

# Estudos Semiclássicos na Representação de Estados Coerentes

por

Ademir Luiz Xavier Jr.

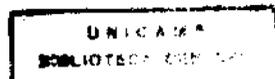
Prof. Marcus A. M. de Aguiar (Orientador)

*Tese desenvolvida e apresentada no Instituto de Física "Gleb Wataghin" (Universidade Estadual de Campinas) como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de doutor em Ciências.*

Setembro 1997

Este exemplar corresponde à redigção final da tese de doutorado defendida por Ademir Luiz Xavier Jr. e aprovada pela comissão julgadora.

3/10/1997



**PARECER DE APROVAÇÃO**  
**DEFESA DE TESE DE DOUTORADO**  
**ADEMIR LUIZ XAVIER JÚNIOR**

DATA : 18 / 09 / 97

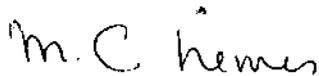
BANCA EXAMINADORA:



- Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar (Orientador do Candidato)



- Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozório de Almeida



- Prof. Dra. Maria Carolina Nemes



- Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira



- Prof. Dra. Kyoko Furuya

## Agradecimentos

Agradeço profundamente a orientação e amizade do Marcus, que me acompanhou por todo esse tempo desde a graduação. Agradeço também a possibilidade de trabalho ao Instituto de Física “Gleb Wataghin”, bem com à Universidade Estadual de Campinas. Tenho especial reconhecimento à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, responsável pela sustentação deste trabalho (processo 93/02490-0). Sou também eternamente grato ao assessor anônimo que julgou todo o andamento deste trabalho.

Agradeço a Alejandro L. Castillo pela amizade e muitas discussões, também a Michel Baranger (CTP, MIT) por várias idéias interessantes e a Frank Grossmann (WPDG, Freiburg Universität, Alemanha) por discussões e contribuições na parte final deste trabalho.

## Resumo

*Neste trabalho desenvolvemos e aplicamos uma aproximação semiclássica para o propagador em estados coerentes  $K(z'', z', t) = \langle z'' | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | z' \rangle$ , onde  $\hat{H}$  é o operador hamiltoniano do sistema e  $|z\rangle$  representam estados coerentes gerados pelo oscilador harmónico. A aproximação semiclássica de  $K(z'', z', t)$  faz uso de uma aproximação de fase estacionária na qual trajetórias estacionárias existem em um espaço de fases estendido (complexo). Disso resulta uma dinâmica complexa que é estudada para hamiltonianos gerais quadráticos unidimensionais, o sistema da partícula em uma caixa e um exemplo de sistema não linear, o oscilador quártico. Comparando-se com o cálculo quântico exato, a precisão da aproximação semiclássica é confirmada para cada um desses casos. Finalmente o processo de espalhamento por uma barreira quadrada é tratado com sucesso, uma situação para a qual nenhuma aproximação semiclássica, fazendo uso exclusivamente de trajetórias clássicas (reais), existe para o regime de energia abaixo do potencial da barreira. Uma extensão do conceito de tempo de travessia clássico é feito para o espaço complexo, que possibilita calcular tempos de travessia para a partícula quântica representada por um pacote de ondas de estados coerentes com energia inicial abaixo do máximo de potencial da barreira. Propomos tal tempo de travessia quântico como um candidato ao tempo de tunelamento de estados coerentes no espaço de fases.*

## Abstract

*In this work we develop and apply a semiclassical approximation to the coherent-state propagator  $K(z'', z', t) = \langle z'' | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | z' \rangle$ , where  $\hat{H}$  is the Hamilton operator for the system and  $|z\rangle$  represents the coherent states of the harmonic oscillator. The semiclassical  $K(z'', z', t)$  makes use of a stationary phase approximation in which stationary trajectories inhabit an extended (complex) phase-space. This gives rise to a complex dynamics which is studied for general quadratic 1-d Hamiltonians, the particle-in-a-box and an example of non-linear system, the quartic oscillator. By comparing with a full quantum calculation, the accuracy of the semiclassical approximation is confirmed for each one of these cases. Finally the process of scattering through a potential square barrier is successfully treated, a situation for which no ordinary semiclassical method based entirely upon classical (real) trajectories can account for in the “under barrier” energy regime. An extension of the classical traversal time concept to the complex space enable us to calculate the traversal time for the quantum particle represented by a coherent state wave packet whose initial average energy is below the barrier top. We propose such quantum traversal time as a sensible candidate for the coherent-state tunneling time in phase-space.*

# Índice

Introdução .....	8
<b>Capítulo 1. Propagador em Estados Coerentes</b> .....	12
1.1. O Propagador em Estados-Coerentes .....	14
1.2. Aproximação de fase estacionária .....	15
1.3. Forma semiclássica do propagador .....	19
1.3.1. Ação complexa .....	22
1.3.2. Aproximação para limite semiclássico .....	24
1.4. Aproximação real para elementos diagonais .....	26
1.5. Exemplos simples .....	28
1.5.1. Oscilador harmônico .....	28
1.5.2. Partícula livre .....	30
<b>Capítulo 2. Oscilador Quártico</b> .....	31
2.1. Método da matriz de monodromia .....	33
2.2. Exemplo numérico .....	38
2.3. Propagador diagonal .....	43
<b>Capítulo 3. Poço Infinito</b> .....	48
3.1. Trajetórias .....	50
3.1.1. Análise das trajetórias complexas .....	53
3.1.1.1. Trajetórias diretas, $n = 0$ .....	53
3.1.1.2. Trajetórias com $n = 1$ .....	54
3.1.1.3. Trajetórias pares ( $n \geq 2$ ) .....	55
3.1.1.4. Trajetórias ímpares ( $n \geq 3$ ) .....	56
3.2. O propagador .....	58
3.2.1. Trajetórias não contribuintes .....	58
3.3. Forma final .....	61

<b>Capítulo 4. Tunelamento Semiclássico</b> .....	67
4.1. A questão sobre o tempo de travessia quântico.....	68
4.1.1. O tempo das trajetórias complexas.....	71
4.2. Tratamento de um caso simples .....	73
4.2.1. A função de onda .....	77
4.3. Barreiras no espaço complexo .....	83
4.3.1. O limite clássico da barreira simples no espaço complexo .....	84
4.3.1.1. Trajetórias diretas $I \rightarrow I$ e $II \rightarrow II$ . .....	85
4.3.1.2. Trajetórias $I \rightarrow II$ e $II \rightarrow I$ .....	85
4.3.1.3. Trajetórias de transmissão $I \rightarrow II \rightarrow I$ .....	87
4.3.2. Cálculo exato do propagador .....	89
4.3.3. Resultados e comparações.....	90
4.4. Barreiras suaves no espaço complexo .....	92
4.4.1. Análise de suavizações .....	93
4.4.2. Barreira simples suavizada.....	95
4.4.3. Novo tempo de travessia.....	100
4.4.4. Nota sobre reflexão.....	104
<b>Conclusões e perspectivas</b> .....	105
<b>Apêndice A</b> .....	112
<b>Apêndice B</b> .....	115
<b>Apêndice C</b> .....	117
<b>Apêndice D</b> .....	119
<b>Bibliografia</b> .....	121

# Introdução

Métodos semiclássicos têm um longa história no estudo do comportamento dinâmico de vários sistemas quânticos. Seu desenvolvimento marca a história do próprio desenvolvimento da mecânica quântica, tendo constituído auxiliar importante como ferramenta de conteúdo heurístico. Idealmente métodos semiclássicos (ou também quase clássicos) são capazes de descrever bem o comportamento de funções quânticas como expansões em torno do comportamento clássico. Existe um limite característico que é o regime quase clássico, isto é, quando a ação associada ao sistema quântico é muito maior que a ação fundamental  $\hbar$  (ou, de maneira análoga, quando  $\hbar \rightarrow 0$ ). Incentivado em parte pelo desenvolvimento de tais métodos, nasceu o estudo da transição da mecânica quântica para a mecânica clássica. Esse estudo adquire aspectos dramáticos quando é aplicado ao comportamento de sistemas ditos não integráveis, ou seja, sistemas para os quais o espaço de fases é quase que completamente cheio de trajetórias caóticas, ao invés de toros invariantes [1]. Uma situação aparentemente paradoxal surge quando se considera o fato de que, com a evolução dinâmica de sistemas não integráveis, estruturas clássicas cada vez mais complexas aparecem no espaço de fases. Por outro lado, o princípio de incerteza proíbe a formação de estruturas abaixo de uma certa “precisão” determinada por  $\hbar$ . Tal situação manifesta-se sob dois aspectos diferentes: quantização semiclássica e dinâmica semiclássica, e tem constituído tema de importantes debates [1], onde a validade e limite da aproximação semiclássica são analisados.

Paralelamente procedimentos semiclássicos também dependem do tipo de representação quântica utilizada. Um estado quântico  $|\Psi\rangle$  pode ser escrito em diversas representações, p. ex.,  $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$ ,  $\Psi(p) = \langle p|\Psi\rangle$ ,  $\Psi(\alpha) = \langle \alpha|\Psi\rangle$  ( $\alpha = q + ip$ ), e todas são equivalentes no sentido de existir uma transformação entre elas. Métodos semiclássicos muito conhecidos existem para integral de trajetória na representação de coordenadas,  $\langle x''|\exp(-i\hat{H}t/\hbar)|x'\rangle$ , que é conhecido como expressão de Van Vleck-Gutzwiller (VVG) [2, 3]. Essa aproximação é do tipo fase estacionária, cujos pontos estacionários são as próprias trajetórias clássicas que vão de  $x'$  até  $x''$  no tempo  $t$ .

Expressões semiclássicas análogas existem para o propagador em momento  $K(p'', p', t)$  [3]. O estudo do limite semiclássico de sistemas quânticos é muito enriquecido se uma representação que faça uso de coordenadas do espaço de fases for introduzida. A função de Wigner [4] foi originalmente criada para tal propósito, isto é, conciliar sistemas quânticos do ponto de vista da mecânica estatística com o espaço de fases do sistema clássico equivalente. A partir da suavização da função de Wigner, obteve-se a chamada distribuição de Husimi [5], que é simplesmente a projeção do estado do sistema em termos dos *estados coerentes*. Estados coerentes constituem o objeto principal deste trabalho. Tais estados são de há muito conhecidos em óptica quântica, tendo papel fundamental na teoria quântica da coerência, onde descrevem o comportamento de campos quânticos de coerência completa [6, 7]. Aqui estados coerentes são usados com referência à representação por eles exibida:  $\langle z; \Psi \rangle$  é a projeção do estado  $|\Psi\rangle$  no estado  $|z\rangle$  gerado pelo oscilador harmônico, que por sua vez depende de quatro números (para sistemas com um grau de liberdade), posição e momento médios e incertezas características. Não obstante a arbitrariedade na definição dos estados coerentes ser considerado uma desvantagem da representação, diversas outras vantagens (segundo A. Voros [8]) existem, que justificam plenamente o estudo e aplicação da mesma.

Neste trabalho descreveremos os fundamentos de um método semiclássico para o propagador em estados coerentes  $K(z'', z', t) = \langle z'' | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | z' \rangle$ , onde  $\hat{H}$  é o operador hamiltoniano do sistema. O estudo desse objeto é bastante importante, uma vez que ele constitui ferramenta valiosa no estudo da dinâmica no espaço de fases de sistemas quânticos parametrizado pelos rótulos de  $|z\rangle$ , que são a posição e o momento médio. Por outro lado, a partir do propagador, podemos construir a evolução temporal de um estado inicial  $|z', t\rangle$  que, projetado no espaço de coordenadas, representa um *pacote de incerteza mínima* e, como tal, representa também o que mais próximo se pode chegar de uma partícula clássica. A análise do propagador em estados coerentes também está intimamente ligada ao estudo de funções de correlação, que tem um interesse especial em química teórica [9]. Em particular, como sugerido por E. Heller [10], a dinâmica molecular para tempos longos pode ser descrita por um conjunto de gaussianas<sup>1</sup> [11], que dão conta do processo de decoerência melhor do que a evolução de apenas um pacote. Partindo-se do propagador em estados coerentes é possível chegar

---

<sup>1</sup>Conhecido como método FGA (Frozen Gaussian Approximation).

a uma expressão semiclássica para  $K(x'', x', t)$  [12], que é análoga àquela obtida por outros métodos, mas que talvez contenha correções adicionais.

A essência da aproximação semiclássica aqui descrita é o método de fase estacionária. Nesse método faz-se a busca de todos os pontos estacionários compatíveis com os vínculos do propagador em todo o espaço de fases. Como os rótulos do propagador excedem o número de parâmetros que caracterizam o movimento clássico (uma trajetória clássica), é necessário uma incursão fora do plano real durante a busca dos pontos estacionários. Resulta então que a aproximação para  $K(z'', z', t)$  é dada como uma expansão em torno de novas trajetórias clássicas, que habitam um espaço de fases de dimensão estendida. Chamamos esse espaço de *espaço de fases complexo*. Surge então uma nova dinâmica clássica, a *dinâmica complexa*, cuja importância se justifica no estudo de sistemas quânticos para os quais nenhum movimento clássico exista. O exemplo mais patente de tais sistemas são os sistemas quânticos apresentando tunelamento, onde foi possível mostrar que trajetórias complexas dão conta da amplitude de transição por uma barreira de potencial maior que a energia do estado inicial.

Neste trabalho dedicamo-nos ao estudo de sistemas unidimensionais, que representam simplificada e grande parte de sistemas físicos gerais. Ressaltamos o caráter pioneiro de tal estudo, já que soluções estacionárias como a do tipo que estudamos aqui só tinham sido obtidas para sistemas extremamente simples com pouco interesse geral. Generalizações para sistemas com mais dimensões são possíveis, uma vez que as expressões semiclássicas obtidas, em particular a Eq. (1.54), valem para sistemas com dois graus de liberdade, com os rótulos do propagador substituídos por quantidades vetoriais. Intuitivamente acredita-se que essa expressão possa ser generalizada para sistemas com mais graus de liberdade [18], não obstante a complexificação do espaço de fases ser aparentemente um obstáculo à determinação das trajetórias estacionárias. O trabalho está dividido em quatro capítulos. No Capítulo 1 é feita a exposição da teoria, onde se obtém a expressão para o propagador semiclássico e aplicação para alguns sistemas simples. No Capítulo 2 descrevemos um procedimento numérico para a determinação das trajetórias complexas, que obedecem a condições de contorno especiais. No Capítulo 3 estudamos o problema de uma partícula presa em uma caixa (poço infinito), onde determinamos as trajetórias e propagador para os elementos diagonais. Sistemas tunelantes são estudados no Capítulo 4, onde fazemos um estudo

geral para o movimento próximo a um ponto hiperbólico (potencial harmônico invertido) e estudamos a evolução dinâmica do propagador em estados coerentes para uma partícula espalhada por uma barreira quadrada. Em todo o trabalho os resultados semiclássicos são comparados aos equivalentes quânticos exatos quando a aproximação não resulta exata. Finalmente na conclusão comentamos os principais resultados obtidos e as perspectivas futuras.

# Capítulo 1

## Propagador em Estados Coerentes

*“Unsere Wellengruppe hält dauernd zusammen, breitet sich nicht im Laufe der Zeit auf ein immer größes Gebiet aus, wie man es sonst, z. B., in der Optik, gewohnt ist.”*  
E. Schrödinger<sup>1</sup>

### Representação de Estados Coerentes.

O conceito de estados coerentes parece ter sido introduzido por E. Schrödinger em 1926 como sugere a passagem acima. O estudo sistemático desses estados só se deu bem mais tarde, com a óptica quântica, graças à equivalência dinâmica entre os estados do oscilador harmônico e os modos de oscilação eletromagnéticos [14].

Inicialmente faremos aqui uma breve recapitulação de como estados coerentes são introduzidos como uma representação possível para estados quânticos gerais. A descrição abaixo é feita para sistemas unidimensionais, mas uma generalização para sistemas de mais graus de liberdade é possível.

---

<sup>1</sup>“Nosso pacote de ondas permanece coeso, não se espalha em regiões maiores com o tempo, ao invés do que estamos acostumados a ver em óptica”. Tradução do autor. Ver referência [13].

É bem sabido que o operador unitário de Weyl [15] é capaz de gerar, pela aplicação de

$$|z\rangle = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a})|0\rangle \quad (1.1)$$

sobre o estado de vácuo denotado por  $|0\rangle$ , os estados  $|z\rangle$  que, expandidos na base de estados do oscilador harmônico  $|n\rangle$ , se escrevem por

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} |n\rangle. \quad (1.2)$$

Em (1.1), os operadores  $a$  e  $a^\dagger$  são os operadores de criação e destruição das autofunções do oscilador harmônico (uma dimensão),

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{b} + i\frac{\hat{p}}{c} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{q}}{b} - i\frac{\hat{p}}{c} \right), \quad (1.3)$$

onde  $b$  e  $c$  medem os desvios em relação à média dos valores característicos de um dado estado  $|z\rangle$ ,  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$  são os operadores posição e momento. Na verdade, os estados  $|z\rangle$  são auto-estados dos operadores  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ , com autovalores dados por

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} + i\frac{p}{c} \right), \quad z^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} - i\frac{p}{c} \right), \quad (1.4)$$

respectivamente. Aqui  $p$  e  $q$  denotam a média em posição e momento para esses estados, respectivamente. Ao longo de todo o trabalho, iremos tratar pacotes de mínima incerteza, ou seja, estados tais que  $bc = \hbar$ .

O nome *coerentes* vêm da propriedade especial desses estados para os sistemas harmônicos, i. e., de não perderem coerência com a evolução temporal. A projeção e descrição em termos de estados coerentes  $|z\rangle$  de um estado quântico genérico é possível [2], e uma resolução de unidade existe,

$$\int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle\langle z| = 1. \quad (1.5)$$

A projeção de  $|z\rangle$  sobre o espaço de configurações pode ser escrita como

$$\langle x|z\rangle = (\sqrt{\pi b})^{-1/2} \exp\left[-\frac{(x-q)^2}{2b^2} + i\frac{p(x-q/2)}{\hbar}\right], \quad (1.6)$$

que representa uma onda propagando-se na direção de  $x$  positivo, com momento característico  $p$  e distribuição de envelope gaussiana ao redor do valor médio  $q$ . A projeção

no espaço de momento tem forma idêntica, com momentos trocados por posições, e  $b$  trocado por  $c$ . Estudando-se estados quânticos na representação  $|z\rangle$ , exploramos ao máximo a falta de privilégio entre as variáveis  $q$  e  $p$ , o que viabiliza um estudo semiclássico da evolução dinâmica de estados quânticos no espaço de fases.

## 1.1 O Propagador em Estados Coerentes

O objeto principal de estudo deste trabalho é o propagador. Há uma enorme literatura sobre propagadores quânticos, inicialmente estudados por Feynman [16]. Entretanto propagadores na representação de estados coerentes só receberam maior atenção a partir dos trabalhos de Klauder [17]. Aqui apresentaremos os passos necessários à obtenção de uma forma semiclássica dos propagadores na representação  $|z\rangle$ , que será usada no estudo de sistemas unidimensionais somente. Este estudo é parte integrante de um estudo muito mais detalhado [18] a ser publicado posteriormente, onde uma aplicação para sistemas com duas dimensões é tratada. Veremos que a aproximação exposta a seguir lembra muito outras aproximações semiclássicas da literatura [21], onde trajetórias clássicas estacionárias são obtidas como esqueletos da aproximação semiclássica.

Como estudaremos sistemas cuja função hamiltoniana é independente do tempo, podemos escrever o operador de evolução temporal desde  $t'$  até  $t''$  como

$$\hat{U}(t'' - t') = \exp \left[ -i \frac{\hat{H}(t'' - t')}{\hbar} \right], \quad (1.7)$$

onde  $\hat{H}$  representa o operador hamiltoniano. Chamaremos de propagador na representação de estados coerentes o objeto

$$K(z'', z', t'' - t') = \langle z'' | \hat{U}(t'' - t') | z' \rangle, \quad (1.8)$$

onde  $z''$  e  $z'$  representam estados finais e iniciais respectivamente. O módulo quadrado de (1.8) representa a probabilidade governada por  $\hat{H}$  de transição entre os estados  $|z'\rangle$  e  $|z''\rangle$  depois de um intervalo de tempo  $t'' - t'$ . O elemento (1.8) pode ser decomposto em intervalos infinitesimais (ou propagadores infinitesimais) pela introdução de resoluções

de unidade (1.5), com o que formalmente escrevemos

$$K(z'', z', t'' - t') = \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \frac{d^2 z_j}{\pi} \right) \langle z_N | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | z_{N-1} \rangle \dots \langle z_1 | e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} | z_0 \rangle, \quad (1.9)$$

onde  $z'' = z_N$  e  $z' = z_0$ . A integral é formalmente escrita para o limite  $N \rightarrow \infty$  e  $\epsilon \rightarrow 0$ , com  $\epsilon = t_j - t_{j-1}$ . Entretanto o propagador infinitesimal  $K(z_{k+1}, z_k, \epsilon)$  de ordem  $k$ , no limite exposto acima pode ser aproximado convenientemente por

$$K(z_{k+1}, z_k, \epsilon) \simeq \langle z_{k+1} | z_k \rangle \left( 1 - \frac{i\epsilon \langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle}{\langle z_{k+1} | z_k \rangle} \right). \quad (1.10)$$

Definimos

$$\bar{H}_{k+1/2} = \frac{\langle z_{k+1} | \hat{H} | z_k \rangle}{\langle z_{k+1} | z_k \rangle}, \quad (1.11)$$

e como

$$\langle z_{k+1} | z_k \rangle = \exp \left( -\frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 - \frac{1}{2} |z_k|^2 + z_{k+1}^* z_k \right), \quad (1.12)$$

então

$$K(z_{k+1}, z_k, \epsilon) \simeq \exp \left( -\frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 - \frac{1}{2} |z_k|^2 + z_{k+1}^* z_k - \frac{i\epsilon}{\hbar} \bar{H}_{k+1/2} \right). \quad (1.13)$$

Com a expressão (1.13), podemos escrever formalmente uma aproximação para o propagador (1.8) na forma

$$K(z'', z', t'' - t') = \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 z_j}{\pi} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} -i\hbar \left( z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2} |z_k|^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} |z_{k+1}|^2 \right) - \epsilon \bar{H}_{k+1/2} \right], \quad (1.14)$$

onde a dependência temporal, bem como o limite  $\epsilon \rightarrow 0$  estão subentendidos. O passo seguinte é a resolução de (1.14) pela aproximação de fase estacionária.

## 1.2 Aproximação de Fase Estacionária

Consideremos integrais do tipo

$$I(\lambda) = \int_C g(z) \exp[\lambda w(z)] dz, \quad (1.15)$$

onde  $g(z)$  e  $w(z)$  são funções analíticas da variável complexa  $z$  em uma certa região  $D$  contendo o contorno  $C$  e  $\lambda$  um parâmetro positivo. A aproximação de fase estacionária (ou também chamado *steepest descent method*) obtém uma aproximação para  $I(\lambda)$  no limite  $\lambda \rightarrow \infty$ . A teoria de funções complexas permite deformar consideravelmente o contorno  $C$  sem mudar o valor da integral. Essa deformação consiste na substituição do contorno original, ou divisão deste em sub-contornos, de forma a levar em conta as maiores contribuições no limite  $\lambda \rightarrow \infty$ , que provém dos chamados *pontos críticos* ou *pontos de fase estacionária*.

De acordo com H. Bleistein [19], a aproximação é feita basicamente em cinco passos essenciais:

- 1) Identificação de todos os pontos críticos;
- 2) Determinação das curvas de *steepest descent* passando por cada ponto;
- 3) Justificação, via teorema de Cauchy, da deformação do contorno original;
- 4) Determinação da expansão das integrais que vem do contorno deformado;
- 5) Soma das expansões assintóticas de cada contribuição.

Os pontos críticos  $\bar{z}$  são aqueles que satisfazem à equação

$$\frac{dw}{dz} = 0, \quad (1.16)$$

no caso de um ponto de sela de primeira ordem. É fácil ver que, no limite  $\lambda \rightarrow \infty$ , esses são os únicos pontos remanescentes que contribuem significativamente para a integral (1.15), já que, fora desses pontos, o integrando varia rapidamente no limite, resultando em uma contribuição que vai a zero para a integral final. As trajetórias de declive descendente ou ascendente (*steepest descent or ascent*) são aquelas que emanam de  $\bar{z}$  e cuja derivada atinge um máximo em módulo (máximo descendente ou ascendente respectivamente). Essas curvas são soluções da equação [19]

$$\Im[w(z)] = \Im[w(\bar{z})]. \quad (1.17)$$

Usando-se o teorema de Cauchy, justifica-se a deformação do contorno original, que é a parte mais crítica do processo de integração. Isso porque cada problema tem seu contorno definido e, além disso, podem haver pontos críticos cuja contribuição resulte em um resultado não esperado *a priori*. Tais pontos são chamados *inadmissíveis* e devem simplesmente ser desconsiderados. Veremos que tais pontos também podem ocorrer

na aproximação assintótica de um funcional (Capítulo 3), como é o próprio propagador aproximado na representação de estados coerentes. A soma das aproximações assintóticas é finalmente feita, se mais de um ponto crítico existir. Para um ponto crítico de primeira ordem (que é o tipo que iremos considerar), a expansão final resulta

$$I(\lambda) \approx g(\bar{z}) \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda|w''(\bar{z})|}} \exp \left[ \lambda w(\bar{z}) + i \left( (2p+1)\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2} \right) \right], \quad (1.18)$$

onde  $\alpha = \arg[w''(\bar{z})]$ . Aqui  $p = 0, 1$ , de acordo com a direção de declive descendente tomada, qual das duas tomar depende do problema. O resultado acima foi obtido expandindo-se até segunda ordem (admitindo-se que  $w''(\bar{z}) \neq 0$ ), e fazendo a integral aproximada (forma gaussiana).

O ponto é que a integral (1.14) também pode ser aproximada via método de fase estacionária com  $\lambda = \hbar^{-1}$ . O processo pode ser visto como a aplicação do método de fase estacionária a um limite de infinitas integrais e, ao invés de pontos estacionários, o passo 1 descrito anteriormente consiste na busca de todas as *trajetórias estacionárias* que contribuem significativamente para o integrando. O espaço onde essas trajetórias existem é o espaço de fases (pela forma de  $z$  dado em (1.4)). Já podemos perceber que as trajetórias que contribuirão significativamente para a aproximação do propagador são as trajetórias geradas pela dinâmica de alguma representação de  $\hat{H}(z)$ . Todos os passos descritos anteriormente podem aqui ser aplicados, se bem que o passo 3 ainda mereça alguma análise posterior. O passo 5 consiste na soma das diversas contribuições (diversas trajetórias satisfazendo aos mesmos vínculos do propagador).

Levando em conta essas considerações, notamos que o argumento da exponencial, função  $S$ , deve ser estacionarizado,

$$S = \sum_{k=0}^{N-1} -i\hbar \left[ z_{k+1}^* z_k - \frac{1}{2}|z_k|^2 - \frac{1}{2}|z_{k+1}|^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \bar{H}_{k+1/2} \right], \quad (1.19)$$

e o equivalente de (1.16) é

$$\frac{\partial S}{\partial z_k} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial z_{k+1}^*} = 0. \quad (1.20)$$

pelo que obtemos o par de relações discretas

$$\begin{aligned} -z_k^* + z_{k+1}^* - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \bar{H}_{k+1/2}}{\partial z_k} &= 0, & k = 1, 2, \dots, N-1, \\ z_k - z_{k+1} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \bar{H}_{k+1/2}}{\partial z_{k+1}^*} &= 0, & k = 0, 1, \dots, N-2. \end{aligned} \quad (1.21)$$

No limite do contínuo, obtemos as relações

$$\dot{z} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \bar{H}}{\partial z^*}, \quad \dot{z}^* = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \bar{H}}{\partial z}, \quad (1.22)$$

onde  $\bar{H} = \langle z | \hat{H} | z \rangle$ . As soluções das relações (1.22) foram discutidas parcialmente em [17] e [18], e o ponto fundamental diz respeito às condições de fronteira. Se tentarmos resolver as relações (1.22) com  $z(t') = z'$  e  $z^*(t'') = z''^*$ , vemos imediatamente que tais condições restringem muito o conjunto de soluções possíveis. De fato, como pode haver uma trajetória em um espaço de fases de duas dimensões se  $z'$ ,  $z''^*$  e  $t'' - t'$  são dados (5 parâmetros)? A maneira de resolver tal restrição é dada pelas equações discretas (1.21), onde notamos que  $z_0^*$  e  $z_N$  nunca aparecem. Assim sendo, deve-se procurar por soluções de (1.22) com  $z(t') = z'$  e  $z^*(t'') = z''^*$ , mas  $z^*(t') \neq z'^*$  e  $z(t'') \neq z''$ . Soluções gerais satisfazendo às condições acima existem em um espaço de fases complexo, razão porque a aproximação semiclássica do propagador em estados coerentes tratado aqui vai se basear totalmente em trajetórias estacionárias em um espaço complexo. Devido a essa diferença nos pontos de fronteira das soluções, tudo acontece como se as variáveis  $z$  e  $z^*$  não fossem complexas conjugadas uma da outra. Trabalhos na mesma direção já foram feitos [20], sem, entretanto, procurar diretamente soluções para equações do tipo (1.22). A fim de facilitar a notação das condições de contorno e, dado a variedade de soluções obtidas, usaremos uma nova notação, onde as variáveis  $u$  e  $v$  substituem  $z$  e  $z^*$ , respectivamente. Assim escrevemos ( $bc = \hbar$ )

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right), \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q}{b} - i \frac{p}{c} \right), \quad (1.23)$$

que substituem (1.4), com a diferença de que agora  $q$  e  $p$  são variáveis complexas.

Nessa nova notação, as relações (1.22) tornam-se<sup>2</sup>

$$i\hbar\dot{u} = \frac{\partial\bar{H}}{\partial v}, \quad -i\hbar\dot{v} = \frac{\partial\bar{H}}{\partial u}, \quad (1.24)$$

que obedecem às condições de contorno

$$z' = u(t') = u' = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q'}{b} + i\frac{p'}{c} \right), \quad z''^* = v(t'') = v'' = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{q''}{b} - i\frac{p''}{c} \right), \quad (1.25)$$

onde  $q'$ ,  $q''$ ,  $p'$  e  $p''$  são parâmetros reais. Note, também, que nada se diz sobre  $u''$  e  $v'$ , que são determinados *a posteriori* a partir das soluções. As trajetórias clássicas obtidas por esse tipo de dinâmica estendida são muito peculiares. Adiantamos que todas as funções dinâmicas do sistema vão apresentar uma parte real e uma contra-parte imaginária (que denotaremos com subíndices 1 e 2 respectivamente), isto é, podemos escrever  $E = E_1 + iE_2$  para a energia estendida, e  $S = S_1 + iS_2$  para a ação estendida. A liberdade na escolha dos parâmetros finais e iniciais é muito maior ou, de outra forma, a dinâmica usual pode ser vista como um sub-conjunto das soluções possíveis de (1.23). Esse conjunto tem a propriedade especial de que

$$u^*(t) = v(t) \quad (1.26)$$

para todo  $t$  entre 0 e  $T$ . Isso quer dizer que, para trajetórias reais, as trajetórias  $u$  e  $v$  são conjugadas uma da outra. Para tais trajetórias  $E_2 = 0$  e  $S_2 = 0$ . É possível, entretanto, encontrar trajetórias atípicas, para as quais a parte imaginária de alguma dessas funções é nula e, mesmo assim, a trajetória está fora do plano real.

