquer dois estados é constante no tempo, portanto, dois estados vizinhos sempre permanecerão à mesma “distância”. Assim, a irreversibilidade na mecânica quântica é comumente tratada usando funções de *eco* [Gor06, Jac09], em vez de correlações como na Eq. (6.1). Neste ponto vamos mudar a direção do nosso trabalho das correlações para estudar a função de eco mais usual, o *eco de Loschmidt* (LE).

Neste capítulo abordamos o LE usando métodos semiclássicos. Especificamente obtemos uma fórmula para avaliar o LE baseada em trajetórias clássicas, na qual a procura de pontos estacionários é substituída por uma integração sobre as condições iniciais dessas trajetórias. Este tipo de aproximação semiclássica é conhecida como um *Representação a valores iniciais* (IVR) e é apropriado para cálculos numéricos [Mil01]. A nossa teoria é obtida a partir da teoria de evolução semiclássica da função de Wigner, juntamente com a teoria clássica de perturbação de primeira ordem [Zam11]. No limite de pequenas ações, nossa formulação se assemelha com a *Representação de defasagem* (DR) para a LE, introduzido por Vaníček na Ref. [Van04].

Finalmente, lembramos que os sistemas caóticos são *correspondidos* com seus análogos clássicos até um tempo limiar t_E , conhecido como *tempo de Ehrenfest*. De fato, um pacote de ondas inicialmente localizado de largura σ se espalha ao longo da variedade clássica instável, da mesma forma como órbitas clássicas. Após o tempo

$$t_E = \lambda^{-1} \ln \left(\frac{L}{\sigma} \right), \quad (6.4)$$

o pacote de ondas deixa de estar localizado. Na Eq. (6.4), λ é o expoente de Lyapunov clássico e L é o tamanho (ou largura) do sistema. Depois desse tempo, os efeitos quânticos devem ser tomados em conta e a correspondência clássica-quântica é quebrada. Assim, as teorias semiclássicas baseadas em caminhos clássicos são presumivelmente válidas até o tempo de Ehrenfest.

[†]Esta discordância entre a dinâmica microscópica *reversível* e *irreversibilidade macroscópica* é o chamado de *paradoxo de Loschmidt*.

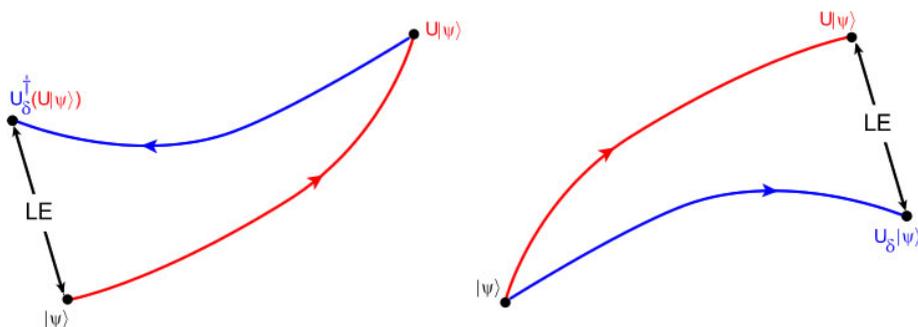


Figura 6.1: **Duas interpretações para o eco de Loschmidt:** (esquerda) como um eco e (direita) como uma fidelidade. Aqui $\hat{U} = e^{-iHt/\hbar}$ e $\hat{U}_\delta = e^{i(H+\delta H)t/\hbar}$.

6.1 Introdução

Perturbações são ubíquas em uma ampla variedade de sistemas físicos, de forma que o estudo das suas conseqüências sobre a dinâmica é essencial tanto no mundo quântico quanto no clássico. Isto está relacionado com a caracterização do caos no regime quântico, uma vez que a noção de distância entre dois estados clássicos e, portanto, o expoente de Lyapunov, não pode ser traduzido como a sobreposição de estados quânticos puros. Portanto, uma alternativa para a caracterização do caos quântico pode ser estudar a resposta à perturbações no Hamiltoniano, em vez de perturbações sobre o próprio estado [Per84]. A influência dessas perturbações é medida pelo eco de Loschmidt (LE) ou *fidelidade* [Per84]:

$$M(t) = |L(t)|^2 \quad \text{onde} \quad L(t) = \langle \psi | e^{it(\hat{H}+\delta\hat{H})/\hbar} e^{-it\hat{H}/\hbar} | \psi \rangle, \quad (6.5)$$

onde $\Delta\hat{H}$ é pequeno comparado com \hat{H} . Para estados mistos:

$$L(t) = \text{tr} \hat{\rho} \hat{I}_L(t) \quad \text{onde} \quad \hat{I}_L(t) = e^{it(\hat{H}+\delta\hat{H})/\hbar} \hat{I} e^{-it\hat{H}/\hbar}, \quad (6.6)$$

onde \hat{I} é o operador identidade. $\hat{I}_L(t)$ é chamado de operador de *eco*. O LE é relevante na informação quântica, descoerência [Cuc03] e em outros contextos (para mais informação *ver cf.* [Gor06, Jac09, Cer03]), além de servir como suporte da noção de *irreversibilidade* na mecânica quântica [Per84]. Em particular, o LE é experimentalmente realizável em experiências de RMN [Hah, Rhi70, Usa98, Pas95], cavidades de microondas [Schä05, Köb11] ondas elásticas [Gor06a, Lob08] entre outra técnicas. A Fig. 6.1 mostra duas interpretações possíveis para a Eq. (6.5): como um *eco* ou como uma *fidelidade*. A primeira corresponde a evoluir um estado $|\psi\rangle$ com o Hamiltoniano \hat{H} e depois disso evoluir *para trás no tempo* com o Hamiltoniano perturbado. Agora, se evoluímos duas cópias do mesmo estado $|\psi\rangle$ sob a ação de dois Hamiltonianos ligeiramente diferentes, \hat{H} e $\hat{H} + \delta\hat{H}$, respectivamente, $M(t)$ poder ser interpretado como uma *fidelidade*.

Um aspecto importante é que a decadência da LE está relacionada com a decadência de pureza (ou entropia linear) em sistemas abertos [Per84, Cuc03]. A pureza é definida

como

$$p = \text{tr } \hat{\rho}^2. \quad (6.7)$$

Ela quantifica acoplamento via descoerência com um ambiente externo: Se o sistema está inicialmente em um estado puro, este estado vai perder sua pureza depois de ficar emaranhado com o ambiente. Na verdade, esta relação do LE com descoerência foi enunciada pelo próprio Peres no seu trabalho seminal [Per84], pois ele introduz a perturbação δH na definição (6.5) como uma contribuição efetiva do ambiente.

A teoria semiclássica da LE tem provado ser uma ferramenta poderosa para entender o seu comportamento em regimes diferentes, dependendo da duração da evolução e da intensidade da perturbação [Jal01, Jac01, Cer03, Pro02, Cuc02, Wis03].

O LE médio possui diferentes regimes de decaimento que dependem da perturbação. A *grosso modo*, para perturbações muito pequenas, de maneira que os elementos da matriz de $\delta H \ll \Delta_E$ sendo Δ_E o espaçamento médio de níveis de \hat{H} , o LE se comporta como

$$\langle M(t) \rangle \simeq 1 - \frac{t^2}{\hbar^2} \langle \delta H^2 \rangle^2, \quad (6.8)$$

ou seja que está caracterizado por um decaimento Gaussiano $\sim e^{-t^2/\tau_G^2}$ com $\tau_G = 1/\langle \delta H^2 \rangle$ [Gor06, Wis03]. Esse comportamento é obtido a partir do mesmo tipo de aproximação que em Eq. (6.2)

Para tempos maiores, o LE decai exponencialmente se a dinâmica clássica do sistema for caótica: Para pequenas perturbações, a taxa de decaimento é proporcional ao quadrado da intensidade da perturbação, que é o chamado *regime da regra de ouro de Fermi*; para perturbações maiores, a taxa de decaimento é o maior expoente de Lyapunov clássico, este é chamado regime de Lyapunov. Um comportamento diferente é esperado se a dinâmica é clássica correspondente regular: Para pequenas perturbações o decaimento é Gaussiano, e para perturbações maiores o LE decai como uma lei de potência [Jac09, Pro02, Gor06].

Finalmente, o LE se satura para tempos longos. O tempo de saturação é inversamente proporcional ao tamanho do espaço de Hilbert eficaz que é necessário para uma descrição razoável da evolução temporal do estado inicial [Pet05, Jac09, Guti09]. Na Fig. 6.2 mostra-se um esboço dos regimes temporais para o decaimento do LE. Ressaltamos que o estado inicial tem uma importância crucial para esses regimes de decaimento. Estados coerentes são normalmente utilizados para estudar o comportamento do LE. Por exemplo, na Ref. [Wis02] é mostrado que se o estado inicial é uma autofunção do Hamiltoniano ou da perturbação, a regime de Lyapunov não acontece.

Na prática, a abordagem semiclássica para a LE sofre do *problema de buscar raízes*: O fato de que a teoria depende das trajetórias clássicas definidas por condições de contorno, as quais são difíceis de determinar, incluso para sistemas simples. A alternativa atraente é lidar com representações a valores iniciais (IVR) [Mil01, Van03b, Tao09]. Brevemente, o método IVR consiste em substituir o problema das condições de contorno

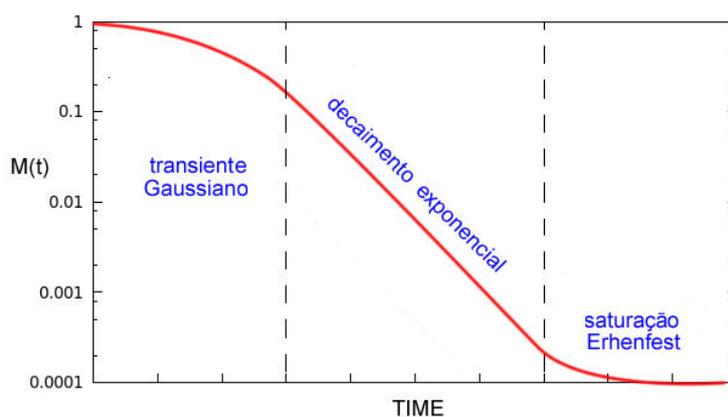


Figura 6.2: **Regimes temporais do decaimento do LE médio.** Começa com um transiente parabólico, seguido por um decaimento exponencial e depois por uma saturação por tempos longos [Gor06, Jac09].

por uma integração sobre todas as condições iniciais. Mesmo que seja preciso calcular muitas trajetórias, elas são facilmente especificadas pelas suas condições iniciais. Isso explica o interesse que existe pela *representação de defasagem* (DR) proposta por Van íček [Van04]:

$$L_{DR}(t) = \int dx_0 W(x_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \delta H(\mathbf{x}(\tau; x_0)) d\tau\right). \quad (6.24)$$

Aqui $x = (p, q)$ é um ponto no espaço de fase $2L$ -dimensional, $W(x)$ é a função de Wigner do estado $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, δH é o análogo clássico da perturbação $\delta\hat{H}$ e $\mathbf{x}(t, x_0)$ é a trajetória clássica do sistema sem perturbar para a condição inicial de x_0 . A DR é um método eficiente para calcular funções de correlação quântica, inclusive para sistemas com muitos graus de liberdade, tais como os estudados na dinâmica molecular [Li09, Mol11]. Além disso, a DR tem sido também utilizada para revelar um comportamento universal do LE [Wis10]. Não obstante sua utilidade prática, a DR não tem uma dedução rigorosa. Um argumento sugestivo é proposto na Ref. [Van06], apelando ao *teorema de sombreamento* da mecânica clássica [Gre90]. Por isso, a precisão da DR comumente está associada à natureza caótica do sistema. De fato, seu intervalo de validade é desconhecido, porém usando a DR obtiveram-se resultados confiáveis em alguns sistemas com dinâmica mista [Wan07, Wan08].

Neste capítulo, deduzimos uma aproximação para a LE, avaliando a ação no marco da teoria semiclássica para a evolução da função de Wigner e usando a teoria de perturbações de primeira ordem [Ozo98, Boh95]. Esta aproximação se reduz à DR para o Hamiltoniano médio \bar{H} , quando se despreza a contribuição semiclássica nas amplitudes. É importante notar que esta diferença no Hamiltoniano da DR, mesmo afetando fracamente a ação clássica, que pode ocasionar a mudanças significativas na fase semiclássica de cada trajetória. Além disto, obtemos uma estimativa do intervalo de validade para a

forma original da DR, onde fica claro que termos são desprezados na nossa teoria. Nos concentramos no caso de Hamiltonianos quadráticos, para os quais o método da fase estacionária é exato e mesmo que não sendo sistemas caóticos, eles podem apresentar uma dinâmica hiperbólica. Desta forma, mostramos que movimento caótico não é uma condição necessária para a acurácia da nossa aproximação.