### 1.3 Forma Semiclássica do Propagador

Denotando-se  $\Psi = iS/\hbar$ , então, nas variáveis  $u$  e  $v$ , podemos escrever de acordo com (1.19)

$$\Psi = \sum_{k=0}^{N-1} \left[ v_{k+1}u_k - \frac{1}{2}u_kv_k - \frac{1}{2}u_{k+1}v_{k+1} \right] - \frac{i\epsilon}{\hbar}\bar{H}_{k+1/2}, \quad (1.27)$$

<sup>2</sup>Vê-se aqui que o hamiltoniano efetivo é  $\bar{H} = \langle z|\hat{H}|z\rangle$ , que assume o papel de hamiltoniano clássico. Essa interpretação pode ser inserida dentro do conceito de *princípio de correspondência fraco* [24].

com os limites em  $k$  estabelecidos em (1.21). Se denotarmos por  $\bar{w}_k = (\bar{v}_{k+1}, \bar{u}_k)$  como a trajetória estacionária, então a primeira variação de  $\Psi$  em relação a tal trajetória é

$$\delta\Psi = \sum_{k=0}^{N-2} \frac{\partial\Psi}{\partial v_{k+1}} \delta v_{k+1} + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial\Psi}{\partial u_k} \delta u_k = 0, \quad (1.28)$$

com

$$\delta v_{k+1} = v_{k+1} - \bar{v}_{k+1}, \quad \delta u_k = u_k - \bar{u}_k. \quad (1.29)$$

Já sabemos que a relação (1.28) conduz às relações (1.24) conforme a seção anterior. Nosso objetivo aqui é avaliar a segunda variação  $\delta^2\Psi$ . Essa se escreve

$$\begin{aligned} \delta^2\Psi &= \sum_{j=0}^{N-2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial^2\Psi}{\partial v_{j+1} \partial v_{k+1}} \delta v_{j+1} \delta v_{k+1} + \sum_{j=0}^{N-2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial^2\Psi}{\partial v_{j+1} \partial u_k} \delta v_{j+1} \delta u_k + \\ &\quad \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial v_{k+1} \partial u_j} \delta v_{k+1} \delta u_j + \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial^2\Psi}{\partial u_j \partial u_k} \delta u_k \delta u_j, \end{aligned} \quad (1.30)$$

com

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial v_{j+1} \partial u_{k+1}} = -\frac{\imath\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial v_{j+1} \partial u_{k+1}} \delta_{jk},$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial u_k \partial u_j} = -\frac{\imath\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial u_k \partial u_j} \delta_{kj},$$

(1.31)

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial v_{j+1} \partial u_k} = \delta_{jk} - \delta_{j+1,k} - \frac{\imath\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial v_{j+1} \partial u_k} \delta_{jk},$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial u_j \partial v_{k+1}} = \delta_{jk} - \delta_{j,k+1} - \frac{\imath\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial u_j \partial v_{k+1}} \delta_{jk}.$$

Fazendo-se as somas, a segunda variação de  $S$ ,  $\delta^2 S$ , torna-se:

$$\begin{aligned} \delta^2 S &= \sum_{k=1}^{N-1} 2\imath\hbar \delta v_k \delta u_k - \sum_{k=1}^{N-2} \left( 2\imath\hbar + 2\hbar\epsilon C_{k+1/2} \right) \delta v_{k+1} \delta u_k - \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} \hbar\epsilon A_k \delta^2 v_k - \sum_{k=1}^{N-1} \hbar\epsilon B_k \delta^2 u_k, \end{aligned} \quad (1.32)$$

onde

$$A_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial v_k^2}, \quad B_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial u_k^2}, \quad C_{k+1/2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}_{k+1/2}}{\partial v_{k+1} \partial u_k}. \quad (1.33)$$

A substituição de (1.32) em (1.14) resulta, a um passo antes da execução das integrais, em

$$K(z'', z', t'' - t') = \exp \left[ \frac{iS(\bar{w})}{\hbar} \right] \int \dots \int \prod_{k=1}^{N-1} \frac{dv_k du_k}{\pi} \exp \left[ \frac{i\delta^2 S(\bar{w})}{2\hbar} \right]. \quad (1.34)$$

Como dissemos anteriormente as integrais em (1.34) [18] são do tipo gaussiano, com argumento de exponencial não diagonal. Uma transformação diagonalizadora pode, entretanto, ser feita sobre (1.32). A forma final final fica

$$\tilde{K}(z'', z', t'' - t') = \sqrt{\frac{1}{\Delta}} \exp \left[ \frac{iS(\bar{w})}{\hbar} \right], \quad (1.35)$$

onde  $\Delta = \lim_{N \rightarrow \infty} \Delta_N$ , e  $\Delta_N$  é o determinante da matriz

$$\Delta_N = \begin{pmatrix} -\epsilon \mathcal{B}_{N-1} & i & 0 & 0 & \dots & 0 \\ i & -\epsilon \mathcal{A}_{N-1} & -(i + \epsilon \mathcal{C}_{N-3/2}) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -(i + \epsilon \mathcal{C}_{N-3/2}) & -\epsilon \mathcal{B}_{N-2} & i & \dots & 0 \\ 0 & 0 & i & -\epsilon \mathcal{A}_{N-2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & i \\ 0 & 0 & 0 & \dots & i & -\epsilon \mathcal{A}_1 \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

De fato, esse determinante pode ser resolvido definindo-se um determinante auxiliar  $\Delta'_N$ , que é o determinante da matriz acima sem a primeira linha e coluna. Assim, existem as seguintes relações de recorrência

$$\Delta_N = -\epsilon \mathcal{B}_{N-1} \Delta'_N + \Delta_{N-1}, \quad (1.37)$$

$$\Delta'_N = -\epsilon \mathcal{A}_{N-1} \Delta_{N-1} - (i + \epsilon \mathcal{C}_{N-3/2})^2 \Delta'_{N-1}. \quad (1.38)$$

Se definirmos

$$f_N = \Delta_N, \quad g_N = i \Delta'_N, \quad (1.39)$$

então expandimos em primeira ordem  $(i + \epsilon \mathcal{C}_{N-3/2})^2 \simeq -1 + 2i\epsilon \mathcal{C}_{N-3/2}$ , com o que obtemos, no limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , o par de equações diferenciais de primeira ordem

$$\dot{f} = i \mathcal{B} g, \quad \dot{g} = -i \mathcal{A} f - 2i \mathcal{C} g. \quad (1.40)$$

Se redefinirmos novamente as funções

$$\phi(t'') = f(t'') \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^{t''-t'} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} dt'' \right], \quad \gamma(t'') = g(t'') \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^{t''-t'} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} dt'' \right], \quad (1.41)$$

com as condições iniciais  $\phi(0) = 1$  e  $\gamma(0) = 0$ , obtemos o sistema

$$\begin{pmatrix} \dot{\phi} \\ \dot{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\mathcal{C} & i\mathcal{B} \\ -i\mathcal{A} & -i\mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \gamma \end{pmatrix}. \quad (1.42)$$

As relações (1.42) são justamente equações linearizadas de movimento ao redor de uma trajetória clássica (complexa) do sistema. Assim o determinante de (1.36) é (com  $T = t'' - t'$ )

$$\Delta = \phi(T) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} dt \right], \quad (1.43)$$

### 1.3.1 Ação Complexa.

Podemos escrever (1.19) na forma (já substituído o novo sistema de coordenadas  $u$  e  $v$  dependendo do hamiltoniano clássico):

$$S = \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left[ -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{v_{k+1} - v_k}{\epsilon} u_k - v_{k+1} \frac{u_{k+1} - u_k}{\epsilon} \right) - \bar{H}(u_k, v_{k+1}) \right]. \quad (1.44)$$

Lembrando que na expressão original de  $S$ , Eq. (1.19), onde aparecem explicitamente  $z_N^* z_N$  e  $z_0 z_0^*$ , substituímos  $v_N u_N$  por  $v_N z''$  e  $v_0 u_0$  por  $u_0 z'^*$ . Com isso, a forma final no limite  $\epsilon \rightarrow 0$  fica

$$S(v'', u', T) = \int_0^T dt \left[ \frac{i\hbar}{2} (v\dot{u} - \dot{v}u) - \bar{H}(u, v) \right] - \frac{i\hbar}{2} (v''u'' + v'u') + \frac{i\hbar}{2} (|v''|^2 + |u'|^2). \quad (1.45)$$

Chamaremos a função (1.45) de *ação parcial complexa*, porque sua forma é remanescente da ação clássica usual.

Definimos também a *ação complexa*,

$$S(v'', u', T) = S(v'', u', T) - \frac{i\hbar}{2} (|v''|^2 + |u'|^2), \quad (1.46)$$

em termos da qual, usando argumentos variacionais usuais, podemos obter

$$-i\hbar u'' = \frac{\partial S}{\partial v''}, \quad -i\hbar v' = \frac{\partial S}{\partial u'}, \quad -E = \frac{\partial S}{\partial T}, \quad (1.47)$$

onde  $E = \bar{H}(u, v)$  é a energia complexa.

Falta, entretanto, a determinação completa da função  $\Delta$  do pré-fator do propagador (1.35). Como vimos na seção anterior, (1.42) representa equações de movimento linearizadas ao redor de uma trajetória clássica. A identificação de  $\mathcal{S}$  com a ação do sistema permite determinar  $\phi(T)$  em termos de variações da ação complexa. Para tanto, consideremos uma trajetória que difira da trajetória estacionária (aquela que resolve (1.24)) pelas quantidades  $\delta u'$ ,  $\delta u''$ ,  $\delta v'$  e  $\delta v''$ . Tais diferenças podem ser relacionadas usando (1.47), pelo que

$$-i\hbar\delta u'' = \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\partial u' \partial v'} \delta u' + \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v''^2} \delta v'', \quad (1.48)$$

$$-i\hbar\delta v' = \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u'^2} \delta u' + \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v'' \partial u'} \delta v''.$$

Por outro lado, as relações (1.42) fornecem as mesmas variações usando as equações de Hamilton (1.24). Mais explicitamente

$$\delta \dot{u} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} \delta u' - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial v^2} \delta v', \quad (1.49)$$

$$\delta \dot{v} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} \delta v' + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u^2} \delta u'.$$

Em termos de variações de  $\mathcal{S}$ , invertemos (1.48) a fim de que

$$\begin{pmatrix} \delta u'' \\ \delta v'' \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \delta u' \\ \delta v' \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

onde  $\mathcal{M}$  é a *matriz de monodromia* do sistema dada por

$$\begin{pmatrix} \frac{i}{\hbar} [S_{uv} - S_{uu} S_{vv} S_{uv}^{-1}] & S_{uv} S_{uv}^{-1} \\ -S_{uu} S_{uv}^{-1} & -i\hbar S_{uv}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

e

$$S_{uu} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u'^2}, \quad S_{uv} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u' \partial v''}, \quad S_{vv} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v''^2}. \quad (1.52)$$

Se  $\delta v' = 1$  e  $\delta u' = 0$ , então podemos identificar  $\phi(T)$  em (1.50), levando em conta (1.42), como  $\phi(T) = \delta v''$  e, assim, como  $-i\hbar S_{uv}^{-1}$ . Finalmente temos

$$\Delta = i\hbar \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} dt \right]. \quad (1.53)$$

A forma final do propagador semiclássico na representação de estados coerentes torna-se

$$\begin{aligned} \tilde{K}(v'', u', T) = & e^{-\frac{1}{2}|v''|^2 - \frac{1}{2}|u'|^2} \sum_j \sqrt{\frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial^2 \mathcal{S}_j}{\partial u' \partial v''} \right|} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_j(v'', u', T) + \right. \\ & \left. + \frac{i}{2\hbar} \int_0^T \frac{\partial^2 \tilde{H}_j}{\partial u \partial v} dt + \frac{i\pi}{2} \sigma \right], \end{aligned} \quad (1.54)$$

onde a soma representa a inclusão de todas as trajetórias estacionárias possíveis compatíveis com os vínculos  $v'' = z''^*$ ,  $u' = z'$ ,  $T = t'' - t'$ . O termo contendo  $\sigma$  representa a fase acumulada por  $iS_{uv}$  ao longo de uma trajetória.

### 1.3.2 Aproximação válida no limite semiclássico.

É possível uma simplificação da relação (1.54) que tem validade no limite semiclássico (isto é,  $\hbar$  verdadeiramente pequeno). Admitindo-se um sistema com operador hamiltoniano na forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2 + \hat{V}(q), \quad (1.55)$$

podemos escrever a forma suavizada

$$\tilde{H} = H + \frac{1}{2}\hbar\omega + [\tilde{V}(q) - V(q)], \quad (1.56)$$

onde  $H$  é o hamiltoniano clássico (isto é, independente de  $\hbar$ ) e

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}b} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-q)^2/b^2} V(x) dx \quad (1.57)$$

é a suavização gaussiana do potencial. Lembramos aqui que  $b = \Delta q$ , isto é, a incerteza do estado inicial com relação à posição. Podemos verificar que, no limite  $b \rightarrow 0$ , reobtemos o potencial clássico. Para isso observamos que

$$\Phi_b(x - q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}b} e^{-(x-q)^2/b^2} \quad (1.58)$$

é uma representação da função  $\delta(x - q)$  no limite considerado. Se  $b$  for pequeno, então podemos ver que

$$\tilde{V}(q) - V(q) \simeq \frac{b^2}{4} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}. \quad (1.59)$$

Substituindo a expressão acima em (1.56) e notando-se que, se  $H_0 = p^2/2 + \omega^2 q^2/2$ , então  $\partial^2 \bar{H}_0 / \partial u \partial v = \hbar \omega$  e  $\bar{H} = H_0 + \bar{V}(q) + \hbar \omega/2$ , com o que

$$\bar{H} - H \simeq \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} \quad (1.60)$$

para  $\hbar \simeq 0$ . Retornando às expressões (1.45) e (1.54), vemos que, se substituirmos a expressão (1.60) na forma de  $S$ , obtemos uma forma "clássica" (quer dizer, escrita em termos de parâmetros independentes de  $\hbar$  nas funções dinâmicas) para o propagador (1.54), desde que também aproximemos  $\bar{H}$  por  $H$  na segunda derivada desse elemento em (1.60). Assim

$$\tilde{S}(v'', u'', T) = \int_0^T dt \left[ \frac{i\hbar}{2} (v\dot{u} - \dot{v}u) - H(u, v) \right] - \frac{i\hbar}{2} (v''u'' + v'u') + \frac{i\hbar}{2} (|v''|^2 + |u'|^2), \quad (1.61)$$

e

$$\tilde{K}_{\hbar=0}(v'', u', T) = e^{-\frac{1}{2}|v''|^2 - \frac{1}{2}|u'|^2} \sum_j \sqrt{\frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial^2 \tilde{S}_j}{\partial u' \partial v''} \right|} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j + \frac{1}{2} \pi \sigma \right] \quad (1.62)$$

Aqui ( $\hbar \rightarrow 0$ ) representa a aproximação descrita acima; a saber, a substituição de  $\bar{H}$  por  $H$  onde quer que aquele apareça, com a qual (1.62) é a forma semiclássica do propagador, válida no limite semiclássico [18]. O elemento  $\tilde{S}$  é a ação para essa aproximação

$$\tilde{S}(v'', u', T) = \bar{S}(v'', u', T) - \frac{i\hbar}{2} (|v''|^2 + |u'|^2) \quad (1.63)$$

No tratamento de sistemas com valores maiores de  $\hbar$ , porém, a forma (1.54) deve obrigatoriamente ser usada, como veremos posteriormente no tratamento de espalhamento semiclássico. Adiantamos, entretanto, que a forma (1.62) foi usada com sucesso em dois sistemas (poço infinito e oscilador anarmônico), sendo que os resultados concordam *grosso modo* com os obtidos via cálculo de autofunções, mesmo para as regiões do espaço de fases de baixo momento. Para a aproximação que faremos a seguir, usaremos também a forma (1.62), uma vez que faremos uma nova expansão do propagador, desta vez em termos de órbitas periódicas reais do sistema, o que é válido em princípio para estados quânticos para os quais tais trajetórias guardem correspondência. Isso é naturalmente válido no limite clássico e para regiões de energia onde esse movimento seja permitido.

## 1.4 Aproximação real para elementos diagonais

Ainda segundo [18], é possível uma segunda aproximação sobre a forma (1.62). Essa se baseia em trajetórias reais tão somente, e se aplica portanto aos elementos  $K(z'', z', T)$  para os quais exista uma trajetória real desde  $z'$  até  $z''$  em um tempo  $\tau \simeq T$ . Na maioria dos casos de interesse, sempre existe tal trajetória, como no caso de sistemas ligados, por exemplo. Há entretanto exemplos onde trajetórias reais não existem, como os sistemas de barreira de potencial, onde não é possível expandir o propagador nesses termos para a região de energia abaixo da barreira. Aqui trataremos exclusivamente de elementos para os quais a aproximação possa ser feita por órbitas periódicas.

Uma maneira simples de se introduzir essa aproximação é estudar o elemento diagonal  $\langle z | \exp(-i\hat{H}T/\hbar) | z \rangle$ , que têm uma interpretação física interessante. Parte-se com um pacote gaussiano  $|z\rangle$  em  $t' = 0$ , que é evoluído pelo tempo  $T$  pela dinâmica do sistema, e pergunta-se qual a probabilidade de se encontrar o estado final resultante no próprio estado inicial. Se o pacote inicial não sofre muitas distorções com a evolução temporal, é natural esperar-se que, segundo o teorema de Ehrenfest, o pacote siga aproximadamente uma trajetória clássica. Nesse caso, a probabilidade será máxima toda vez que o pacote final se localizar próximo ao pacote inicial. Isso ocorrerá naturalmente nas proximidades de uma órbita periódica do sistema, seja quando, para um dado  $T$ , lançamos pacotes iniciais com  $\langle p \rangle$  e  $\langle q \rangle$  próximos às regiões de existência dessas órbitas e quando  $T \approx \tau_n$ , onde  $\tau_n = n\tau_0$ , sendo  $\tau_0$  o período primitivo da órbita periódica existente para  $\langle p \rangle$  e  $\langle q \rangle$ ,

Em sistemas unidimensionais ligados, todas as trajetórias reais são periódicas. Em outras palavras, para todo ponto  $z$  no espaço de fases, existe um tempo  $\tau$  tal que o ponto final coincide com o inicial. Tanto para sistemas unidimensionais ligados ou abertos, um ponto inicial  $z'$  está ligado ao ponto final  $z''$  pelo tempo  $\tau$  correspondente ao tempo clássico de evolução por uma trajetória real onde, entretanto, o ponto final  $z''$  é muito especial (de fato, o ponto final não é dado). Quando  $z' = z''$ , a trajetória é uma órbita periódica com o correspondente período.

A aproximação real é feita expandindo-se até segunda ordem a ação (1.61) aproxi-

mada em torno da órbita periódica

$$\tilde{S}(z^*, z, T) \simeq \tilde{S}(z^*, z, \tau) + \frac{\partial \tilde{S}}{\partial T} \delta T + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial T^2} \delta T^2, \quad (1.64)$$

onde  $\delta T = \tau - T$ . Utilizando-se (1.47) e (1.46), encontramos

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T} = -E_0, \quad (1.65)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial T^2} = -\frac{\partial H}{\partial v'} \frac{\partial v'}{\partial T} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial v'} \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial u' \partial T}, \quad (1.66)$$

onde aqui  $E_0$  é a energia (real) da órbita periódica. Usando a relação

$$H\left(\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial v''}, v''\right) = -\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T}, \quad (1.67)$$

diferenciada em ambos os lados em termos de  $u'$ , temos que

$$\frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial T^2} = -i\dot{v} \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial u' \partial v''} = -\alpha. \quad (1.68)$$

Substituindo as aproximações acima em (1.54), temos

$$\tilde{K}(z, z, T) \simeq \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{S}(z^*, z, \tau)}{\partial u' \partial v''}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \tilde{S}(z^*, z, \tau) - |z|^2 - \frac{i}{\hbar} E_0(\tau - T) - \frac{i}{2\hbar} \alpha(\tau - T)^2 \right]. \quad (1.69)$$

Onde retiramos a soma sobre trajetórias possíveis, já que, para sistemas unidimensionais ligados, só existe uma órbita periódica para cada ponto  $z$  do espaço de fases.

Ao longo deste trabalho teremos a oportunidade de testar a validade da aproximação real, calculando (1.69) para dois sistemas unidimensionais: o exemplo do potencial quártico (Capítulo 2) e a partícula na caixa (Capítulo 3). Os elementos diagonais são importantes na determinação de uma aproximação semiclássica para a função de Green na representação de estados coerentes, que é dada pela transformada de Fourier para energia do propagador temporal aproximado [18],

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \tilde{K}(z, z, T) \exp[i(E + i\gamma)T/\hbar] dT = \sum_n \frac{|(z|\tilde{\Psi}_n)|^2}{E - \tilde{E}_n + i\gamma}, \quad (1.70)$$

onde admitimos um sistema com distribuição de níveis não degenerada. O fator  $\gamma$  age como termo de suavização. Como se vê em (1.70), os resíduos na parte direita são as projeções de  $|\tilde{\Psi}_n\rangle$  nos estados  $|z\rangle$ , que são as funções de Husimi [5] (semiclássicas) para cada nível, e os polos são os níveis de energia semiclássicos  $\tilde{E}_n$ .

## 1.5 Exemplos Simples

Alguns exemplos simples servem para ilustrar a aproximação semiclássica que apresentamos. Particularmente interessantes, porque exatos, ou seja, a aproximação semiclássica obtida coincide com o cálculo quântico exato, são o oscilador harmônico e a partícula livre.

### 1.5.1 O Oscilador Harmônico.

Como gerador da representação de estados coerentes, a aproximação semiclássica para o propagador é exata. Na verdade, todo sistema descrito por hamiltonianos quadráticos tem aproximação semiclássica exata. Partimos da função hamiltoniana clássica que é

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\omega^2}{2}q^2, \quad (1.71)$$

com frequência característica  $\omega$ . Sob a aplicação de (1.23), encontramos a forma quadrática

$$\bar{H}(u, v) = \lambda(u^2 + v^2) + 2\gamma uv + \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad (1.72)$$

onde

$$\lambda = \frac{\omega^2 b^2 - c^2}{4}, \quad \gamma = \frac{\omega^2 b^2 + c^2}{4}. \quad (1.73)$$

Como  $bc = \hbar$ , então, na verdade, o hamiltoniano (1.72) só depende de um parâmetro pelo que

$$\lambda^2 = \gamma^2 - \frac{\omega^2 \hbar^2}{4}. \quad (1.74)$$

Aplicando-se (1.24), encontramos o sistema para  $u$  e  $v$

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \frac{2i}{\hbar} \begin{pmatrix} -\gamma & -\lambda \\ \lambda & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (1.75)$$

A matriz característica de (1.75) tem auto-valores  $\pm i\omega$ , de forma que uma solução genérica do sistema será

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} = C^+ \begin{pmatrix} \zeta \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega t} + C^- \begin{pmatrix} 1 \\ \zeta \end{pmatrix} e^{-i\omega t}, \quad (1.76)$$

onde

$$\zeta = \sqrt{\frac{\gamma - \hbar\omega/2}{\gamma + \hbar\omega/2}}. \quad (1.77)$$

Aplicando-se as condições de contorno  $u(0) = u'$  e  $v(T) = v''$ , encontramos  $C^+$  e  $C^-$ , e as trajetórias complexas

$$u(t) = \frac{u' \left( \zeta^2 e^{i\omega(t-T)} - e^{-i\omega(t-T)} \right) + 2iv''\zeta \sin \omega t}{\zeta^2 e^{-i\omega T} - e^{i\omega T}}, \quad (1.78)$$

$$v(t) = \frac{2iu'\zeta \sin \omega(t-T) + v'' \left( \zeta^2 e^{-i\omega t} - e^{i\omega t} \right)}{\zeta^2 e^{-i\omega T} - e^{i\omega T}}. \quad (1.79)$$

Note que, pelas equações acima,  $u^*(T) \neq v''$  e  $v(0) \neq u'^*$ . O movimento simplifica bastante se considerarmos  $\zeta = 0$  ou  $\gamma = \hbar\omega/2$ . Nesse caso

$$u(t) = u' e^{-i\omega t}, \quad v(t) = v'' e^{-i\omega(t-T)}. \quad (1.80)$$

Notamos que  $u(t) \neq v^*(t)$ , a não ser no caso especial quando  $u' = v''^*$  e  $T = 2n\pi/\omega$ , com  $n$  um número inteiro. Sendo a parte integral da ação (1.46)  $-\hbar\omega T/2$ , temos

$$S = -i\hbar u' v'' e^{-i\omega T} - \frac{\hbar\omega T}{2}. \quad (1.81)$$

A energia do sistema é

$$E(v'', u', T) = \hbar\omega u' v'' e^{-i\omega T} + \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (1.82)$$

onde notamos que a energia mínima é  $\hbar\omega/2$ , como não poderia deixar de ser. De acordo com (1.81),

$$\frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} = -i\hbar e^{-i\omega T}, \quad (1.83)$$

e, como só existe uma trajetória para  $z''$ ,  $z'$  e  $T$  dados, o propagador fica

$$K(z'', z', T) = \exp \left[ -\frac{i\omega T}{2} + z' z''^* e^{-i\omega T} - \frac{1}{2} (|z''|^2 + |z'|^2) \right], \quad (1.84)$$

que coincide com o propagador calculado a partir métodos quânticos usuais. Chamamos a atenção para o fato de termos obtido aqui explicitamente a fase  $\sigma$  do pré-fator.

### 1.5.2 Partícula Livre.

Para a partícula livre o hamiltoniano é simplesmente  $H = p^2/2$ , cuja forma complexa é

$$\bar{H}(u, v) = \frac{\beta\hbar}{2}(2uv - u^2 - v^2) + \frac{1}{2}\hbar\beta, \quad (1.85)$$

onde definimos  $\beta = c^2/2\hbar$ .

As equações (1.24) resultam no sistema

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} -\beta & \beta \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (1.86)$$

Os auto-valores da matriz em (1.86) são nulos. Isso significa que o movimento é do tipo  $u = At + B$  e  $v = Ct + D$ . Aplicando-se as condições de contorno usuais, encontramos as trajetórias

$$u(t) = \frac{i\beta}{1 + i\beta T}(v'' - u')t + u', \quad (1.87)$$

$$v(t) = \frac{i\beta}{1 + i\beta T}(v'' - u')(t - T) + v'', \quad (1.88)$$

de onde temos a energia

$$E(v'', u', T) = -\frac{\beta\hbar}{2} \left( \frac{v'' - u'}{1 + i\beta T} \right)^2 + \frac{1}{2}\hbar\beta, \quad (1.89)$$

onde também chamamos a atenção para a “energia de ponto zero”, proveniente da incerteza em momento,  $\hbar\beta/2$ . Temos também explicitamente a ação

$$S(v'', u', T) = -\frac{i\hbar}{2} \left[ \frac{i\beta T(v''^2 + u'^2) + 2u'v''}{1 + i\beta T} \right] - \frac{1}{2}\hbar\beta T. \quad (1.90)$$

Como só existe uma trajetória estacionária para cada condição de contorno, podemos calcular facilmente o propagador, que também coincide com o resultado exato,

$$K(v'', u', T) = \frac{1}{\sqrt{1 + i\beta T}} \exp \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{2u'v'' + i\beta T(u'^2 + v''^2)}{1 + i\beta T} \right) - \frac{1}{2}(|u'|^2 + |v''|^2) \right]. \quad (1.91)$$

## Capítulo 2

# O Oscilador Quártico

A fim de que o método exposto no capítulo anterior tenha uma aplicação geral (isto é, seja aplicável a uma grande gama de potenciais possíveis), desenvolvemos aqui um método de cálculo numérico das trajetórias complexas que serve também para a determinação do propagador semiclássico. O procedimento numérico exposto aqui é uma aplicação, para as equações (1.24), do método da matriz de Monodromia de Baranger *et al.* [22], que mostrou resultados muito satisfatórios nos exemplos de sistema que estudamos.

Antes de tudo, ao invés das variáveis  $u$  e  $v$ , tratamos diretamente de lidar com o espaço de fases estendido se definirmos as variáveis

$$q = x_1 + ip_2, \quad (2.1)$$

$$p = p_1 + ix_2, \quad (2.2)$$

que substituímos em (1.23). Nesse novo sistema a função hamiltoniana é (por simplicidade, omitimos a barra sobre  $H$ )

$$H = H_1(x_1, p_2, p_1, x_2) + iH_2(x_1, p_2, p_1, x_2), \quad (2.3)$$

e temos os gradientes

$$\frac{\partial}{\partial u} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ \left( b \frac{\partial}{\partial x_1} - c \frac{\partial}{\partial x_2} \right) - i \left( c \frac{\partial}{\partial p_1} + b \frac{\partial}{\partial p_2} \right) \right], \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial v} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ \left( b \frac{\partial}{\partial x_1} + c \frac{\partial}{\partial x_2} \right) + i \left( c \frac{\partial}{\partial p_1} - b \frac{\partial}{\partial p_2} \right) \right], \quad (2.5)$$

com os quais obtemos, para (1.24),

$$\dot{x}_1 = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial H_1}{\partial p_1} + \frac{\partial H_2}{\partial x_2} \right), \quad \dot{p}_1 = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial H_1}{\partial x_1} + \frac{\partial H_2}{\partial p_2} \right), \quad (2.6)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial H_1}{\partial p_2} - \frac{\partial H_2}{\partial x_1} \right), \quad \dot{p}_2 = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial H_1}{\partial x_2} - \frac{\partial H_2}{\partial p_1} \right).$$

Se nos restringirmos a funções *analíticas* tão somente, ou seja, funções que obedecem à condição de Cauchy-Riemann [27] para  $f(x, y) = f_1(x, y) + if_2(x, y)$ ,

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} = \frac{\partial f_2}{\partial y}, \quad \frac{\partial f_1}{\partial y} = -\frac{\partial f_2}{\partial x}, \quad (2.7)$$

encontramos

$$\dot{x}_1 = \frac{\partial H_1}{\partial p_1}, \quad \dot{p}_1 = -\frac{\partial H_1}{\partial x_1}, \quad (2.8)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{\partial H_1}{\partial p_2}, \quad \dot{p}_2 = -\frac{\partial H_1}{\partial x_2}.$$

As relações (2.8) mostram que (1.24) junto com (2.1) correspondem, na verdade, a um sistema de dois graus de liberdade governado pela parte real da hamiltoniana (2.3). Aqui é importante enfatizar que, não obstante o aumento no número de graus de liberdade, não há perda de integrabilidade do movimento, uma vez que a parte imagiária da energia fornece a constante de movimento adicional ( $H_1$  e  $H_2$  são invariantes do movimento). Em sua maioria, os hamiltonianos de interesse são analíticos, tendo uma forma que pode ser expandida em série polinomial

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \sum_{j=1}^N a_j q^j. \quad (2.9)$$

Por outro lado, veremos que, para potenciais descontínuos classicamente,  $\langle z | \hat{H} | z \rangle$  é, em geral, uma função classicamente suave, cuja forma complexa pode ser escrita segundo (2.9). Além disso, mesmo que se considere hamiltonianos classicamente descontínuos, é possível às vezes, sem a suavização, uma expansão polinomial. Considere, por exemplo, o sistema da partícula numa caixa (poço infinito, ver Capítulo 3), que é um exemplo de hamiltoniano não analítico que pode ser tratado por (2.8). Vejamos que a partícula na caixa pode ser descrita pelo limite de um hamiltoniano polinomial de grau elevado

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{2q}{L} \right)^n. \quad (2.10)$$

onde  $L$  é a dimensão do poço. O método descrito aqui é aplicável a sistemas do tipo (2.9).

Quanto às condições (1.25), no novo sistema de coordenadas temos

$$\begin{aligned}x_1(0) - \frac{b}{c}x_2(0) &= q', \\x_1(T) + \frac{b}{c}x_2(T) &= q'', \\p_1(0) + \frac{c}{b}p_2(0) &= p', \\p_1(T) - \frac{c}{b}p_2(T) &= p''.\end{aligned}\tag{2.11}$$

Como se vê por (2.11), a resolução (2.8) não pode ser feita normalmente como para um sistema de equações diferenciais de primeira ordem obedecendo a condições de contorno usuais. É necessário levar em conta as condições de fronteira mistas dadas por (2.11).

## 2.1 O Método da Matriz de Monodromia

Apresentamos inicialmente [26] em linhas gerais o método de integração descrito em [22], após o que aplicamos o método à resolução das equações (2.8). Partimos de um hamiltoniano geral bidimensional na forma

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{1}{2}p_y^2 + V(x, y),\tag{2.12}$$

através do qual integramos as equações de movimento. Dividimos o tempo total  $T$  de uma trajetória solução em  $N$  intervalos  $\epsilon$ ,  $T = N\epsilon$ , de forma a obtermos equações discretizadas de movimento

$$\begin{aligned}x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} + \epsilon^2 \frac{\partial V}{\partial x}(x_n, y_n) &= 0, \\y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} + \epsilon^2 \frac{\partial V}{\partial y}(x_n, y_n) &= 0.\end{aligned}\tag{2.13}$$

A solução que satisfaz às equações de movimento é obtida a partir de uma trajetória tentativa inicial que denotamos por  $(\bar{x}_n, \bar{y}_n)$ . A trajetória solução difere da tentativa

segundo

$$\begin{aligned}x_n &= \bar{x}_n + \delta x_n, \\y_n &= \bar{y}_n + \delta y_n.\end{aligned}\tag{2.14}$$

Expandimos até segunda ordem o potencial em torno da trajetória tentativa, encontrando uma relação entre as sucessivas diferenças na forma do sistema

$$\begin{pmatrix} \delta x_{n+1} \\ \delta y_{n+1} \\ \delta x_n \\ \delta y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \epsilon^2 V_{xx} & -\epsilon^2 V_{xy} & -1 & 0 \\ -\epsilon^2 V_{xy} & 2 - \epsilon^2 V_{yy} & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_n \\ \delta y_n \\ \delta x_{n-1} \\ \delta y_{n-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2.15}$$

onde  $V_{xx} = \partial V / \partial x^2$ ,  $V_{xy} = \partial V / \partial x \partial y$ , etc. O vetor  $(a_n \ b_n \ 0 \ 0)$  representa o erro característico da trajetória tentativa pela aplicação desta às equações discretas (2.13).

Representando  $r_{n+1} = (\delta x_{n+1}, \delta y_{n+1}, \delta x_n, \delta y_n)$ , podemos escrever (2.15) na forma

$$r_{n+1} = U_n r_n + C_n, \quad n = 1, \dots, N-1. \tag{2.16}$$

onde  $C_n$  contém o erro, e  $U_n$  é a matriz em (2.15). Aplicando-se sucessivamente a relação (2.15), podemos obter as novas correções para toda trajetória

$$r_N = \mathcal{M} r_1 + B. \tag{2.17}$$

Aqui  $B$  contém todo o erro das aplicações sucessivas. Se a trajetória for uma órbita periódica,  $r_N = r_1$ , podemos escrever

$$r_1 = (1 - \mathcal{M})^{-1} B. \tag{2.18}$$

Sucessivas iterações, usando a cada passo o resultado anterior, resultam na solução numérica, desde que  $B^{(m)} \rightarrow 0$  para  $m \rightarrow \infty$ , onde  $m$  é o número de iterações.

Retornemos agora ao caso da aplicação desse método às equações (2.8). O método exposto acima aplicado para equações diferenciais de segunda ordem pode ser aplicado à equações de primeira ordem. Se denotamos o vetor do espaço de fases por  $r = (x_1, x_2, p_1, p_2)$ , podemos escrever (2.8) na forma compacta (convenção do somatório)

$$\dot{r}_j = \mathcal{J}_{jk} \frac{\partial H_1(r_i)}{\partial r_k}, \tag{2.19}$$

onde

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Dividindo o intervalo de tempo  $T$  em  $(N-1)$  partes iguais de tamanho  $\epsilon$ ,  $\epsilon = T/(N-1)$ , a equação (2.19) toma a forma discreta

$$r_j^{(n+1)} = r_j^{(n)} + \epsilon \mathcal{J}_{jk} \frac{\partial H_1[\bar{r}_j^{(n)}]}{\partial r_k}, \quad (2.21)$$

onde  $\bar{r}^{(n)} = \frac{1}{2}(r^{(n+1)} + r^{(n)})$  e  $r_i^{(n)} = r_i(n\epsilon)$ . Assumindo que temos em mãos uma tentativa inicial  $r_i^{(n)}$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ , satisfazendo a (2.11), computamos a correção  $\Delta r_i^{(n)}$ , impondo que  $r_i^{(n)} + \Delta r_i^{(n)}$  satisfaz a (2.21) em primeira ordem em  $\Delta r_i^{(n)}$ . Usando

$$\frac{\partial H_1[r_i^{(n)} + \Delta r_i^{(n)}]}{\partial r_k} \simeq \frac{\partial H_1[r^{(n)}]}{\partial r_k} + \frac{\partial^2 H_1[r^{(n)}]}{\partial r_l \partial r_k} \Delta r_l^{(n)}, \quad (2.22)$$

encontramos que  $\Delta r^{(n)}$  deve satisfazer a

$$V^{(n)} \Delta r^{(n+1)} = \mathcal{U}^{(n)} \Delta r^{(n)} + \mathcal{R}^{(n)}, \quad (2.23)$$

onde

$$\mathcal{R}_j^{(n)} = -(r_j^{(n+1)} - r_j^{(n)}) + \epsilon \mathcal{J}_{jk} \frac{\partial H_1[\bar{r}^{(n)}]}{\partial r_k}, \quad (2.24)$$

$$V_{jl}^{(n)} = \delta_{jl} - \frac{\epsilon}{2} \mathcal{J}_{jk} \frac{\partial^2 H_1[\bar{r}^{(n)}]}{\partial r_l \partial r_k}, \quad (2.25)$$

e

$$\mathcal{U}_{jl}^{(n)} = \delta_{jl} + \frac{\epsilon}{2} \mathcal{J}_{jk} \frac{\partial^2 H_1[\bar{r}^{(n)}]}{\partial r_l \partial r_k}. \quad (2.26)$$

Multiplicando ambos os lados de (2.23) por  $[V^{(n)}]^{-1}$ , e usando esta equação recursivamente a partir de  $\Delta r^{(0)}$ , obtemos

$$\Delta r^{(N+1)} = \mathcal{M} \Delta r^{(0)} + \mathcal{B}, \quad (2.27)$$

onde

$$\mathcal{B} = \sum_{l=1}^{N-1} \left[ \prod_{k=l+1}^N (V^{-1} \mathcal{U})^{(k)} \right] V^{-1(l)} \mathcal{R}^{(l)} + V^{-1(0)} \mathcal{R}^{(0)}, \quad (2.28)$$

e

$$\mathcal{M} = \prod_{m=0}^N (V^{-1}\mathcal{U})^{(m)}. \quad (2.29)$$

Finalmente conectamos  $\Delta r^{(N+1)}$  a  $\Delta r^{(0)}$ , impondo-se as condições de fronteira. As relações (2.11) implicam que

$$\begin{aligned} \Delta x_1(0) &= \frac{b}{c} \Delta x_2(0), \\ \Delta p_1(0) &= -\frac{\varepsilon}{\delta} \Delta p_2(0), \\ \Delta x_1(T) &= -\frac{b}{c} \Delta x_2(T), \\ \Delta p_1(T) &= \frac{\varepsilon}{\delta} \Delta p_2(T), \end{aligned} \quad (2.30)$$

e as correções inicial e final podem ser expressas em termos de um único vetor  $W_1$  dado por

$$\Delta r^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ c/b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -b/c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1(0) \\ \Delta x_1(T) \\ \Delta p_1(0) \\ \Delta p_1(T) \end{pmatrix} \equiv A_0 W_1, \quad (2.31)$$

e

$$\Delta r^{(N+1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -c/b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & b/c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1(0) \\ \Delta x_1(T) \\ \Delta p_1(0) \\ \Delta p_1(T) \end{pmatrix} \equiv A_N W_1. \quad (2.32)$$

Substituindo (2.31) e (2.32) em (2.27), temos

$$W_1 = (A_0 - \mathcal{M}A_N)^{-1}B, \quad (2.33)$$

$$\Delta r^{(0)} = A_0(A_0 - \mathcal{M}A_N)^{-1}B,$$

que, juntamente com (2.27), determina a correção para toda trajetória.

A convergência do método é garantida desde que a trajetória tentativa inicial esteja suficientemente próxima da solução. A velocidade de convergência também depende da distância da tentativa inicial da solução. Para alguns casos como veremos existe

mais de uma trajetória satisfazendo as mesmas condições de fronteira e, dependendo da tentativa, uma ou outra solução é encontrada. Como veremos, para potenciais gerais da forma (2.9), as soluções partem de trajetórias tentativas reais, que são obtidas por outros métodos (às vezes soluções analíticas). Para a determinação de elementos diagonais ( $z'' = z'$ ) do propagador, as órbitas periódicas são as candidatas naturais ao chute inicial. Como exemplo, considere o potencial quártico  $q^4$ : Para um dado ponto  $(q, p)$  no espaço de fases, não existe em geral uma órbita periódica no tempo  $T$ . Há, entretanto, uma órbita com período  $\tau(q, p)$ , que entra no algoritmo como tentativa inicial. O procedimento consiste em usar tal tentativa inicial com uma modificação no período  $\tau$  a cada iteração.

O procedimento apresentado até aqui permite ainda a determinação do propagador. Para tanto, precisamos ainda determinar o fator  $\partial^2 \mathcal{S} / \partial u' \partial v''$ . Lembrando a relação (1.50), que escrevemos como [sendo  $s$  os elementos da matriz de (1.50)]

$$\begin{pmatrix} \delta u_1'' \\ \delta u_2'' \\ \delta v_1'' \\ \delta v_2'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11}^I & -s_{11}^{II} & s_{12}^I & -s_{12}^{II} \\ s_{11}^{II} & s_{11}^I & s_{12}^{II} & s_{12}^I \\ s_{21}^I & -s_{21}^{II} & s_{22}^I & -s_{22}^{II} \\ s_{21}^{II} & s_{21}^I & s_{22}^{II} & s_{22}^I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta u_1' \\ \delta u_2' \\ \delta v_1' \\ \delta v_2' \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

onde por  $s_{11}^I$  denotamos a parte real de  $s_{11}$ ,  $s_{11}^{II}$  a parte imaginária de  $s_{11}$  etc. A equação (2.27) aplicada à trajetória solução (parte final do processo iterativo) permite a determinação de  $\mathcal{M}$ , cujos elementos denotamos por  $m_{ij}$ , que se relaciona com os pontos inicial e final segundo

$$\begin{pmatrix} \delta x_1'' \\ \delta x_2'' \\ \delta p_1'' \\ \delta p_2'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_1' \\ \delta x_2' \\ \delta p_1' \\ \delta p_2' \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Temos apenas que estabelecer a relação (transformação de coordenadas) entre (2.34) e (2.35). Aplicamos (2.1) e (2.2) em (1.23) e (2.34), o que faz com que  $\mathcal{M}$  em (2.35) se simplifique,

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{24} & -m_{23} & m_{22} & -m_{21} \\ -m_{14} & m_{13} & -m_{12} & m_{11} \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

e

$$s_{22}^I = \frac{1}{2} \left[ m_{11} + m_{22} + \frac{c}{b} m_{12} + \frac{b}{c} m_{21} \right], \quad (2.37)$$

$$s_{22}^{II} = -\frac{1}{2} \left[ m_{14} - m_{23} + \frac{b}{c} m_{24} - \frac{c}{b} m_{13} \right]. \quad (2.38)$$

Assim sendo, de acordo com(1.51).

$$\frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial c''} = \frac{i\hbar}{s_{22}^I + i s_{22}^{II}}. \quad (2.39)$$

e o propagador pode ser calculado completamente.

## 2.2 Exemplo Numérico

Desenvolvemos um algoritmo numérico (chamado CMONOG, variante dos MONOGs de Baranger *et al* [22]) para a determinação do propagador diagonal, bem como trajetórias complexas genéricas baseado no método exposto na seção anterior. Como uma trajetória tentativa é necessária, estas são escolhidas entre as soluções analíticas da partícula livre, oscilador harmônico (ver Capítulo 1) ou uma órbita periódica real própria do sistema.

O sistema estudado é descrito pela hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\lambda}{2} q^2 + \beta q^4, \quad (2.40)$$

com  $\lambda \geq 0$  e  $\beta > 0$ . Nas coordenadas (2.1) e (2.2), a parte real da hamiltoniana toma a forma

$$H_1 = \frac{1}{2} p_1^2 + \frac{\lambda}{2} x_1^2 - \frac{\lambda}{2} p_2^2 - \frac{1}{2} x_2^2 + \beta(x_1^4 + p_2^4 - 6x_1^2 p_2^2). \quad (2.41)$$

Nas figuras 2.1-2.5 estão mostradas seqüências de trajetórias complexa no plano  $[\sqrt{2}\Re(u), \sqrt{2}\Im(u)]$  para vários valores de tempo  $T$ . Em cada uma dessas figuras, os valores de  $q', q'', p', p''$  são fixados, e os tempos finais (para cada trajetória) são

$$T_m = T_0 + (T_F - T_0) \frac{m-1}{M-1} \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (2.42)$$

Em cada figura, o valor de  $m$  está representado por um número. Nesses cálculos, usamos  $\hbar = 1$  e também  $c = 1$ , mas  $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ . A figura 2.1 mostra um exemplo

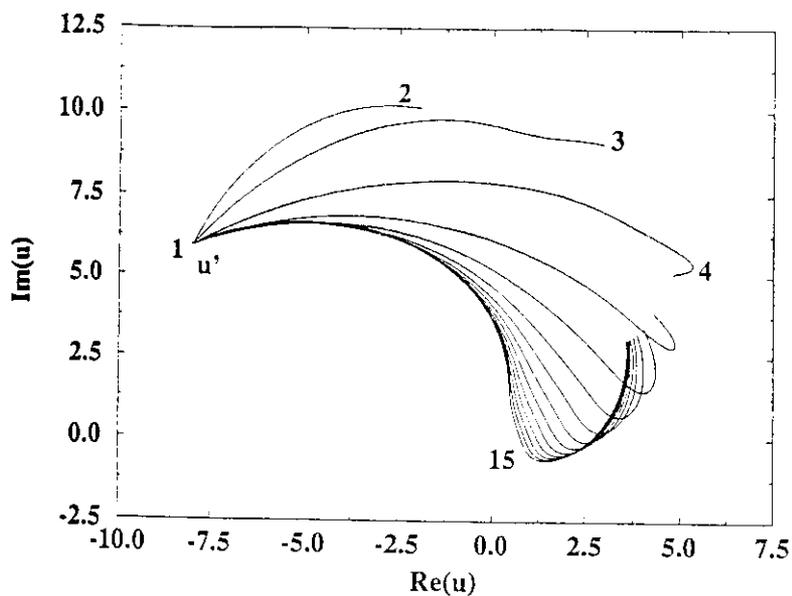


Figura 2.1: Sequência de trajetórias não diagonais complexas ( $M=15$ ) para  $q' = -8.0$ ,  $q'' = 0.0$ ,  $p' = 5.9$ ,  $p'' = 7.9$ ,  $T_0 = 0.0001$  e  $T_F = 4.5$  ( $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ ).

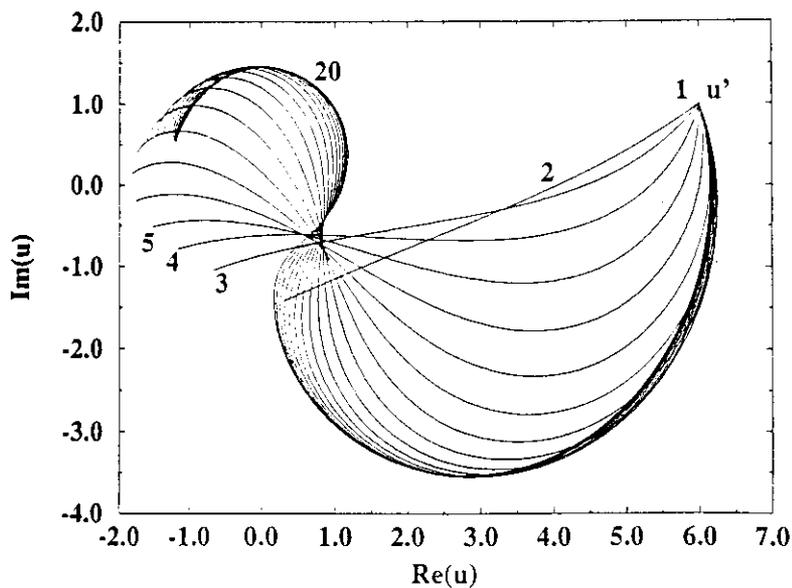


Figura 2.2: Sequência de trajetórias diagonais complexas ( $M=20$ ) com  $q' = q'' = 6.0$ ,  $p' = p'' = 1.0$ , com  $T_0 = 0.001$  e  $T_F = 4.0$  ( $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ ).

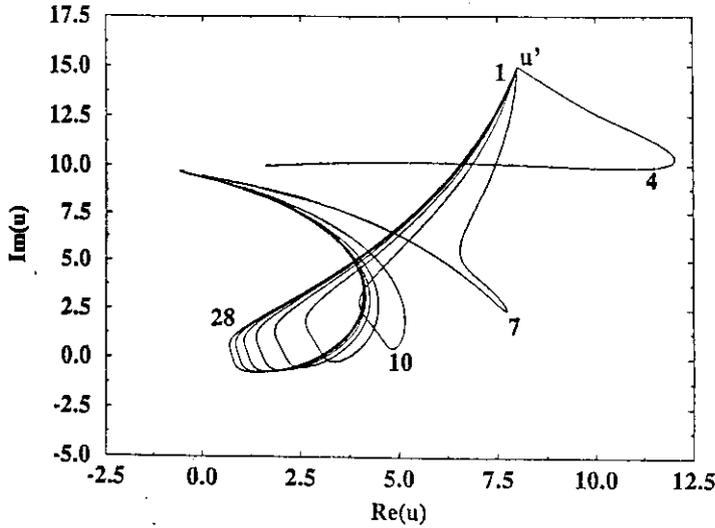


Figura 2.3: Sequência de 10 trajetórias diagonais complexas (primeira família de um conjunto de 30 trajetórias) para  $q' = q'' = 8.0$ ,  $p' = p'' = 15.0$ ,  $M = 30$  com  $T_0 = 0.0001$  e  $T_F = 5.5$  ( $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ ).

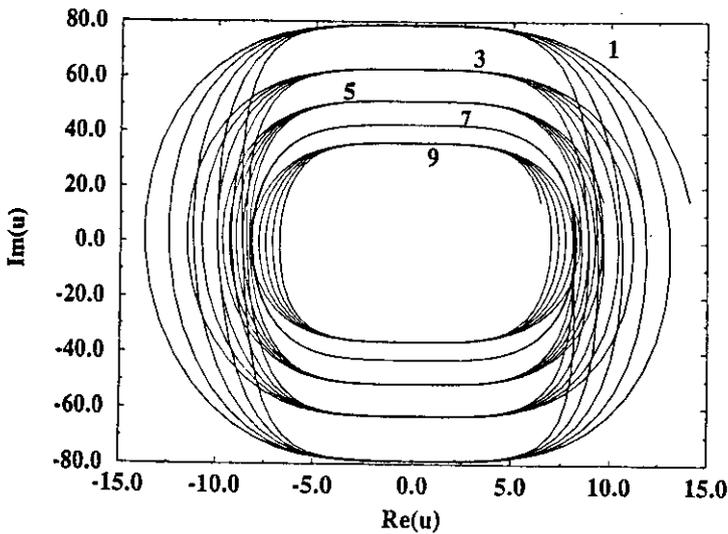


Figura 2.4: Sequência de 5 trajetórias diagonais ( $M = 10$ , família determinada a partir de uma tentativa real) que satisfaz às mesmas condições de fronteira de Fig. 2.3. mas com  $T_0 = 3.5$  e  $T_F = 5.5$ . Tais trajetórias são muito próximas das trajetórias reais ( $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ ).

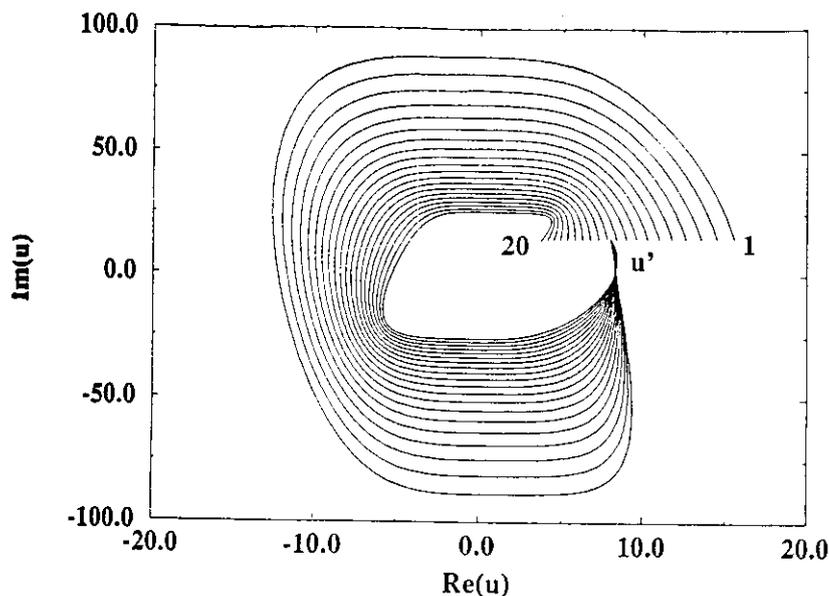


Figura 2.5: Sequência de trajetórias diagonais complexas satisfazendo a  $q' = q'' = 8.0$  e  $p' = p'' = 15.0$ .  $M = 20$ .  $T_0 = 0.7$  e  $T_F = 1.3$ . Há uma solução real para  $T = 1.003$  ( $\lambda = 0$  e  $\beta = 0.2$ ).

de trajetória não diagonal para a qual  $q' = -8.0$ ,  $q'' = 0.0$ ,  $p' = 5.9$  e  $p'' = 7.9$ .

As 15 trajetórias mostradas são para  $T_0 = 0.0001$  e  $T_F = 4.5$ . A primeira trajetória ( $m = 1$ ) foi calculada usando uma trajetória do oscilador harmônico como tentativa inicial. A próxima trajetória, por sua vez, ( $m = 2$ ) usa a trajetória  $m = 1$  como entrada, e assim por diante. Tal procedimento permite a determinação de toda uma família muito facilmente.

A Fig. 2.2 representa uma sequência de 20 trajetórias diagonais para as quais  $q' = q'' = 6.0$ ,  $p' = p'' = 1.0$ .  $T_0 = 0.0001$  e  $T_F = 4.0$ . Novamente o oscilador harmônico forneceu o chute inicial.

A Fig. 2.3 representa uma família de 10 trajetórias diagonais de um conjunto com  $M = 30$  para  $q' = q'' = 8.0$ ,  $p' = p'' = 15.0$ ,  $T_0 = 0.0001$ ,  $T_F = 5.5$  e tentativa inicial dada pelo oscilador harmônico. Já a Fig. 2.4 mostra uma família de 5 trajetórias diagonais de um conjunto de 10 com as mesmas condições da Fig. 2.3, mas com  $T_0 = 3.5$  e  $T_F = 5.5$ . A diferença aqui está na tentativa inicial. O chute inicial veio de uma solução periódica (real) passando por  $q = 0.8$  e  $p = 15.0$ . A parte imaginária da

ação  $S$  calculada para cada família nas figs. 2.3 e 2.4, (1.45), deixa claro a diferença entre os dois grupos. Para período  $T \simeq 4.8$ , a trajetória  $m = 26$  na Fig. 2.3 tem  $\Im[S] \simeq 123.0$ , enquanto que  $m = 4$  na Fig. 2.4 tem  $\Im[S] \simeq 0.08$ . Como a amplitude do propagador (1.54) depende exponencialmente de  $-\Im[S]$ , é claro que trajetórias como as da Fig. 2.3 contribuem muito pouco.

A Fig. 2.5 mostra uma sequência de 20 trajetórias diagonais obtidas a partir de uma órbita periódica real com condições iniciais  $q' = q'' = 8.0$ ,  $p' = p'' = 15.0$ ,  $T_0 = 0.7$  e  $T_F = 1.3$ . Existe, entre as soluções, uma trajetória real com período  $\tau = 1.003$ , que corresponde a uma trajetória fechada no espaço de fases  $[\mathcal{R}(u), \Im(u)]$ . O valor de  $\Im[S]$  passa por um mínimo na solução real, e, como a amplitude de (1.54) é proporcional a  $\exp(-\Im[S]/\hbar)$ , concluímos que esta passa por um máximo na trajetória real. Isso é verdade para todo o espaço de fases, desde que soluções com  $\Im[S]$  muito negativo<sup>1</sup> não existam (ou, se existirem, sejam descartadas) no sistemas que tratamos. Na Fig. 2.6 é mostrada a função  $\Im[S](T)$  para o conjunto de trajetórias da Fig. 2.5.

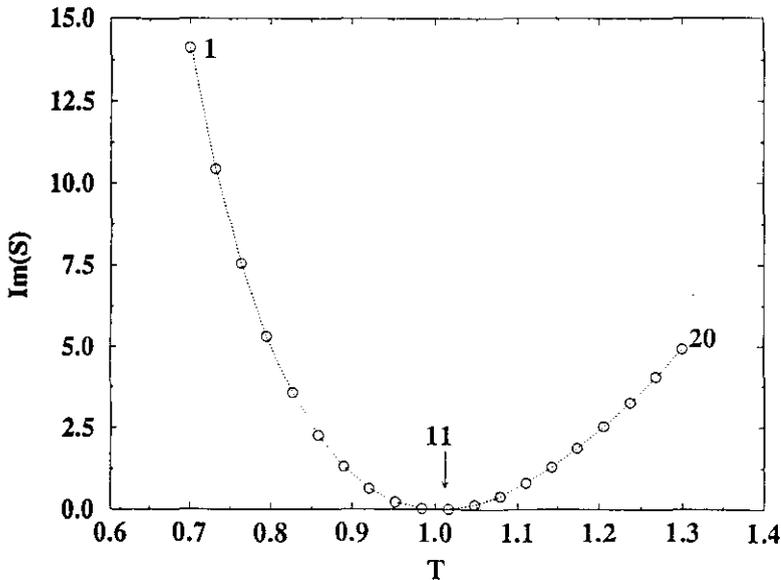


Figura 2.6: Função  $\Im[S](T)$  exibindo um mínimo ( $\Im[S] = 0$ ) para a trajetória  $m = 11$  ( $T \simeq 1.003$ ) no conjunto da Fig. 2.5.

<sup>1</sup>Ver questão das trajetórias não contribuintes no Capítulo 3

## 2.3 O Propagador Diagonal

Procedemos à determinação do propagador diagonal  $K(z, z, T)$ . Antes, porém, precisamos calcular o propagador por outro meio para comparação com o propagador semiclássico. Chamaremos de *propagador exato* o propagador calculado via auto-estados

$$K(z'', z', T) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle z'' | n \rangle \langle n | z' \rangle e^{-iE_n T/\hbar}, \quad (2.43)$$

onde  $|n\rangle$  representa um auto-estado de  $H$  com auto-valor  $E_n$ . Também

$$\langle n | z \rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}b} \right)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \langle n | x \rangle \exp \left[ -\frac{(x-q)^2}{4b^2} + \frac{i}{\hbar} p(x-q/2) \right] dx. \quad (2.44)$$

é a onda de Bargmann<sup>2</sup> [23], cujo módulo quadrado é a função de Husimi [5] do sistema. Tais funções, que denotamos por  $\Psi_n(x) = \langle n | x \rangle$ , são facilmente obtidas se diagonalizamos o hamiltoniano do sistema em uma base conhecida, em termos da qual podemos expandir

$$\Psi_n(x) \simeq \sum_{m=1}^{N_{\max}} c_{nm} \varphi_m(x). \quad (2.45)$$

onde  $N_{\max}$  é o índice da truncagem da série. Escolhemos a base da partícula presa na caixa

$$\varphi_m(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin \left[ m\pi \left( \frac{x}{2L} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (2.46)$$

onde o parâmetro  $L$  é escolhido de acordo com o método descrito em [25]. Foram usados 250 funções  $\varphi_n(x)$  com as quais 150 auto-estados  $\Psi_n(x)$  foram determinados. Como o propagador calculado em (2.43) tem soma finita, é necessário introduzir uma truncagem até um certo auto-estado de ordem  $\bar{N}$ . O grau de exatidão dessa truncagem é dado por um parâmetro  $\sigma$  calculado em  $T = 0$  de acordo com

$$K(z, z, 0) \simeq \sum_{n=1}^{\bar{N}} \langle z | n \rangle \langle n | z \rangle = 1 - \sigma, \quad (2.47)$$

onde  $\sigma \approx 0$ . Como a evolução temporal de um estado quântico é linear, para  $T \neq 0$ , a diferença entre o propagador exato (2.43) e o exato truncado nunca ultrapassará a medida dada por  $\sigma$ .

<sup>2</sup>Nome sugerido por M. Baranger.

As Figs. 2.7-2.9 mostram uma sequência de curvas de isoprobabilidade para a função  $|K(z, z, T)|^2$  no espaço dos parâmetros de  $z$ . O caso (a) representa o propagador exato, e o caso (b) o propagador semiclássico. Nesses cálculos usamos  $\lambda = 1.0$  e  $\beta = 0.1$ , com  $\hbar = 1.0$  e  $c = 1.0$ . Em todas essas figuras uma sequência de 16 isoprováveis é mostrada com valores entre 0 e 1 (valores relativos). Em (b) cada ponto do espaço de fases está associado a uma trajetória estacionária geralmente complexa com a qual o propagador foi calculado. Como se vê, a concordância entre (a) e (b) é boa para uma ampla gama de valores de  $T$ . Na Fig. 2.7, existe um máximo centrado na origem. Este máximo foi calculado usando trajetórias tentativas do oscilador harmônico, já que a dinâmica se aproxima a de um oscilador para pequenas amplitudes e períodos curtos. À medida que  $T \rightarrow 0$ , a área da curva mais exterior (mínimo) cresce infinitamente e, para cada ponto do espaço de fases, a amplitude é muito próxima de 1, como deve ser. Do ponto de vista da aproximação semiclássica exposta na seção 1.5, que usa trajetórias reais tão somente, a amplitude  $|K(z, z, T)|^2$  seria nula, já que, para  $p \approx 0$  ou  $T \approx 0$ , não existem trajetórias reais.

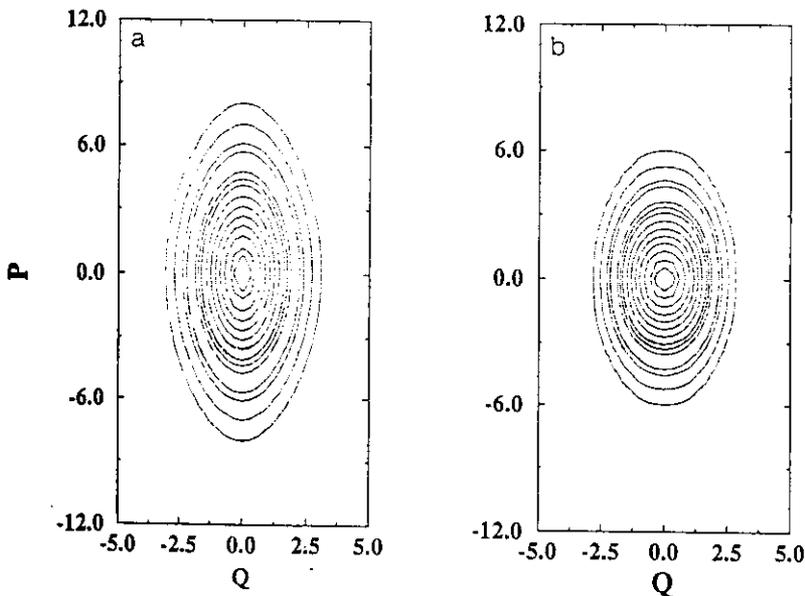


Figura 2.7: Curvas de nível de  $|K(z, z, T)|^2$  normalizadas para  $T = 0.5$ . (a) quântico. (b) semiclássico ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

Nas Figs. 2.8 e 2.9 os casos  $T = 3.5$  e  $T = 7.0$  são mostrados, respectivamente.

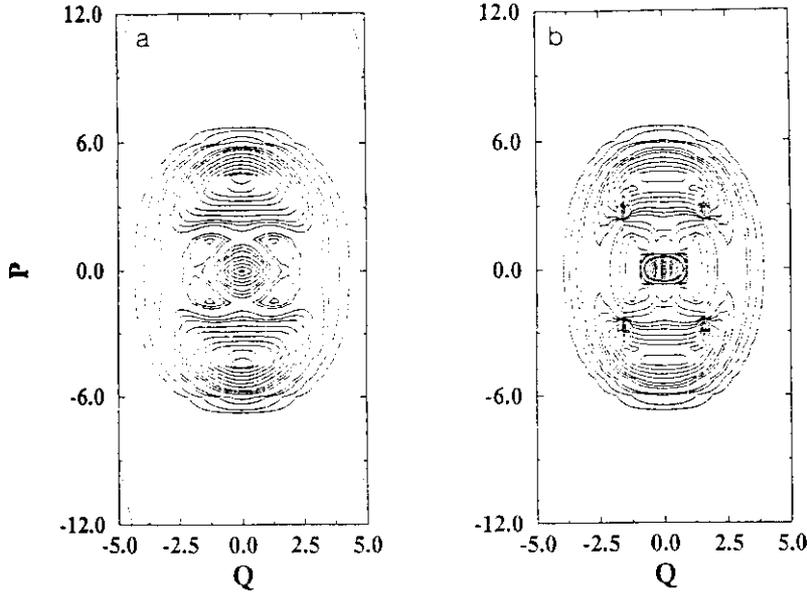


Figura 2.8: Curvas de nível de  $|K(z, z, T)|^2$  normalizadas para  $T = 3.5$ . (a) quântico. (b) semiclássico ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

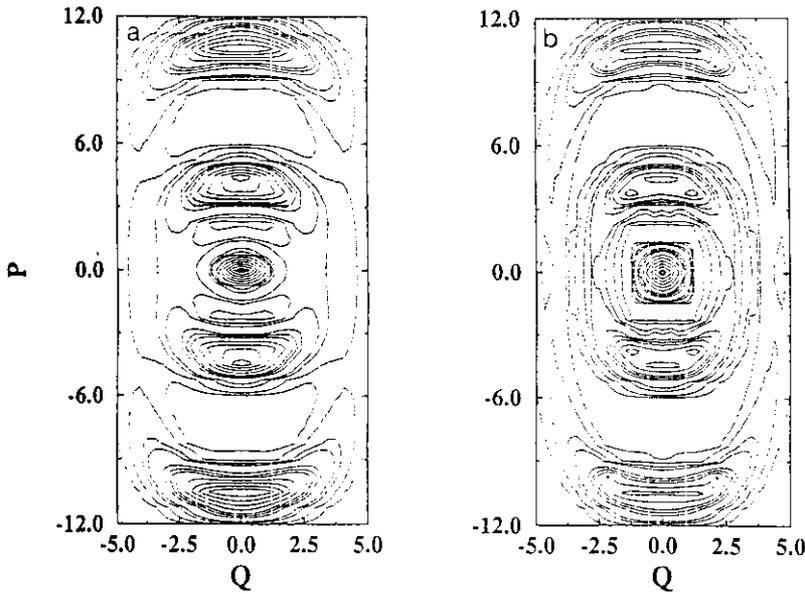


Figura 2.9: Curvas de nível de  $|K(z, z, T)|^2$  normalizadas para  $T = 7.0$ . (a) quântico. (b) semiclássico ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

Notamos que as regiões de máximos locais estão ao redor de órbitas periódicas. Aqui o princípio que já discutimos anteriormente se aplica. Escolhido um  $T$ , o propagador mostra máximos para todos os pontos do espaço de fases pertencentes a órbitas periódicas de período comensurável com esse tempo.

Nas Figs. 2.10-2.12 mostramos curvas de  $|K(z, z, T)|^2$  para  $q = 0$  em termos de  $p$  para o caso exato e semiclássico, para os tempos  $T = 0.5$  (Fig. 2.10),  $T = 3.5$  (Fig. 2.11) e  $T = 7.0$  (Fig. 2.12). As linhas pontilhadas representam o resultado semiclássico, enquanto que as cheias o propagador exato. À medida que  $T \rightarrow \infty$ , a densidade de órbitas periódicas aumenta proporcionalmente. Fazendo  $\hbar \rightarrow 0$ , vemos que a distribuição dos máximos de probabilidade tende a se concentrar cada vez mais nas órbitas periódicas, ou seja, o limite clássico é atingido. Nas regiões intermediárias (entre órbitas periódicas), para  $\hbar \rightarrow 0$ , as trajetórias complexas, se existirem, têm  $\Im[S] \rightarrow \infty$ .

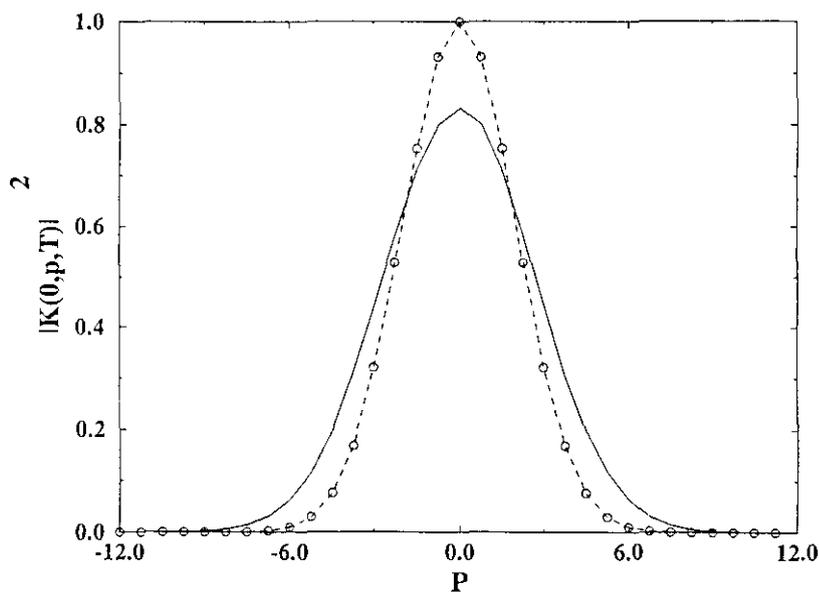


Figura 2.10:  $|K(z, z, T)|^2$  em  $q = 0.0$  para  $T = 0.5$ . Cálculo exato (linha cheia) e semiclássico (linha pontilhada) ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

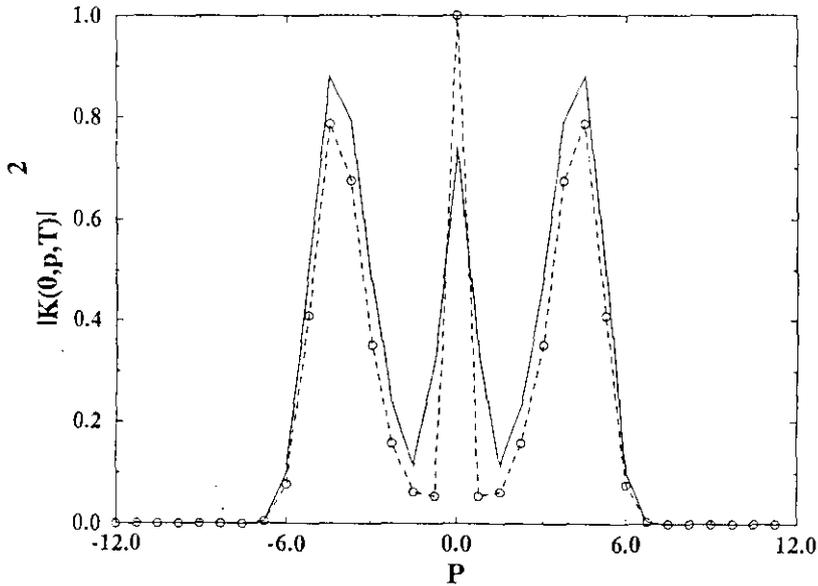


Figura 2.11:  $|K(z, z, T)|^2$  em  $q = 0.0$  para  $T = 3.5$ . Cálculo exato (linha cheia) e semiclássico (linha pontilhada) ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

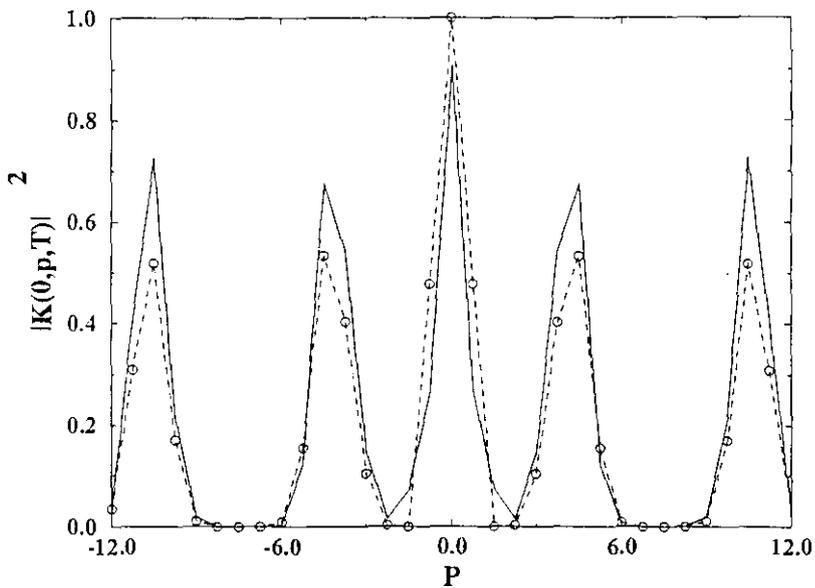


Figura 2.12:  $|K(z, z, T)|^2$  em  $q = 0.0$  para  $T = 7.0$ . Cálculo exato (linha cheia) e semiclássico (linha pontilhada) ( $\lambda = 1.0$ ,  $\beta = 0.1$ ).