6.2 Representação de defasagem

Nesta seção vamos obter a fórmula DR para o LE Eq. (6.24), seguindo o trabalho original de Van íček [Van06]. Começamos por considerar a Eq. (6.5) escrita em termos das funções de onda respectivas

$$L(t) = \int dq \psi_+^*(q, t) \psi_-(q, t), \quad \text{onde} \quad \psi_{\pm}(q, t) = \int dq' K_{\pm}(q, q'; t) \psi(q'), \quad (6.9)$$

de acordo com a Eq. (2.27) e

$$K_{\pm}(q, q'; t) \equiv \langle q | e^{-it\hat{H}_{\pm}/\hbar} | q' \rangle \quad (6.10)$$

sendo o propagador quântico. Agora vamos substituir o propagador quântico pela *representação a valores iniciais* (IVR) do propagador de van Vleck em L graus de liberdade (ver Apêndice C)

$$\langle q^t | e^{-iHt/\hbar} | q^o \rangle_{\text{IVR}} = \int \frac{dx^o}{(2\pi i \hbar)^{L/2}} \left| \det \frac{\partial q^t}{\partial p^o}(x^o) \right|^{\frac{1}{2}} e^{iS^t(x^o)/\hbar}. \quad (C.7)$$

Aqui t corresponde ao tempo de propagação, e as órbitas são denotadas por

$$x^t = (p^t, q^t) = \mathbf{x}(t) = (p(t), q(t)). \quad (6.11)$$

Particularmente x^o é a condição inicial. A ação é dada por

$$S^t(x^o) = \int_0^t dt' [p^\tau \dot{q}^\tau - H(x^\tau, \tau)]. \quad (6.12)$$

Assim, o LE é aproximado semiclassicamente por

$$L_{\text{IVR}}(t) = \int dq \left[\int dq_+ K_+^*(q, q_+; t)_{\text{IVR}} \psi^*(q_+) \right] \left[\int dq_- K_-(q, q_-; t)_{\text{IVR}} \psi(q_-) \right]. \quad (6.13)$$

Inserindo a Eq. (C.7) temos que

$$L_{\text{IVR}}(t) = \int \frac{dx_-^o dx_+^o dp}{(2\pi \hbar)^L} \left| \det \frac{\partial q_-^t}{\partial p_-^o} \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial q_+^t}{\partial p_+^o} \right|^{\frac{1}{2}} e^{i(S_-^t - S_+^t - p \eta_q^t)/\hbar} \langle \psi | q_+^o \rangle \langle q_-^o | \psi \rangle, \quad (6.14)$$

onde $\eta_q^t = q_+^t - q_-^t$, e usamos a relação

$$\langle q_+^o | q_-^o \rangle = \delta(\eta_q^t) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^L} \int dp e^{ip \eta_q^t/\hbar}. \quad (6.15)$$

Agora, realizamos uma mudança de variáveis

$$\bar{x} = \frac{x_+ + x_-}{2}, \quad (6.16a)$$

$$\eta = x_+ - x_-. \quad (6.16b)$$

Destacamos que as Eqs. (6.16) definem dois vetores no espaço de fase, explicitamente $\eta = (\eta_p, \eta_q)$ e $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{p}, \bar{q})$. Dado que o Jacobiano desta transformação é igual a 1, temos que

$$L_{\text{IVR}}(t) = \int \frac{d\bar{x}^o d\eta^o}{(2\pi\hbar)^L} \left| \det \frac{\partial q_-^t}{\partial p_-^o} \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial q_+^t}{\partial p_+^o} \right|^{\frac{1}{2}} \psi^*(q_+^o) \psi(q_-^o) \delta(\eta_q^t) e^{i(S_-^t - S_+^t)/\hbar}. \quad (6.17)$$

Como queremos um aproximação semiclássica, buscamos as contribuições dominantes desta integral quando \hbar tende a zero. Avaliando a variação da diferença de ações $S_+^t - S_-^t$ em termos das variáveis \bar{x} e η , encontramos as condições de fase estacionária

$$\eta_q^o = \eta_p^o = \eta_p^t = 0. \quad (6.18)$$

Note também que a função δ de Dirac na Eq. (6.17) restringe o valor de η_q^t a zero. Estas condições estacionárias são trivialmente satisfeitas se as órbitas x_+^τ e x_-^τ forem as mesmas para qualquer $0 \leq \tau \leq t$. No entanto, se o comportamento clássico for caótico, mesmo que essas duas órbitas comecem na mesma condição inicial, elas vão se separar exponencialmente, pois elas evoluem sob a ação de dois Hamiltonianos ligeiramente diferentes. Para contornar com esta dificuldade, o argumento original de Van íček [Van04] usa o teorema de sobreamento da mecânica clássica [Gre90]. Brevemente, o teorema afirma que, para uma dada trajetória gerada por um Hamiltoniano clássico H , existe uma outra trajetória gerada pelo Hamiltoniano perturbado, $H + \delta H$, que irá acompanhar de perto (ou fazendo *sombra*) a órbita não perturbada. Além disso, o teorema também garante que a condição inicial para a *órbita de sombra* é exponencialmente próxima da condição inicial da órbita não perturbada. Assim, em princípio, este teorema garante a existência dos pontos estacionárias do integrando (6.17), de modo que a diferença de fase, $S_-^t - S_+^t$ ao longo destas órbitas é aproximadamente

$$S_-^t - S_+^t \simeq \Delta S^t(\bar{x}^o) - \bar{p}^t \eta_q^t + \bar{p}^o \eta_q^o, \quad (6.19)$$

onde

$$\Delta S^t(\bar{x}^o) = - \int_0^t \delta H(x^\tau, \tau) d\tau. \quad (6.20)$$

Aqui ΔS^t é a fase ganha pela perturbação δH ao longo da trajetória não perturbada x^t ; os dois últimos termos na Eq. (6.19) aparecem devido à pequena diferença das trajetórias no tempo t e no tempo 0. Um desenho esquemático desta diferença de fase é mostrado na Fig. 6.3. Neste ponto, o produto de Jacobianos é aproximado como

$$\left| \det \frac{\partial q_-^t}{\partial p_-^o} \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial q_+^t}{\partial p_+^o} \right|^{\frac{1}{2}} \approx \left| \det \frac{\partial(-\eta^t)}{\partial(-\eta_p^o)} \right|^{\frac{1}{2}} \left| \det \frac{\partial \eta_q^t}{\partial \eta_p^o} \right|^{\frac{1}{2}} = \left| \det \frac{\partial \eta_q^t}{\partial p_+^o} \right| (x^o) \quad (6.21)$$

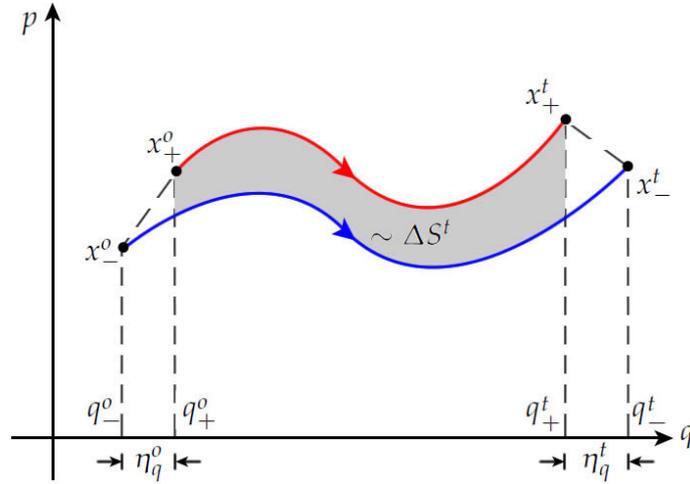


Figura 6.3: **Esboço da aproximação na fase da DR.** A fase de $S_-^t - S_+^t$ é dada pela área sombreada ΔS^t mais as áreas dos dois trapézios de linhas tracejadas. ΔS^t é aproximada pela perturbação ao longo do caminho não perturbado de acordo com a Eq. (6.20).

e depois de fazer a mudança de variáveis $\eta_p^o \rightarrow \eta_q^o$ na Eq. (6.17). Então

$$\begin{aligned} L_{\text{IVR}}(t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\bar{x}^o d\eta_q^o d\eta_q^t \psi^*(q_+^o) \psi(q_-^o) \delta(\eta_q^t) e^{i(S_-^t - S_+^t)/\hbar} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\bar{x}^o d\eta_q^o \psi^*(q_+^o) \psi(q_-^o) e^{i(S_-^t - S_+^t)/\hbar} \Big|_{\eta^t=0}, \end{aligned} \quad (6.22)$$

onde na última linha o integral sobre η_q^t foi feita. Assim, inserindo a fase (6.19) na Eq. (6.17) e substituindo $q_{\pm}^0 = \bar{q}^o \pm \eta_q^o$, obtém-se

$$L_{\text{DR}}(t) = \int \frac{dx^o}{(2\pi\hbar)^L} \left[\int d\eta_q^o \psi^* \left(\bar{q}^o + \frac{\eta_q^o}{2} \right) \psi^* \left(\bar{q}^o - \frac{\eta_q^o}{2} \right) e^{i\bar{p}^o \eta_q^o/\hbar} \right] e^{i\Delta S^t/\hbar}. \quad (6.23)$$

Aqui, o subíndice DR indica que estamos usando (6.19) para a aproximar a fase. Aqui reconhecemos a função de Wigner no termo dentro dos colchetes na Eq. (6.23). Finalmente, a DR para o LE é

$$L_{\text{DR}}(t) = \int dx^o W(x^o) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \delta H(\mathbf{x}(\tau; x^o)) d\tau \right). \quad (6.24)$$

Note que aqui trocamos a notação das órbitas de x^t para $\mathbf{x}(t; x^o)$ para assim explicitar a condição inicial x^o . Portanto, esta fórmula avalia o LE como a média da função Wigner sobre as fases devido a diferenças de ação. Ressaltamos que esta dedução não é formal, especialmente no que diz respeito à aplicabilidade do teorema de sombreamento da mecânica clássica. Da mesma forma, a aproximação para os Jacobianos, (6.21) não é muito rigorosa. No entanto, esta fórmula inclui os regimes de decaimento de Lyapunov e da regra de ouro de Fermi [Van04, Gor06]. Ela também funciona para estados mistos e, em particular, é bastante apropriada para a avaliação numérica de fidelidade

para sistemas com muitos graus de liberdade, proporcionando uma expressão eficiente em comparação com simulações clássicas e quânticas [Li09, Weh11, Mol11]. Ressaltamos que em sistemas com alta dimensionalidade, os cálculos quântico exatos são extremamente difíceis (ou mesmo impossíveis).

6.3 Dedução formal da IVR

Primeiro, observemos que a Eq. (6.5) pode ser escrita como

$$L(t) = \text{tr } \hat{\rho} \hat{I}_L(t) = \int dx W(x) I_L(x, t), \quad (6.25)$$

onde $W(x)$ é a função de Wigner do estado $\hat{\rho}$ e $I_L(x, t)$ é a representação de Weyl do operador eco. Observe que na Eq. (6.5) $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Denotando o símbolo de Weyl de $e^{-it\hat{H}_{\pm}/\hbar}$ por $U_{\pm}^t(x)$, o símbolo do eco é dado pela composição [Ozo98]:

$$I_L(x, t) = \int \frac{dx_+ dx_-}{(\pi\hbar)^{2L}} U_-^t(x_-) [U_+^t(x_+)]^* e^{\frac{i}{\hbar} \Delta_3(x, x_+, x_-)}, \quad (6.26)$$

onde $\Delta_3(x, x_+, x_-) = -2(x_+ - x) \wedge (x_- - x)$ é a área simplética do triângulo com pontos médios x , x_+ e x_- . A expressão semiclássica para o $U_{\pm}^t(x)$, conhecida como *propagador de Weyl*, é [Ozo98, Ber89]

$$U_{\pm}^t(x_{\pm})_{\text{sc}} = 2^L \mathcal{A}_{\pm} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\pm}^t(x_{\pm}) \right], \quad (6.27)$$

onde S_{\pm}^t são as ações de centro, associadas à evolução gerada pelos Hamiltonianos clássicos $H_{\pm}(x)$:

$$S_{\pm}^t(x_{\pm}) = \oint p_{\pm} \cdot dq_{\pm} - \int_0^t H_{\pm}(\mathbf{x}_{\pm}(\tau|x_{\pm})) d\tau. \quad (6.28)$$