# Capítulo 3

## O Poço Infinito

*“The rabbit-hole went straight on like a tunnel for some way, and then dipped suddenly down, so suddenly that Alice had not a moment to think about stopping herself before she found herself falling down a very deep well”.*

Lewis Carroll <sup>1</sup>

No capítulo anterior o método semiclássico apresentado no Capítulo 1 mostrou resultados muito satisfatórios no cálculo de aproximações para o propagador diagonal de sistemas anarmônicos simples. Neste capítulo estudamos um sistema de extrema simplicidade, mas que pode nos dar informações muito importantes sobre o limite de validade e aplicabilidade do método. No Capítulo 1 vimos que a dinâmica de uma partícula livre é descrita exatamente pela evolução semiclássica do propagador. Depois do oscilador harmônico e da partícula livre, o sistema mais simples existente a ser tratado (fechado) é o de uma partícula presa em uma caixa, que designaremos pelo nome de poço infinito [28]. Neste capítulo desenvolveremos analiticamente as relações necessárias à obtenção de trajetórias complexas e do propagador semiclássico (1.62), além da segunda aproximação real (Seção 1.4). Veremos que a aproximação construída a partir de elementos clássicos é bastante precisa. Por simplicidade, entretanto, calcularemos o propagador diagonal, que já é suficiente para exibir a dinâmica da partícula

---

<sup>1</sup>Em “Alice’s Adventures in Wonderland”, Capítulo 1.

na caixa. A generalização para o caso geral é direta.

Partimos [28] da função hamiltoniana do sistema

$$H(q, p) = \begin{cases} p^2/2, & |x| \leq \frac{L}{2}, \\ \infty, & |x| > \frac{L}{2}. \end{cases}, \quad (3.1)$$

onde indicamos que o poço tem limites entre  $-L/2$  e  $L/2$ . Embora a forma (3.1) não seja analítica, como já dissemos (Capítulo 2), é possível escrever (3.1) como o limite  $n \rightarrow \infty$  da forma polinomial

$$H_n(q, p) = \frac{p^2}{2} + \left(\frac{2q}{L}\right)^{2n}, \quad (3.2)$$

que é analítica. Assim sendo, as equações (2.1), (2.2) e (2.8) são aplicáveis. Portanto, o hamiltoniano estendido fica

$$H_1(x_1, p_2, p_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{2}(p_1^2 - x_2^2), & x_1^2 + p_2^2 \leq \frac{L^2}{4}, \\ \infty, & x_1^2 + p_2^2 > \frac{L^2}{4}. \end{cases} \quad (3.3)$$

O sistema é então transformado em um poço circular infinito (ver Fig. 3.2), onde a partícula colide um número arbitrário de vezes com a parede. As condições de fronteira (2.11) aplicam-se com a seguinte notação

$$\begin{aligned} x_1(0) - x_2(0) &\equiv x'_1 - x'_2 = q', \\ p_1(0) + p_2(0) &\equiv p'_1 + p'_2 = p', \\ x_1(T) + x_2(T) &\equiv x''_1 + x''_2 = q'', \\ p_1(T) - p_2(T) &\equiv p''_1 - p''_2 = p'', \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde  $q'$ ,  $p'$ ,  $q''$ ,  $p''$  e  $T$  são dados e  $c = b = 1$ .

### 3.1 Trajetórias

De acordo com (2.8), as equações de movimento são simplesmente

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= p_1, & \dot{x}_2 &= 0, \\ \dot{p}_1 &= 0, & \dot{p}_2 &= x_2, \end{aligned} \tag{3.5}$$

que uma integração direta (tendo em conta (3.4)) fornece

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \frac{T(q'' - q') + 2(p'' + p')}{4 + T^2} t + q' + \frac{2(q'' - q') - T(p'' + p')}{4 + T^2}, \\ p_2(t) &= \frac{2(q'' - q') - T(p'' + p')}{4 + T^2} t + p' - \frac{T(q'' - q') + 2(p'' + p')}{4 + T^2}, \\ x_2(t) &= \frac{2(q'' - q') - T(p'' + p')}{4 + T^2}, \\ p_1(t) &= \frac{T(q'' - q') + 2(p'' + p')}{4 + T^2}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Chamaremos as trajetórias (3.6) de *diretas*, já que não se admite colisão alguma no intervalo de evolução  $0 \leq t \leq T$ . Deve-se, entretanto, enfatizar que as relações (1.23) devem ser suplementadas pelas exigências

$$|x'_1| \leq \frac{L}{2}, \quad |p'_2| \leq \frac{L}{2}, \quad |x''_1| \leq \frac{L}{2}, \quad |p''_2| \leq \frac{L}{2}, \tag{3.7}$$

que se aplicam independentemente, separando as soluções específicas das gerais.

Reflexões nas fronteiras do potencial exigem que o sinal dos momentos seja trocado

$$p_1 \rightarrow -p_1, \quad x_2 \rightarrow -x_2. \tag{3.8}$$

Isso é necessário a fim de que sejam conservadas a parte real ( $E_1 = p_1^2 - x_2^2$ ) e imaginária ( $E_2 = p_1 x_2$ ) da energia. Aqui vemos que a reflexão nas paredes do poço não é do tipo especular: a partícula simplesmente muda o sentido do movimento, sem deixar a linha de direção original (ver Fig. 3.2).

Como a partícula pode colidir com as paredes um número arbitrário de vezes (que com certeza depende do tempo total  $T$ ) denotaremos por  $\bar{x}_1^{(j)}$  e  $\bar{p}_2^{(j)}$  os pontos localizados na fronteira (pontos de retorno) no espaço  $(x_1, p_2)$  onde uma  $j$ -ésima colisão pode

ocorrer. Se o índice  $j + 1$  rotula a posição da partícula após a  $j$ -ésima colisão, uma trajetória geral pode ser descrita por

$$\begin{aligned} p_1^{(j+1)}(t) &= (-1)^j p_1', & x_1^{(j+1)}(t) &= p_1^{(j+1)}(t - t_j) + \bar{x}_1^{(j)}, \\ x_2^{(j+1)}(t) &= (-1)^j x_2', & p_2^{(j+1)}(t) &= x_2^{(j+1)}(t - t_j) + \bar{p}_2^{(j)}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

para  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$ . Há uma relação geral para os pontos de contorno, a de que obedeçem à *relação de borda*

$$\bar{x}_1^2 + \bar{p}_2^2 = \frac{L^2}{4}. \quad (3.10)$$

Pontos de retorno sucessivos se relacionam também por

$$\begin{aligned} \bar{x}_1^{(j+1)} &= p_1^{(j+1)} \Delta + \bar{x}_1^{(j)}, \\ \bar{p}_2^{(j+1)} &= x_2^{(j+1)} \Delta + \bar{p}_2^{(j)}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\Delta = t_j - t_{j-1}.$$

É simples ver que qualquer solução diferente da direta pode ser classificada em dois tipos: *trajetórias pares* e *trajetórias ímpares*. Trajetórias pares são aquelas cujo momento final tem o mesmo sinal do inicial. Trajetórias ímpares, por sua vez, são aquelas de momento final invertido em relação ao momento inicial. Mais especificamente, se

$$p_1'' = (-1)^n p_1', \quad (3.12)$$

$$x_2'' = (-1)^n x_2',$$

então as trajetórias pares têm  $n$  par e as ímpares  $n$  ímpar. Chamaremos  $n$  de ordem da trajetória.

As relações (3.4) possibilitam escrever fórmulas de conexão entre as posições iniciais e finais. Encontramos facilmente que, para a ordem par

$$x_1'' = p_1'(T - n\Delta) + x_1', \quad (3.13)$$

$$p_2'' = x_2'(T - n\Delta) + p_2',$$

e para a ordem ímpar

$$x_1'' = -p_1'[T + \Delta(n-1) - 2t_n] + x_1', \quad (3.14)$$

$$p_2'' = -x_2'(T + \Delta(n-1) - 2t_n) + p_2'.$$

Substituindo as relações (3.4) em (3.13) e (3.14), os momentos são facilmente encontrados. Para a ordem par ( $n \geq 2$ )

$$p_1'^{(n)} = \frac{(T - n\Delta)(q'' - q') + 2(p'' + p')}{4 + (T - n\Delta)^2}, \quad (3.15)$$

$$x_2'^{(n)} = \frac{2(q'' - q') - (T - n\Delta)(p'' + p')}{4 + (T - n\Delta)^2},$$

e, para a ordem ímpar ( $n \geq 1$ )

$$p_1'^{(n)} = \frac{q'' - q'}{2t_n - T - \Delta(n-1)}, \quad (3.16)$$

$$x_2'^{(n)} = -\frac{p'' + p'}{2t_n - T - \Delta(n-1)}.$$

Temos até agora uma solução parcial, já que ainda faltam encontrar os intervalos temporais entre colisão  $\Delta$  e o tempo da colisão final  $t_n$ . Como temos duas variáveis, necessitamos de dois conjuntos de equações. Para ordem par ( $n \geq 2$ ), a última colisão resulta

$$\bar{x}_1^{(n)} = q'' - x_2' - p_1'(T - t_n), \quad (3.17)$$

$$\bar{p}_2^{(n)} = p_1' - p'' - x_2'(T - t_n),$$

e para a  $(n-1)$ -ésima colisão

$$\bar{x}_1^{(n)} = q'' - x_2' - p_1^{(n)}(T - t_n - \Delta), \quad (3.18)$$

$$\bar{p}_2^{(n)} = p_1' - p'' - x_2^{(n)}(T - t_n - \Delta).$$

Para a ordem ímpar ( $n \geq 1$ ), a última colisão resulta

$$\bar{x}_1^{(n)} = q'' + x_2' + p_1'(T - t_n), \quad (3.19)$$

$$\bar{p}_2^{(n)} = x_2'(T - t_n) - p_1' - p''.$$

e para a  $(n - 1)$ -ésima colisão

$$\begin{aligned}\bar{x}_1^{(n)} &= q'' + x_2' + p_1'^{(n)}(T - t_n - \Delta), \\ \bar{p}_2^{(n)} &= x_2'^{(n)}(T - t_n - \Delta) - p_1' - p''.\end{aligned}\tag{3.20}$$

Assim, os pares de equações (3.17) e (3.18), juntamente com (3.10), fornecem  $\Delta$  e  $t_n$  para as trajetórias pares, enquanto que (3.19) e (3.20) em (3.10) fornecem as mesmas variáveis para a ordem ímpar.

Como dissemos no começo deste capítulo, trataremos especificamente dos casos diagonais. A partir daqui faremos  $q' = q'' = q$  e  $p' = p'' = p$ . Na próxima seção, faremos uma análise completa de todas as ordens, isto é, determinaremos completamente as trajetórias para todo  $n$ .

### 3.1.1 Análise das Trajetórias Complexas

#### 3.1.1.1 Trajetórias Diretas, $n = 0$

Para  $n = 0$ , não existe colisão, isto é, a partícula não tem tempo suficiente para colidir com as fronteiras do potencial. O problema aqui resume-se em determinar a região de existência no espaço de fases de cada trajetória para um dado  $T$ . As trajetórias diretas são encontradas em regiões de  $p$  pequeno e para  $T$  curtos. Elas dominam o espaço de fases para  $T \rightarrow 0$ , fornecendo a única contribuição estacionária para o propagador nesse limite temporal. Aplicando as relações (3.7) nas trajetórias diretas (3.6) diagonais, obtemos as condições de existência

$$\begin{aligned}T^2 p^2 + 4pqT - B^2(4 + T^2) &< 0, \\ T^2 p^2 - 4pqT - B^2(4 + T^2) &< 0,\end{aligned}\tag{3.21}$$

com  $B^2 = L^2/4 - q^2$ . Na Fig. 3.1, estão exibidas as regiões de existência de trajetórias complexas diagonais para diversas ordens  $n$ . As condições (3.21) limitam a existência de trajetórias diretas às regiões de baixo momento, que está indicada na Fig. 3.1 pela região triangular (para  $p \geq 0$  em (a)). A existência de trajetórias diretas no poço indica que existem valores de momento para os quais a partícula ainda não sentiu a interação com o potencial (cuja amplitude resultante está ausente da aproximação da Seção 1.4).

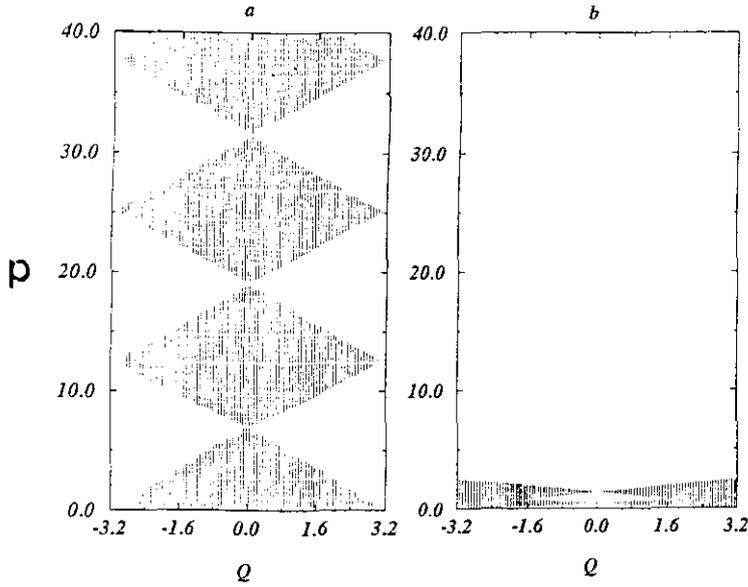


Figura 3.1: Regiões de existência para  $T = 1.0$  para (a) trajetórias com  $n$  par. (b) trajetórias com  $n$  ímpar.

### 3.1.1.2 Trajetórias com $n = 1$

Se definirmos  $\xi_1 = 2t_1 - T$  e aplicarmos as equações (3.19) em (3.10), encontramos facilmente

$$B^2 \xi_1^2 + 4pq\xi_1 - (4 + T^2)p^2 = 0. \quad (3.22)$$

Com isso

$$t_1 = \frac{T}{2} + \frac{1}{4B^2} \left[ 4pq \pm |p| \sqrt{L^2(4 + T^2) - 4q^2T^2} \right] \quad (3.23)$$

é o tempo de colisão. Na Fig. 3.2 pode-se ver um exemplo de trajetória com  $n = 1$ . Como  $q' = q''$ , por (3.16) vemos que  $p_1 = 0$  sempre. Isso significa que as trajetórias ímpares são sempre “verticais” no plano  $(x_1, p_2)$ .

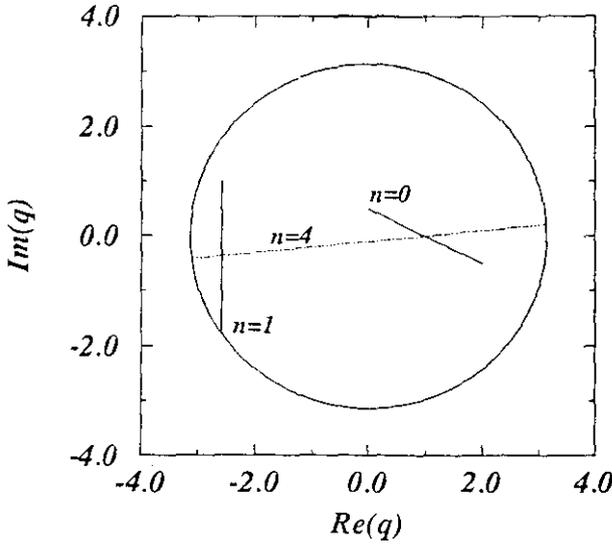


Figura 3.2: Exemplos de trajetórias diagonais no plano  $(x_1, p_2)$  para  $T = 1.0$ :  $n = 0$  ( $q = 1.0, p = 2.5$ );  $n = 1$  ( $q = 1.0, p = 1.0$ );  $n = 1$  ( $q = 1.0, p = 21.0$ ). O círculo representa a fronteira do potencial.

### 3.1.1.3 Trajetórias pares ( $n \geq 2$ )

Se substituirmos (3.17) e (3.18) na relação (3.10), e usarmos as definições

$$\xi_n = 2t_n - T - n\Delta,$$

$$\xi_{n-1} = 2t_n - T - (n - 2)\Delta. \tag{3.24}$$

$$\alpha_n = T - n\Delta,$$

equações quadráticas acopladas são obtidas

$$p^2 \xi_n^2 + 4pq \xi_n - B^2(4 + \alpha_n^2) = 0. \tag{3.25}$$

$$p^2 \xi_{n-1}^2 + 4pq \xi_{n-1} - B^2(4 + \alpha_n^2) = 0.$$

Já que os coeficientes nas relações (3.25) são os mesmos, essas equações são idênticas.

As soluções são

$$\xi^\pm = -\frac{2q}{p} \pm \frac{1}{|p|} \sqrt{L^2 + \alpha_n^2 B^2}. \tag{3.26}$$

Tomamos  $\xi_n = \xi^+$  e  $\xi_{n-1} = \xi^-$ . De acordo com (3.24), temos

$$(\xi_{n-1} - \xi_n)^2 = 4\Delta^2, \quad (3.27)$$

que resulta, juntamente com (3.25), em uma equação quadrática para  $\Delta$

$$\Delta^2(B^2n^2 - p^2) - 2B^2n\Delta + L^2 + B^2T^2 = 0. \quad (3.28)$$

É fácil ver que a equação (3.28) contém entre suas soluções a real. Se  $\alpha_n = 0$ , temos

$$\Delta = \frac{L}{|p|}, \quad (3.29)$$

que é a definição do tempo entre colisões para uma partícula de momento  $p$  para  $T \geq nL/p$ .

As soluções gerais são

$$\Delta_{\pm} = \frac{B^2nT \pm \sqrt{(p^2 - B^2n^2)L^2 + p^2T^2B^2}}{B^2n^2 - p^2}. \quad (3.30)$$

O tempo para a última colisão é obtido somando-se  $\xi_n + \xi_{n-1}$ , ou seja,

$$t_n = \frac{1}{2} \left[ T + \Delta(n-1) - \frac{2q}{p} \right]. \quad (3.31)$$

#### 3.1.1.4 Trajetória ímpares ( $n \geq 3$ )

Novamente substituímos as equações (3.19) e (3.20) em (3.10), com a definição

$$\xi_n = \xi_{n-1} = 2t_n - T - \Delta(n-1), \quad (3.32)$$

e um par de equações é obtido

$$B^2\xi_n^2 + 4pq\xi_n - \{4 + [T - \Delta(n-1)]^2\}p^2 = 0, \quad (3.33)$$

$$B^2\xi_{n-1}^2 + 4pq\xi_{n-1} - \{4 + [T - \Delta(n+1)]^2\}p^2 = 0.$$

Desde que  $\xi_n = \xi_{n-1}$ , soluções só são possíveis se

$$[T - \Delta(n-1)]^2 = [T - \Delta(n+1)]^2, \quad (3.34)$$

ou seja, se  $\Delta = 0$  ou  $\Delta = T/n$ . A única solução razoável é portanto

$$\Delta = \frac{T}{n}. \quad (3.35)$$

Novamente, somando  $\xi_n^\pm + \xi_{n-1}^\pm$ , obtemos

$$t_n = \frac{1}{2} \left[ T \left( \frac{2n-1}{n} \right) + \frac{1}{2} (\xi_n^\pm + \xi_{n-1}^\pm) \right], \quad (3.36)$$

com

$$\xi_n^\pm + \xi_{n-1}^\pm = -\frac{4pq}{B^2} \pm \frac{2|p|}{B^2} \sqrt{L^2 + \left( \frac{BT}{n} \right)^2}. \quad (3.37)$$

Entretanto (o que não sai naturalmente das equações de movimento) devemos ter

$$0 < \Delta < t_n < T, \quad (3.38)$$

que equivale a um critério de causalidade. Como obtemos equações quadráticas para  $t_n$ , a condição (3.38) decide qual solução dentro do par faz realmente sentido, eliminando soluções espúrias (do tipo  $\Delta$  complexo, o tempo nessa aproximação é sempre real!) ou tempos negativos. O número de soluções possíveis dependerá fortemente de  $q$ ,  $p$  e  $T$  obviamente, mas, para um dado  $z$  e  $T$ , existe no máximo uma trajetória possível<sup>2</sup>. Classificando-se por ordem, temos a imagem seguinte (ver Fig. 3.1): as trajetórias ímpares tendem a se concentrar em regiões de baixo  $p$ , sendo que para um dado  $T$  encontramos muitas ordens ímpares (tanto mais próximas de  $p = 0$  quanto maior  $n$ ) em um dado  $z$ ; já as trajetórias pares, para um dado  $z$ , são únicas em  $n$ , isto é, cada ordem  $n$  habita uma diferente região do espaço de fases. O que é muito importante, entretanto, é que o espaço de fases está muito longe de ser totalmente coberto por trajetórias complexas, ou seja, existem muitas regiões vazias (ver Fig. 3.1). Em termos semiclássicos, as regiões onde não é possível encontrar trajetórias complexas estão diretamente relacionadas a probabilidades de transição muito baixas. Isso se confirma pelo fato de que tais regiões vazias se encontram entre as órbitas periódicas (reais).

<sup>2</sup>Para a ordem ímpar existem várias, entretanto. O que queremos dizer é que existe somente uma trajetória que deva contribuir realmente para o propagador.

## 3.2 O propagador

De acordo com a equação (1.23), podemos escrever

$$u^{(n)} = v'' + \sqrt{2}i(-1)^n p^{(n)}, \quad v^{(n)} = u' - \sqrt{2}ip^{(n)}, \quad (3.39)$$

com  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $p^{(n)} = p_1^{(n)} + ix_2^{(n)}$  e  $u' = v''^*$  (elementos diagonais). Como sempre, precisamos achar a ação parcial para determinarmos o propagador. Para hamiltonianos unidimensionais quadráticos, a parte integral de (1.46) é sempre nula, de forma que

$$\mathcal{S}_n(v'', u', T) = -\frac{i\hbar}{2}[v''u^{(n)} + u'v^{(n)}] \quad (3.40)$$

e, assim, por (3.39)

$$\mathcal{S}_n(v'', u', T) = -\frac{i\hbar}{2}\{u'^2 + v''^2 + i\sqrt{2}p^{(n)}[-u' + (-1)^n v'']\} \quad (3.41)$$

é a ação do poço infinito.

Procedemos assim à soma (1.62) para as trajetórias ímpares e a pares. Para as trajetórias ímpares, entretanto, acontece de a parte imaginária da ação parcial (1.45),  $S_2$ , apresentar valores negativos, o que implica, pela soma, em um aumento anormal na amplitude final (lembramos que  $|K(z^*, z, T)|^2 \propto \exp[-S_2] \gg 1$ ). Este problema aparentemente não esperado está relacionado com a questão das trajetórias não contribuintes, que passamos a descrever.

### 3.2.1 Trajetórias não contribuintes

Como vimos no Capítulo 1, tratamos uma aproximação de fase estacionária para a forma (1.9), onde devemos encontrar todas as trajetórias estacionárias satisfazendo a (1.24) e (1.23). Entretanto, existem exemplos de aproximações para funções simples onde alguns pontos estacionários não devem entrar na forma final da integral aproximada, porque resultam em valores não esperados (diante do bom-senso do pesquisador) como solução. Seja, por exemplo, a aproximação da função de Airy ( $n = 1, 2, 3$ ) [7]

$$F_n(s) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_n} e^{s z - z^3/3} dz, \quad s \rightarrow \infty, \quad (3.42)$$

com as curvas  $C_n$  definidas em [7]. Em outros casos, a deformação da curva  $C$  em (1.15) é proibida pelo teorema de Cauchy (ver [7], p. 268 o exemplo da função de Hankel do

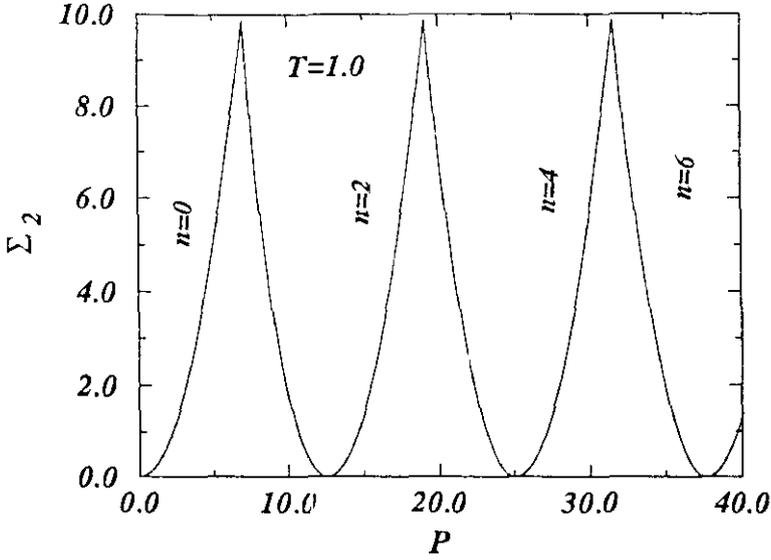


Figura 3.3:  $S_2(p)$  na linha  $q = 0$  para  $T = 1.0$ . Os valores de  $p$  tais que  $S_2 = 0$  são  $p = nL/T$ .

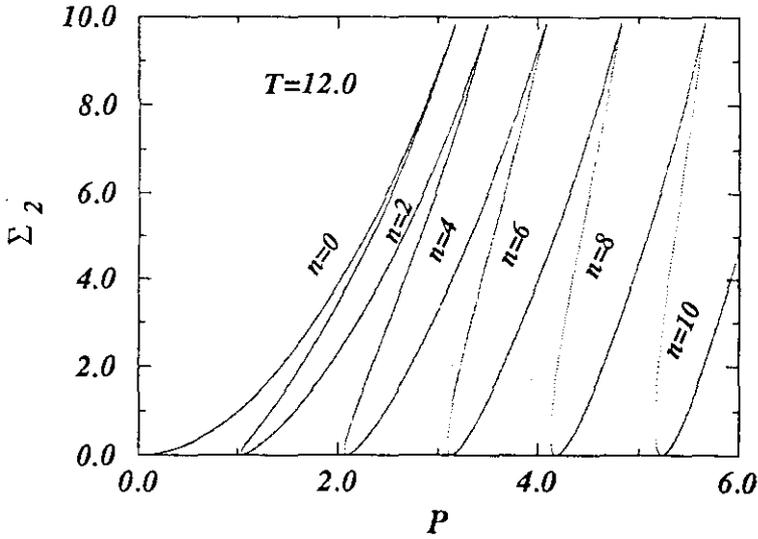


Figura 3.4:  $S_2(p)$  na linha  $q = 0$  para  $T = 12.0$ . Os valores de  $p$  tais que  $S_2 = 0$  são  $p = nL/T$ .

tipo  $j$ ). Quando isso acontece, tais pontos críticos são simplesmente descartados. Não existe, entretanto, um método geral que possibilite a discriminação direta dos pontos não contribuintes, sendo essa filtragem feita posteriormente. Em todo esse processo, está claro que outros argumentos, não somente puramente técnicos, são usados. Cada problema tem seus limites definidos. Da mesma forma, no poço, encontramos um exemplo onde a contribuição de um tipo trajetória estacionária (ímpares) excede em muito o valor esperado (que é 1 para  $\{K(z'', z', T)$ , qualquer que seja  $z'', z'$  e  $T$ ) do propagador, o que não corresponde a um valor físico. Correspondentemente, descartamos tais trajetórias.

Retornando ao cálculo do propagador, vemos, por outro lado, que a discriminação das trajetórias ímpares não têm efeito algum sobre a forma final do propagador. Vimos que, para o propagador diagonal (ver Fig. 3.1), as trajetórias ímpares ocupam uma área próxima à linha  $p = 0$ , para um certo  $T$ , e que a região de existência da ordem ímpar converge para essa linha no limite  $T \rightarrow \infty$ . Entretanto, as trajetórias diretas são suficientes para aproximar muito bem o propagador nessa região. As trajetórias diretas resultam na aproximação para o propagador

$$K_{sci}(z, z, T) = (1 + i\beta T)^{-1/2} \exp \left[ \frac{i\beta T p^2}{1 + i\beta T} \right], \quad (3.43)$$

onde  $\beta = 1/2$ .

Antes de tratarmos da aproximação do propagador pelas ordens pares, vejamos o comportamento da ação parcial (1.45) para elas. Nas Figs. 3.3 e 3.4, mostramos o comportamento de  $S_2(p)$  para  $n$  par na linha  $q = 0$ , para  $T = 1.0$  e  $T = 12.0$ , respectivamente. Vemos que  $S_2$  vai a zero nas órbitas reais e têm sempre valores positivos. Como já dissemos no Capítulo 2, isso significa que a amplitude do propagador é máxima nas órbitas reais e vai a zero suavemente fora delas. Também, pela Fig. 3.4, a medida que  $T$  aumenta, várias ordens podem contribuir para o propagador, o que significa semiclassicamente que várias trajetórias semiclássicas existem conectando o estado inicial ao final.

### 3.3 Forma final

A determinação do fator  $\partial^2 \mathcal{S} / \partial u' \partial v''$  vem de

$$-i\hbar v' = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial u'}. \quad (3.44)$$

onde escrevemos  $v'$  em uma forma conveniente. Usando (3.39), obtemos

$$\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u' \partial v''} = -\hbar \left[ \left( \frac{\partial p_1^{(a)}}{\partial q''} - \frac{\partial x_2^{(n)}}{\partial p''} \right) + i \left( \frac{\partial x_2^{(a)}}{\partial q''} + \frac{\partial p_1^{(n)}}{\partial p''} \right) \right]_{q,p}. \quad (3.45)$$

As derivadas na relação (3.45) exigem a determinação de elementos não diagonais (ver Apêndice A). O que fazemos é obter novamente as equações que definem os tempos de colisão para  $q' \neq q''$  e  $p' \neq p''$ . Com isso temos

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial p_1}{\partial q''} \right|_{q,p} &= \frac{\alpha_n}{4 + \alpha_n^2} - \frac{8\alpha_n p}{(4 + \alpha_n^2)^2} \left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial q''} \right|_{q,p}, \\ \left. \frac{\partial p_1}{\partial p''} \right|_{q,p} &= \frac{2}{4 + \alpha_n^2} - \frac{8\alpha_n p}{(4 + \alpha_n^2)^2} \left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial p''} \right|_{q,p}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\left. \frac{\partial x_2}{\partial q''} \right|_{q,p} = \frac{2}{4 + \alpha_n^2} - \left[ \frac{2p}{4 + \alpha_n^2} - \frac{4\alpha_n^2 p}{(4 + \alpha_n^2)^2} \right] \left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial q''} \right|_{q,p}.$$

$$\left. \frac{\partial x_2}{\partial p''} \right|_{q,p} = -\frac{\alpha_n}{4 + \alpha_n^2} - \left[ \frac{2p}{4 + \alpha_n^2} - \frac{4\alpha_n^2 p}{(4 + \alpha_n^2)^2} \right] \left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial p''} \right|_{q,p}.$$

onde  $\alpha_n = T - n\Delta$ . Também (ver Apêndice A)

$$\left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial q''} \right|_{q,p} = \frac{2pq\alpha_n^2 + 4(q^2 + 2p^2)\alpha_n}{\alpha_n p(4B^2 - p^2/n^2) - 8p^2(2q + pT/n^2)},$$

$$\left. \frac{\partial \alpha_n}{\partial p''} \right|_{q,p} = -\frac{2(B^2 - 2p^2/n^2)\alpha_n^2 + 4p(2pT/n^2 - 7q)\alpha_n + 8q^2 + 4[2B^2 - (pT/n^2)]}{p\alpha_n(4B^2 - p^2/n^2) - 8p^2(2q + pT/n^2)}. \quad (3.47)$$

onde as derivadas são calculadas para  $q = q' = q''$  e  $p = p' = p''$ .

Comparações numéricas podem ser feitas entre a forma exata do propagador  $K(z, z, T)$  e as aproximações real e complexa. Compararemos novamente o quadrado

das amplitudes. De acordo com a aproximação real (1.69) da seção 1.1, temos

$$|\tilde{K}(z, z, T)|^2 = \left| \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u'' \partial v'}(q, p, \tau) \right| \exp \left[ \frac{i}{2\hbar} (\alpha^* - \alpha) \delta T^2 \right], \quad (3.48)$$

onde

$$\alpha = |\dot{u}|^2 \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u'' \partial v'}(q, p, \tau), \quad (3.49)$$

$$\delta T = T - \tau, \quad \tau = m\tau_0. \quad (3.50)$$

Aqui, entretanto, o pré-fator  $\partial^2 \mathcal{S} / \partial u'' \partial v''$  foi calculado usando (3.45), que por sua vez precisa do cálculo das trajetórias gerais. Note, porém, que a aproximação real não fornece valores para a amplitude em momento próximo de zero, simplesmente porque não há nenhuma trajetória para  $p = 0$ .

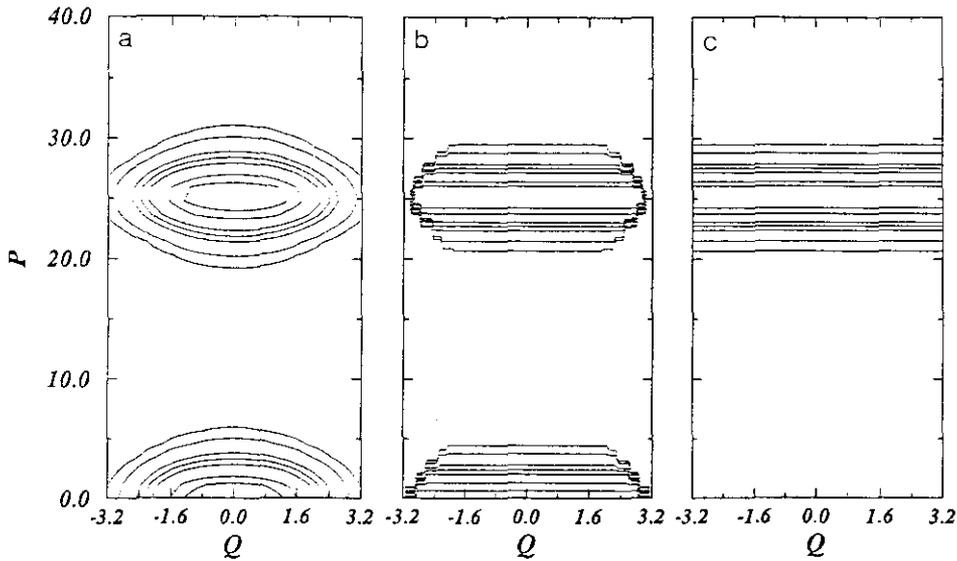


Figura 3.5: Contornos de  $|K(z, z, T)|^2$  (normalizados) para  $T = 0.5$ . (a), (b) e (c): cálculo exato, complexo e real respectivamente.

Nas Figs. 3.5-3.7 estão mostrados mapas de isoprobabilidade normalizados para  $p \geq 0$  de  $|K(z, z, T)|^2$  para  $T = 0.5, 1.0$  e  $1.5$ , respectivamente. Para todos os cálculos a seguir, fizemos  $L = 2\pi$ ,  $c = 1$  e  $\hbar = 1$ . Em cada uma dessas figuras, (a) é o resultado exato (via auto-funções do poço), (b) é a aproximação semiclássica complexa e (c) a

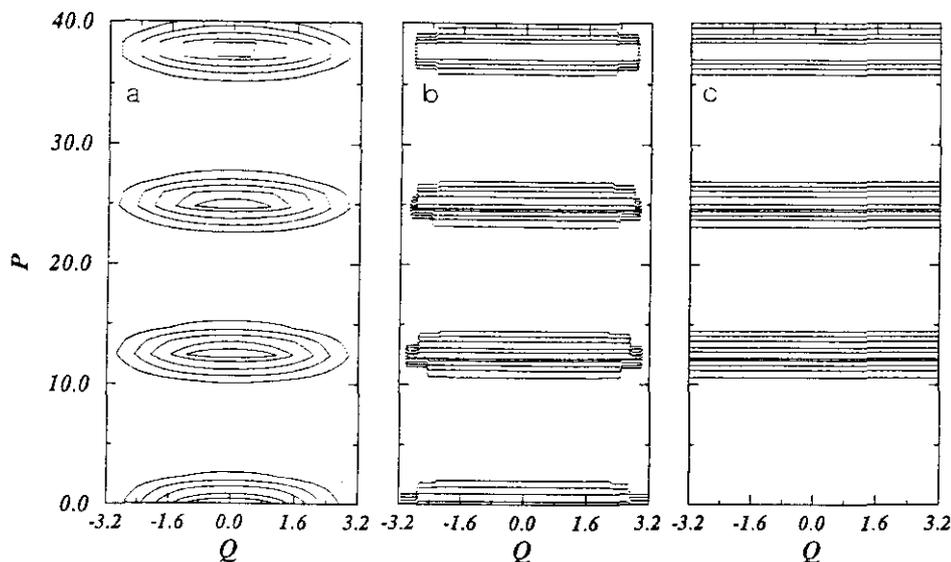


Figura 3.6: Contornos de  $|K(z, z, T)|^2$  (normalizados) para  $T = 1.0$ . (a), (b) e (c): cálculo exato, complexo e real respectivamente.

aproximação real. Essas figuras mostram concentrações de probabilidade ao redor das órbitas periódicas, que, como já expusemos, corresponde ao fato de que a amplitude expressa a correlação entre o estado inicial e o final. A medida que o tempo do propagador  $T$  aumenta, o número de órbitas periódicas aumenta proporcionalmente (existem mais períodos comensuráveis com  $T$ ). Destacamos as seguintes diferenças entre cada aproximação: está claro que a aproximação complexa tem uma dependência em  $q$  que está ausente da aproximação real. Isso porque a mesma órbita real é usada para aproximar o propagador na aproximação real que só depende de  $p$ ; está ausente da aproximação real a região de baixo momento, porque, como dissemos, não há trajetórias reais nessa região. Vê-se claramente que o cálculo semiclássico complexo é uma boa aproximação para o resultado exato, mesmo para o valor de  $\hbar = 1$ . Lembramos apenas que o resultado semiclássico é válido idealmente para  $\hbar \rightarrow 0$ . O que percebemos é que a aproximação semiclássica funciona muito bem para valores de  $\hbar$  extrapolados desse limite.

Existe também um bom acordo entre as aproximações quanto às amplitudes absolutas. Na Fig. 3.8 estão mostrados os valores de  $|K(z, z, T)|^2$  como função de  $p$  na linha  $q = 0$ . As Figs. (a), (b) e (c) são para  $T = 0.5$ ,  $T = 1.0$  e  $T = 1.5$ , respectivamente. A

linha sólida representa a amplitude calculada pela aproximação complexa, os círculos mostram a aproximação real, e a linha tracejada o cálculo exato. Aparentemente, a largura de cada pico é ligeiramente menor para as aproximações semiclássicas. As Figs. 3.9 e 3.10 mostram  $|K(z, z, T)|^2$  como função de  $q$ . A Fig. 3.9 é feita para  $p = 1.125$  tal que as órbitas contribuindo para o propagador nunca colidem com as paredes. Já na Fig. 3.10 escolhemos valores de  $p$  tais que  $n = 2$ . Nessas últimas duas figuras (a), (b) e (c) mostram resultados para  $T = 0.5, 1.0$  e  $1.5$ , respectivamente, com o detalhe que para a Fig. 3.9 não existe aproximação real. Está claro que a aproximação complexa é uma interpolação entre o cálculo exato e a aproximação real.

Desses cálculos vemos que o método semiclássico tem sucesso em tratar um sistema onde o pior resultado seria esperado, já que o potencial é fortemente descontínuo. Uma observação importante, e que talvez seja o resultado mais notório da aplicação para o poço, foi a ausência de trajetórias complexas para certas regiões do espaço de fases. Nessas regiões a aproximação semiclássica é simplesmente nula. Isso, entretanto, não é crítico, já que o propagador exato é muito próximo de zero nessas regiões. Pensamos ser esse um resultado relevante, pois acredita-se que esquemas de complexificação podem salvar os métodos semiclássicos usuais nas regiões onde trajetórias reais não existem. Nós simplesmente achamos um exemplo simples onde mesmo trajetórias complexas *podem não existir*.

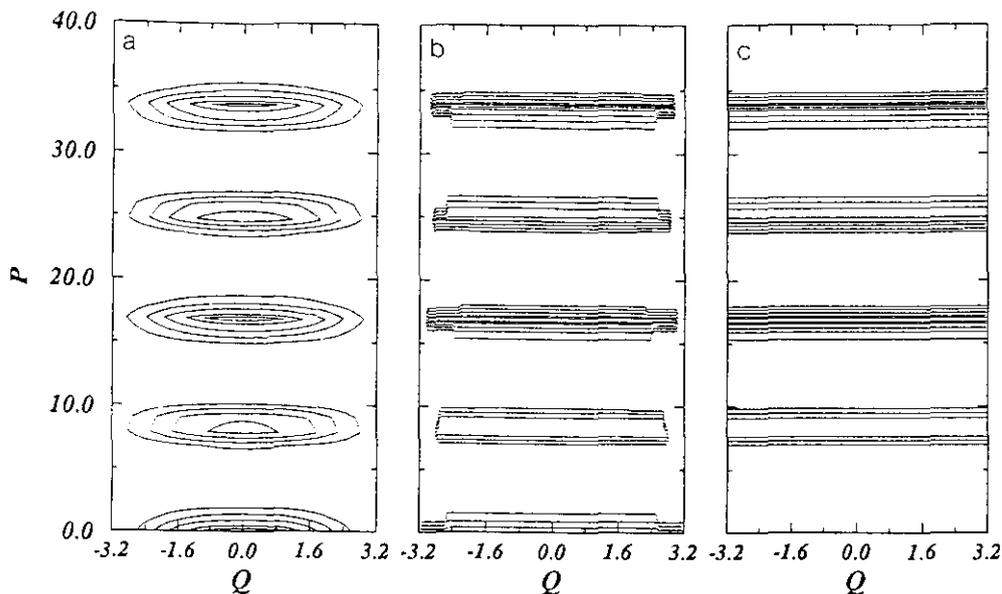


Figura 3.7: Contornos de  $|K(z, z, T)|^2$  (normalizados) para  $T = 1.5$ . (a), (b) e (c): cálculo exato, complexo e real respectivamente.

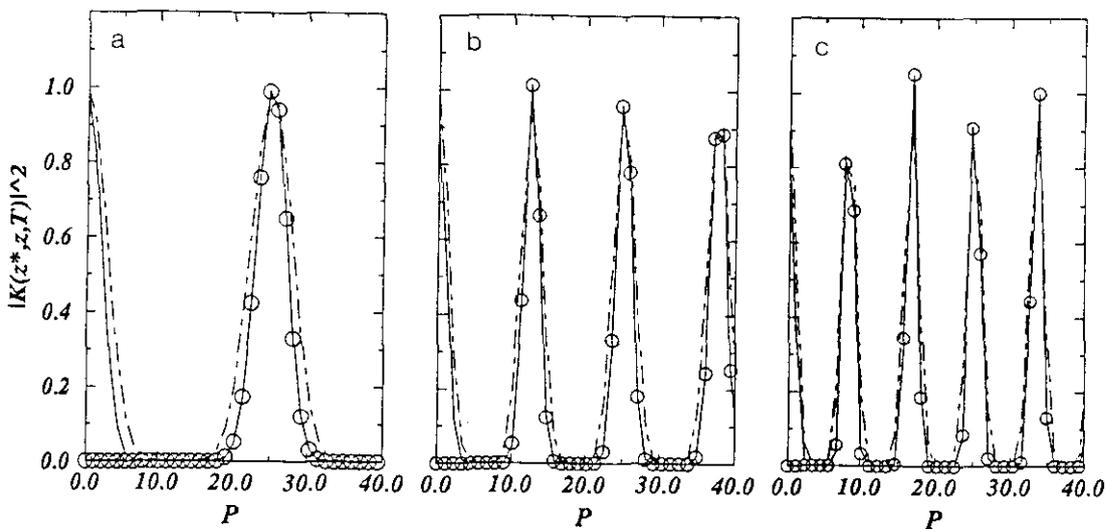


Figura 3.8:  $|K(z^*, z, T)|^2$  como função de  $p$  em  $q = 0$ : (a)  $T = 0.5$ . (b)  $T = 1.0$  e (c)  $T = 1.5$ . ---- cálculo exato, o aproximação real e — aproximação complexa.

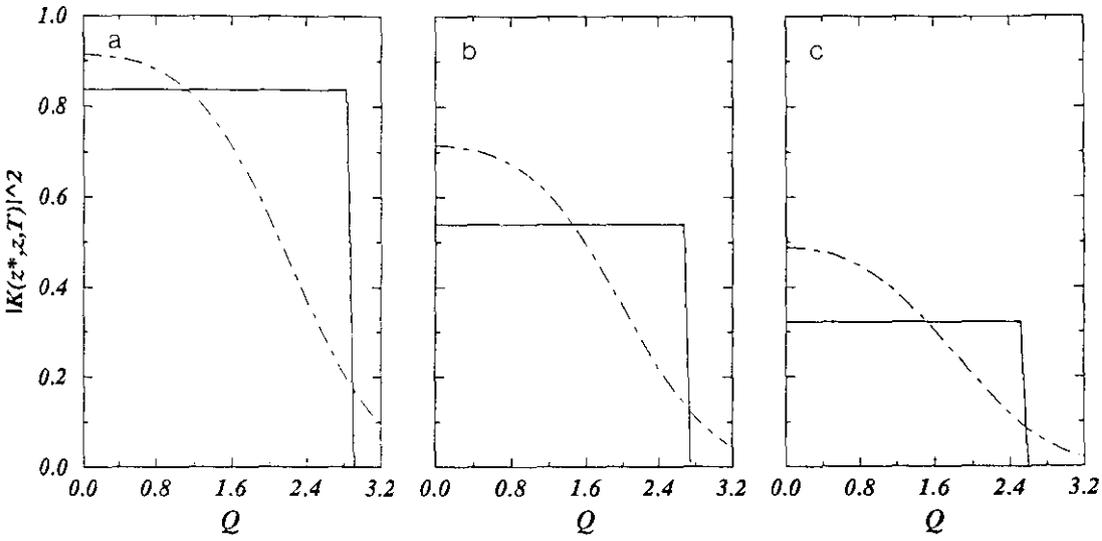


Figura 3.9:  $|K(z^*, z, T)|^2$  para  $n = 0$  como função de  $q$  em  $p = 1.125$ : (a)  $T = 0.5$ , (b)  $T = 1.0$  e (c)  $T = 1.5$ . ---- cálculo exato e - - aproximação complexa.

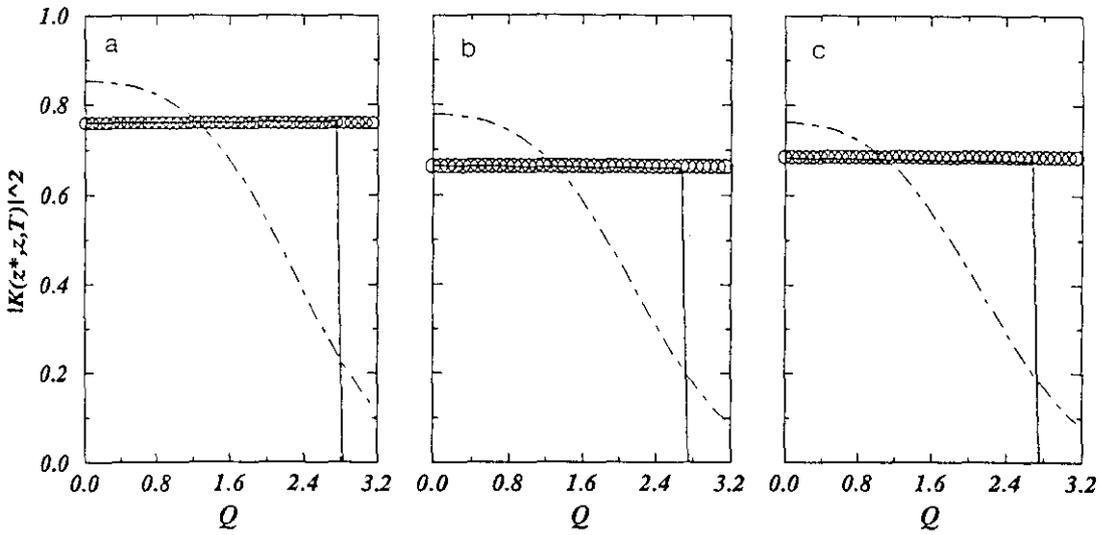


Figura 3.10:  $|K(z^*, z, T)|^2$  para  $n = 2$  como função de  $q$ : (a)  $T = 0.5$ , (b)  $T = 1.0$  e (c)  $T = 1.5$ . ---- cálculo exato, o aproximação real e - - aproximação complexa.

## Capítulo 4

# Tunelamento Semiclássico

O interesse maior no desenvolvimento de métodos semiclássicos em parte vem do fascínio de se aplicar conceitos clássicos na descrição de sistemas inerentemente quânticos. Acontece que nem sempre é possível encontrar os elementos clássicos em um dado sistema: existem aqueles onde trajetórias clássicas estão proibidas. Nesses casos a aplicação de métodos semiclássicos torna-se um desafio. Tal aplicação tem sido feita por continuações analíticas a partir das regiões de movimento permitido e, muitas vezes por meio de uma engenhosa manipulação, novas trajetórias clássicas são criadas para dar conta de transições quânticas desses sistemas. Veja por exemplo D. McLaughling [29] que, em trabalho pioneiro, introduziu trajetórias complexas para a determinação de funções de Green em casos de tunelamento. A questão aqui é também saber até que ponto a aproximação que apresentamos é válida na descrição de sistemas onde as trajetórias clássicas usuais (reais) estão ausentes. Para isso, as barreiras de potencial são os sistemas mais indicados, já que não existe movimento clássico usual para energias menores que o máximo da barreira, enquanto o correspondente quântico apresenta o fenômeno de tunelamento. Por outro lado, para energias maiores que a barreira, nenhuma reflexão clássica é esperada, enquanto que para o sistema quântico há sempre um resíduo de reflexão que vai a zero no limite  $\hbar \rightarrow 0$  e altas energias.

Neste capítulo apresentamos exemplos práticos onde a aproximação semiclássica com trajetórias complexas pode ser útil no estudo de questões fundamentais, tais como a do tempo que uma partícula representada por um pacote coerente com energia média

menor que  $V_0$  permanece no interior de uma barreira de potencial com máximo  $V_0$ , dado que a partícula tunelou. Essa é uma questão que tem uma longa história [30], e já adiantamos que é um assunto bastante controverso, onde é sempre possível achar um argumento contra ou a favor da própria pertinência da questão.

Discutiremos inicialmente o contexto atual da questão do tempo de tunelamento através de uma breve introdução.<sup>1</sup> A seguir, iniciamos um estudo de barreiras de potencial, partindo de um caso exato, a barreira harmônica inversa, para a qual determinamos o propagador e a função de onda  $\langle x|z, t \rangle$  exatamente. Posteriormente, a barreira simples (potencial  $V_0$  para  $|x| \leq a/2$ ) será estudada em profundidade.

## 4.1 A questão sobre o tempo de travessia quântico

A questão sobre quanto tempo uma partícula leva para atravessar uma barreira quântica, se ela não dispõe de energia para a travessia clássica, já foi extremamente discutida. Em geral, é dito [31] que, não tendo *status* de variável dinâmica, o tempo não pode ser associado a um observável do sistema, ou seja, não pode ser expresso em nenhuma forma operatorial e, conseqüentemente, sua medida é necessariamente indireta. Na verdade, a questão é entendida muito simplesmente se nos lembrarmos que a idéia de tempo é primitiva da mecânica clássica, e está intimamente ligado ao conceito de trajetória. Essas, porém, não tem lugar dentro dos princípios de mecânica quântica, e muito menos em suas interpretações ortodoxas. As trajetórias no sentido clássico surgem como comportamentos emergentes no limite clássico (formalmente representado por  $\hbar \rightarrow 0$ ). Ainda assim, várias questões permanecem abertas [9], principalmente se o correspondente sistema for não integrável, um problema já antevisto por Einstein [32] em 1917.

Segundo Leavens [33], o problema do tempo de tunelamento pode ser visto conceitualmente de duas maneiras: 1 - o da discussão, dentro das interpretações usuais ou marginais, do significado desse tempo. Aqui, entretanto, entra-se no domínio dos

---

<sup>1</sup>Tal introdução, na verdade, incentiva-nos o tratamento semiclássico de barreiras de potencial segundo o método que expomos, colocando esse estudo dentro de um contexto mais geral.

fundamentos de mecânica quântica, uma área que não nos cabe examinar aqui. É interessante lembrar apenas que a interpretação de *ensembles* de Bohm [33, 34] permite, de fato, uma determinação rigorosa do tempo de tunelamento, assim como seu tempo de existência dentro do potencial, se a partícula foi refletida; **2** - Independentemente da interpretação usada, não há conclusão sobre a mensurabilidade desse tempo, o que quer dizer que existem dúvidas sobre como se aplicar os postulados quânticos (que não dependem da interpretação) a fim de medir o tempo. Há, de qualquer forma, uma multiplicidade de tratamentos teóricos possíveis e, alguns autores [30] chegam a afirmar que essa multiplicidade reflete uma variedade de pontos de vista, sem maiores implicações. Uma boa revisão dos trabalhos em tempo de tunelamento pode ser encontrada em [30].

Segundo Landauer [30], existem três diferentes tipos de abordagem da questão:

**1** - Tratamento via pacotes de onda. Consiste na propagação de pacotes mais ou menos localizados na direção de uma barreira simples, por exemplo. Segundo a Ref. [35], o uso de pacotes não traz conclusões positivas, já que a mera localização de pacotes no espaço de configurações não é suficiente para caracterizar um processo ideal de tunelamento. Por processo ideal se entende o lançamento de um pacote localizado com  $\langle x \rangle \leq 0$  em  $t = 0$ , por exemplo, e  $\langle p \rangle \geq 0$  e energia média inferior a da barreira. Da interação com o potencial, o pacote inicial é refletido e um pacote transmitido emerge. Se o pacote inicial tiver, entretanto, uma distribuição de frequências altas muito localizada, o processo de tunelamento ocorre *antes* do pacote atingir a barreira. Por outro lado, a pura simulação da evolução do pacote no interior do potencial não permite nenhuma conclusão quanto ao tempo de permanência no mesmo, porque o pacote perde localização no interior da barreira;

**2** - Introdução de relógios quânticos. Esses caracterizam-se pela presença de um termo a mais dependente do tempo na função hamiltoniana. O relógio pode ser ajustado de forma a interferir o mínimo possível com o sistema original;

**3** - Introdução de variedades de trajetórias. Dentro dessa linha está o tratamento de Bohm [33], e cálculos via integrais de trajetória. Aqui é onde tratamentos semiclássicos podem entrar, já que fazem uso de trajetórias clássicas. Como órbitas clássicas são proibidas para as energias de tunelamento, extensões analíticas podem ser usadas, e é aqui que aparecem as contribuições complexas e tempos complexos [36].

Vejamos brevemente como as abordagens 3 tratam o problema. Classicamente uma partícula permanece no interior de uma região  $\Sigma$  do espaço, movendo-se segundo uma trajetória  $\vec{r}(t)$ , pelo tempo

$$t_{cl} = \int_0^\infty dt \int_\Sigma dr \delta[\vec{r} - \vec{r}(t)], \quad (4.1)$$

e, se a partícula está associada a um *ensemble* de trajetórias com probabilidade  $P_{ab}[\vec{r}(t)]$  de transição entre os pontos  $\vec{a}$  e  $\vec{b}$  do espaço, então

$$t_{cl}^{a-b} = \int_0^\infty dt \int_\Sigma dr P_{ab}[\vec{r}(t)]. \quad (4.2)$$

Por outro lado, para uma partícula com comportamento quântico, é possível a definição do *tempo de existência*

$$t = \int_0^\infty dt \int_\Sigma |\psi(\vec{r}, t)|^2 dr, \quad (4.3)$$

na região  $\Sigma$ . É claro que, em (4.3), não levamos em conta o fato de que, se a partícula de fato abandonou  $\Sigma$ , e se essa é a única informação que temos, não temos nenhuma idéia para onde ela foi. Isso naturalmente contrasta com (4.2) que é uma definição clássica. A essência do cálculo por integrais de trajetórias é calcular (4.1) como um elemento de transição [4]. No espaço de configurações usual, dado um funcional  $\mathcal{F}(\vec{r})$ ,  $\vec{r} = \vec{r}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  que depende das trajetórias possíveis desde  $\vec{r}_1$  até  $\vec{r}_2$ , o elemento de transição do estado  $|\psi_i(\vec{r}_1)\rangle$  para  $|\psi_f(\vec{r}_2)\rangle$  é dado por

$$\langle \psi_f | \mathcal{F} | \psi_i \rangle = N^{-1} \int dr_2 \int dr_1 \psi_f^*(\vec{r}_2) \int \mathcal{D}r \mathcal{F}(\vec{r}) e^{iS(\vec{r})/\hbar} \psi_i(\vec{r}_1), \quad (4.4)$$

sendo  $S$  a ação dependente da trajetória

$$S(\vec{r}) = \int_{t_1}^{t_2} \left[ \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} - V(\vec{r}, t) \right] dt, \quad (4.5)$$

e a normalização

$$N = \langle \psi_f | 1 | \psi_i \rangle = \int dr_2 dr_1 \psi_f^*(\vec{r}_2) \int \mathcal{D}r e^{iS(\vec{r})/\hbar} \psi_i(\vec{r}_1). \quad (4.6)$$

As integrais sobre  $r_1$  e  $r_2$  dão conta do fato de os estados inicial e final não serem localizados. O funcional  $\mathcal{F}$  é tomado como sendo a extensão de (4.1)

$$t = \int_0^\infty dt \int_\Sigma dr \delta[\vec{r} - \vec{r}_\gamma], \quad (4.7)$$

aqui  $\tilde{r}_z$  representa todas as possíveis trajetórias no sentido dado por Feynman. Segundo [36], se  $\psi_f$  é escolhido como a evolução quântica de  $\psi_i$ , então o valor de  $\langle t \rangle$  é dado por (4.3). É fácil ver que o elemento (4.4) pode levar a valores complexos para  $\langle t \rangle$ . Essa é a origem dos “tempos complexos” no problema de tunelamento. Para a barreira simples, escolhendo-se convenientemente estados iniciais e finais de forma a separar a parte transmitida da refletida, em [36] foi possível relacionar  $\Re[\langle t \rangle]$  e  $\Im[\langle t \rangle]$  com a taxa de precessão do spin de um elétron sujeito a um campo magnético na região da barreira, em duas direções paralela e longitudinal ao campo, respectivamente, com relação a correspondente frequência de Larmor. Embora esse resultado seja fisicamente interessante e revele alguma conexão oculta entre propriedades internas do elétron e sua dinâmica, não há conclusão se ele, de fato, expressa o tempo de tunelamento da partícula, ou o tempo de permanência na barreira, se ela foi refletida.

### 4.1.1 Tempo das trajetórias complexas.

A essência da contribuição das trajetórias estacionárias complexas do tipo que temos tratado neste trabalho na elucidação do problema do tempo de tunelamento é dada pela relação (4.1). Simplesmente extendemos essa relação às trajetórias complexas. Para isso, definimos previamente  $\Sigma$  como a *região do espaço complexo*  $x_1 - p_2$  onde o potencial existe. Assim, o tempo de existência  $\Delta$  dentro dessa região é simplesmente dado pela diferença  $t_2 - t_1$  entre os tempos de entrada e saída de cada trajetória conectando os pontos  $z'$  e  $z''$  no tempo  $T$ . Também

$$\Delta(q', p', q'', p'', T) = t_2 - t_1 < T, \quad (4.8)$$

ou seja, o tempo de transição  $\Delta$  é um funcional da trajetória. A afirmação da relação (4.8) está baseada, entretanto, na associação, para cada ponto do espaço de fases, de uma trajetória complexa conectante. Assim, o grau de precisão com que a fórmula semiclássica (1.54) aproxima o cálculo exato é crucial para o estabelecimento dessa nova proposta de tempo de tunelamento, que é válida para a representação de estados coerentes (que se pode estender a outras representações, desde que essas sejam obtidas via uma transformação conveniente a partir dos estados-coerentes), e para a qual nenhum análogo quântico existe. Por outro lado, tempos de reflexão também podem ser calculados, desde que se considere os estados de reflexão, i. e., aqueles para os quais

o momento final tem sinal contrário ao inicial. Nesse caso, a região  $\Sigma$  continua sendo a região de potencial no espaço complexo com a qual a trajetória de reflexão interagiu. Entretanto, apresentaremos aqui somente os resultados para a transmissão.

Adiantamos também que tal proposta (4.8) deve ser necessariamente comparada a outras existentes na literatura [33], baseadas em outras interpretações da mecânica quântica. Essas, por sua vez, tem sido consideradas como tratamentos únicos do tempo de tunelamento e reflexão (porque, justamente, fazem uso de trajetórias clássicas, isto é, aquelas associadas às *variáveis ocultas* do sistema). A nova proposta feita aqui mostra que, mesmo sem abandonar a interpretação ortodoxa (que poderíamos especificamente denominar de “*instrumentalista*”<sup>2</sup>), um tratamento único e direto pode ser divisado. Queremos deixar claro que as trajetórias complexas podem ser vistas como bons instrumentos de cálculo, sem pretendermos associar a elas nenhuma interpretação física.

Antes de tratarmos o exemplo da barreira, fazemos uma análise preliminar do potencial harmônico invertido para o qual o propagador e a função de onda  $\langle x|z, T \rangle$  são exatos. Esse potencial simula o comportamento de um sistema próximo a um ponto hiperbólico. Fazemos uma discussão do tempo de transição esperado para uma partícula nesse potencial, avaliando o máximo no tempo da probabilidade atingida pelo propagador na região posterior da barreira. Algumas comparações para os tempos clássicos esperados são feitas.

---

<sup>2</sup> “*Instrumentalismo*: Sustenta que as proposições teóricas da ciência são na verdade instrumentos de cálculo e predição, ou ainda regras de inferência, que auxiliam a conexão e a estruturação das proposições sobre coisas e processos observáveis. Portanto, segundo o instrumentalismo, as proposições teóricas não são proposições genuínas, às quais não se aplicam os conceitos de verdade e falsidade [37]”.

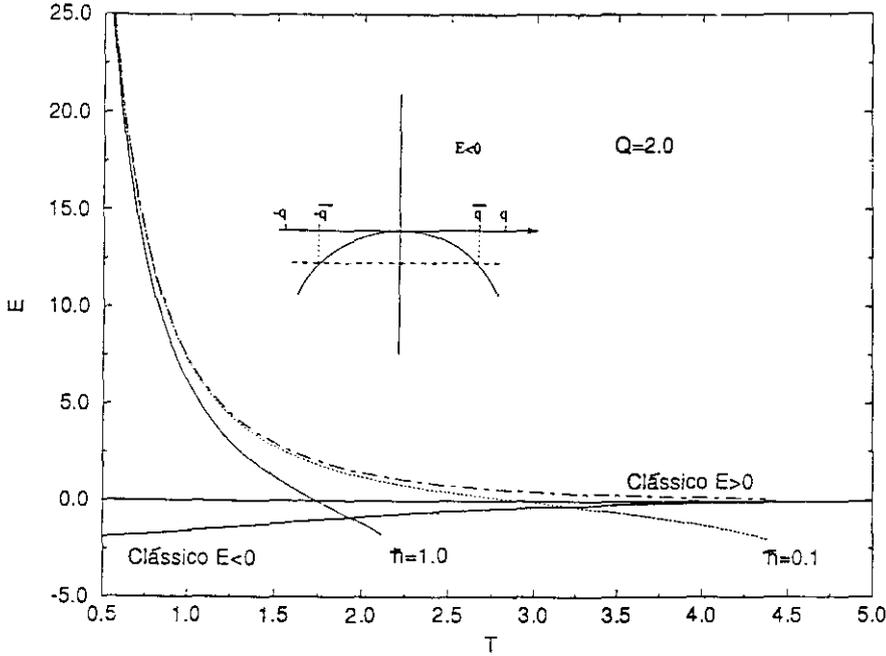


Figura 4.1: Curvas das soluções  $E(T)$  para  $q = 2.0$ . A linha tracejada é a relação clássica. As linhas iniciando em  $E > 0$  são as correspondentes quânticas para  $\hbar = 1.0$  e  $\hbar = 0.1$ . A linha cheia começando em  $E < 0$  é a solução  $E^-$  ( $\hbar = 0$ ).

## 4.2 Tratamento de um caso simples.

Em um sistema unidimensional, o tempo clássico  $\tau$  que uma partícula gasta para ir de  $q_a$  até  $q_b$  em um potencial  $V(x)$ , com energia  $E > V(x)$ , para  $q_a \leq x \leq q_b$  é

$$\tau = \int_{q_a}^{q_b} \frac{dx}{p(x)}, \quad (4.9)$$

onde  $p(x) = \sqrt{2[E - V(x)]}$ . Para uma partícula sujeita a função hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{\lambda}{2}q^2, \quad \lambda > 0, \quad (4.10)$$

o tempo desde  $q_a = -q$  e  $q_b = q$  ( $q > 0$ ) é

$$\tau_q = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \ln \left( \frac{\sqrt{\lambda q^2 + 2E} + \sqrt{\lambda}q}{\sqrt{\lambda q^2 + 2E} - \sqrt{\lambda}q} \right), \quad (4.11)$$

onde  $E = p^2/2 - \lambda q^2/2$ . Podemos reescrever (4.11) na forma

$$\sinh \sqrt{\lambda} \tau = \frac{2pq\sqrt{\lambda}}{p^2 - \lambda q^2}. \quad (4.12)$$

Para  $E < 0$ , entretanto, não existe trajetória clássica conectando  $q_i$  e  $q_f$  dados acima. Isso porque o momento torna-se uma quantidade complexa dentro da barreira. Se, porém, admitirmos uma continuação complexa para (4.9), onde fazemos  $\tau = \tau_1 + i\tau_2$ , com  $E = -|E|$ ,  $p(x) = \sqrt{\lambda x^2 - 2|E|}$ , encontramos (ver figura menor em Fig.4.1)

$$\tau = \int_{-q}^{\bar{q}} \frac{dx}{\sqrt{\lambda x^2 - 2|E|}} + \int_{-\bar{q}}^{\bar{q}} \frac{dx}{\sqrt{\lambda x^2 - 2|E|}} - i \int_{-i}^{\bar{q}} \frac{dx}{\sqrt{2|E| - \lambda x^2}}. \quad (4.13)$$

onde  $\bar{q} = \sqrt{2|E|/\lambda}$ . Fazendo as integrais acima, obtemos

$$\tau_q = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \ln \left( \frac{\sqrt{\lambda}q + \sqrt{\lambda q^2 - 2|E|}}{\sqrt{\lambda}q - \sqrt{\lambda q^2 - 2|E|}} \right) + i \frac{\pi}{\sqrt{\lambda}}, \quad (4.14)$$

de onde vem que a parte imaginária de  $\tau$  é uma constante. Novamente, rearranjando convenientemente (4.14), encontramos

$$\sinh \sqrt{\lambda} \tau = \frac{2\sqrt{\lambda}qp}{p^2 - \lambda q^2}, \quad (4.15)$$

que é a mesma expressão obtida anteriormente (4.11) para  $E > 0$ . Esse é um exemplo simples que mostra o aparecimento de tempo complexo já em tratamento clássico.