Aqui $\mathbf{x}_{\pm}(\tau|x_{\pm})$ são as trajetórias clássicas para os Hamiltonianos H_{\pm} , que estão, respectivamente, centradas no par de pontos de x_{\pm} . Em geral, um dado ponto no espaço de fase pode ser o centro de várias trajetórias; assim a Eq. (6.27) é formalmente uma soma sobre todas as possíveis trajetórias centradas em $\mathbf{x}_{\pm}(\tau|x_{\pm})$, tal como ilustrado na Fig. 6.4. As áreas definidas pela primeira integral são fechadas pelo par de cordas que se juntam $\mathbf{x}_{\pm}(0|x_{\pm})$ a $\mathbf{x}_{\pm}(t|x_{\pm})$, como mostrado na Fig. 6.4. As amplitudes em (6.27) são [Ber89, Ozo98]

$$\mathcal{A}_{\pm} = |\det [I + \mathcal{M}_{\pm}]|^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2^L} \left| \det \left[I + \frac{J}{2} \frac{\partial^2 S_{\pm}^t}{\partial x_{\pm}^2} \right] \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (6.29)$$

onde I é a matriz identidade de dimensão $2L \times 2L$ e \mathcal{M}_{\pm} são as matrizes para as transformações lineares,

$$\mathbf{x}_{\pm}(0|x_{\pm}) = x_{\pm} + J \frac{\partial S_{\pm}^t}{\partial x_{\pm}} \rightarrow \mathbf{x}_{\pm}(t|x_{\pm}) = x_{\pm} - J \frac{\partial S_{\pm}^t}{\partial x_{\pm}}, \quad (6.30)$$

de modo que aproximadamente

$$\delta \mathbf{x}_{\pm}(t|x_{\pm}) = \mathcal{M}_{\pm} \delta \mathbf{x}_{\pm}(0|x_{\pm}). \quad (6.31)$$

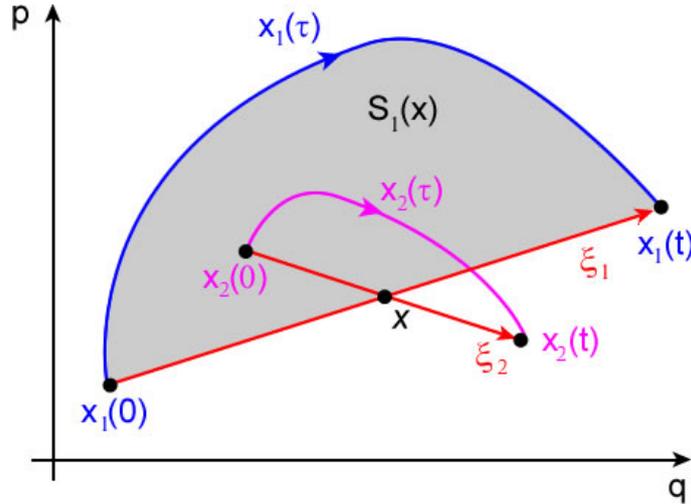


Figura 6.4: **Interpretação geométrica da fase do propagador de Weyl.** Aqui é mostrado que duas órbitas diferentes podem contribuir para o propagador semiclássico $U(x)$ porque x é o ponto médio entre os pontos iniciais e finais das duas trajetórias.

Esse tipo de matriz é conhecida como *matriz de monodromia*. Inserindo (6.27) na Eq. (6.26), obtemos

$$I_L(x, t)_{SC} = \left(\frac{2}{\pi \hbar} \right)^{2L} \int dx_+ dx_- \mathcal{A}_+ \mathcal{A}_- e^{-\frac{i}{\hbar} \Sigma(x_+, x_-, x)}, \quad (6.32)$$

onde $\Sigma = S_+^t(x_+) - S_-^t(x_-) - \Delta_3(x, x_+, x_-)$. Esta fórmula semiclássica para o LE é difícil de avaliar, pois é necessário encontrar todas as trajetórias centradas em cada par de argumentos x_{\pm} , mesmo para sistemas simples.

O passo chave na nossa formulação consiste em reinterpretar a fórmula acima para o LE, tomando uma única transformação clássica, que parte de $\mathbf{x}_-(0)$ e chega a $\mathbf{x}_+(0)$ ao longo da trajetória $\mathbf{x}_-(\tau)$ e que volta por $\mathbf{x}_+(-t)$, isto é, o caminho vermelho na Fig. 6.5. Portanto \hat{I}_L é equivalente a um operador de evolução associado com esta transformação e o seu símbolo de Weyl deve ter a mesma forma semiclássica da Eq. (6.27), ou seja,

$$I_L(x, t) = 2^L \mathcal{A}_L \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_L(x)\right). \quad (6.33)$$

Aqui $S_L(x)$ é a ação de centros para a trajetória vermelha na Fig. 6.5, avaliada de acordo com (6.28), enquanto que

$$\mathcal{A}_L = |\det [\mathbf{I} + \mathcal{M}_L]|^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2^L} \left| \det \left[\mathbf{I} + \frac{J}{2} \frac{\partial^2 S_L}{\partial x^2} \right] \right|^{\frac{1}{2}} \quad (6.34)$$

é a amplitude para a transformação completa $\mathbf{x}_-(0) \rightarrow \mathbf{x}_+(0)$ a qual é gerada por S_L .

Este propagador de Weyl é único, de forma que a sua aproximação semiclássica depende de uma única trajetória clássica, se representa um operador unitário em uma

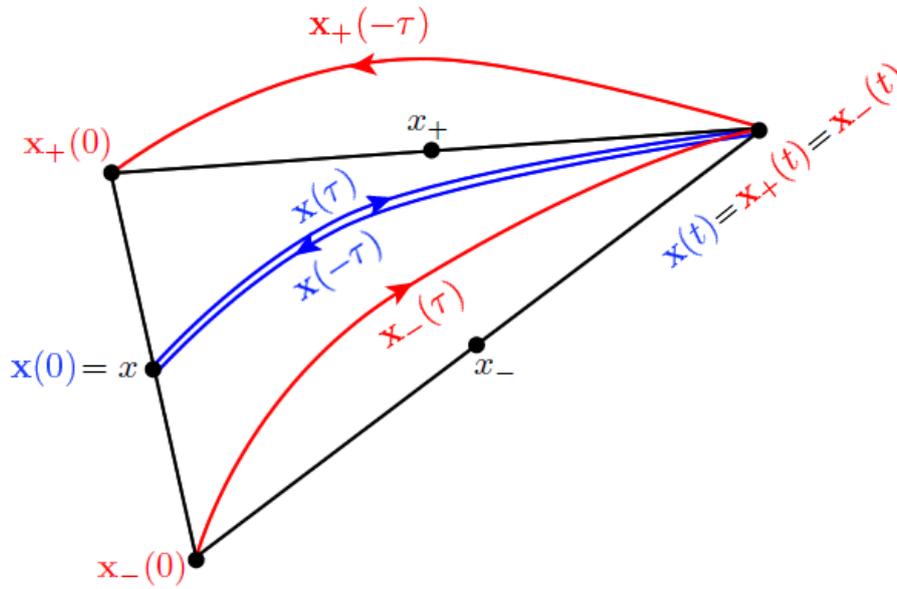


Figura 6.5: **Interpretação geométrica do símbolo de eco semiclássico.** O caminho azul (de ida e volta) é o a órbita sem perturbar. O caminho vermelho é a trajetória perturbada que parte de $\mathbf{x}_-(0)$ e chega em $\mathbf{x}_-(t)$, a qual corresponde ao eco clássico. O triângulo preto é $\Delta_3(x, x_+, x_-)$.

vizinhança suficientemente pequena do operador identidade [Ozo98]. Isso justifica a forma simples e sem interferências de (6.33), ou seja, $I_L(x, t)$ não é uma soma de termos. Em contraste, isto não precisa ser verdade para os propagadores individuais (6.27), que estritamente são uma superposição de termos oscilatórios [Jal01]. Então, a simplificação é que uma única trajetória centrada em x_- deverá corresponder com uma única trajetória centrada em x_+ , como é retratado na Fig. 6.5.

Finalmente, podemos considerar a trajetória vermelha na Fig. 6.5 como a produzida por um par de perturbações de uma trajetória única, que é impulsionada pela Hamiltoniano médio

$$\bar{H} = \frac{H_+ + H_-}{2}. \quad (6.35)$$

Isto é, tomar a trajetória $\mathbf{x}(\tau)$ durante $0 < \tau < t$ e voltar por ela mesma durante $-t < \tau < 0$. Este caminho é a linha dupla azul na Fig. 6.5 de modo que os ramos da trajetória que contribui ao LE é a resultante das perturbações $\pm\delta H/2$ sobre o \bar{H} . Então, já que a trajetória não perturbada tem ação nula, $\bar{S}_L(x) = 0$, temos que a aproximação para $S_L(x)$ à primeira ordem na perturbação (ver Apêndice D) para a dita trajetória é

$$\delta S_L(x) = \int_0^t \delta H(\mathbf{x}(\tau; x)) d\tau. \quad (6.36)$$

Então, a fórmula semiclássica para o símbolo do eco é

$$I_L(x, t) = \left| \det \left[\mathbf{I} + \frac{J}{2} \frac{\partial^2 \delta S_L}{\partial x^2} \right] \right|^{\frac{1}{2}} e^{-i\delta S_L(x)/\hbar}, \quad (6.37)$$

e, conseqüentemente, obtemos o LE semiclássico como [Zam11]

$$L(t)_{\text{sc}} = \int dx \left| \det \left[\mathbf{I} + \frac{J}{2} \frac{\partial^2 \delta S_L}{\partial x^2} \right] \right|^{\frac{1}{2}} W(x) e^{-i\delta S_L(x)/\hbar}. \quad (6.38)$$

Note que esta integral é realizada ao longo de todas as possíveis condições iniciais x para as órbitas $\mathbf{x}(\tau)$ do Hamiltoniano médio \bar{H} , evitando-se assim o problema de *root-search*. Assim, obtém-se uma IVR para o LE sem realizar a mudança de variáveis para as condições iniciais, como é explicado no Apêndice C. Dado que a amplitude \mathcal{A}_L depende da função escalar $\delta S_L(x)$, a qual não requer a avaliação explícita da matriz de monodromia, o que é computacionalmente tedioso para sistemas com alta dimensionalidade [Tao09]. Observamos que, embora a perturbação seja tomada ao longo da órbita central para \bar{H} , $\delta S_L(x)$ gera uma transformação canônica, que é próxima da identidade. Para perturbações suficientemente pequenas o determinante na Eq. (6.38) tende a 2-L, de modo que recuperamos a DR (6.24) para órbitas geradas pelo Hamiltoniano médio.

Para estimar o erro na ação da DR, dado que ela não usa o Hamiltoniano médio, note-se que a corda, $\xi(x) \equiv \mathbf{x}_+(0) - \mathbf{x}_-(0)$ (ver Fig. 6.5), é aproximada por

$$\xi(x) = J \frac{\partial \delta S_L}{\partial x} = - \int_0^t \delta \dot{\mathbf{x}}(\tau; x) d\tau, \quad (6.39)$$

onde $\delta \dot{\mathbf{x}}$ é a velocidade no espaço de fase para o Hamiltoniano $\delta H(\mathbf{x})$. O erro na ação a partir da avaliação de (6.36) ao longo de $\mathbf{x}_-(\tau)$, em vez de $\mathbf{x}(\tau)$, é aproximadamente

$$\delta S_L(x + \xi/2) - \delta S_L(x) = -\frac{1}{8} \xi \left[\int_0^t \frac{\partial^2 \delta H(\mathbf{x}(\tau; x))}{\partial x^2} d\tau \right] \xi, \quad (6.40)$$

o que significa um erro até termos de terceira ordem nas componentes de $\xi(x)$.

6.4 Casos quadráticos

A partir daqui, vamos estudar em detalhe a validade da nossa fórmula, comparando-a com o método da fase estacionária (SP), descrita no capítulo 5, aplicada à Eq. (6.25). Vamos nos restringir a Hamiltonianos quadráticos, cuja aproximação semiclássica é exata e gera a versão quântica das transformações canônicas lineares (clássicas) [Haa91]. Eles têm um papel de crucial importância para os métodos semiclássicos, de modo que uma alta precisão de (6.38) permite a aplicação de nossa formulação para sistemas mais complexos. Lembrando que um Hamiltoniano quadrático genérico é dado por

$$H(x) = \frac{1}{2} x \mathcal{H} x + a \wedge x, \quad (2.16)$$

onde $\mathcal{H} = \partial^2 H / \partial x^2$ é a matriz Hessiana e a é um vetor do espaço de fase. Sua função geratriz de centros para um tempo fixo t é dada por

$$S^t(x) = x B^t x + \alpha^t \wedge x, \quad (2.17)$$

onde

$$JB^t = [I - e^{J\mathcal{H}t}][I + e^{J\mathcal{H}t}]^{-1} \quad \text{e} \quad \alpha^t = 2JB^t(J\mathcal{H})^{-1}a. \quad (2.18)$$

No caso especial quando $\mathcal{H} = 0$, temos que $S^t(x) = -ta \wedge x$. Inserindo os propagadores quadráticos semiclássicos,

$$U_{\pm}(x) = 2^L \mathcal{A}_{\pm} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\pm}(x)\right) = 2^L \mathcal{A}_{\pm} \exp\left(\frac{i}{\hbar} [xB_{\pm}^t x + \alpha_{\pm}^t \wedge x]\right), \quad (6.41)$$

na fórmula (6.26), ela permanece exata.

Agora, vamos definir as variáveis \bar{x} e η , de acordo com a Eq. (6.16) de tal maneira que $x_{\pm} = \bar{x} \mp \eta$, como mostrado na Fig. 6.6. Também definimos os parâmetros médios \bar{B} e $\bar{\alpha}$ e

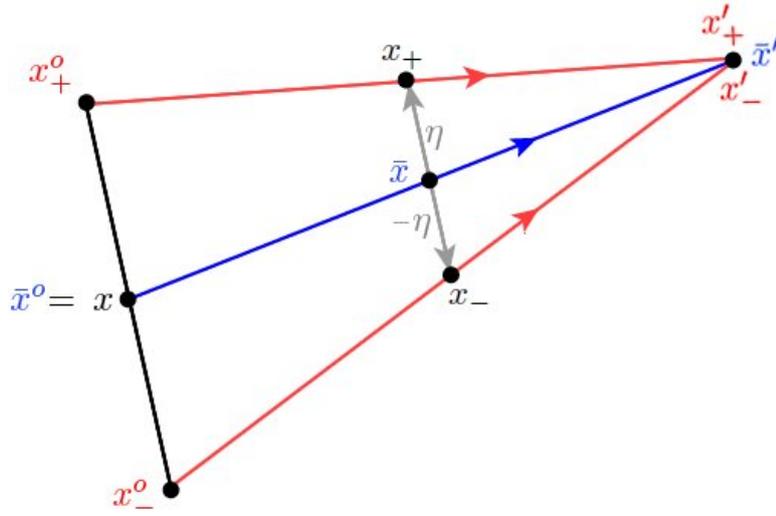


Figura 6.6: **Avaliação de LE por SP para o caso quadrático.** As flechas vermelhas correspondem aos mapas $x_{\pm}^o \rightarrow x'_{\pm}$, gerados por $S_{\pm}(x_{\pm})$, respectivamente, e a corda azul corresponde ao mapa médio $\bar{x} = x^o \rightarrow \bar{x}'$ gerado por $\bar{S}(\bar{x})$. Estes mapas têm o mesmo ponto final $\bar{x}' = x'_{+} = x'_{-}$. O ponto médio entre x_{+} e x_{-} é \bar{x} e 2η é a corda que os une.

suas perturbações:

$$\delta B = B_{+} - B_{-} \quad \text{e} \quad \delta \alpha = \alpha_{+} - \alpha_{-}. \quad (6.42)$$

Obtém-se então as funções geratrizes como

$$S_{\pm}(x) = x \left[\bar{B} \pm \frac{\delta B}{2} \right] x + \left(\bar{\alpha} \pm \frac{\delta \alpha}{2} \right) \wedge x, \quad (6.43)$$

e a integral $I_L(x, t)$ para Hamiltonianos quadráticos toma a forma exata

$$I_L(x, t) = 2^L \int d\bar{x} d\eta \mathcal{A}_{+} \mathcal{A}_{-} e^{-\frac{i}{\hbar} \Phi(\bar{x}, \eta)} \quad (6.44)$$

onde

$$\Phi = \bar{x} \delta B \bar{x} + \eta \delta B \eta + 4\bar{x} \bar{B} \eta + \delta \alpha \wedge \bar{x} + 2\bar{\alpha} \wedge \eta - 4(\bar{x} - x) \wedge \eta. \quad (6.45)$$

O ponto estacionário da integral em relação a \bar{x} , fornece a relação:

$$\eta = -\frac{[J\bar{B} - \mathbb{I}]^{-1}}{2} \left(J\delta B\bar{x} - \frac{\delta\alpha}{2} \right) \sim \mathcal{O}(\epsilon), \quad (6.46)$$

onde ϵ é o tamanho da perturbação $\delta\alpha$ e/ou δB . Assim, para um ϵ pequeno podemos desprezar o termo de terceira ordem $\eta\delta B\eta \sim \mathcal{O}(\epsilon^3)$ na Eq. (6.44). Esta é a condição para a perturbação seja *suficientemente pequena*. Lembramos que esta aproximação não afeta a condição (6.46). A segunda condição de fase estacionária é então

$$x \simeq [\mathbb{I} + J\bar{B}]\bar{x} - \frac{\bar{\alpha}}{2} \text{ ou } \bar{x} \simeq [\mathbb{I} + J\bar{B}]^{-1} \left(x + \frac{\bar{\alpha}}{2} \right). \quad (6.47)$$

Assim, nesta aproximação x independe de η e pode ser interpretado como o ponto inicial da transformação média $\bar{S}(\bar{x}) = \bar{x}\bar{B}\bar{x} + \bar{\alpha} \wedge \bar{x}$, como na nossa derivação de DR generalizada (ver Fig. 6.6). Combinando as Eqs.(6.47) e (6.46) temos que

$$4\bar{x}\bar{B}\eta + 2\bar{\alpha} \wedge \eta - 4(\bar{x} - x) \wedge \eta = 0, \quad (6.48)$$

portanto, a aproximação de fase estacionária para o símbolo do eco, Eq. (6.26), com Hamiltonianos quadráticos é

$$I_L^q(x, t) = 2^L \mathcal{A}_L \exp \left(-\frac{i}{\hbar} S^q(\bar{x}, \eta) \right) \quad (6.49)$$

onde

$$S^q(\bar{x}, \eta) = \bar{x}\delta B\bar{x} + \delta\alpha \wedge \bar{x}, \quad (6.50)$$

e $\bar{x}(x)$ é dado por (6.47). No que diz respeito à amplitude na Eq. (6.49), as matrizes de monodromia são

$$\mathcal{M}_{\pm} = e^{J\mathcal{H}_{\pm}t} \quad (6.51)$$

e estão relacionadas com as matrizes de B_{\pm} por uma parametrização de Cayley (ver Eq. (2.18a)). Então

$$\mathcal{A}_L = |\det[\mathbb{I} + \mathcal{M}_L]|^{-\frac{1}{2}} \quad \text{onde} \quad \mathcal{M}_L = \mathcal{M}_+ \mathcal{M}_-. \quad (6.52)$$

Observemos que no caso quadrático geral a matriz de monodromia \mathcal{M}_L é independente de x mas $\mathcal{M}_L \neq \mathbb{I}$.

Sem negligenciar o termo $\eta\delta B\eta$ na Eq. (6.45), a aproximação de fase estacionária fornece a Eq. (6.46) e

$$\bar{x} = \left[[J\bar{B} + \mathbb{I}] - J\delta B \frac{[J\bar{B} - \mathbb{I}]^{-1}}{4} J\delta B \right]^{-1} \left(x + \frac{\bar{\alpha}}{2} - J\delta B \frac{[J\bar{B} - \mathbb{I}]^{-1}}{4} \frac{\delta\alpha}{2} \right) \quad (6.53)$$

$$\simeq [J\bar{B} + \mathbb{I}]^{-1} \left(x + \frac{\bar{\alpha}}{2} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (6.54)$$

Usando a primeira linha da equação anterior, podemos mostrar que

$$4\bar{x}\bar{B}\eta + 2\bar{\alpha} - 4(\bar{x} - x) \wedge \eta = -2\eta\delta B\eta, \quad (6.55)$$

e assim, a fase exata (6.45) no ponto estacionário é

$$\Phi(\bar{x}, \eta) = \bar{x} \delta B \bar{x} + \delta \alpha \wedge \bar{x} - \eta \delta B \eta. \quad (6.56)$$

Assim, o erro na aproximação (6.50) é determinado por $-\eta \delta B \eta$ e a interpretação geométrica de x como o ponto inicial da transformação média \bar{S} é válida até a segunda ordem na intensidade da perturbação ϵ .

6.4.1 Perturbação linear

A aproximação para Hamiltonianos quadráticos, Eq. (6.49), tem a mesma forma e amplitude que a Eq. (6.38), mas as fases podem ser diferentes. No entanto, podemos mostrar que eles são iguais para o caso simples em que a perturbação é uma função linear $\delta H = \delta a \wedge x$.

As trajetórias genéricas de um Hamiltoniano quadrático (2.16) são

$$\mathbf{x}(\tau) = e^{J\mathcal{H}\tau} \mathbf{x}(0) + [\mathbf{I} - e^{J\mathcal{H}\tau}] [J\mathcal{H}]^{-1} a, \quad (6.57)$$

de modo que

$$\delta S_L(x) = \delta a \wedge [J\mathcal{H}]^{-1} ([\mathbf{I} - e^{J\mathcal{H}t}](x - [J\mathcal{H}]^{-1}a) - ta). \quad (6.58)$$

Por outro lado,

$$\bar{x} = \frac{\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0)}{2} = [\mathbf{I} + JB]^{-1} (x + JB[J\mathcal{H}]^{-1}a) \quad (6.59)$$

e, portanto,

$$S^q(x) = \delta a \wedge [J\mathcal{H}]^{-1} ([\mathbf{I} - e^{J\mathcal{H}t}](x - [J\mathcal{H}]^{-1}a) + 2JB[J\mathcal{H}]^{-1}a). \quad (6.60)$$

Para tempos pequenos $B \rightarrow -t\mathcal{H}/2 + \mathcal{O}(t^3)$, e assim recuperamos (6.58). Além disso, o caso simples com um Hamiltoniano não perturbado é linear, então $\mathcal{H} = 0$, (6.58) é sempre exato. Explicitamente,

$$\delta S_L(x) = -t\delta a \wedge \left(x - \frac{ta}{2} \right) = S^q(x), \quad (6.61)$$

porque

$$\bar{\alpha} = -ta, \quad \delta \alpha = -t\delta a \quad \text{e} \quad \bar{x} = x - \frac{ta}{2}. \quad (6.62)$$

Finalmente, observamos que $\delta S_L(x)$ é uma função linear, portanto não há nenhuma correção para a amplitude da versão original da DR. Observe também que no caso anterior, $\eta \delta B \eta = 0$, de modo que a simplificação de (6.44) é exata.

6.4.2 ‘Comprimindo’ dois osciladores harmônicos

Outro exemplo simples é o oscilador harmônico simétrico,

$$\hat{H} = \frac{\omega}{2} (\hat{p}^2 + \hat{q}^2), \quad (6.63)$$

para o qual a matriz Hessiana é de $\mathcal{H} = \omega\mathbf{I}$. Note que estamos tomando as mesmas unidades para a posição e o momento. Perturbaremos o sistema por meio de duas *compressões*: Uma contração na posição e uma expansão no momento e vice-versa, obtendo-se as duas matrizes Hessianas

$$\mathcal{H}_{\pm} = \omega\mathbf{I} \pm \epsilon\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{H} \pm \frac{\delta\mathcal{H}}{2}. \quad (6.64)$$

Assim, a fase em (6.38) é dada por

$$\delta S_L(x) = \frac{\epsilon}{2}(q^2 - p^2) \sin(2\omega t) + 2\epsilon p q \sin^2(\omega t). \quad (6.65)$$

O par de matrizes simétricas correspondentes a estes Hamiltonianos H_{\pm} , são

$$\omega B_{\pm} = -\tan\left(\frac{\omega t}{2}\right)\mathcal{H}_{\pm}. \quad (6.66)$$

Assim

$$\bar{B} = -\tan\left(\frac{\omega t}{2}\right)\mathbf{I} \quad \text{e} \quad \delta B = -\tan\left(\frac{\omega t}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.67)$$

A fase obtida pela aproximação de fase estacionária é

$$S^q(x) = x ([\mathbf{I} + J\bar{B}]^{-1})^T \delta B [\mathbf{I} + J\bar{B}]^{-1} x, \quad (6.68)$$

que é igual a (6.65).

Note-se que, neste caso, o Hamiltoniano médio tem um espectro discreto, de modo que a análise semiclássica dos diferentes regimes de decaimento do LE [Gor06, Cer03, Wis10] também pode ser realizada. No entanto, o intervalo para esta análise deve ser muito menor do que o período, $T = 2\pi/\omega$.