O propagador semiclássico para o sistema descrito por (4.10) pode ser calculado exatamente. Vemos que, a partir do propagador, podemos obter (4.12) no limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Dado a definição das novas variáveis  $u$  e  $v$  (1.23), definimos os parâmetros

$$\xi = \frac{c^2 + \lambda b^2}{2\hbar}, \quad \zeta = \frac{c^2 - \lambda b^2}{2\hbar}. \quad (4.16)$$

com as quais (4.10) fica

$$H = -\frac{\hbar\xi}{2}(u^2 + v^2) + \hbar\xi uv. \quad (4.17)$$

De acordo com (1.24) temos o sistema

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\xi & i\zeta \\ -i\zeta & i\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Diagonalizando a matriz característica, encontramos autovalores  $a^\pm = \pm\sqrt{\lambda}$  e o movimento segundo

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} = k^+ \begin{pmatrix} \zeta + i\sqrt{\lambda} \\ \xi \end{pmatrix} e^{\sqrt{\lambda}t} + k^- \begin{pmatrix} \zeta - i\sqrt{\lambda} \\ \xi \end{pmatrix} e^{-\sqrt{\lambda}t}. \quad (4.19)$$

Se introduzimos as condições de fronteira  $u(0) = u'$  e  $v(T) = v''$ , encontramos que

$$k^+ = \frac{\xi u' e^{-\sqrt{\lambda}T} - v''(\zeta - i\sqrt{\lambda})}{\xi(2i\sqrt{\lambda} \cosh \sqrt{\lambda}T - 2\zeta \sinh \sqrt{\lambda}T)}, \quad (4.20)$$

$$k^- = \frac{-\xi u' e^{\sqrt{\lambda}T} + v''(\zeta + i\sqrt{\lambda})}{\xi(2i\sqrt{\lambda}T - 2\zeta \sinh \sqrt{\lambda}T)}, \quad (4.21)$$

que determinam as trajetórias completamente. Por simplicidade, escolhemos os parâmetros do estado coerente dependendo do potencial na forma

$$c = \sqrt{\hbar\sqrt{\lambda}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{\lambda}}}, \quad (4.22)$$

Com isso as trajetórias ficam simplesmente

$$u(t) = \frac{u' \cosh \sqrt{\lambda}(T-t)}{\cosh \sqrt{\lambda}T} + \frac{iv'' \sinh \sqrt{\lambda}t}{\cosh \sqrt{\lambda}T}, \quad (4.23)$$

$$v(t) = \frac{v'' \cosh \sqrt{\lambda}t}{\cosh \sqrt{\lambda}T} + \frac{iu' \sinh \sqrt{\lambda}(T-t)}{\cosh \sqrt{\lambda}T}.$$

A escolha que fizemos corresponde a fazer  $\zeta = 0$ . A energia e ação parcial ficam parametrizadas pelas trajetórias (4.23) por

$$E(v'', u', T) = \frac{\hbar\sqrt{\lambda}}{2 \cosh^2 \sqrt{\lambda}T} \left[ (v''^2 + u'^2) + 2iu'v'' \sinh \sqrt{\lambda}T \right], \quad (4.24)$$

e

$$\mathcal{S}(v'', u', T) = \frac{\hbar}{2 \cosh \sqrt{\lambda}T} \left[ (v''^2 + u'^2) \sinh \sqrt{\lambda}T - 2iv''u' \right]. \quad (4.25)$$

Assim

$$\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial v'' \partial u'} = -\frac{i\hbar}{\cosh \sqrt{\lambda}T}, \quad (4.26)$$

e o propagador resulta simplesmente

$$K(v'', u', T) = \frac{e^{-1/2(|v''|^2 + |u'|^2)}}{\sqrt{\cosh \sqrt{\lambda} T}} \exp \left[ \frac{i(v''^2 + u'^2) \sinh \sqrt{\lambda} T + 2v''u'}{2 \cosh \sqrt{\lambda} T} \right]. \quad (4.27)$$

Por simplicidade, consideremos em (4.27) que  $q' = -q$ ,  $q'' = q$  e  $p' = p'' = p$  ( $q > 0$ ,  $p > 0$ ). O quadrado do módulo de (4.27) é

$$|K(q, p, T)|^2 = \frac{1}{\cosh \tau} \exp \left[ \frac{2pq \tanh \tau}{\hbar} + \frac{1}{\cosh \tau} \left( \frac{p^2}{c^2} - \frac{q^2}{b^2} \right) - \left( \frac{p^2}{c^2} + \frac{q^2}{b^2} \right) \right], \quad (4.28)$$

com  $\tau = \sqrt{\lambda} T$ . A idéia é calcularmos os pontos  $T$  para os quais

$$\frac{\partial |K(q, p, T)|^2}{\partial T} = 0, \quad (4.29)$$

experimentando um *máximo*. Isso resulta na relação

$$-\frac{\hbar\sqrt{\lambda}}{2} \sinh 2\tau - (p^2 - \lambda q^2) \sinh \tau + 2pq\sqrt{\lambda} = 0. \quad (4.30)$$

Vê-se imediatamente que, no limite  $\hbar \rightarrow 0$ , obtemos (4.12). Há, porém, uma importante extensão da relação (4.30), a de que ela é válida para  $E < 0$ . Elevando essa relação ao quadrado e substituindo o valor de  $p$ , encontramos uma equação de segundo grau para a energia

$$\frac{4E^2}{\lambda} \sinh^2 \tau + \left( \frac{2\hbar}{\sqrt{\lambda}} \sinh 2\tau \sinh \tau - 8q^2 \right) E + \frac{\hbar^2}{4} \sinh^2 2\tau - 4\lambda q^4 = 0. \quad (4.31)$$

Naturalmente, existem duas soluções possíveis,  $E^\pm$

$$E^\pm = \frac{\lambda}{\sinh^2 \tau} \left( q^2 - \frac{\hbar}{4\sqrt{\lambda}} \sinh 2\tau \sinh \tau \pm q^2 \cosh \tau \sqrt{1 - \frac{\hbar \sinh 2\tau \sinh \tau}{2q^2 \sqrt{\lambda} \cosh^2 \tau}} \right), \quad (4.32)$$

das quais a solução  $E^+$  corresponde à solução clássica para trajetórias diagonais no limite  $\hbar \rightarrow 0$

$$E_{cl} = \frac{\lambda}{\sinh^2 \tau} q^2 (1 + \cosh^2 \tau). \quad (4.33)$$

Na Fig.4.1 vemos um gráfico das relações  $E(T)$  para trajetórias diagonais na barreira harmônica invertida para  $q' = -q'' = -2$ . A curva tracejada corresponde ao limite

clássico para  $E > 0$  (4.12). Há uma curva cheia para  $E < 0$ , que corresponde à solução  $E^-$  de (4.32). A solução  $E^+$  é exibida em duas curvas (uma cheia e outra pontilhada) para diferentes valores de  $\hbar$  indicados na figura. A medida que  $\hbar \rightarrow 0$ , a curva  $E^+$  tende à relação clássica. As curvas com  $\hbar \neq 0$  para  $E > 0$  indicam que, para um valor não nulo de  $\hbar$ , existe um máximo de  $|K(q, p, T)|^2$  até um certo valor de  $T$  e uma energia mínima. Para energias menores que esse valor, existe tunelamento, isto é, probabilidade de se encontrar a partícula do outro lado, porém não existe solução para (4.29). O valor máximo de  $|K(q, p, T)|^2$  encontrado para  $E < 0$  não representa a passagem do pacote principal pelo ponto  $q''$ , mas sim o momento quando a distribuição de probabilidades mais se aproxima desse ponto. É interessante observar que, para o sistema dado por (4.10), não há divisão do pacote em parte transmitida e refletida, mesmo para valores diferentes de  $c$  e  $b$ . O “centro de massa” da distribuição de probabilidades segue sempre a trajetória clássica, refletindo se  $\langle E \rangle < 0$ . Isso pode ser visto nas Figs. 4.2 e 4.3, onde são mostradas as evoluções coerentes de dois pacotes em cada figura, desde  $T = 0.0$  até  $T = 1.4$ , para  $c = 1.0$  e  $\hbar = 1.0$ . Na Fig.4.2, fixamos  $q' = -1$  e  $p' = 2$ , de forma que  $\langle E \rangle = 3/2$ , enquanto que na Fig.4.3  $q' = -3$  e  $p' = 1$ , de forma que  $\langle E \rangle = -4$ . As figuras mostram isoprováveis de  $|K(q'', p'', q', p', T)|^2$  no espaço das coordenadas finais  $q''$  e  $p''$ . O centro do pacote segue sempre a trajetória clássica correspondente.

### 4.2.1 Função de onda.

Podemos analiticamente obter a projeção de  $K(z'', z', T)$  no espaço  $x$  através da integral

$$\langle x|z, t \rangle \equiv \psi_{q,p}(x, T) = \int_{\text{todo } z'} \langle x|z' \rangle \langle z'| e^{-i\hat{H}T/\hbar} |z \rangle \frac{d^2 z'}{\pi}, \quad (4.34)$$

com  $d^2 z' = dp' dq' / 2\hbar$  e  $\tau = \sqrt{\lambda} T$ . Além disso,

$$\langle x|z' \rangle = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \exp \left[ -\frac{1}{2b^2} (x^2 + q'^2 - 2xq') + \frac{ip'x}{\hbar} - \frac{ip'q'}{2\hbar} \right]. \quad (4.35)$$

É aparente que, a partir das Figs. 4.2 e 4.3, a projeção em  $x$  conservará a forma gaussiana. Aqui indicamos os passos para a resolução de (4.34). Explicitamente podemos

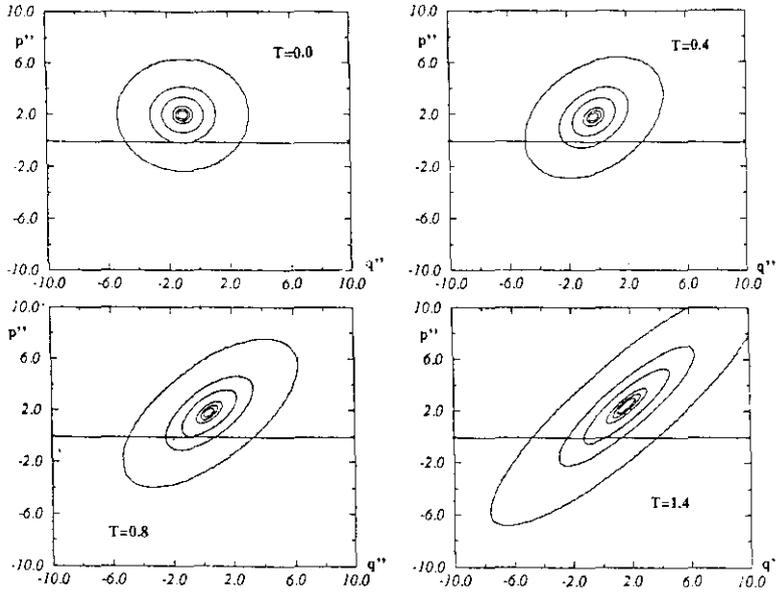


Figura 4.2: Sequência de isoprováveis de  $|K(q'', p'', q', p', T)|^2$  para vários valores de  $T$  no espaço de fases  $(q'', p'')$  para  $\langle E \rangle = 3/2$ .

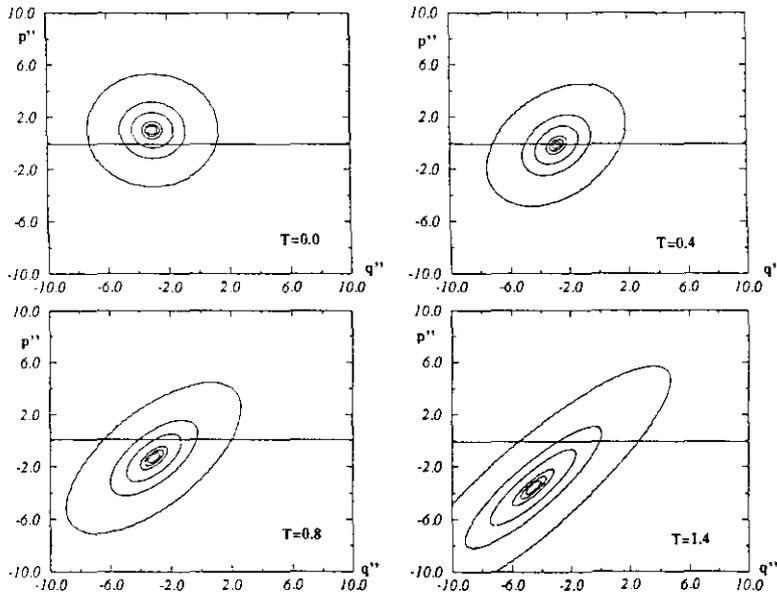


Figura 4.3: Sequência de isoprováveis de  $|K(q'', p'', q', p', T)|^2$  para vários valores de  $T$  no espaço de fases  $(q'', p'')$  para  $\langle E \rangle = -4$ .

escrever essa relação na forma

$$\psi_{q,p}^i(x, \tau) = \frac{e^{g(z,x,\tau)}}{2\pi\hbar\sqrt{\sqrt{\pi}b\cosh\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp' dq' e^{-F(x,z,q',p',\tau)}, \quad (4.36)$$

com

$$g(z, x, \tau) = -\frac{1}{2}|z|^2 + \frac{i}{2}z^2 \tanh \tau - \frac{x^2}{2b^2}, \quad (4.37)$$

e

$$F(x, z, q', p', \tau) = Aq'^2 + Bp'^2 - Cq'p' + Dq' + Ep'. \quad (4.38)$$

As constantes em  $F(x, z, q', p', \tau)$  são

$$\xi = 1 + i \tanh \tau, \quad (4.39)$$

$$A = \frac{2 + \xi^*}{4b^2}, \quad (4.40)$$

$$B = \frac{\xi}{4c^2}, \quad (4.41)$$

$$C = \frac{-i\xi}{2\hbar}, \quad (4.42)$$

$$D = -\left(\frac{x}{b^2} + \frac{z}{\sqrt{2}\cosh\tau}\right), \quad (4.43)$$

$$E = -i\left(\frac{x}{\hbar} - \frac{z}{\sqrt{2}c\cosh\tau}\right). \quad (4.44)$$

A integral em (4.36) é gaussiana. É necessário, porém, introduzir uma transformação diagonalizadora. Representando essa transformação na forma

$$\vec{q} = \mathcal{K}\vec{u} + \mathcal{C}, \quad (4.45)$$

onde

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad \vec{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (4.46)$$

podemos determinar  $\mathcal{K}$  e  $\mathcal{C}$ . Também podemos escrever (4.38) como (t significa transposta)

$$F = \vec{q}^t \mathcal{A} \vec{q} + \mathcal{B}^t \vec{q}, \quad (4.47)$$

com

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & -C/2 \\ -C/2 & A \end{pmatrix} \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} D \\ E \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

Basta impor que  $F$  fique na forma diagonal. A translação resulta

$$C = -\frac{1}{2(AB - C^2/4)} \begin{pmatrix} BD + CE/2 \\ CD/2 + AE \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

de forma que

$$F = \lambda^+ u^2 + \lambda^- v^2 - \left( \frac{BD^2 + AE^2 + CED}{4AB - C^2} \right). \quad (4.50)$$

Para completar, a matriz de rotação torna-se

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \frac{C/2}{\sqrt{(A-\lambda^+)^2 + C^2/4}} & \frac{A+\lambda^+}{\sqrt{(A-\lambda^+)^2 + C^2/4}} \\ \frac{B-\lambda^-}{\sqrt{(B-\lambda^-)^2 + C^2/4}} & \frac{C/2}{\sqrt{(B-\lambda^-)^2 + C^2/4}} \end{pmatrix}, \quad (4.51)$$

que tem auto-valores dados por

$$\lambda^\pm = \frac{1}{2}[(A + B) \pm \sqrt{(A - B)^2 + C^2}]. \quad (4.52)$$

A integral final só depende do produto  $\lambda^+ \lambda^- = AB - C^2/4$ . Finalmente, a projeção  $\psi_{q,p}(x, \tau)$  torna-se

$$\psi_{q,p}(x, \tau) = \frac{\exp[-\alpha x^2 + \beta x + \gamma]}{\sqrt{\sqrt{\pi} b (\cosh \tau + i \sinh \tau)}}, \quad (4.53)$$

com

$$\alpha = \frac{1}{2b^2}(\operatorname{sech} 2\tau - i \tanh 2\tau), \quad (4.54)$$

$$\beta = \frac{1}{b \cosh 2\tau} \left[ \left( \frac{q}{b} \cosh \tau + \frac{p}{c} \sinh \tau \right) + i \left( \frac{p}{c} \cosh \tau - \frac{q}{b} \sinh \tau \right) \right], \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} \gamma &= -\frac{1}{4} \left( \frac{q^2}{b^2} + \frac{p^2}{c^2} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{q^2}{b^2} - \frac{p^2}{c^2} \right) \left[ 1 + i \tanh \tau \frac{(\cosh 2\tau - 1)}{\cosh 2\tau} \right] - \\ &- \frac{qp}{2\hbar} \left[ \tanh \tau \frac{(1 + \cosh 2\tau)}{\cosh 2\tau} + i \operatorname{sech} 2\tau \right]. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Pode-se facilmente mostrar a partir de (4.53) que

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \psi_{q,p}(x, \tau) = \langle x | z \rangle, \quad (4.57)$$

como deve acontecer. É bastante claro que a função de onda em  $x$ , inicialmente gaussiana em  $\tau = 0$ , permanece gaussiana (função quadrática na exponencial - ver Fig.

4.5). Há, entretanto, um forte espalhamento em  $x$ , com incerteza propagando-se no tempo segundo

$$\Delta x \propto b \cosh 2\tau. \quad (4.58)$$

Na Fig. 4.4 são mostradas juntamente duas curvas de  $|K(q'', p'', q', p', T)|^2$  (curva

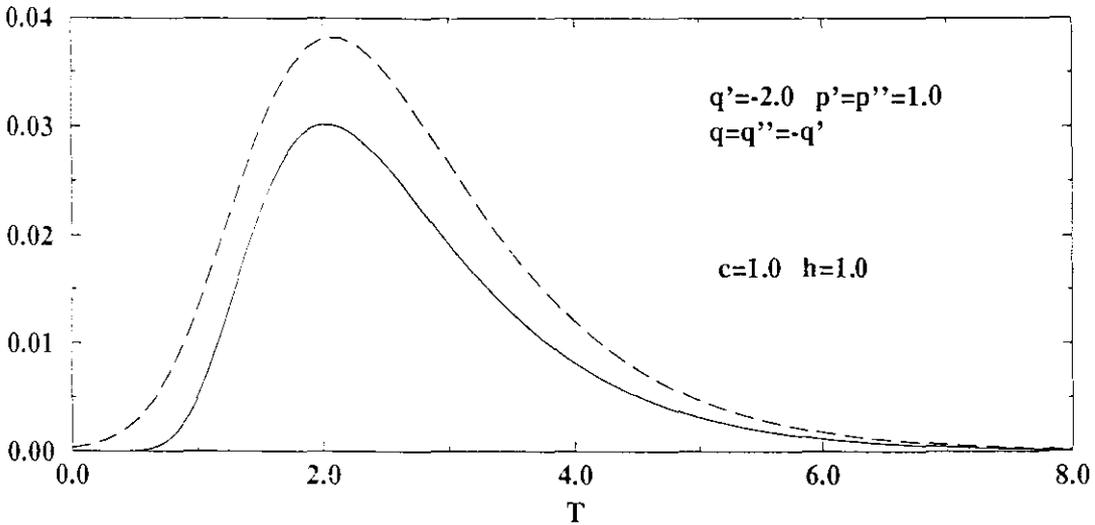


Figura 4.4: Curvas de  $|K(q'', p'', q', p', T)|^2$  (curva tracejada) e  $|\psi_{q,p}(x, T)|^2$  (curva cheia) para o potencial harmônico invertido, mostrando máximos de probabilidade em função de  $T$  para os parâmetros indicados.

tracejada) e  $|\psi_{q,p}(x, T)|^2$  (curva cheia), para  $p' = p'' = p$  e  $q'' = q = x = -q' = -2$  em função de  $T$ . Como vemos, o máximo em  $T$  para as duas curvas indica que, para  $|\psi_{q,p}(x, T)|^2$ , também existe um máximo, aproximadamente igual ao do propagador. Nesse caso  $E < 0$ . Na Fig. 4.5 dois gráficos de  $|\psi_{q,p}(x, T)|^2$  mostram a evolução de pacotes coerentes na barreira harmônica invertida com parâmetros  $c = 1$ ,  $\hbar = 1.0$ , onde se usou a parametrização  $c^2 = \lambda b^2$ . Em (a),  $q = -1.0$  e  $p = 2.0$ , de forma que o pacote tem  $\langle E \rangle = 3/2$ . Em (b),  $q = -3.0$  e  $p = 1.0$ , de forma que  $\langle E \rangle = -4$ . Em particular, esse último gráfico mostra que não há emersão de um pacote tunelante. Ainda que  $E \approx 0$ , com  $E < 0$ , podemos verificar que não há tunelamento no sentido da emersão de um pacote secundário<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Ou tunelamento ideal segundo Landauer, ver página 57.

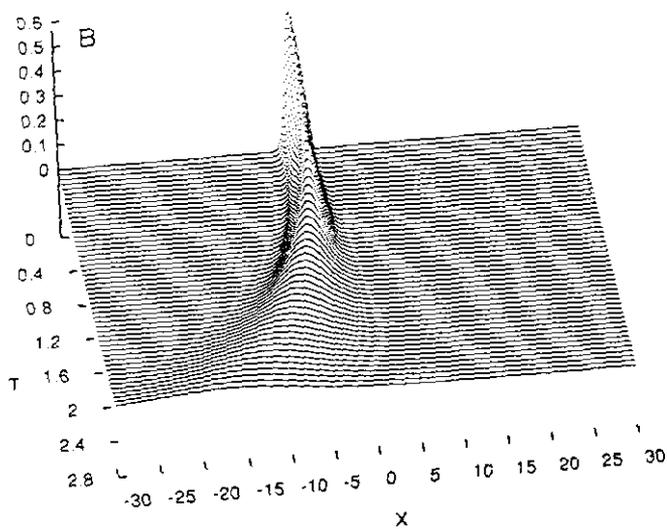
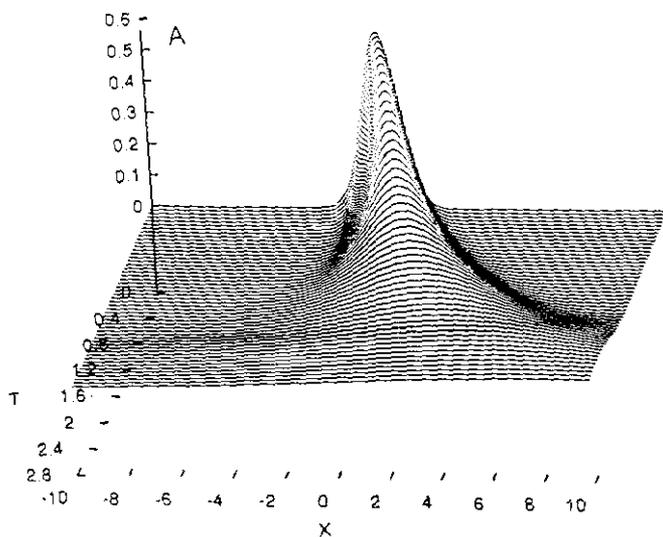


Figura 4.5: Função  $|\psi_{q,p}(x, T)|^2$  no espaço  $x, T$ . (a),  $q = -1.0$  e  $p = 2.0$   $E > 0$ :  
 (b),  $q = -3.0$  e  $p = 1.0$   $E < 0$ .  $c = 1.0$  e  $\hbar = 1.0$ .

### 4.3 Barreiras no espaço complexo

Na seção anterior vimos que o potencial hiperbólico, apesar de exato em sua solução semiclássica, não permite uma análise de um processo de tunelamento ideal. Consideramos, então, o tratamento de uma barreira simples de potencial unidimensional

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } |x| \leq a/2, \\ 0 & \text{se } |x| > a/2, \end{cases} \quad (4.59)$$

para a qual nenhum movimento clássico conectando  $x < 0$  com  $x > 0$  existe com momento  $p < \sqrt{2V_0}$  ( $m = 1$  sempre). Tal sistema é muito conhecido na literatura básica, tendo sido extensivamente estudado [30] no contexto do problema do tempo de tunelamento. Determinaremos os propagadores exato e semiclássico na representação de estados coerentes, onde faremos uma análise detalhada do cálculo desses propagadores nas diversas aproximações possíveis.

Do ponto de vista do andamento do trabalho, fizemos inicialmente uma aplicação direta ao problema da barreira da relação (1.62), que nos permite um tratamento “semi-analítico”, isto é, as principais relações que resultam nas trajetórias complexas foram determinadas analiticamente até o ponto onde resoluções numéricas foram necessárias. Essa tentativa inicial levou à descoberta de que a aproximação dada por (1.62) conduz a resultados precisos (se comparados ao cálculo exato) desde que, na região do espaço de fases analisada, trajetórias clássicas reais existam. De outra forma, (1.62) não aproxima estados baixos, justamente os que sofrem espalhamento com tunelamento em (4.59). Nesse caso, (1.54) deve ser usada obrigatoriamente. A aproximação (1.62) só é aplicável assim a estados elevados ou a barreiras simples cuja área no espaço de fases  $\mathcal{A} \simeq a\sqrt{2V_0} \gg \hbar$ . Entretanto faremos também aqui uma análise preliminar por essa via, já que ela nos permite uma análise analítica. Finalmente aplicaremos (1.54) utilizando do processo numérico descrito no Capítulo 2. Com isso podemos implementar nossa idéia sobre o tempo de travessia segundo as trajetórias complexas.

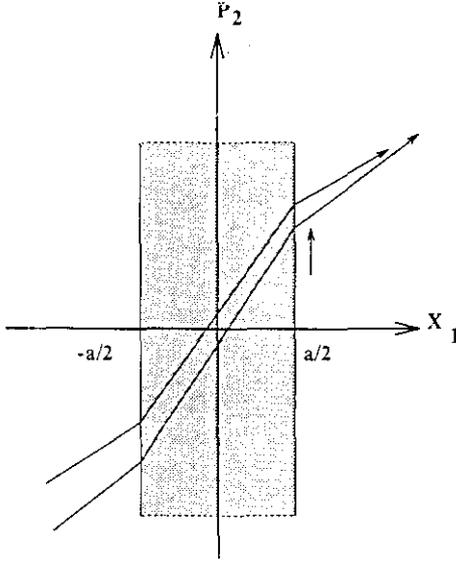


Figura 4.6: Faixa de potencial no plano complexo  $x_1 - p_2$  mostrando algumas trajetórias de transmissão.

### 4.3.1 O Limite clássico da barreira simples no espaço complexo.

Aplicando-se (1.62) necessitamos de uma forma complexa para o potencial de (4.59). Esta vem de

$$V_\alpha(q) = \frac{V_0}{4} \left[ 1 + \tanh\left(\frac{q + a/2}{\alpha}\right) \right] \left[ 1 - \tanh\left(\frac{q - a/2}{\alpha}\right) \right], \quad (4.60)$$

com  $q = x_1 + ip_2$  no limite  $\alpha \rightarrow 0$ . Nesse limite, a parte real de  $V_\alpha(q)$  não depende de  $p_2$ , de forma que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \Re[V_\alpha(q)] = \frac{V_0}{4} [1 + \Theta(x_1 + a/2)][1 - \Theta(x_1 - a/2)]. \quad (4.61)$$

Isso descreve uma faixa no plano complexo (Fig.4.6)  $x_1 - p_2$  entre  $-a/2$  e  $a/2$  em  $x_1$ . Distinguimos, assim, duas regiões distintas: a região I de movimento livre e a região II (entre  $-a/2$  e  $a/2$ ) com potencial  $V_0$ . A determinação das trajetórias complexas é feita pela obtenção das equações de movimento dentro e fora da barreira. Como o movimento é do tipo livre, uma trajetória de travessia apresenta refração no interior da barreira. Para tais trajetórias soluções são encontradas resolvendo-se simultaneamente

as equações de conservação de energia e continuidade através da barreira. Como no caso do poço simples, resolvemos, caso a caso, as trajetórias. Se admitirmos que  $c = 1$  e  $b = 1$  como no caso do poço, temos as condições gerais (3.4), que devem ser obedecidas. As condições de borda do potencial são dadas por

$$\bar{x}_1^{(1)} = -\frac{a}{2}, \quad \bar{x}_1^{(2)} = \frac{a}{2}, \quad (4.62)$$

que correspondem a condições válidas para trajetórias que provêm da esquerda para direita (movimento que sempre usaremos).

#### 4.3.1.1 Trajetórias diretas I→I e II→II

São aquelas cujo movimento é sempre livre, isto é, que não interagem com a fronteira do potencial. Essas caracterizam o movimento fora (I→I) e dentro (II→II) da barreira. Tais trajetórias são dadas por

$$x_1'' = p_1' T + x_1', \quad p_1' = p_1'', \quad (4.63)$$

$$p_2'' = x_2' T + p_2', \quad x_2' = x_2''.$$

onde

$$p_1' = \frac{T(q'' - q') + 2(p' + p'')}{4 + T^2}, \quad x_2' = \frac{-T(p' + p'') + 2(q'' - q')}{4 + T^2}. \quad (4.64)$$

Para cada  $q'$ ,  $p'$ ,  $q''$ ,  $p''$  e  $T$  dado inicialmente, deve-se determinar as regiões de existência de tais trajetórias.

#### 4.3.1.2 Trajetórias I→II e II→I

Trajetoórias desse tipo aparecem em condições de contorno intermediárias, quando o pacote se avizinha da barreira ou se começa a se afastar dela. Além das condições (3.4), a trajetória deve satisfazer a equações de continuidade e conservação de energia. Numa transição tipo I→II (o caso II→I é idêntico, bastando trocar  $V_0 \rightarrow -V_0$ ) temos

$$E_1^I = \frac{1}{2}(p_1'^2 - x_2'^2), \quad E_2^I = p_1' x_2', \quad (4.65)$$

$$E_1^{II} = \frac{1}{2}(p_1''^2 - x_2''^2) + V_0, \quad E_2^{II} = p_1'' x_2''.$$

e, naturalmente

$$E_1 = E_1^I = E_1^{II}, \quad E_2 = E_2^I = E_2^{II}. \quad (4.66)$$

Vê-se claramente que a conservação da parte imaginária da energia é necessária, uma que o potencial não é inteiramente analítico. Dessas duas relações obtemos relações para os momentos finais

$$p_1''^4 - 2(E_1 - V_0)p_1''^2 - E_2^2 = 0, \tag{4.67}$$

$$x_2''^4 + 2(E_1 - V_0)x_2''^2 - E_2^2 = 0,$$

cujas soluções são

$$p_1''^2 = (E_1 - V_0) \pm \sqrt{(E_1 - V_0)^2 + E_2^2}, \tag{4.68}$$

$$x_2''^2 = V_0 - E_1 \pm \sqrt{(E_1 - V_0)^2 + E_2^2}.$$

Como  $p_1''$  e  $x_2''$  são sempre reais as soluções de sinal negativo devem ser descartadas. Temos duas soluções assim associadas à simetria do potencial

$$p_1'' = \pm \sqrt{(E_1 - V_0) + \sqrt{(E_1 - V_0)^2 + E_2^2}}, \tag{4.69}$$

$$x_2'' = \pm \sqrt{(V_0 - E_1) + \sqrt{(E_1 - V_0)^2 + E_2^2}}.$$

Se a trajetória é real  $E_2 = 0$ , então  $x_2 = 0$ , e  $p_1$  é o próprio momento esperado para  $E_1 > V_0$ . Se  $E_1 < V_0$  então

$$\lim_{E_2 \rightarrow 0} p_1'' = 0, \quad \lim_{E_2 \rightarrow 0} x_2'' = 0. \tag{4.70}$$

Entretanto

$$\lim_{E_2 \rightarrow 0} \frac{p_1''}{x_2''} = 0, \tag{4.71}$$

o que mostra que  $p_1''$  vai a zero mais rapidamente que  $x_2''$ . Se descrevermos a posição da partícula no interior da barreira pelo vetor  $\vec{P} = (x_1'' - \bar{x}_1, p_2'' - \bar{p}_2)$ , então, se  $\vec{P} = p(\cos \alpha, \sin \alpha)$ , no limite  $E_2 \rightarrow 0$ ,  $\alpha \rightarrow \pi/2$ . Assim, a medida que uma trajetória com  $E_1 < V_0$  se aproxima da linha real, o trajeto no interior II tende a se aproximar da primeira fronteira do potencial. Porém, se  $T$  for suficiente longo, haverá emersão pela outra borda. Trajetórias desse tipo são continuadas no espaço de fases por trajetórias de reflexão, isto é, aquelas que sofrem reflexão total na borda do potencial.

Se o tempo  $t_1$  for o tempo de interação com o potencial, a relação de continuidade será dada por

$$x_1'' = p_1''(T - t_1) + p_1' t_1 + x_1 \quad (4.72)$$

$$p_2'' = x_2''(T - t_1) + x_2' t_1 + p_2$$

Substituindo (3.4) e (4.62) encontramos

$$p_1'' = \frac{x_2 t_1 - p_1' + p'' + p' + \zeta_1(q'' + a/2)}{1 + \zeta_1^2}, \quad (4.73)$$

$$x_2'' = \frac{q'' + a/2 - \zeta_1(x_2' t_1 - p_1' + p'' + p')}{1 + \zeta_1^2}, \quad (4.74)$$

onde  $\zeta = T - t_1$  e

$$t_1 = - \left( \frac{x_2' + q' + a/2}{p_1'} \right). \quad (4.75)$$

Aplicando as equações acima em (4.66) obtemos duas equações para as duas variáveis  $p_1'$  e  $x_2'$  que podem ser resolvidas em termos de  $q'$ ,  $p'$ ,  $q''$ ,  $p''$  e  $T$ .

#### 4.3.1.3 Trajetórias de transmissão I→II→I

As trajetórias que entram e saem da barreira tem solução semelhante aos casos mais simples descritos anteriormente. A diferença está na existência de mais uma relação de borda.