O último exemplo que consideramos é o oscilador harmônico invertido, que é integrável (não caótico), mas tem uma dinâmica hiperbólica. A matriz Hessiana é

$$\mathcal{H} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.69)$$

e a perturbação $\delta\mathcal{H} = 2\epsilon\omega\mathbf{I}$. Assim, estamos lidando com duas matrizes Hessianas:

$$\mathcal{H}_{\pm} = \mathcal{H} \pm \epsilon\omega\mathbf{I},$$

de maneira que obtemos

$$\delta S_L(x) = -\frac{\epsilon}{2}(q^2 + p^2) \sinh(2\omega t) - 2\epsilon p q \sinh^2(\omega t). \quad (6.70)$$

Por outro lado,

$$\omega B_{\pm} = -\tanh\left(\frac{\omega t}{2}\right)\mathcal{H}_{\pm}, \quad (6.71)$$

então

$$\delta B = -2\epsilon \tanh\left(\frac{\omega t}{2}\right) I \quad \text{e} \quad \omega \bar{B} = -\tanh\left(\frac{\omega t}{2}\right) \mathcal{H}. \quad (6.72)$$

$S^q(x)$ é, portanto, igual a (6.70). Assim, a dinâmica quadrática gerada pelo oscilador harmônico e oscilador invertido, confirma a validade de nossa IVR.

O determinante associado à forma quadrática (6.70) fornece uma estimativa para a contribuição dominante para o LE, quando o estado inicial é um estado coerente. Escrevemos a forma quadrática (6.70) em notação matricial como

$$\delta S_L(x) = -\frac{\epsilon}{2} x^T \mathfrak{S} x, \quad \text{onde} \quad \mathfrak{S} = \begin{pmatrix} \sinh(2\omega t) & 2\sinh^2(\omega t) \\ 2\sinh^2(\omega t) & \sinh(2\omega t) \end{pmatrix}. \quad (6.73)$$

Observamos que a função de Wigner de um estado coerente é uma função Gaussiana, Eq. (2.59). Em seguida, efetuando a integral (6.38) obtemos uma amplitude do LE que é proporcional a

$$|\det \mathfrak{S}|^{-\frac{1}{2}} = |\sinh^2(2\omega t) - 4\sinh^4(\omega t)|^{-\frac{1}{2}}. \quad (6.74)$$

Isto que dizer que independente da perturbação, o LE decai como $\sim e^{-\omega t}$. Este “regime de Lyapunov” é diferente do encontrado na Ref. [Jal01], onde o mesmo fator regula a intensidade e não a amplitude em (6.25). Devemos ter em conta que o resultado contido em [Jal01] é obtido realizando uma média sobre um conjunto incoerente de pacotes Gaussianos, além de ser válido para dinâmicas caóticas, e não regulares, como no caso do nosso exemplo.

6.5 Discussão

Resumindo, obtivemos uma derivação de uma IVR para o LE, que introduz na fase e na amplitude refinamentos no DR original. Em particular, espera-se que a fórmula (6.38) tenha as mesmas vantagens da Eq. (6.24): A sua versatilidade computacional e que inclua os regimes de decaimento do LE.

Foi essencial ter a evolução para o Hamiltoniano médio \bar{H} , a fim de obter a fase correta nos exemplos acima enunciados. Além disso, nestes casos em que a perturbação afeta uma matriz Hessiana constante, a amplitude tem uma correção de segunda ordem da perturbação que é constante. Destacamos que nossa teoria é baseada no *kernel* de propagação para o LE, de modo a que as médias de estados iniciais devem ser necessárias para reconsiderar os vários cenários do decaimento da fidelidade [Gor06, Cer03, Wis10].

Sem tais médias, a intensidade do eco não necessariamente diminui monotonicamente [Gou11]. Na verdade, um segundo parâmetro na perturbação permite a existência de zeros isolados de sobreposição, tal como no caso simples de translações pequenas no espaço de fase, pois eles podem ser facilmente calculados dentro da teoria semiclássica dos Capítulos 4 e 5. Além disso, os exemplos dados acima mostram que a precisão da aproximação semiclássica para o LE não requer que o movimento seja caótico, enquanto

$\eta\delta B\eta$ for pequeno. Este termo desprezado pode ser avaliado dentro de nossa aproximação para fornecer uma estimativa do erro no $L(t)_{SC}$.

Considerações Finais

“Y si soñamos, fue con realidades”

Juan Cunha

O objetivo principal desta tese foi estudar a função de correlação de estados quânticos no espaço de fase, mesmo para sistemas abertos. Para isto o formalismo no espaço de fase da mecânica quântica foi usado com sucesso. Focou-se em três assuntos: os zeros de correlação no espaço de fase, a forma semiclássica da correlação e a fidelidade quântica. Os resultados obtidos ao longo desta tese mostram como as características dos estados quânticos se manifestam no espaço de fase, além da sua relação com as estruturas sub-Planckianas, que naturalmente surgem a partir das translações no espaço de fase.

Caracterizamos pontos cegos para estados puros em termos das linhas nodais das partes real e imaginária da função de cordas e mostramos a sua extrema sensibilidade à descoerência no limite Markoviano. As linhas nodais da correlação no espaço de fase são propriedade de estados simétricos. Um conjunto de zeros isolados é obtido quando esta simetria é quebrada. Os pontos cegos para uma superposição de estados coerentes são robustos a mudanças nas características estruturais — amplitudes, fases relativas e *compressões*. Demos especial ênfase aos tripletos de estados coerentes, o que revelou as interessantes propriedades geométricas der seus pontos cegos: Eles encontram-se em uma rede hexagonal formada por duas sub-redes mutuamente ortogonais.

Desenvolvemos uma teoria para o primeiro ponto cego perto da origem e demonstrou-se que os pontos cegos aparecem nas escalas sub-Planckianas. Na verdade, essa aproximação, Eq. (4.15), corresponde a uma reinterpretação da relação de Zurek, que relaciona as estruturas grandes e pequenas no espaço de fase, Eq. (3.11). Os pontos cegos aparecem para deslocamentos menores se os números quânticos se tornarem maiores. Enfatizamos que os pontos cegos são um fenômeno não-clássico, pois a distinguibilidade completa entre um par de distribuições clássicas só é possível para separações que são grandes em comparação com as suas larguras. Abordamos o problema de encontrar ortogonalidade completa entre dois estados, em contraste com trabalhos anteriores que es-

tavam preocupados apenas com correlações relativamente pequenas. Os nossos resultados são válidos mesmo para um número arbitrário de graus de liberdade. Note que para estados mistos a função de cordas pode ter zeros, mas eles não são zeros de correlação espaço de fase porque o último não é mais identificado com a intensidade da função da corda.

Ao nível semiclássico as correlações no espaço de fase foram abordadas em termos da função de cordas para funções de onda tipo WKB. A fim de proporcionar uma representação completa, foram analisadas e resolvidas as cústicas da função de cordas semiclássica. O comportamento da correlação no espaço de fase, para estados puros, pode ser resumido como um máximo inicial na origem seguido por um regime oscilatório; aumentando o tamanho do deslocamento um máximo na correlação é alcançado na cústica de cordas longas seguido por uma região de decaimento evanescente. Para estados sem simetria, pontos cegos aparecem no cruzamento entre o máximo na origem e na região oscilatória. Complementarmente, as cústicas da função de Wigner foram estudadas e resolvidas; além disso uma aproximação semiclássica para os momentos estatísticos da distribuição de Wigner foi obtida.

Com respeito as cústicas da função de cordas, os nossos resultados foram obtidos assumindo a convexidade da variedade quantizada que suporta o estado WKB. Neste caso, todas as cordas geométricas ficam no interior da variedade. Esta propriedade global se perde sob perturbações que produzam concavidades na curva clássica. É importante observar que a teoria das catástrofes, apesar de ser muito abrangente, só se refere aos aspectos locais e o mesmo vale para seu correspondente quântico, que lida com catástrofes de difração. Assim, nossos resultados não são afetados de forma alguma se a corda ficar no interior ou no exterior da curva quantizada. Por exemplo, o caso de um toro com forma de *feijão* foi estudada em detalhe na referência [Zam08].

Um dos principais resultados desta tese foi obter uma representação a valores iniciais para a fidelidade. Em trabalhos anteriores [Van04, Van06], foi proposta uma fórmula a valores iniciais, a DR, a qual não possui uma dedução (semiclássica) formal. Pelo contrário nossa fórmula foi deduzida formalmente. Ela também contém a DR como um caso limite, por isso possui as mesmas vantagens: ela deve incluir os regimes de decaimento da fidelidade e deve ter uma eficiência semelhante para cálculos numéricos. Além disso, mostramos que a nossa fórmula é válida mesmo para sistemas com dinâmica regulares, para os quais espera-se que a DR original não seja válida. Estudos numéricos de nossa IVR ficam para um projeto posterior.

Pode-se estabelecer uma relação direta entre a nossa IVR para a fidelidade e a correlação semiclássica no espaço de fase, reinterpretando a aproximação de cordas curtas (5.12). Uma translação no espaço de fase pode ser vista como uma evolução linear gerada pelo Hamiltoniano $H_\alpha = \alpha \wedge x$, isto é, a corda é de $\xi = -t\alpha$. Assim, a função de cordas na Eq.

(5.12) torna-se uma função dependente do tempo:

$$\chi_s(t; \alpha) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-iH_\alpha(\theta, I)t/\hbar}. \quad (5.12)$$

Esta integral é realizada ao longo do toro clássico, parametrizado pelas variáveis de ângulo-ação (θ, I) . Assim a fórmula acima corresponde à DR no caso de uma perturbação linear H_α e para uma função de Wigner inicial aproximada por uma função δ de Dirac sobre toro. Fica como um trabalho posterior estudar a presença de pontos cegos generalizados, ou seja, os zeros para a correlação (6.1) e suas implicações no regimes de decaimento previamente estabelecidos na Refs. [Hel91, Van03a]. Isto forneceria uma explicação mais detalhada sobre o decaimento não-monotônico do eco de Loschmidt, atualmente estabelecido somente para sistemas unidimensionais [Gou11, Van03a].

Na verdade, o decaimento da sobreposição para uma translação é a mais simples instância da perda geral de fidelidade por um par de estados quânticos, $|\Psi(t)\rangle$ e $|\Psi'(t)\rangle$, quando evoluídos sob a ação de Hamiltonianos ligeiramente diferentes. A maioria dos tratamentos anteriores tem sido baseados na evolução unitária de simples estados coerentes iniciais [Jal01, Gor06]. Os pontos cegos são um exemplo, onde adicionar estrutura no estado inicial modula o decaimento da sobreposição média de uma maneira inesperada. Por exemplo, podemos aproximar a evolução geral —para tempos curtos— de um multipletto de estados coerentes através de uma teoria semiclássica localmente quadrática [Hel91], de maneira que o estado continue sendo uma superposição de estados coerentes generalizados. Geralmente, a sobreposição $\langle\psi(t)|\psi'(t)\rangle$ é uma função complexa para qualquer tempo, portanto, espera-se que esses zeros (para uma evolução dependente de dois parâmetros) aconteçam em pontos isolados. Alguma descoerência é necessária para que a fidelidade dos estados estruturados decaia suavemente. A indicação desta afirmação, que provem da nossa análise para Hamiltonianos quadráticos no regime Markoviano, pode ser de certa maneira generalizada usando uma aproximação tipo WKB, que ainda produz evolução das correlações com a forma de uma convolução, embora a janela do *coarsegraining* não seja Gaussiana [Ozo09b].

Fase para cordas cruzadas

*“Todas as generalizações são falsas,
incluindo esta”*

Mark Twain

A fase no integrando para a função de Wingner em (5.19), sendo $S_i = S_+$ e $S_j = S_-$, avaliada no ponto $\mathbf{x} = (p, q)$ é

$$\hbar F(Q; x) = S_+(q + Q/2, I) - S_-(q - Q/2) - pQ. \quad (\text{A.1})$$

Sejam q_0 e q_1 os pontos de retorno sobre a curva fechada, $q_0 < q_1$. Escolhendo o eixo q de maneira que q_0 esteja sobre ele, de acordo com a Fig. A.1, então nos pontos estacionários $Q = \pm \xi_q$ temos que

$$S_+(q + \xi_q/2) = \int_{q_0}^{q + \xi_q/2} p_+(Q) dQ = a_1, \quad (\text{A.2})$$

$$S_-(q - \xi_q/2) = \int_{q_0}^{q_1} p_+(Q) dQ + \int_{q_1}^{q - \xi_q/2} p_-(Q) dQ = a_1 + a_2 + a_3 + [-a_3 + a_4]. \quad (\text{A.3})$$

Assumimos que a corda estacionária ξ é *cruzada*, i.e. os extremos dela pertencem a diferentes ramos da ação. Então, a fase fica

$$\hbar F(\xi_q; x) = a_1 - [a_1 + a_2 + a_4] - p\xi_q = -[a_2 + a_4] - p\xi_q = a - \oint pdq. \quad (\text{A.4})$$

Definindo $A(x)$ como a área entre a corda estacionária e a curva fechada, temos que

$$\hbar F(\xi_q; x) = A(x) - \oint pdq = A(x) - 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.5})$$

A fase no integrando em (5.38), que define a função de cordas para a mesma geometria

$$\hbar F_\chi(Q, \xi) = S_+(Q + \xi_q/2) - S_-(Q - \xi_q/2) - \xi_p Q. \quad (\text{A.6})$$

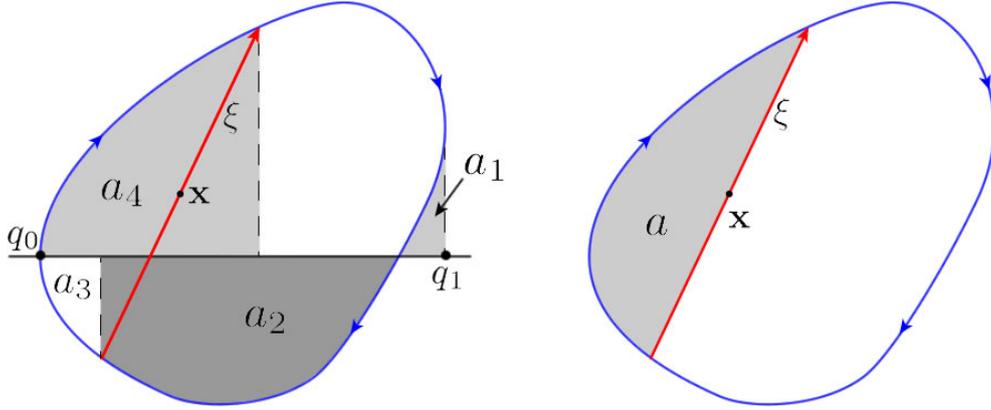


Figura A.1: Diferença de fase entre os pontos estacionários para a função de Wigner, avaliada no ponto $x = (p, q)$, tal que os extremos da sua corda, $\xi = (\xi_p, \xi_q)$, ligam os dois ramos da função WKB. A área sombreada é $a = S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q$,

Os pontos estacionários são coordenadas de posição q , mas sua interpretação geométrica fornece uma coordenada de momento p . Novamente, denotamos por $x = (p, q)$, assim a fase estacionária F_χ depende de x em vez de q . Escolhendo o eixo q da mesma forma que para a fase de Wigner, obtemos

$$\hbar F_\chi(x, \xi) = S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q + p\xi_q - \xi_p q, \quad (\text{A.7})$$

$$= S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q + x \wedge \xi \quad (\text{A.8})$$

Definindo $\mathcal{A}_x(\xi)$ como a área simplética entre a curva e a realização de ξ , centrada em x , como na Figura A.1, temos que

$$\hbar F_\chi(x, \xi) = \mathcal{A}_x(\xi) + x \wedge \xi - 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.9})$$

Para implementar as aproximações assintóticas, podemos ignorar o termo adicional $\oint pdq$, pois ele é cortado naturalmente. Devemos reiterar que a condição de quantização do toro implica que as áreas, $A(x)$ e $\mathcal{A}_x(\xi)$ e suas respectivas áreas complementares, $A'(x)$ e $\mathcal{A}'_x(\xi)$, satisfazem

$$A(x) + A'(x) = \mathcal{A}_x(\xi) + \mathcal{A}'_x(\xi) = \oint pdq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.10})$$

Regime Transicional

“La vida no debería despojar a uno de la niñez sin antes darle un buen puesto en la juventud”

Joaquín Salvador Lavado

A aproximação uniforme (5.43) pode ser simplificada em regiões próximas da cáustica, mesmo sobre a cáustica, onde $\mathcal{A}_{12} \rightarrow 0$. A curva clássica pode ser aproximada localmente por parábolas nas vizinhanças dos extremos das realizações da corda ξ_D . Isso equivale a dizer que as amplitudes podem ser aproximadas por $\Sigma I^{12} = 2\{I^+, I^-\}$ e $\Delta I^{12} \rightarrow 0$. Assim, o termo da derivada da função Airy na Eq. (5.43) cancela-se perto da cáustica.

Para obter uma expressão explícita da função de cordas neste regime transicional, começamos por lembrar que a variável de ação $I(x)$ pode ser interpretada como um Hamiltoniano, de tal forma que a curva clássica é uma trajectória ou a curva de nível $I(x) = \mathcal{I}$. Considerando x como o centro de uma corda η que conecta dois pontos da curva, x_a e x_b , obtemos como uma primeira aproximação que

$$x_b \simeq x_a + \tau \dot{x}_a \quad (\text{B.1})$$

quando x é muito próximo à curva. Então, a ação pode ser expandida como (veja o Apêndice B da Ref. [Ozo98])

$$\mathcal{I} - I(x) \simeq \frac{1}{8} \tau^2 \dot{x} \mathfrak{J}_x \dot{x}, \quad (\text{B.2})$$

onde \mathfrak{J}_x é a matriz Hessiana de I no ponto x . Este Hamiltoniano quadrático gera um movimento linear. Por outro lado, a área entre η e a curva (veja Fig. B.1) é dada por [Ozo98].

$$S_{\mathcal{I}}(x) \simeq \frac{1}{12} \tau^3 \dot{x} \mathfrak{J}_x \dot{x}. \quad (\text{B.3})$$

Assim, observando que os centros das realizações de η são $X^\pm \equiv \pm \xi/2$, a área simplética \mathcal{A}_{12} na fig. 5.7 pode ser obtida como

$$\mathcal{A}_{12}(\xi) = S_{\mathcal{I}}(\xi/2) + S_{\mathcal{I}}(-\xi/2) = \frac{1}{12} \left(\tau_+^3 \dot{X}^+ \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+ + \tau_-^3 \dot{X}^- \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^- \right) \quad (\text{B.4})$$

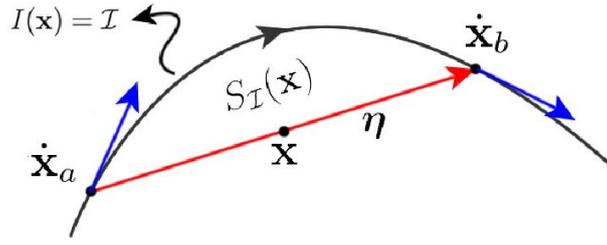


Figura B.1: **Estrutura geométrica da função de cordas transicional.** $S_{\mathcal{I}}$ é a área para um ponto muito próximo à curva de nível $I(x) = \mathcal{I}$. As pontas da corda η evoluem sob ação do fluxo do Hamiltoniano $I(x)$. Como uma primeira aproximação, esta evolução é linear.

onde τ_{\pm} é o ‘tempo de vôo’ entre os extremos de cada realização de η , sob a evolução gerada por $I(x)$.

Lembrando que x_1 e x_2 são os pontos centrais das realizações de ξ , os colchetes de Poisson da ação nas amplitudes em (5.43) serão dados pelos seguintes produtos simpléticos

$$\dot{x}_1^+ \wedge \dot{x}_1^- = \{I_1^+, I_1^-\} \simeq -\{I_2^+, I_2^-\} = \dot{x}_2^- \wedge \dot{x}_2^+. \quad (\text{B.5})$$

Assim, após definir as acelerações de ‘ \ddot{x}_1 e \ddot{x}_2 ’, como [Ozo98, Ber89] temos que

$$\ddot{x}_j = \left(\dot{x}_j \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) \dot{x} = J \mathcal{J}_x \dot{x}, \quad (\text{B.6})$$

tal que $\dot{x}_2^+ \simeq \dot{x}_1^+ + \tau_+ \ddot{x}_1^+$ e $\dot{x}_1^- \simeq \dot{x}_2^- + \tau_- \ddot{x}_2^-$. Então

$$\{I_1^+, I_1^-\} = \frac{1}{2} \left[\tau_+ \dot{X}^- \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+ + \tau_- \dot{X}^+ \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^- \right] \quad (\text{B.7})$$

Os tempos τ_+ e τ_- podem ser avaliados usando (B.2), de maneira que (B.4) fica

$$\frac{3}{4} \mathcal{A}_{12}(\xi) = \sqrt{2} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{X}^+ \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+]^{\frac{1}{2}}} + \frac{[\mathcal{I} - I(-\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{X}^- \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (\text{B.8})$$

Temos agora todos os ingredientes necessários para obter a forma transicional da função de cordas:

$$\begin{aligned} \chi(\xi) = & 2 \frac{e^{i\Sigma\mathcal{A}/2h - i\pi/2} [\tau_+^3 \dot{X}^+ \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+ + \tau_-^3 \dot{X}^- \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^-]^{\frac{1}{6}}}{\pi^{-\frac{2}{3}} h^{-\frac{1}{3}} [\tau_+ \dot{X}^- \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+ + \tau_- \dot{X}^+ \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^-]^{\frac{1}{2}}} \\ & \times \text{Ai} \left(-2^{\frac{1}{3}} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{X}^+ \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+]^{\frac{1}{2}}} + \frac{[\mathcal{I} - I(-\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{X}^- \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{X}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

Se a curva tem uma simetria local de reflexão com relação à origem, as matrizes Hessianas serão iguais, ou seja, $\mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} = \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}}$ e os vetores velocidade $\dot{X}^+ = -\dot{X}^-$. Neste caso,

temos de recordar que a origem depende da corda ξ , pois a origem foi escolhida como o ponto médio entre os centros das realizações de ξ . Assim, a função de cordas transicional se reduz a

$$\chi(\xi) = 2 \frac{e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar+i\pi}}{(2\pi)^{-\frac{2}{3}}\hbar^{-\frac{1}{3}}} [\dot{X}^+ \mathcal{I}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+]^{-\frac{1}{3}} \text{Ai} \left(2 \frac{I(\frac{\xi}{2}) - \mathcal{I}}{[\dot{X}^+ \mathcal{I}_{\frac{\xi}{2}} \dot{X}^+]^{\frac{1}{3}}} \right). \quad (\text{B.10})$$

Para um diâmetro ξ_D , o argumento da função de Airy se cancela, pois $I(\pm\xi_D/2) = \mathcal{I}$, e $\Sigma\mathcal{A}/2$ é a área semiclássica associada a ξ_D . Assim, a aproximação transicional permanece finita, mesmo na cáustica, onde se tem um máximo local na amplitude da ordem de $\sim \hbar^{\frac{1}{3}}$.

Podemos seguir um procedimento semelhante para a função de Wigner. Definindo $\bar{\xi}$, como a média entre as cordas estacionárias ξ_1 e ξ_2 e definindo também o par de pontos no espaço de fase, $y^\pm = x \pm \bar{\xi}/2$, obtemos

$$W(x) = \frac{4 \sin \left[\frac{\Sigma\mathcal{A}}{2\hbar} \right]}{\pi^{\frac{1}{3}} \hbar^{\frac{2}{3}}} \frac{[\tau_+^3 \dot{y}^+ \mathcal{I}_{y^+} \dot{y}^+ - \tau_-^3 \dot{y}^- \mathcal{I}_{y^-} \dot{y}^-]^{\frac{1}{6}}}{[\tau_- \dot{y}^+ \mathcal{I}_{y^-} \dot{y}^- - \tau_+ \dot{y}^- \mathcal{I}_{y^+} \dot{y}^+]^{\frac{1}{2}}} \times \text{Ai} \left(-2^{\frac{1}{3}} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(y^+)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{y}^+ \mathcal{I}_{y^+} \dot{y}^+]^{\frac{1}{2}}} - \frac{[\mathcal{I} - I(y^-)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{y}^- \mathcal{I}_{y^-} \dot{y}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (\text{B.11})$$

Observemos que esta forma transicional escala como $\hbar^{-\frac{2}{3}}$. Ao contrário da função de cordas, no caso particular de que o estado é simétrico com respeito à reflexão, a forma transicional (B.11) é singular na cáustica, pois a cáustica de diâmetros neste caso colapsa para um ponto, onde a função de Wigner tem uma catástrofe de ordem superior.