Trajetoórias tipo I→II→I obedecem às relações ( $\Delta = t_2 - t_1$ )

$$x_1'' = p_1''(T - t_2) + \bar{x}_2^{(2)}, \quad \bar{x}_1^{(2)} = p_1^{II} \Delta + \bar{x}_1^{(1)}, \quad \bar{x}_1^{(1)} = p_1' t_1 + x_1', \quad (4.76)$$

$$p_2'' = x_2''(T - t_2) + \bar{p}_2^{(2)}, \quad \bar{p}_2^{(2)} = x_2^{II} \Delta + \bar{p}_2^{(1)}, \quad \bar{p}_2^{(1)} = x_2' t_1 + p_2'.$$

Aqui  $t_2$  é o tempo de saída, e  $(p_1^{II}, x_2^{II})$  é o momento no interior da barreira. Por conservação de energia

$$p_1'' = p_1', \quad x_2'' = x_2', \quad p_1'^2 - x_2'^2 = p_1^{II2} - x_2^{II2} - 2V_0, \quad p_1' x_2' = p_1^{II} x_2^{II}. \quad (4.77)$$

De um modo geral podemos escrever três relações  $f_i(p_1', x_2', \Delta) = 0, i = 1, 2, 3$ , de onde se tem as soluções, sendo [levando em conta também (4.75)]

$$\begin{aligned} f_1 &= p_1' x_2' - [2p_1' - (p'' + p') - x_2'(T - \Delta)]a, \\ f_2 &= (p_1'^2 - x_2'^2 - 2V_0)\Delta^2 - a^2 + [2p_1' - (p'' + p') - x_2'(T - \Delta)]^2, \\ f_3 &= (q'' - q') - 2x_2' - a - p_1'(T - \Delta). \end{aligned} \quad (4.78)$$

Essas equações podem ser resolvidas por procedimento numérico que determine solução de sistemas não lineares de  $N$  variáveis. Um chute inicial é necessário. O que se faz é substituir uma solução real como chute inicial (por exemplo, pode-se substituir as soluções exatas (4.64) para  $V_0 = 0$  e aumentar o potencial adiabaticamente) e mudar adiabaticamente algum parâmetro.

A ação  $S$  fica simplesmente

$$S = -\frac{i\hbar}{2}[v''^2 + u'^2 + \sqrt{2}i(v''\bar{p}' - u'\bar{p}')], \quad (4.79)$$

onde  $\bar{p} = p'_1 + ix'_2$  e  $\bar{p}'' = p''_1 + ix''_2$ . Também, segundo (3.45), temos

$$\frac{\partial^2 S}{\partial u' \partial v''} = -\hbar \left[ \left( \frac{\partial p'_1}{\partial q''} - \frac{\partial x'_2}{\partial p''} \right) + i \left( \frac{\partial x'_2}{\partial q''} + \frac{\partial p'_1}{\partial p''} \right) \right], \quad (4.80)$$

ou seja, basta obter as derivadas de  $\bar{p}'$  com relação a  $z''$ . Há duas maneiras de se fazer isso. Uma delas é partir diretamente das equações (4.78). De fato, para  $i = 1, 2, 3$ , temos

$$f_i(q', p', q'', p'', T) = 0 \quad (4.81)$$

Uma mudança diferencial nos pontos finais implica também

$$f_i(q', p', q' + \delta q'', p'' + \delta p'', T) = 0, \quad (4.82)$$

ou seja,

$$\left. \frac{\delta f_i}{\delta q''} \right|_{z', z'', T} = 0, \quad \left. \frac{\delta f_i}{\delta p''} \right|_{z', z'', T} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (4.83)$$

ou

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial x_j}{\partial q''} \right) = -\frac{\partial f_i}{\partial q''}, \quad \sum_{j=1}^3 \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial x_j}{\partial p''} \right) = -\frac{\partial f_i}{\partial p''}, \quad (4.84)$$

para  $i = 1, 2, 3$ , com  $\bar{x} = (p'_1, x'_2, \Delta)$ . As relações (4.84) representam dois sistemas de equações lineares homogêneas para as derivadas (Apêndice B) em (4.80). Uma outra maneira seria numericamente introduzir uma diferença,  $\Delta q''$  e  $\Delta p''$ , para cada trajetória e determinar os novos  $\Delta p'_1$  e  $\Delta x'_2$ . Constrói-se então, pela relação das diferenças, o valor em (4.80).

Em geral, as trajetórias I—II—I são sempre responsáveis pelo processo de tunelamento semiclássico do pacote. O cálculo do propagador semiclássico pode ser assim feito completamente.

### 4.3.2 Cálculo exato do propagador.

Antes de apresentar o resultado semiclássico, discutimos brevemente o cálculo exato. Como o sistema é aberto, temos que

$$K(z'', z', T) = \int_{-\infty}^{\infty} C_{k, z''}^* C_{k, z'} \epsilon^{-iE_k T/\hbar} dk, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \quad (4.85)$$

onde

$$C_{k, z} = \langle k|z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle z|x \rangle \Psi_k(x) dx. \quad (4.86)$$

Aqui  $\Psi_k(x)$  é a auto-função da barreira.

Admitindo-se movimento da esquerda, para  $E > V_0$  e  $k > 0$ , denotamos  $\kappa^2 = 2V_0/\hbar^2$ , de forma que  $\mu^2 = k^2 - \kappa^2$ . A auto-função fica

$$\Psi_{+k}(x) = \mathcal{N} \begin{cases} \epsilon_{>} e^{ikx} + \beta_{>} e^{-ikx} & \text{se } x < -a/2, \\ \gamma_{>} e^{i\mu x} + \zeta_{>} e^{-i\mu x} & \text{se } |x| \leq a/2, \\ \epsilon_{>} e^{ikx} & \text{se } x > a/2, \end{cases} \quad (4.87)$$

onde

$$\beta_{>} = \frac{i}{2} \epsilon_{>} \left( \frac{\mu}{k} - \frac{k}{\mu} \right) \sin \mu a, \quad (4.88)$$

$$\gamma_{>} = \frac{\epsilon_{>}}{2} \left( 1 + \frac{k}{\mu} \right) e^{i(k-\mu)a/2}, \quad (4.89)$$

$$\zeta_{>} = \frac{\epsilon_{>}}{2} \left( 1 - \frac{k}{\mu} \right) e^{i(k+\mu)a/2}, \quad (4.90)$$

com

$$\epsilon_{>} = \frac{2e^{-ika}}{2 \cos \mu a - i \left( \frac{\mu}{k} + \frac{k}{\mu} \right) \sin \mu a}. \quad (4.91)$$

Para  $E < V_0$  e  $k > 0$ , com  $\mu^2 = \kappa^2 - k^2$ , temos a auto-função

$$\Psi_{-k}(x) = \mathcal{N} \begin{cases} e^{ikx} + \beta_{<} e^{-ikx} & \text{se } x < -a/2, \\ \gamma_{<} e^{\mu x} + \zeta_{<} e^{-\mu x} & \text{se } |x| \leq a/2, \\ \epsilon_{<} e^{ikx} & \text{se } x > a/2, \end{cases} \quad (4.92)$$

onde

$$\beta_{<} = -\frac{i\epsilon_{<}}{2} \left( \frac{\mu}{k} + \frac{k}{\mu} \right) \sinh \mu a, \quad (4.93)$$

$$\gamma_{<} = \frac{\epsilon_{<}}{2} \left( 1 + \frac{i\tilde{k}}{\mu} \right) e^{(ik-\mu)/2} \quad (4.94)$$

$$\zeta_{<} = \frac{\epsilon_{<}}{2} \left( 1 - \frac{i\tilde{k}}{\mu} \right) e^{(ik+\mu)/2}, \quad (4.95)$$

com

$$\epsilon_{<} = \frac{2e^{-ika}}{2 \cosh \mu a + i \left( \frac{\mu}{k} - \frac{k}{\mu} \right) \sinh \mu a}. \quad (4.96)$$

Para  $k < 0$ , basta invertermos o sinal de  $k$  nas relações para  $\Psi_k(x)$  acima e tomarmos o complexo conjugado  $\Psi_k(x) \rightarrow \Psi_k^*(x)$ . As funções acima são ideais para a construção do propagador exato (4.85). A normalização  $\mathcal{N}$  é obtida notando-se que [38] ( $p = \hbar k$ )

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p'), \quad (4.97)$$

de onde temos  $\mathcal{N} = \sqrt{1/2\pi}$ . Na determinação numérica de (4.85), para maior rapidez, aproximamos

$$C_{k,z} \approx \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}c}} \exp \left[ -\frac{(\hbar k - p')^2}{2c^2} - \frac{iq'}{\hbar} (\hbar k - p'/2) \right], \quad (4.98)$$

que é válido se  $|q'| \gg a$ , ou seja, se o pacote inicial for lançado bem longe da barreira. Também em (4.85) uma truncagem na integral em  $k$  deve ser feita. Escolhe-se, assim, um valor máximo  $k_{max}$  para os limites da integral quando o integrando é suficientemente próximo de zero nesse limite.

### 4.3.3 Resultados e comparações.

Em todos os casos, tanto exatos como semiclássicos, usamos  $c = 1$  e  $b = 1$ . Na Fig.4.7 mostramos as isoprováveis em  $q'', p''$  de  $|K(z'', z', T)|^2$  dos cálculos semiclássico (a) e exato (b). O estado inicial é preparado de forma que  $q' = -5.0$ ,  $p' = 4.0$ ,  $V_0 = 5.0$  e  $a = 1.0$ , ou seja, para  $\langle E \rangle > V_0$ , que é o caso para o qual a aproximação é válida. Três valores de tempo são mostrados,  $T = 2.45$ ,  $T = 2.65$  e  $T = 2.85$ , quando o processo de espalhamento já se efetuou. A medida que  $T$  aumenta o centro

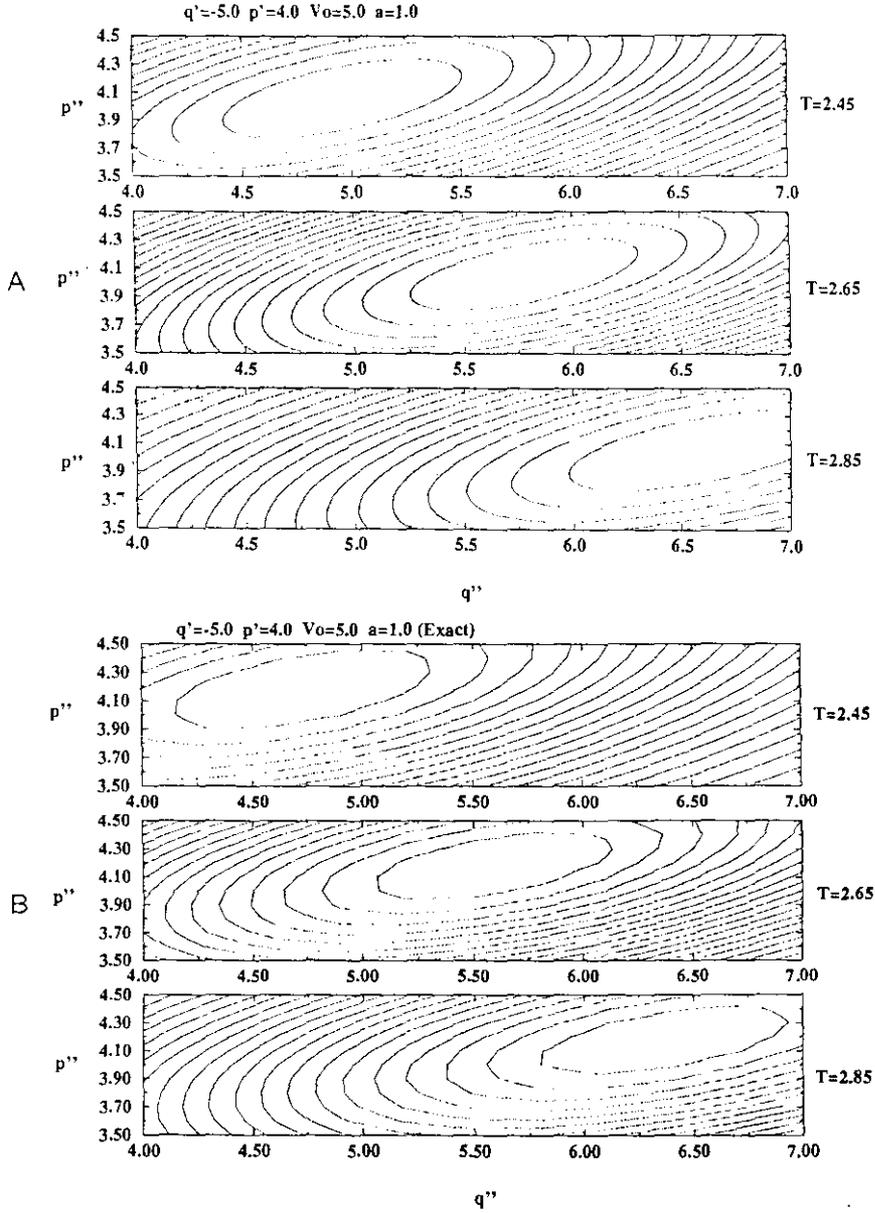


Figura 4.7: Curvas de isoprováveis de  $|K(z'', z', T)|^2$  para valores indicados na figura. (a) caso semiclássico, (b) cálculo exato.

do pacote transmitido move-se livremente para a direita. Existe uma boa concordância do cálculo semiclássico com o exato, tanto no que se refere às isoprováveis quanto aos valores absolutos do propagador (não mostrado). Destacamos que o momento final médio do pacote tunelado é ligeiramente maior que o momento inicial. Isso porque as barreiras de potencial podem ser vistas como “aceleradores” [35] de pacotes, isto é, não obstante haver um atraso com relação ao tempo de saída de mesmo pacote na ausência da barreira, o pacote tunelado move-se mais rápido. Pelas relações (4.91) e (4.96) as componentes de frequência alta passam mais facilmente, o que faz com que a distribuição de momentos finais seja deslocada em relação à distribuição inicial.

A boa concordância obtida entre os propagadores exato e semiclássico, dado a magnitude de  $\hbar$  usada (o que equivale a um círculo de raio 0.56 no espaço de fases), indica que o método, de fato, pode ser usado para a determinação de amplitudes de tunelamento, o que nos incentiva à aplicação da forma semiclássica mais exata (1.54). Os resultados tendem a melhorar se  $p'$  aumenta, que equivale ao limite sem barreira (partícula livre). A concordância também melhora se diminuirmos o valor de  $\hbar$  ou, semelhantemente, se aumentarmos o tamanho no espaço de fases da barreira. A barreira que utilizamos na Fig.4.7 está longe de ser um objeto clássico (como a “área” no espaço de fases é da ordem  $\mathcal{A} = a\sqrt{2V_0}$ , então  $\hbar/\mathcal{A} \approx 0.3$  para a Fig.4.7), o que se comprova pela análise do pacote semiclássico para energias médias inferiores a  $V_0$ . Reportamos que essa aproximação não funciona para essas energias.

## 4.4 Barreiras suaves no espaço complexo.

Estados quânticos na barreira que nos interessam são aqueles abaixo do potencial  $V_0$ . Para isso implementamos a aproximação (1.54). Como nos capítulos anteriores, é possível escrever um potencial no espaço complexo segundo o qual trajetórias complexas são calculadas de acordo com (1.23). A análise do potencial feita para com a aproximação (1.62) pode ser repetida aqui com

$$\bar{H} = \langle z | \hat{H} | z \rangle = \frac{1}{2} p^2 + \bar{V}(q) + \frac{1}{4} c^2 \quad (4.99)$$

e o potencial dado por (1.57). Diferentemente do caso “clássico” de mínimo nulo, existe um termo  $c^2/4$ , que representa a energia mínima devido a incerteza em momento associada ao pacote.

A fim de avaliar a influência da suavização (4.99) na dinâmica dos estados, analisemos inicialmente casos onde (4.99) pode ser calculado exatamente.

### 4.4.1 Análise de suavizações.

Consideremos o hamiltoniano clássico

$$H = \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{2}\lambda x^2 + \beta x^4, \quad \lambda > 0, \quad \beta > 0, \quad (4.100)$$

que representa um sistema quártico com barreira hiperbólica. Facilmente pode-se mostrar que

$$\bar{H}(q, p) = \frac{1}{2}p^2 - \left(\frac{1}{2}\lambda - 3\beta b^2\right)q^2 + \beta q^4 + \frac{1}{4}(c^2 - \lambda b^2) + \frac{3}{4}\beta b^4. \quad (4.101)$$

O hamiltoniano (4.101) representa, de fato, o hamiltoniano sentido pelo pacote coerente. Se admitirmos estados iniciais do tipo tratado na seção 4.2, podemos anular a contribuição de ordem  $\hbar$  em (4.101), isto é, fazendo

$$c^2 = \lambda b^2. \quad (4.102)$$

Um efeito interessante da suavização é o aparecimento de uma nova constante da barreira

$$\bar{\lambda} = \lambda - \frac{6\beta\hbar}{\sqrt{\lambda}}, \quad (4.103)$$

que é menor que a constante original. Em outras palavras, a força que separa os mínimos do potencial em (4.101) é menor que a força clássica. Se a distância entre os mínimos clássicos é  $d_{class}$  então

$$\bar{d} \approx d_{class} \left(1 - \frac{3\beta\hbar}{\lambda^{3/2}}\right). \quad (4.104)$$

Também por (4.101), escolhendo-se  $\beta$  e a incerteza  $b$  convenientemente, podemos eliminar a barreira central. Isso ocorre se

$$\hbar > \frac{\lambda^{3/2}}{6\beta}. \quad (4.105)$$

Outro caso relevante para a análise que fazemos aqui é o da barreira exponencial

$$V(x) = V_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) \quad (4.106)$$

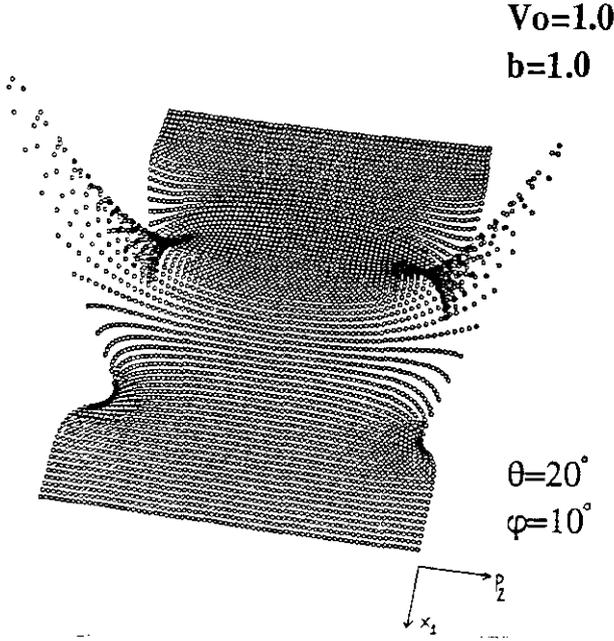


Figura 4.8: Superfície  $\bar{V}_1(x_1, p_2)$  para a barreira exponencial.  $\theta$  e  $\varphi$  são ângulos de visão em coordenadas esféricas.

Por (1.57)

$$\bar{V}(q) = \frac{V_0 \alpha}{\sqrt{\alpha^2 + b^2/2}} \exp \left[ -\frac{q^2}{2(\alpha^2 + b^2/2)} \right], \quad (4.107)$$

cujo limite clássico é obtido fazendo-se  $b \rightarrow 0$ . O efeito do pacote inicial é introduzir um alargamento da barreira pelo fator  $b^2/2$ . Existe assim um mínimo de largura possível, associado a incerteza de posição do pacote inicial, que é  $b^2/2$ .

A complexificação da forma (4.99) é direta. Simplesmente substituímos as variáveis complexas já utilizadas  $p = p_1 + ip_2$  e  $q = x_1 + ip_2$ . Na Fig.4.8 mostramos um gráfico no espaço  $x_1 - p_2$  da superfície real da complexificação de (4.107)

$$\bar{V}_1(x_1, p_2) = \bar{V}_0 \exp \left[ -\frac{(x_1^2 - p_2^2)}{2\bar{\alpha}^2} \right] \cos \left( \frac{x_1 p_2}{\bar{\alpha}^2} \right). \quad (4.108)$$

onde as constantes  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{V}_0$  são dadas em (4.107), feito para  $V_0 = 1.0$ ,  $b = 1.0$  e  $\alpha = 1.0$  ( $|x_1| < 4.0$  e  $p_2 < 2.5$ ). Nesse espaço e para esse potencial, a faixa central é substituída por uma faixa suavizada limitada por duas “paredes” do tipo  $\exp(p_2^2/2\bar{\alpha}^2)$ . As trajetórias complexas ficam confinadas entre essas duas paredes.

### 4.4.2 Barreira simples suavizada.

A suavização da barreira (4.59) não conduz a uma forma analítica fechada. De fato, para a barreira

$$\bar{V}(q) = \frac{V_0}{\sqrt{\pi}b} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-(x-q)^2/b^2} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} V_0 \left[ \int_0^{Q_f} e^{-u^2} du - \int_0^{Q_i} e^{-u^2} du \right]. \quad (4.109)$$

com

$$Q_f = \frac{1}{\sqrt{2}b} \left( \frac{a}{2} - q \right), \quad Q_i = -\frac{1}{\sqrt{2}b} \left( \frac{a}{2} + q \right). \quad (4.110)$$

ou seja,  $\bar{V}(q)$  fica expresso em termos da função erro [39]. Na Fig.4.9 vemos um gráfico

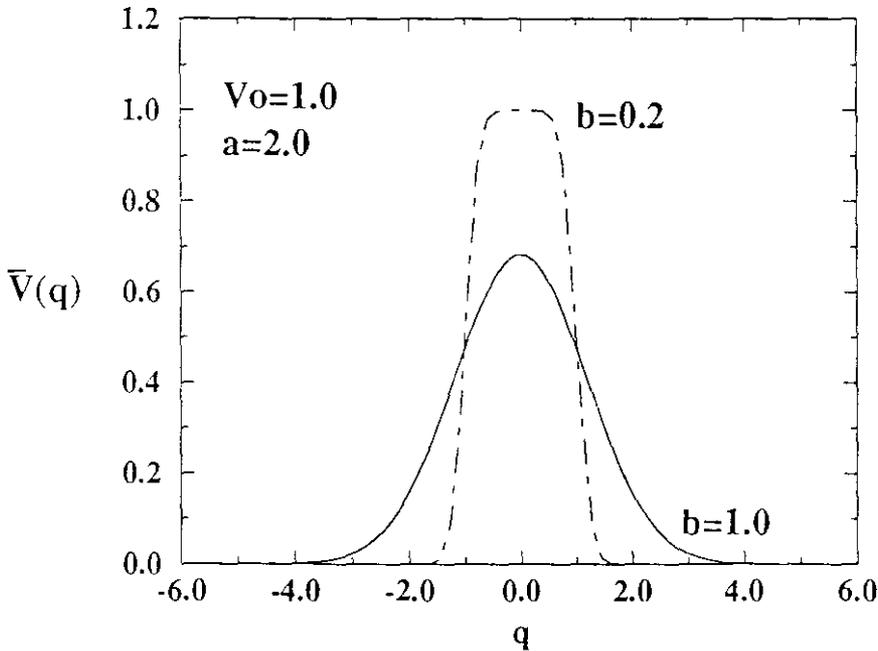


Figura 4.9: Curva  $V(q)$  para  $b = 0.2$  e  $b = 1.0$ .

de  $\bar{V}(q)$  para dois valores diferentes de  $b$ . Nesse gráfico  $V_0 = 1.0$  e  $a = 2.0$ . Para o maior valor de  $b$ , o valor máximo da barreira é diminuído para  $\bar{V}_0 \approx 0.7$ . Por conseguinte, para pacotes cuja energia média é inferior à barreira clássica, existem trajetórias reais responsáveis pela conexão entre estados de transmissão. Entretanto veremos que as trajetórias responsáveis pela máxima contribuição à amplitude de transição são trajetórias fora do plano real.

O potencial na forma complexa tem que ser avaliado numericamente também. Introduzindo as variáveis sem dimensão

$$\bar{x}_1 = \frac{x_1}{b}, \quad \bar{p}_2 = \frac{p_2}{c}, \quad \text{etc,} \quad (4.111)$$

a parte real do potencial fica

$$\bar{V}_1(x_1, p_2) = \frac{\epsilon \bar{p}_2^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-a/2b}^{a/2b} \epsilon^{-(x-\bar{x}_1)^2} \cos[2(\bar{x} - \bar{x}_1)\bar{p}_2] V(\bar{x}) d\bar{x}. \quad (4.112)$$

com

$$\lim_{b \rightarrow 0} \bar{V}_1(x_1, p_2) = V_1(x_1, p_2) \quad (4.113)$$

Implementamos a rotina CMONOG (Capítulo 2) para o cálculo das trajetórias complexas e propagador semiclassical da barreira simples. As derivadas superiores de  $\bar{H}_1$  necessárias [ver equações (2.26) e (2.25)] devem ser avaliadas numericamente também (Apêndice C). Temos ainda que determinar o termo de correção (1.60). Podemos mostrar (Apêndice D) que, para hamiltonianos analíticos, temos

$$\frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial u \partial v} = \frac{1}{2} b^2 \left( \frac{\partial^2 \bar{H}_1}{\partial x_1^2} - i \frac{\partial^2 \bar{H}_1}{\partial x_1 \partial p_2} \right) + \frac{1}{2} c^2 \quad (4.114)$$

Na determinação da evolução temporal  $|K(z'', z', T)|^2$ , somente o termo  $\partial^2 \bar{H}_1 / \partial x_1 \partial p_2$  é relevante.

Mais uma vez escolhemos fixar  $b = 1$  e  $c = 1$  e variar a dimensão da barreira ao invés do valor de  $\hbar$ . Apresentaremos resultados para uma barreira com  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ , para um estado coerente inicialmente centrado em  $q' = -7.0$  e  $p' = 4.0$ , movendo-se portanto para a direita. A energia média do pacote é assim menor que o potencial.

Na aplicação da rotina CMONOG, utilizamos trajetórias tentativa do tipo partícula livre (movimento sem barreira) e trajetórias reais. Para cada ponto do espaço de fases uma trajetória tentativa deve ser dada. Na Fig.4.10 mostramos um gráfico no plano  $x_1 - p_2$  de trajetórias tunelantes e linhas equipotenciais de (4.112). Da mesma forma como mostrado na Fig.4.8, as trajetórias habitam numa região intermediária, delimitada por duas paredes dadas por  $\exp[p_2^2/b^2]$ . Para o potencial suavizado, aproximando-se do limite clássico  $b \rightarrow 0$ , as duas paredes se aproximam da linha real e as trajetórias se confinam na região intermediária. No limite o plano complexo deixa de existir, só permanecendo o plano real dado por  $p_2 = 0$ , e as trajetórias são totalmente reais.

Nessa figura mostramos 4 trajetórias para diferentes valores de  $p''$  e  $T$ . Todas elas tem  $p' = 4.0$ ,  $q' = -7.0$ ,  $q'' = 7.0$  e representam movimento para a direita. As trajetórias dadas por pontos têm  $T = 3.7$  e foram feitas para dois valores de momento final,  $p'' = 4.0$  e  $p'' = 5.0$ , conforme indicado. Do grupo com  $p'' = 5.0$ , a trajetória descrita por linha cheia tem  $T = 4.0$ , enquanto que a dada por linhas tracejadas tem  $T = 3.2$ . Como veremos a trajetória dada por pontos com  $p'' = 5.0$  e  $T = 3.7$  é responsável pelo máximo na amplitude de  $|K(z'', z', T)|^2$  para o tempo  $T = 3.7$ , estando completamente fora da linha real.

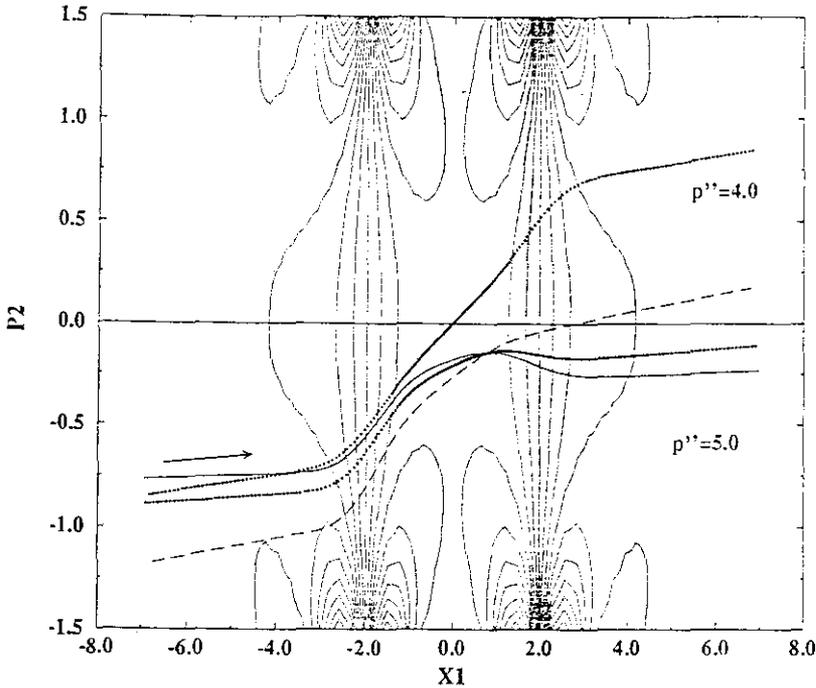


Figura 4.10: Linhas equipotencias e trajetórias complexas para um estado inicial com  $p' = 4.0$ ,  $q' = -7.0$  e barreira  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$  (ver texto).

A trajetória para esse tempo com  $p'' = 4.0$  representaria a trajetória que conservaria energia  $p'' = p'$ . De acordo com a posição dos pontos na figura, vemos que há uma desaceleração do movimento no interior do potencial. Na Fig. 4.11 mostramos trajetórias equivalentes no plano  $x_1 - p_1$ , juntamente com os limites clássicos do potencial, para  $T = 3.7$ ,  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ . Nessa figura existem três trajetórias: uma trajetória real com  $p' = p'' = 4.91$ , e as trajetórias mostradas na Fig.4.10 com  $p' = p'' = 4.0$  e

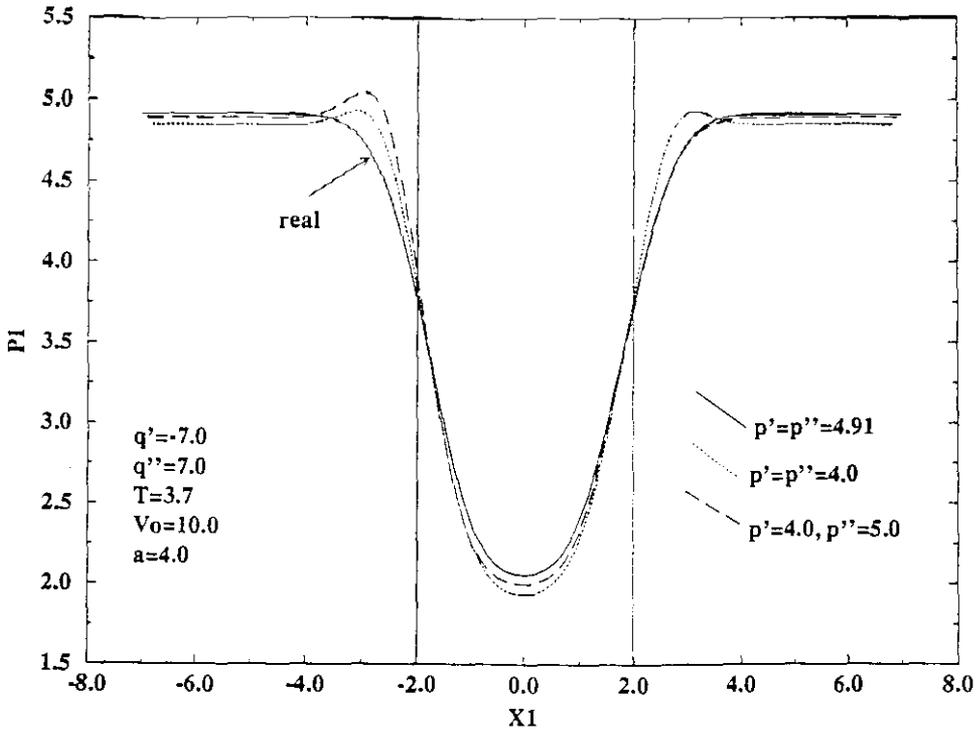


Figura 4.11: Trajetórias no espaço  $x_1 - p_1$  para  $T = 3.7$ ,  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ . Para trajetórias reais esse é o próprio espaço de fases (ver texto).

$p' = 4.0$  e  $p'' = 5.0$  (traj. de maior contribuição). Esse espaço é o próprio espaço de fases para as trajetórias reais.

Na Fig. 4.12 podemos comparar as linhas de equiprováveis para o cálculo semiclássico (a) e exato (b). Essas figuras mostram os pacotes evoluídos para os tempos  $T = 3.6$  e  $T = 3.7$ . O acordo do cálculo semiclássico é excelente: a medida que  $T$  passa, a distribuição semiclássica move-se para a direita, reproduzindo o resultado exato. Como dissemos acima, para  $T = 3.6$ , o máximo de  $|K(z'', z', T)|^2$  é dado aproximadamente por  $q'' \approx 6.0$  e  $p'' \approx 5.0$ , que corresponde, para  $T = 3.7$ , à trajetória pontilhada que mostramos na Fig.4.10. Como consequência, a aproximação semiclássica para  $E < V_0$  deve necessariamente ser feita segundo trajetórias complexas. Uma aproximação baseada em trajetórias reais seria assim insuficiente. Podemos dizer aqui que, a medida que a energia do pacote inicial aumenta, a trajetória de maior contribuição tende suavemente à trajetória real existente acima da barreira.