Representação a valores iniciais

*“Science may set limits to knowledge,
but should not set limits to
imagination”*

Bertrand Russell

Para explicar a idéia básica de uma representação a valores iniciais (IVR) [Mil01], vamos considerar o elemento matricial do operador de evolução temporal

$$K_{n,m}(t) \equiv \langle n | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | m \rangle = \int dq_a dq_b \psi_n^*(q_b) \psi_m(q_b) \langle q_b | e^{-i\hat{H}t\hbar} | q_a \rangle \quad (\text{C.1})$$

que é a amplitude de probabilidade de transição do estado $|N\rangle$ para o estado $|m\rangle$ durante um tempo t . A aproximação semiclássica imediata consiste em substituir o propagador quântico

$$K(q_a, q_b; t) \equiv \langle q_b | e^{-i\hat{H}t\hbar} | q_a \rangle \quad (\text{C.2})$$

pela sua forma semiclássica: o *propagador de van Vleck* [Vle28, Haa91, Gut90]. Esta substituição fornece o propagador em termos da ação $S(q, q_o; t)$ de cada caminho clássico que parte de q_o e que chegam a q . Explicitamente

$$\langle q_b | e^{-i\hat{H}t\hbar} | q_a \rangle_{\text{sc}} = \sum_{q_a \xrightarrow{j} q_b} \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{L/2}} \left| \frac{\partial^2 S_j}{\partial q_a \partial q_b} \right|^{-\frac{1}{2}} e^{iS_j(q_a, q_b; t)/\hbar - \beta_j \pi/2}. \quad (\text{C.3})$$

A soma na expressão acima é realizada sobre todas as possíveis órbitas clássicas geradas pelo fluxo do Hamiltoniano clássico H que começam em (p_a, q_a) e chegam a (p_b, q_b) depois de um tempo t . Note que o valor dos momentos inicial p_a e final p_b não estão restringidos, como mostrado na Fig. C.1. O índice de Maslov β_j aparece para corrigir as possíveis mudanças de ramos da função S ao longo de cada órbita. Como o movimento clássico é determinístico, procurar essas órbitas é equivalente a encontrar o momento inicial p_a de modo que as condições de contorno sejam satisfeitas. Inserindo a Eq. (C.3) no elemento

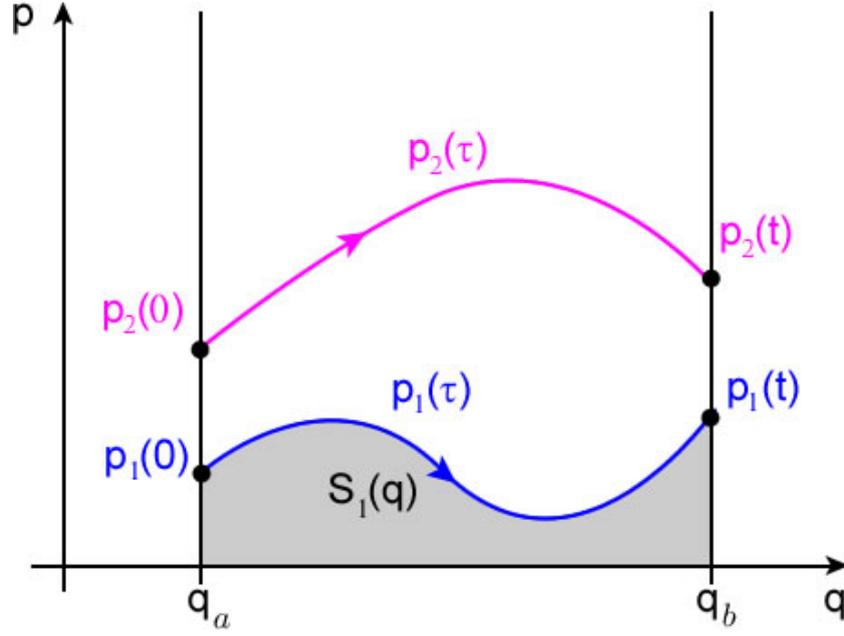


Figura C.1: **Problema de procura de raízes para o propagador de van Vleck.** Contribuem ao propagador semiclássico unicamente as órbitas que partem de q_o e chegam a q_f , sem importar o valor dos momentos iniciais e finais. Nesta figura mostramos duas órbitas. A ação é a área sombreada.

matricial (C.1) temos que

$$K_{n,m}(t)_{\text{SC}} = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{L/2}} \int dq_a dq_b \sum_{\text{roots}} \psi_n^*(q_b) \psi_m(q_a) \left| \frac{\partial^2 S_j}{\partial q_a \partial q_b} \right|^{-\frac{1}{2}} e^{i S_j(q_a, q_b; t) / \hbar - \beta_j \pi / 2}. \quad (\text{C.4})$$

Aqui a soma é indicada para ser feita sobre as “raízes”, deste modo se enfatiza que devemos buscar daquelas órbitas.

O truque de uma IVR está em mudar a integral sobre q por uma integral sobre momento inicial de p_o , isto é

$$\int dq_b \sum_{\text{roots}} \approx \int dp_a \left| \frac{\partial q_b(p_a, q_a)}{\partial p_a} \right|, \quad (\text{C.5})$$

onde o Jacobiano aparece devido à mudança de variáveis na integração. Note que esta aproximação faz sentido porque uma integral sobre p_a é equivalente a uma integração em q_b mais uma soma sobre todas as possíveis raízes (ou órbitas). Então, a IVR para o propagador lê-se como

$$K_{n,m}(t)_{\text{IVR}} = \int \frac{dx_a}{(2\pi i \hbar)^{L/2}} \left| \frac{\partial q_t}{\partial p_a}(x_a, t) \right|^{-\frac{1}{2}} \psi_n^*(q_t(x_a, t)) \psi_m(q_a) e^{i S^t(q_t(x_a, t), q_a; t) / \hbar}. \quad (\text{C.6})$$

Note que substituímos q_b por q_t enfatizar que q_t é a coordenada de posição para uma trajetória com condição inicial $x_a = (p_a, q_a)$ gerada pelo fluxo clássico de H no tempo t .

$S^t(q_t(x_a, t), q_a, t)$ é a fase ganha ao longo desta trajetória. Assim, a integral na Eq. (C.6) é feita sobre todas as condições iniciais no espaço de fase, trocando o problema de condições iniciais. Estas aproximações são apropriadas para sistemas de vários graus de liberdade, pois uma IVR permite a utilização de métodos de Monte Carlo de integração.

Particularmente, se os estados $|n\rangle$ e $|m\rangle$ são autoestados do operador de posição, a fórmula (C.6) torna-se uma IVR para o propagador de van Vleck, ou seja,

$$K(q, q', t)_{\text{IVR}} \equiv \langle q^t | e^{-iHt/\hbar} | q^o \rangle_{\text{IVR}} = \int \frac{dx^o}{(2\pi i \hbar)^{L/2}} \left| \frac{\partial q^t}{\partial p^o} (x^o) \right|^{\frac{1}{2}} e^{iS^t(x^o)/\hbar}. \quad (\text{C.7})$$

Aproximação à primeira ordem para a ação

*“No cometas el crimen, varón
si no vas a cumplir la condena”.*

Andrés Calamaro

A seguinte derivação baseia-se na Ref. [Boh95]. Consideremos uma órbita γ gerada pelo Hamiltoniano

$$H = H_o + \epsilon H_1 \quad (\text{D.1})$$

onde H_1 é uma perturbação arbitrária e ϵ a sua magnitude. Queremos expressar a ação

$$S = \int (p dq - H dt) \quad (\text{D.2})$$

como uma perturbação da ação S_o associada à órbita γ_o de H_o . Note-se que a ação (D.2) é estacionária ao longo de γ , onde assume o valor,

$$\int_x^{x'} (p dq - H dt) = S_\gamma - E\tau, \quad (\text{D.3})$$

E sendo a energia e τ o tempo necessário para percorrer γ entre dois pontos $x, x' \in \gamma$. Vamos, comparar a ação (D.3) com a ação do circuito próximo Γ ilustrado na Fig. D.1. Uma *viagem* ao longo de Γ corresponde a começar em $x \in \gamma$ e instantaneamente *pular* para um ponto vizinho $x_o \in \gamma_o$, depois continua-se ao longo de γ_o até chegar a um ponto $x'_o \in \gamma_o$ muito perto do ponto final $x' \in \gamma$ gastando um tempo τ_o . Finalmente retorna-se de volta para x' no tempo $(\tau - \tau_o)$. Esse percurso ao longo do circuito Γ demora um tempo τ . O princípio variacional no espaço de fase implica que, até ϵ^2 , as ações que se ganham ao longo de γ e ao longo Γ são iguais. Podemos escolher x_o tal que $H(x_o) = H(x) = E$, dado que as órbitas em um sistema Hamiltoniano geralmente aparecem agrupadas em

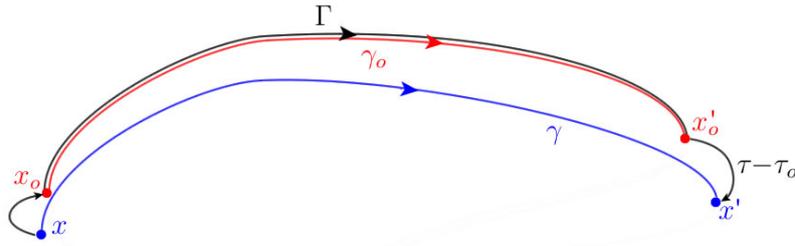


Figura D.1: **Teoria de perturbação para a ação.** Os caminhos γ_o e γ são gerados pelos Hamiltonianos H_o e $H = H_o + \epsilon H_1$, respectivamente. Γ é construído como um pulo inicial e instantâneo desde x até x_o . Depois se segue a evolução de H_o pela órbita γ_o até chegar a x'_o próximo a x' , onde se pula de volta para γ . Este último pulo demora $\tau - \tau_o$. As ações de Γ e γ são iguais até segunda ordem em ϵ .

famílias de um parâmetro onde, e dito parâmetro pode ser a energia [Ozo88]. Então

$$S - E\tau = S_o - \int_0^{\tau_o} H(\mathbf{x}_o(t)) dt - E(\tau - \tau_o) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (\text{D.4})$$

onde $H(x, t)$ é o Hamiltoniano total avaliado ao longo da órbita não perturbada γ . Finalmente, temos que

$$\begin{aligned} S - S_o &= \int_o^{\tau_o} [E - H(\mathbf{x}_o(t))] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \epsilon \int_o^{\tau_o} H_1(\mathbf{x}_o(t)) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Referências Bibliográficas

- [Abr64] M. Abramowitz and I. Stegun 1964 *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover).
- [Alm07] M. P. Almeida, F. de Melo, M. Hor-Meyll, A. Salles, S. P. Walborn, P. H. Souto Ribeiro and L. Davidovich 2007 *Science* **316**, 579.
- [Alo04] D. Alonso, S. Brouard, J. P. Palao and R. Sala Mayato 2004 *Phys. Rev. A* **69**, 052111.
- [Aga71] G. S. Agarwal 1971 *Phys. Rev. A* **4**, 739.
- [Are09] N. Ares and D. A. Wisniacki 2009 *Phys. Rev. E* **80**, 046216.
- [Arn79] V. I. Arnold 1978 *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (New York: Springer).
- [Aub80] S. Aubry and G. André 1980 *Ann Israel Phys. Soc.* **3**, 133.
- [Ber76] M. V. Berry 1976 *Adv. in Phys.* **25**, 1.
- [Ber77] M. V. Berry 1977 *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **287**, 30.
- [Ber89] M. V. Berry 1989 *Proc. Soc. Roy. A* **423**, 219.
- [Ber01] M. V. Berry, I. Marzoli and W. Schleich 2001 *Phys. World* **14**, 39.
- [Boh95] O. Bohigas, M.-J. Giannoni, A. M. Ozorio de Almeida and C. Schmit 1995 *Nonlinearity* **8**, 203.
- [Brag80] V. B. Braginsky, Y. I. Vorontsov and K. S. Thorne 1980 *Science* **209**, 547.
- [Bra94] S. L. Braunstein and C. M. Caves 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3439.
- [Bra01] D. Braun 2001 *Dissipative Quantum Chaos and Decoherence* (Berlin: Springer STMP).
- [Bre02] H. P. Breuer and F. Petruccione 2002 *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford: Oxford University)
- [Bro04] O. Brodier and A. M. Ozorio de Almeida 2004 *Phys. Rev. E* **69**, 016204.
- [Bro10] O. Brodier and A. M. Ozorio de Almeida 2010 *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 505308.

- [Bru92] M. Brune *et. al.* 1992 *Phys. Rev. A* **45**, 5193.
- [Car99] H. J. Carmichael 1999 *Statistical Methods in Quantum Optics 1: Master Equations and Fokker-Planck Equations* (Berlin: Springer).
- [Cav80] C. M. Caves, K. S. Thorne, R. W. P. Drever, V. D. Sandberg and M. Zimmermann 1980 *Rev. Mod. Phys.* **52**, 341.
- [Cra46] H Cramér 1946 “*Mathematical Methods of Statistics*”. (Princeton, NJ: Princeton Univ. Press)
- [Cer03] N. R. Cerruti and S. Tomsovic 2003 *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 3451.
- [Che57] C. Chester, B. Friedman and F. Ursell 1957 *Proc. Camb. Phil. Soc. Math. Phys. Sci.* **53**, 599.
- [Cho98] S. Chountasis and A. Vourdas 1998 *Phys. Rev. A* **58**, 848.
- [Cuc02] F. M. Cucchietti, C. H. Lewenkopf, E. R. Mucciolo, H. M. Pastawski and R. O. Vallejos 2002 *Phys. Rev. E* **65**, 046209.
- [Cuc03] F. M. Cucchietti, D. A. R. Dalvit, J. P. Paz and W. H. Zurek 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91**, 210403.
- [Din73] R. B. Dingle 1973 *Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation*. (London: Academic Press).
- [Dio02] L. Diosi and C. Kiefer 2002 *J. Phys. A: Math. Gen.* **35**, 2675.
- [Dod85] V. V. Dodonov and O. V. Manko 1985 *Physica A* **130**, 353.
- [Eme02] J. Emerson, Y. S. Weinstein, S. Lloyd, and D. G. Cory 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89**, 284102.
- [Esc11] B. M. Escher, R. L. de Matos Filho and L. Davidovich 2011 *Braz. J. Phys.* **41**, 229.
- [Esc11a] B. M. Escher, R. L. de Matos Filho and L. Davidovich 2011 *Nature Physics* **7**, 406.
- [Fis04] A. J. Fisher *et al.* 2004 *Lecture Notes for Graduate Course on Open Quantum Systems 3rd term 2004* (available at: www.cmmp.ucl.ac.uk/~ajf/course_notes).
- [Gar11] I. García-Mata, R. O. Vallejos and D. A. Wisniacki 2011 *New J. Phys.* **13**, 103040.
- [Gio04] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone 2004 *Science* **306**, 1330.
- [Gio06] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96**, 010401.
- [Giu96] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu and H. D. Zeh 1996 *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory* (Berlin: Springer).
- [Gla63] R. J. Glauber 1963 *Phys. Rev.* **131**, 2766.
- [Gol80] H. Goldstein 1980 *Classical mechanics* (MA: Addison-Wesley).
- [Gor06] T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman and M. Znidaric 2006 *Phys. Rep.* **435**, 33.

- [Gor06a] T. Gorin, T. H. Seligman and R. L. Weaver 2006 *Phys. Rev. E* **73**, 015202(R).
- [Gou11] A. Goussev 2011 *Phys. Rev. E* **83**, 056210.
- [Gre90] C. Grebogi, S. M. Hammel, J. A. Yorke and T. Sauer 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1527.
- [Grö46] H. J. Grönwold 1946 *Physica* **12**, 405.
- [Gros76] A. Grossmann 1976 *Commun. Math. Phys.* **48**, 191.
- [Gros78] A. Grossmann and P. Huguenin 1978 *Helv. Phys. Acta* **51**, 252.
- [Gut90] M. Gutzwiller 1990 *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (New York: Springer).
- [Guti09] M. Gutiérrez and A. Goussev 2009 *Phys. Rev. E* **79**, 046211.
- [Haa91] F. Haake 1991 *Quantum Signatures of Chaos* (Berlin: Springer).
- [Hah] E. Hahn 1950 *Phys. Rev.* **80** 580.
- [Har06] S. Haroche and J. M. Raimond 2006 *Explore the Quantum: Atoms, Cavities and Photons* (Oxford: Oxford Univ. Press).
- [Harp55] P. G. Harper 1955 *Proc. Phys. Soc. A* **68**, 874878.
- [Hel91] E. J. Heller 1991 *Chaos and Quantum Physics (Les Houches LII) ed M.-J. Giannoni, A. Voros and J. Zinn-Justin* (Amsterdam: North-Holland) 547.
- [Hof09] M. Hofheinz, H. Wang, M. Ansmann, R. C. Bialczak, E. Lucero, M. Neeley, A. D. O'Connell, D. Sank, J. Wenner, J. M. Martinis and A. N. Cleland 2009 *Nature* **459**, 546.
- [Hor09] K. Hornberger 2009 *Introduction to Decoherence Theory* eds. A. Buchleitner, C. Viviescas and M. Tiersch (*Lecture Notes in Physics vol 768*) (Berlin: Springer) 221.
- [Hue97] S. F. Huelga, C. Macchiavello, T. Pellizzari, A. K. Ekert, M. B. Plenio and J. I. Cirac 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3865.
- [Jac01] Ph. Jacquod, P. G. Silvestrov and C. W. J. Beenakker 2001 *Phys. Rev. E* **64**, 055203(R).
- [Jac09] Ph. Jacquod and C. Petitjean 2009 *Adv. Phys.* **58**, 67.
- [Jal01] R. A. Jalabert and H. M. Pastawski 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2490.
- [Joh10] B. R. Johnson 2010 *Nature Phys.* **6**, 663.
- [Kla85] J. R. Klauder and B.-S. Skagerstam 1985 *Coherent states: Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific).
- [Köb11] B. Köber, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, A. Goussev and K. Richter 2011 *Phys. Rev. E* **83**, 016214.
- [Kos72] A. Kossakowski 1972 *Rep. Math. Phys.* **3** 247.

-
- [Kra83] K. Kraus 1983 *States, Effects and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory* (Berlin: Springer).
- [Leb90] P. Leboeuf and A. Voros 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 1765.
- [Leb95] P. Leboeuf and A. Voros 1995 in *Quantum Chaos* eds. G. Casati and B. Chirikov (Cambridge: Cambridge Univ. Press) 507.
- [Lee95] H.-W. Lee 1995 *Phys. Rep.* **259**, 147.
- [Lem11] G. B. Lemos and F. Toscano 2011 *Phys. Rev. E* **84**, 016220.
- [Leo97] U. Leonhardt 1997 *Measuring the Quantum State of Light* (Cambridge: Cambridge Univ. Press).
- [Li09] B. Li , C. Mollica and J. Vaníček 2009 *Comm. J. Chem. Phys.* **131**, 041101.
- [Lin76] G. Lindblad 1976 *Commun. Math. Phys.* **48**, 119.
- [Lit95] R. G. Littlejohn 1995 in *Quantum Chaos* eds. G. Casati and B. Chirikov (Cambridge: Cambridge Univ. Press) 343.
- [Lob08] O. I. Lobkis and R. L. Weaver 2008 *Phys. Rev. E* **78**, 066212.
- [Lon57] M. S. Longuet-Higgins 1957 *Phil. Trans. R. Soc. A* **249**, 321.
- [Lup07] A. Lupaşcu, S. Saito, T. Picot, P. C. de Groot, C. J. P. M. Harmans and J. E. Mooij 2007 *Nature Phys.* **3**, 119.
- [Luk60] E. Lukacs 1960 *Characteristic Functions* (London: Griffin).
- [Mar98] N. Margolus and L. B. Levitin 1998 *Physica D* **120**, 188.
- [Mas65] V. P. Maslov and M. V. Fedoriuk 1965 *Semiclassical approximation in quantum mechanics* (Reidel: Dordrecht) (translated from the original russian edition).
- [Mes72] A. Messiah 1972 *Quantum Mechanics* (Amsterdam: North Holland).
- [Mil01] W. H. Miller 2001 *J. Phys. Chem. A* **105**, 2942.
- [Mir90] A. Miranowicz, R. Tanas and S. Kielich 1990 *Quantum Opt.* **2**, 253.
- [Mol11] C. Mollica and J. Vaníček 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107**, 214101.
- [Nie00] M. A. Nielsen and I. L. Chuang 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge Univ. Press)
- [Nye74] J. F. Nye and M. V. Berry 1974 *Proc. R. Soc. A* **336**, 165.
- [Nye91] J.F. Nye, 1999 *Natural Focusing and Fine Structure of Light: Caustics and Wave Dislocations* (CRC Press: Bristol).
- [Ozo88] A. M. Ozorio de Almeida 1988 *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization* (Cambridge: Cambridge Univ. Press).

- [Ozo98] A. M. Ozorio de Almeida 1998 *Phys. Rep.* **295**, 265.
- [Ozo04] A. M. Ozorio de Almeida, R. O. Vallejos and M. Saraceno 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 1473.
- [Ozo09a] A. M. Ozorio de Almeida 2009 *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends* eds. A. Buchleitner, C. Viviescas and M. Tiersch (*Lecture Notes in Physics* vol 768) (Berlin: Springer) 157.
- [Ozo09b] A. M. Ozorio de Almeida, P. M. Rios and O. Brodier 2009 *J. Phys. A: Math. Gen.* **42**, 065306.
- [Pas95] H. M. Pastawski, P. R. Levstein, and G. Usaj 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4310.
- [Paz93] J. P. Paz, S. Habib and W. H. Zurek 1993 *Phys. Rev. D* **47**, 488.
- [Per84] A. Peres 1984 *Phys. Rev. A* **30**, 1610.
- [Per93] A. Peres 1993 *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Dordrecht: Kluwer Acad. Publishers).
- [Pet05] C. Petitjean and Ph. Jacquod 2005 *Phys. Rev. E* **71**, 036223.
- [Pre98] J. Preskill 1998 *Lecture notes for Physics 229: Quantum Information and Computation* (available at: <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph219/index.html#lecture>).
- [Pro02] T. Prosen 2002 *Phys. Rev. E* **65**, 036208.
- [Rhi70] W. K. Rhim, A. Pines, and J. S. Waugh. 1970 *Phys. Rev. Lett.* **25**, 218.
- [Rao45] C. R. Rao 1945 *Bulletin Calcutta Math. Soc* **37** 89.
- [Roy77] A. Royer 1977 *Phys. Rev. A* **15**, 449.
- [San87] A. Sandulescu, H. Scutaru and W. Scheid 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 2121.
- [Sch01] P. W. Schleich 2001 *Quantum Optics in Phase Space* (Berlin: Wiley).
- [Schr26] E. Schrödinger 1926 *Naturwissenschaften* **14**, 664.
- [Schä05] R. Schäfer, H.-J. Stöckmann, T. Gorin, and T. H. Seligman 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95**, 184102.
- [Tao09] G. Tao and W. H. Miller 2009 *J. Chem. Phys.* **131**, 224107 (2009).
- [Tar93] K. Tara, G. S. Agarwal and S. Chaturvedi 1993 *Phys. Rev. A* **47**, 5024.
- [Tes86] C. D. Tesche 1986 *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **480**, 36.
- [Tho75] R. Thom 1975 *Structural Stability and Morphogenesis* (MA: Benjamin).
- [Tos99] F. Toscano and A. M. Ozorio de Almeida 1999 *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 6321.

-
- [Tos06] F. Toscano, D. A. R. Dalvit, L. Davidovich and W. H. Zurek 2006 *Phys. Rev. A* **73**, 023803.
- [Usa98] G. Usaj, H. M. Pastawski, and P. R. Levstein 1998 *Mol. Phys.* **95**, 1229.
- [Van03a] J. Vaníček and D. Cohen 2003 *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 9591.
- [Van03b] J. Vaníček and E. J. Heller 2003 *Phys. Rev. E* **68**, 056208.
- [Van04] J. Vaníček 2004 *Phys. Rev. E* **70**, 055201(R).
- [Van06] J. Vaníček 2006 *Phys. Rev. E* **73**, 046204.
- [Vle28] J. H. van Vleck 1928 *Proc. Math. Acad. Sci. U.S.A* **14**, 178.
- [Vor89] A. Voros 1989 *Phys. Rev. A* **40**, 6814.
- [Wal06] S. P. Walborn, P. H. Souto Ribeiro, L. Davidovich, F. Mintert and A. Buchleitner, 2006 *Nature* **440**, 1022.
- [Wan04] W. Wang, G. Casati and B. Li 2004 *Phys. Rev. E* **69**, 025201(R).
- [Wan07] W. Wang, G. Casati and B. Li 2007 *Phys. Rev. E* **75**, 016201.
- [Wan08] W. Wang 2008 *Phys. Rev. E* **77**, 036206.
- [Weh11] M. Wehrle, M. Šulc and J. Vaníček 2011 *Chimia* **65**, 334.
- [Wig32] E. P. Wigner 1932 *Phys. Rev.* **40**, 749.
- [Wig55] E. P. Wigner 1955 *Ann. of Math.* **62**, 548.
- [Wis02] D. A. Wisniacki and D. Cohen 2002 *Phys. Rev. E* **66**, 046209.
- [Wis03] D. A. Wisniacki 2003 *Phys. Rev. E* **67**, 016205.
- [Wis10] D. A. Wisniacki, N. Ares and E. G. Vergini 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104**, 254101.
- [Zam08] E. Zambrano and A. M. Ozorio de Almeida 2008 *Nonlinearity* **21**, 783.
- [Zam09] E. Zambrano and A. M. Ozorio de Almeida 2009 *New. J. Phys.* **11**, 113044.
- [Zam10] E. Zambrano and A. M. Ozorio de Almeida 2010 *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 205302.
- [Zam11] E. Zambrano and A. M. Ozorio de Almeida 2011 *Phys. Rev. E* **84**, 045201(R).
- [Zur91] W. H. Zurek 1991 *Phys. Today* **44**, 3 (*updated version on:* quant-ph/0306072).
- [Zur93] W. H. Zurek, S. Habib and J. P. Paz 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1187.
- [Zur01] W. H. Zurek 2001 *Nature* **412**, 712.
- [Zur03] W. H. Zurek 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715.

—*¿Por qué le gusta llevar siempre la
contraria?*

—*Yo nunca llevo la contraria*

Roberto Bolaño