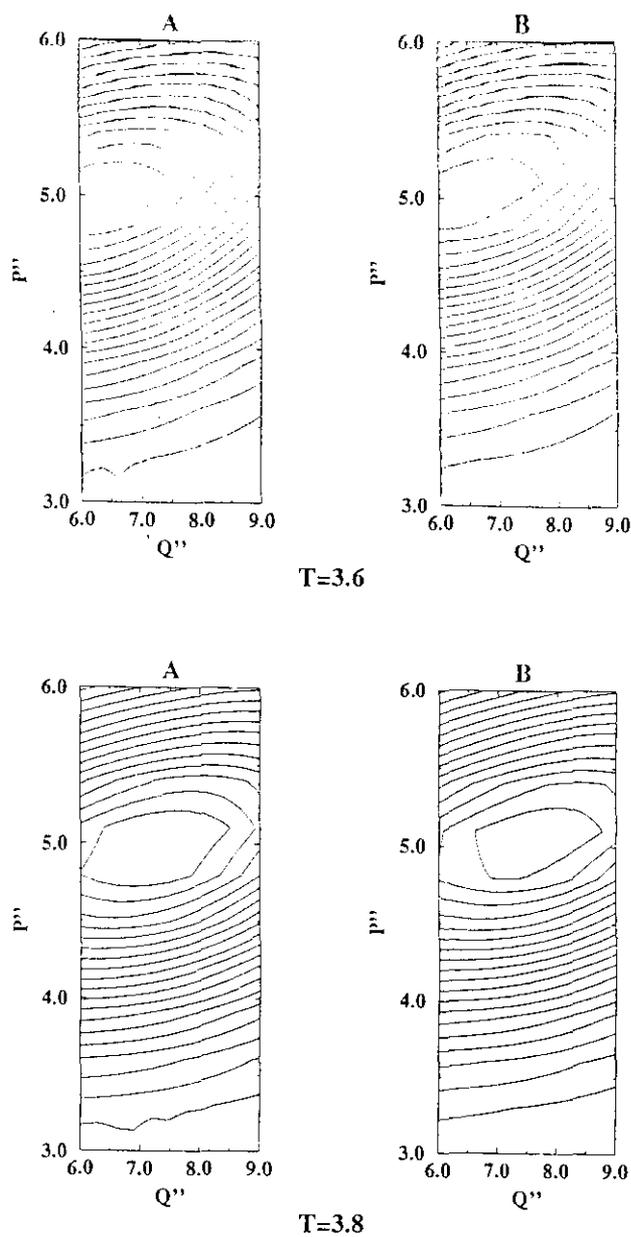


Figura 4.12: Curvas de isoprováveis para  $|K(z'', z', T)|^2$  para a barreira com  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$  (momento médio abaixo da barreira). (a) cálculo semiclássico e (b) cálculo exato.

### 4.4.3. Novo tempo de travessia

Uma vez que o cálculo semiclassical aproxima bem o resultado exato, podemos proceder à determinação da proposta de tempo de travessia feita em 4.1.1. Como vemos na Fig.4.10, é possível a definição de uma região de potencial no espaço  $x_1 - p_2$ , onde a partícula sofre a influência da barreira. Definida uma fronteira, podemos facilmente determinar o tempo (4.8) para cada trajetória, que é assim função não só dos parâmetros do propagador mas da barreira. Para cada trajetória, basta que calculemos os tempos de entrada  $t_1$  e saída  $t_2$ . Dada a limitação das equipotenciais mostradas na Fig. 4.10 para aproximadamente  $-2 < x_1 < 2$ , consideramos esta por simplicidade a região  $\Sigma$  em (4.1). Na Fig. 4.10, a trajetória pontilhada com  $p'' = 4.0$  e  $T = 3.7$  tem  $\Delta = 1.6733$ , enquanto que a trajetória pontilhada com  $p'' = 5.0$  tem  $\Delta = 1.6547$ . O tempo  $\Delta$  representa assim o tempo de travessia semiclassical determinado via trajetórias complexas para que um estado, preparado em  $z'$  com incerteza em momento e posição dados por  $c$  e  $b$ , respectivamente, e colhido em  $z''$  no tempo  $T$  segundo as mesmas incertezas, atrevesse uma barreira simples de altura  $V_0$  e espessura  $a$ .

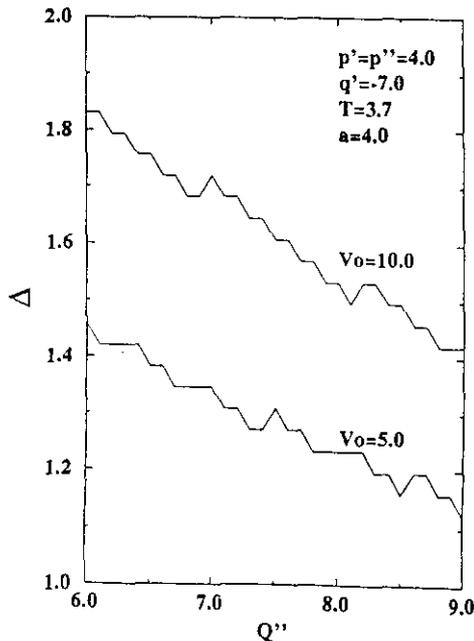


Figura 4.13: Tempo de travessia  $\Delta(z'', z', T)$  como função de  $q''$  para duas barreiras diferentes. Aqui  $p' = p'' = 4.0$ ,  $q' = -7.0$ ,  $T = 3.7$  e  $a = 4.0$ .

Na Fig. 4.13 mostramos o comportamento de  $\Delta$  como função de  $q''$  para um tempo total fixo  $T = 3.7$  e para duas barreiras de potencial com  $V_0 = 5.0$  e  $V_0 = 10.0$ . O tempo de travessia é maior para barreiras mais intensas, como era de se esperar (a partícula sofre maior desaceleração para barreiras maiores). Como o tempo total  $T$  está fixo, o tempo de travessia deve diminuir com  $q''$ , já que a partícula, tendo fixos os momentos inicial e final, deve gastar menos tempo dentro da barreira para alcançar um ponto final  $q''$  maior.

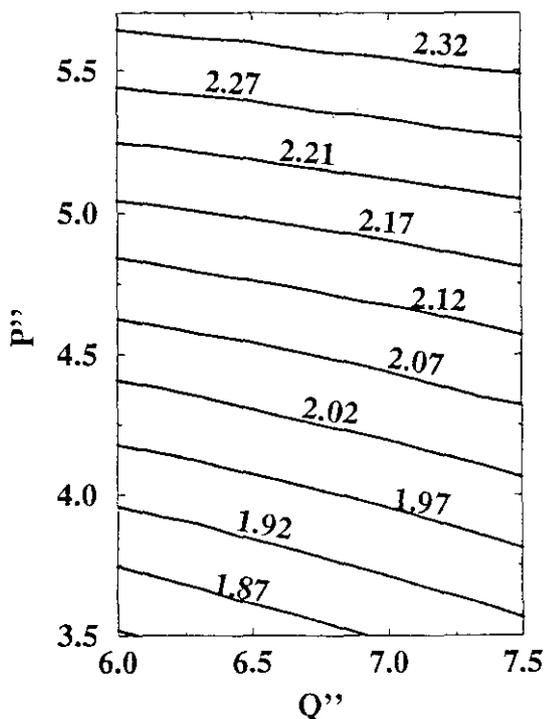


Figura 4.14: Isócronas de  $\langle \Delta \rangle$  para o pacote  $q'' = -7.0$  e  $p' = 4.0$  na barreira com  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ .

A fim de tornarmos o valor dessa nova quantidade independente do tempo total de cada trajetória, introduzimos valores médios. Fixado  $z'$  e considerando cada ponto  $z''$  na região onde se encontra a parte que atravessou, a função  $|K(z'', z', T)|^2$  apresenta um máximo para um certo  $T$  como é evidente da Fig.4.12. A quantidade

$$\langle T \rangle = N^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} T |K(z'', z', T)|^2 dT. \quad (4.115)$$

onde  $\mathcal{N}$  é a normalização

$$\mathcal{N} = \int_0^\infty |K(z'', z', T)|^2 dT, \quad (4.116)$$

representa o tempo médio para o qual encontraremos a partícula. Esse tempo representa de fato o tempo médio de propagação total do pacote. Propomos a generalização

$$\langle \Delta \rangle = \mathcal{N}^{-1} \int_{-\infty}^\infty \Delta(z'', z', T) |K(z'', z', T)|^2 dT, \quad (4.117)$$

que consequentemente representa o tempo médio de existência do pacote dentro da barreira, desde que o pacote foi encontrado em  $z''$  a partir de  $z'$ . Deixamos claro aqui que *não existe análogo quântico “crato” para tais tempos*. Como dissemos, uma vez que o formalismo semiclássico desenvolvido aqui permite a ligação de estados por meio de trajetórias clássicas, é possível a definição de tais tempos. Só por meio desse formalismo pudemos dividir o estado inicial em uma parte que atravessa e outra que é refletida<sup>4</sup>. O tempo  $\langle \Delta \rangle$  é função do estado inicial, final e da barreira somente. As trajetórias complexas funcionam assim como um esqueleto que, embora oculto no formalismo, estão na base do cálculo de amplitudes, fornecendo outros elementos clássicos de comparação.

Na Fig. 4.14 mostramos um gráfico das “isócronas”  $\langle \Delta \rangle$  (4.117) no espaço dos pontos finais  $p''$  e  $q''$ . São as curvas para as quais o sistema, preparado em  $q' = -7.0$  e  $p' = 4.0$ , tem o mesmo tempo médio de travessia em  $p''$  e  $q''$  finais. Para o cálculo de (4.117) tivemos que escolher tempos limites finais para a integral,  $\tau_{min} = 2.0$  e  $\tau_{max} = 5.5$ , tais que o valor do propagador para esses tempos está suficientemente próximo de zero. Essas curvas são mostradas para a barreira com  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ . Vemos que o tempo médio de travessia *umenta com  $p''$*  por duas razões: uma pelo fato de  $T$  não estar fixo e outra pelo fato de, sendo o momento final maior, a partícula “gasta” menos tempo fora da barreira (note que  $p'$  está fixo também, o tempo que ela leva para atingir a barreira é mais ou menos o mesmo), como consequência, o tempo de travessia é maior. Por outro lado, o tempo médio de travessia, para  $p''$  fixo, *umenta com  $q''$*  (que contrasta com o mostrado na Fig. 4.13). A razão aqui é o fato de  $T$  não estar fixo, isto é,  $T$  aumenta com  $q''$  (note também que, fixado  $z''$ ,  $\Delta$  aumenta com  $T$ ).

<sup>4</sup>Que é uma das questões até então só resolvida por formalismos paralelos em mecânica quântica [33].

Podemos fazer um cálculo grosseiro do valor  $\Delta$  para o centro do pacote. Para  $T = 3.7$  o centro no espaço de fases tem  $\langle p'' \rangle = 5.0$  e  $\langle q'' \rangle = 7.0$ . Se admitirmos que temos uma partícula clássica que se move livremente desde  $q = -7.0$  até  $q = -2.0$  com  $p' = 4.0$ , e de  $q = 2.0$  até  $q = 7.0$  com  $p'' = 5.0$ , isso nos dá um tempo total  $t = 2.25$ . A diferença para  $T = 3.7$  é  $\langle \Delta \rangle \approx 1.45$ , que aproxima bem o valor  $\Delta = 1.67$  encontrado para a trajetória principal na Fig.4.10. Na Fig. 4.15 temos um gráfico de  $\Delta$  como função de  $q'' = q''_i + p''\tau$  no tempo  $T = T_i + \tau$ ,  $\tau = 2/p''$ , com  $q''_i = 6.0$  e barreira com  $V_0 = 10.0$  e  $a = 4.0$ . Dois valores de momento são mostrados  $p' = p'' = 4.0$  e  $p' = p'' = 6.0$ . O tempo  $T_i$  é escolhido de forma ao valor de  $q''$  coincidir com o máximo do pacote. Para essa figura  $T_i = 2.5$  ( $p' = 6.0$ ) e  $T_i = 6.0$  ( $p' = 4.0$ ). Vemos assim que o valor de  $\Delta$  é mais ou menos constante se nos fixarmos no movimento do centro do pacote. É de fato constante para  $V_0 \rightarrow 0$ , sendo o próprio tempo de existência clássico dentro da região do potencial, já que, nesse limite, o centro do pacote move-se segundo a trajetória real (para os valores dessa figura,  $\Delta \rightarrow 1$  se  $V_0 \rightarrow 0$  para  $p' = 4.0$ ).

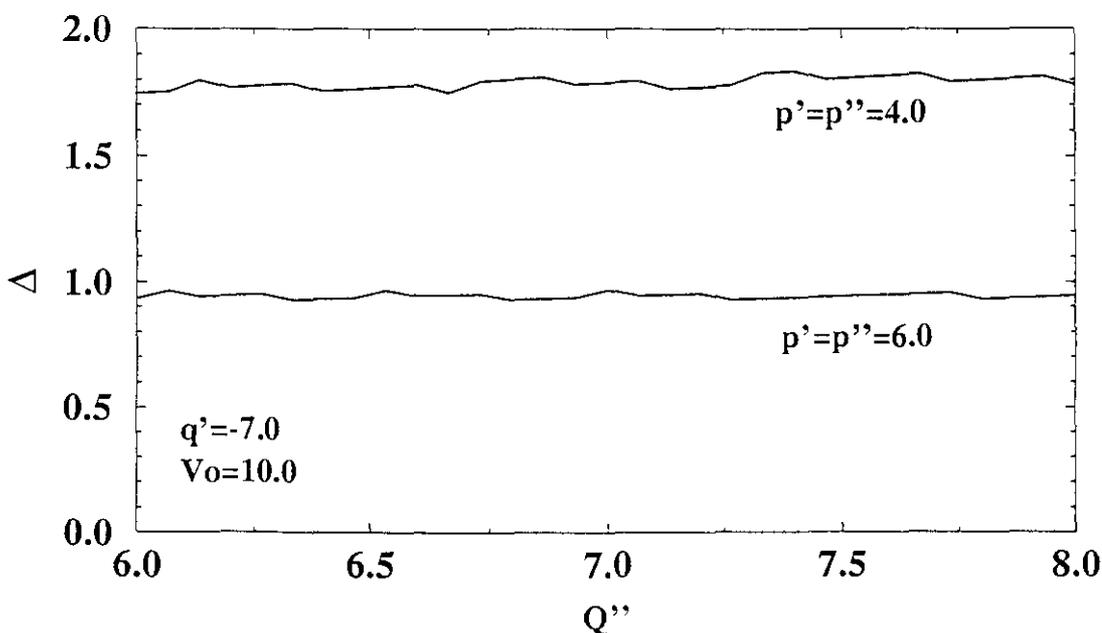


Figura 4.15:  $\Delta$  como função de  $q'' = q''_i + p''\tau$  para  $p' = p'' = 4.0$  e  $p' = p'' = 6.0$  (ver texto).

Fica assim evidente que barreiras de potencial, pelo menos no que diz respeito à

influência sobre pacotes descritos no espaço de fases, provocam um atraso mensurável no movimento do pacote, além de alterar sua energia média.

#### 4.4.4. Nota sobre reflexão.

Não tratamos explicitamente da parte refletida do pacote espalhado por uma questão de tempo. Está claro, porém, que o tratamento da reflexão do pacote é um fenômeno de grande interesse, já que, para energias acima de  $V_0$ , segundo a mecânica clássica, não há reflexão. Sistemas quânticos apresentam, entretanto, uma reflexão residual, cuja amplitude vai a zero só no limite clássico.

A simulação semiclássica de  $K(z'', z', T)$  para a parte refletida [via (1.54)] é plenamente possível. De algumas tentativas que fizemos anteriormente usando (1.62), concluímos que trajetórias de reflexão (derivadas a partir de continuações analíticas de trajetórias reais), bem como trajetórias diretas entram na amplitude total do propagador para energias abaixo de  $V_0$ . Assim sendo, mesmo se o pacote tem energia média maior que  $V_0$ , haverá sempre trajetórias de reflexão, com tempo de existência no interior da barreira  $\Delta = t_2 - t_1$ , interferindo com trajetórias diretas de reflexão. Para  $p' \gg \sqrt{2V_0}$ , a contribuição dessas trajetórias para o propagador é, entretanto, muito pequena. O resíduo de reflexão pode assim ser explicado pela ação das trajetórias diretas. Nesse sentido, a precisão semiclássica do método exposto aqui poderia ser avaliada pela determinação da amplitude do propagador  $|K(z'', z', T)|^2$  de uma barreira infinita, onde seria necessário determinar precisamente a interferência entre dois tipos de trajetórias contribuintes na região de baixas energias. Note, entretanto, que essa é uma *interferência no espaço de fases*. No cálculo da função de Green para uma barreira no espaço ordinário  $G(x'', x', E)$  via transformação de  $K(x'', x', T)$ , duas trajetórias também contribuem para a amplitude final, uma de  $x' \rightarrow x''$  diretamente (trajetória direta) e uma de  $x' \rightarrow x''$  com reflexão na barreira. Da mesma forma, no cálculo de  $K(z'', z', T)$  para a barreira, haveria uma contribuição dessas duas trajetórias no espaço de fases.

## Conclusões e perspectivas.

“ ‘Oh, I’ve had such a curious dream!’ said Alice, and she told her sister, as well as she could remember them, all these strange Adventures of hers that you have just been reading about; and when she had finished, her sister kissed her, and said, ‘It was a curious dream, dear, certainly: but now run in to your tea; it’s getting late.’ So Alice got up and ran off, thinking while she ran, as well as she might, what a wonderful dream it had been.”

Lewis Carroll<sup>5</sup>

Neste trabalho mostramos que é possível a descrição de sistemas quânticos em termos de elementos clássicos do espaço de fases, ainda que definidos como uma extensão da dinâmica clássica ordinária, a fim de satisfazer aos vínculos exigidos pelas funções de distribuição quântica. Talvez não seria demais lembrar que, em mecânica quântica, há uma liberdade intrínseca de escolha da representação a ser usada para descrição. Não há uma representação absoluta, todas gozam do privilégio de descreverem completamente um dado estado  $|\Psi\rangle$ . Se por um lado existe uma vantagem evidente nessa liberdade, já que podemos escolher aquela mais cômoda, por outro lado há também a desvantagem de perda da compreensão física e bom senso analítico. Pois se o mundo é caracterizado por uma realidade objetiva e independente de nós, é natural que, nessa liberdade extrema de descrição, certos aspectos dessa realidade sejam perdidos. Não há, também, como mostrar que a visão que mais satisfaça à visão instintiva e ao bom senso físico corresponda exatamente àquela que mais se aproxime dessa realidade.

Aqui mostramos que a representação de estados-coerentes gerada na base do oscilador harmônico não só descreve precisamente<sup>6</sup> sistemas quânticos simples, como

---

<sup>5</sup>Em *Alice’s Adventures in Wonderland*, Capítulo 12.

<sup>6</sup>Por precisamente queremos dizer até o ponto onde o conhecimento sobre sistema é, de fato,

fornece uma descrição semiclássica dos mesmos. A base de tal descrição é a aproximação semiclássica assintótica do propagador  $\langle z'' | \exp(-i\hat{H}T/\hbar) | z' \rangle$  no limite  $\hbar \rightarrow 0$ , que fornece a amplitude de transição do movimento não perturbado segundo  $\hat{H}$ . Tal análise nos conduziu a uma mecânica clássica nova, com um espaço de fases de estrutura semelhante ao usual, sendo uma extensão analítica deste. Os elementos clássicos desse espaço só tem sentido se conectados aos vínculos do propagador, e fornecem equivalentes clássicos à transição de estado entre  $z'$  e  $z''$  operada por  $\hat{H}$  durante o tempo  $T$ . É necessário dizer ainda que as propriedades dessas soluções clássicas, seus comportamentos gerais etc ainda necessitam de maior exploração do ponto de vista formal. Aqui apenas derivamos algumas soluções analíticas e numéricas para sistemas unidimensionais simples. É importante ressaltar a possibilidade de cálculo numérico das trajetórias complexas (Capítulo 2), uma vez que soluções analíticas são exíguas e limitadas a hamiltonianos sem interesse geral. É interessante também destacar que o método de matriz monodromia de Baranger *et al.* [22] parece ser o único método a fornecer soluções numéricas gerais (sem ser do tipo busca de pontos de vínculo [20]) já que tal método exige uma solução tentativa já satisfazendo aos vínculos do propagador. A possibilidade de aplicação da aproximação semiclássica bem como do método numérico para espaços de maior dimensão abre perspectivas promissoras de estudo de sistemas mais complexos segundo a representação de estados-coerentes<sup>7</sup>.

Uma questão interessante tratada aqui foi a da validade das aproximações (1.54), (1.62) e (1.69) que são o limite assintótico em  $\hbar \rightarrow 0$  de  $\langle z'' | \exp(-i\hat{H}T/\hbar) | z' \rangle$ , esse limite sem correções de ordem  $\hbar$  e segundo aproximações de trajetória real respectivamente. No que diz respeito a aplicações gerais, está claro que (1.54) deve ser usada obrigatoriamente. Entretanto, a aproximação (1.62) funciona bem em alguns sistemas mesmo para baixas energias. Em particular, no sistema do poço infinito (Capítulo 3), trajetórias diretas (sem colisão com as paredes) sem nenhum análogo clássico possível aproximam a amplitude para valores baixos de momento. Para tal sistema calculamos os elementos diagonais  $\langle z | \exp(-i\hat{H}T/\hbar) | z \rangle$ , cuja amplitude próximo a  $p = 0$  é dada por essas trajetórias, cuja evolução, definida no espaço complexo, representa transição

---

relevante.

<sup>7</sup>Em particular a questão do limite semiclássico de sistemas quânticos não integráveis (ver adiante)

para o mesmo estado. Se aplicássemos (1.54) para o poço infinito encontraríamos o mesmo tipo de trajetória (só não representariam movimento livre, já que a incerteza na posição do pacote inicial introduz um novo potencial como vimos posteriormente). A estrutura geral das soluções suaves de (1.54) para o poço obedeceria também ao mesmo critério de trajetórias pares e ímpares.

Entretanto a manifestação mais evidente da inapropriedade de (1.62) no tratamento de estados com baixo momento foi vista na aplicação do método no problema do espalhamento pela barreira simples de potencial  $V_0$ . Para esse sistema os estados de maior interesses são aqueles com  $p < \sqrt{2V_0}$ , que exigem uma descrição detalhada. A suavização da barreira introduzida por (1.54) mostra que, do ponto de vista da descrição clássica permitida pelas trajetórias estacionárias, a distribuição de estado altera consideravelmente o potencial clássico original. O exemplo mais dramático seja talvez o caso  $V(x) = \alpha\delta(x)$ ,  $\alpha > 0$ . Para esse potencial, a partícula é de fato atuada por  $\tilde{V}(q) = \pi^{-1/2}b^{-1}\alpha \exp(-q^2/b^2)$ , que, no limite  $b \rightarrow 0$ , é o potencial clássico. Claramente se vê que, na representação de estados coerentes, descrições semiclássicas ao redor de trajetórias clássicas reais tem grande exito, já que existe sempre uma trajetória real<sup>8</sup> para  $p > \sqrt{2\pi^{-1/2}b^{-1}\alpha}$ . Mostramos, porém, que trajetórias complexas são obrigatórias abaixo desse limite no exemplo do espalhamento pela barreira simples.

Aplicando a aproximação para um pacote espalhando-se por uma barreira simples, vimos que uma trajetória totalmente fora do plano real é responsável pela transição de maior probabilidade. Nesse sentido percebe-se que, quanto mais longe do movimento ordinário (no sentido da mecânica real), tanto mais complexa a trajetória estacionária (como no exemplo da trajetória direta no poço infinito - Capítulo 3). Em sistemas ligados, onde é sempre possível aplicar os métodos semiclássicos usuais pela existência de trajetórias reais, as trajetórias muito complexas ligam estados pouco prováveis, isto é transições de estado  $z' \rightarrow z''$  com baixa probabilidade. No sistema da barreira, onde se sabe de muito que aproximações reais falham [40], as trajetórias complexas tem papel fundamental já que, como vimos, fazem a transição entre estados mais prováveis. Esse foi, aliás, uma das principais aplicações do método semiclássico desenvolvido aqui, que justifica plenamente o esforço despendido.

---

<sup>8</sup>O parâmetro  $b$  (e, conseqüentemente,  $\hbar$ ) é crucial para estabelecer o limite de validade de tais aproximações.

A concordância dos cálculos semiclássicos com o exato para região abaixo de  $V_0$  na barreira simples possibilitou avaliar semiclassicamente o tempo de travessia do pacote pela extensão da relação clássica Eq.(4.1) do tempo de travessia de partículas clássicas. Uma nova proposta de tempo de tunelamento pode ser obtida, simplesmente calculando-se o tempo total que a trajetória estacionária gasta no interior da região de potencial no espaço complexo. Na análise do significado desse tempo é importante lembrar que tal resultado é válido dentro da representação que trabalhamos, isto é, esse é um tempo válido para a evolução de pacotes no espaço de fases descrito pelos estados-coerentes. Uma das críticas levantadas contra a medida de tempos por pacotes [35] é a de que é difícil separar as componentes do pacote que representam tunelamento (aquelas com momento abaixo de  $V_0$ ) das componentes com momento livre acima do potencial. Essa é, com certeza, uma crítica aceitável, desde que se entenda por tunelamento a transição entre um lado e outro da barreira de um auto-estado da mesma. Entretanto, auto-estados não podem ser interpretados dinamicamente. Tem-se obrigatoriamente que localizar de alguma forma o estado inicial, e acreditamos que pacotes coerentes são uma boa definição para essa localização inicial. Propomos, entretanto, tal tempo como um de travessia, onde componentes acima da barreira, bem como componentes tunelantes, participam. A partir dos cálculos que fizemos, não há como preparar um estado inicial com energia abaixo da barreira e garantir que o tunelamento se dá única e exclusivamente através das componentes de momento inferior a  $V_0$ . Por menor que seja a probabilidade de o pacote inicial ter momento acima da barreira, essa probabilidade entra de maneira decisiva e contribui para o tempo de existência. Outra questão importante é sobre um possível significado físico das trajetórias estacionárias do propagador semiclássico. Nos propagadores de Feynman usuais isso é questão simples, já que as trajetórias estacionárias contribuintes são as trajetórias usuais da mecânica. As trajetórias complexas são obtidas de maneira idêntica, um princípio variacional aplicado sobre a ação do propagador gera as equações tipo Hamilton generalizadas, mas daí a se dizer que tais trajetórias tem idêntica interpretação é um passo muito além. Conforme exposto, dentro do ponto de vista "instrumentalista", as trajetórias complexas devem ser vistas apenas como instrumentos úteis de cálculo.

Como dissemos anteriormente, a liberdade de escolha da representação caracteriza

sistemas quânticos (é sempre possível passar de uma representação a outra por meio de uma transformação característica), razão porque não dizemos que a representação usada aqui, bem como o resultado para o tempo de travessia, devam gozar de algum privilégio. Esses resultados devem ser analisados do ponto de vista dessa representação. Também acreditamos que, grande parte da variedade de tempo de tunelamento propostos se deva a uma certa confusão no uso indiscriminado de diferentes representações. Elas simplesmente resultam em tempos incompatíveis [30].

Por fim descrevemos brevemente alguns dos trabalhos possíveis interessantes utilizando o formalismo exposto aqui. Além de uma análise formal da estrutura do espaço de fases complexo, outras aplicações a sistemas físicos simples podem resultar em alguma contribuição à área da análise semiclássica. Em particular destacamos a possibilidade de generalização da relação do propagador (1.54) para sistemas de mais de um grau de liberdade [18]. De uma maneira geral, alguns trabalhos seriam:

- Análise do átomo de hidrogênio. Devido a propriedades de simetria do potencial de Coulomb, a transformação de Kustaanheimo-Stiefel (KS) é capaz de renormalizar o hamiltoniano de sistemas coulombianos de forma que estes possam ser tratados como osciladores harmônicos [41, 42]. Seguindo desenvolvimentos recentes [43], a introdução da transformação nos passos intermediários da integral

$$G(z'', z', E) = \int K(z'', z', t) e^{iEt/\hbar} dt, \quad (4.118)$$

que resulta na função de Green na representação de estados-coerentes, fornece a definição de  $G$  em termos do kernel transformado  $K(u'', u', \sigma)$ . Aqui  $|u'\rangle$  e  $|u''\rangle$  são respectivamente os estados-coerentes inicial e final para o oscilador e  $\sigma$  um novo parâmetro de tempo. Se aplicarmos o método semiclássico ao propagador (note que, neste caso, a aproximação é exata), algumas propriedades interessantes [44] no que diz respeito à evolução temporal do pacote poderiam ser estudadas. Destacamos que uma possível interpretação clássica do tempo fictício  $\sigma$ , que é um problema teórico não resolvido, poderia ser tirada via trajetórias complexas.

- Um exemplo de sistema não integrável. A aproximação semiclássica poderia ser usada para o estudo da evolução dinâmica de um sistema unidimensional exibindo

caos

$$H = \frac{1}{2}p_2^2 + \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{3}q^3 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT), \quad (4.119)$$

que é o hamiltoniano gerador do mapa de Hénon [45] (de fato, poderíamos ter usado também o rotor pulsado [20]). A evolução dinâmica em estados-coerentes poderia ser feita calculando-se o propagador semiclássico  $K(z'', z', T)$ . Discretizando o tempo segundo procedimentos usuais, obtemos o *mapa de Hénon complexo* que resolve as equações (1.24) para as variáveis  $x_1$ ,  $p_2$ ,  $p_1$  e  $x_2$ , para o passo de ordem  $(n + 1)$  como função do passo  $n$

$$\begin{aligned} x_{1(n+1)} &= x_{1(n)} \cos T + \left[ p_{1(n)} - \left( x_{1(n)}^2 - p_{2(n)}^2 \right) \right] \sin T, \\ p_{2(n+1)} &= \left( x_{2(n)} - 2x_{1(n)}p_{2(n)} \right) \sin T + p_{2(n)} \cos T, \\ x_{2(n+1)} &= \left( x_{2(n)} - 2x_{1(n)}p_{2(n)} \right) \cos T - p_{2(n)} \sin T, \\ p_{1(n+1)} &= -x_{1(n)} \sin T + \left[ p_{1(n)} - \left( x_{1(n)}^2 - p_{2(n)}^2 \right) \right] \cos T, \end{aligned}$$

desde que as relações (2.11) com  $b = 1$  e  $c = 1$  sejam obedecidas. O mapa acima mostra que existe caos no espaço complexo. O trabalho constituiria no desenvolvimento de um método de busca das trajetórias geradas pelo mapa acima que contribuem de fato para o propagador. Resolvendo esse problema descobriríamos a regra das trajetórias complexas (sejam caóticas ou não) na dinâmica semiclássica em estados coerentes. Naturalmente haveria necessidade do cálculo exato do propagador desse sistema para comparação.

- Análise da fórmula do traço próximo a ressonâncias. Sabe-se que a fórmula do traço de Gutzwiller [46] é capaz de conectar a densidade de estados de um sistema quântico  $n(E)$  com suas contra-partes clássicas, isto é, órbitas periódicas isoladas e suas múltiplas recorrências. Há uma variedade enorme de sistemas para os quais tal relação é aplicável. Existe, entretanto, sérios problemas de convergência em sistemas de dinâmica clássica semi-estável, com aparecimento de divergências na soma próximas aos pontos ressonantes. Nesse sentido, a fórmula de Gutzwiller depende crucialmente da estabilidade linear de cada órbita periódica entrando na soma. Em [47] os autores propõem um procedimento baseado em formas normais para corrigir a fórmula do traço nas proximidades das ressonâncias.

Por outro lado um trabalho recente [48] atacou o problema de uma maneira diferente. Os autores mostraram como tratar bifurcações aparecendo em Hamiltonianos alimentados periodicamente, fazendo uma extensão analítica para o espaço complexo. Isso significa que, próximo às bifurcações onde as trajetórias periódicas deixam de existir (como no caso do sistema através de uma bifurcação tangente), órbitas complexas podem ter papel relevante em regimes de  $\hbar$  diferente de zero. Os autores em [48] foram capazes de corrigir o traço do operador de Floquet, que dá origem a uma fórmula semiclássica semelhante a de Gutzwiller, pelo uso de trajetórias complexas. A partir do propagador semiclássico em estados coerentes, um projeto mais audacioso seria avaliar o papel das trajetórias complexas estacionárias se o traço for tomado sobre tais trajetórias. Talvez as trajetórias complexas como em [48] possam dar conta do problema de divergência discutido acima nas proximidades das ressonâncias, realizando, de uma maneira suave, a transição através de uma bifurcação.

Em particular, na última proposta, haveria a necessidade de um estudo detalhado da relação semiclássica para o propagador de sistemas de mais de um grau de liberdade. Realizado o estudo, esse trabalho constituiria o passo inicial de uma teoria semiclássica alternativa a outras já existentes, capaz de tratar sistemas não integráveis de interesse mais geral.

# Apêndice A

## Obtenção de $\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial u^i \partial v^j}$ para elementos gerais e $n \geq 2$ , trajetórias pares.

Precisamos obter relações para os elementos gerais  $q'' \neq q'$  e  $p'' \neq p'$ , restritos posteriormente ao caso diagonal. Partimos das equações para os momentos (3.15) das trajetórias pares ( $n \geq 2$ )

$$p'_1 = \frac{2P + \alpha Q}{4 + \alpha^2}. \tag{A.1}$$

$$x'_2 = \frac{2Q - \alpha P}{4 + \alpha^2},$$

onde introduzimos  $Q = q'' - q'$  e  $P = p'' + p'$ . Também  $\alpha = T - n\Delta$ . Substituímos essas equações nas relações que definem o ponto de última colisão (3.17) e penúltima colisão (3.18). Os tempos são encontrados da mesma forma como para os elementos diagonais. Substituímos as relações para os pontos de última e penúltima colisão em (3.10). Após uma série de manipulações, encontramos um par de relações quadráticas para os tempos na forma

$$\xi^2(P^2 + Q^2) - 2\xi(p''A_2 + q''A_1) + (P^2 + Q^2) + 2(q''A_2 - p''A_1) + (p''^2 - B''^2)(4 + \alpha^2) = 0, \tag{A.2}$$

onde introduzimos

$$A_1 = 2P + \alpha Q \quad A_2 = P\alpha - 2Q \tag{A.3}$$

e

$$B''^2 = \frac{L^2}{4} - q''^2. \quad (\text{A.4})$$

A variável  $\xi = \xi_n = T - t_n$  para a última colisão, e  $\xi = \xi_{n-1} = T - t_n - \Delta$  para a penúltima colisão. Como o conjunto de equações (A.2) têm a mesma forma para  $\xi_n$  e  $\xi_{n-1}$ , cada solução define  $\xi_n$  e  $\xi_{n-1}$ , isto é, podemos fazer  $\xi^+ = \xi_n$  e  $\xi^- = \xi_{n-1}$ , onde  $\xi^\pm$  é o par de soluções. Como pela definição das variáveis  $\xi$ ,  $\xi_n - \xi_{n-1} = \Delta$ , uma equação para  $\Delta$  é obtida

$$\frac{(T - \alpha)^2(P^2 + Q^2)^2}{4n^2} = \quad (\text{A.5})$$

$$(p''A_2 + q''A_1)^2 - (P^2 + Q^2) [(P^2 + Q^2) + 2q''A_2 - 2p''A_1 + (p''^2 - B''^2)(4 + \alpha^2)],$$

onde  $\alpha = T - n\Delta$ . Precisamos, assim, resolver uma equação quadrática para  $\alpha$  (A.5)

$$C_1\alpha^2 + C_2\alpha + C_3 = 0 \quad (\text{A.6})$$

onde

$$C_1 = (q''Q + p''P)^2 - (P^2 + Q^2)(p''^2 - B''^2) - \frac{(P^2 + Q^2)^2}{4n^2} \quad (\text{A.7})$$

$$C_2 = 4(q''Q + p''P)(Qp'' - Pq'') - 2(P^2 + Q^2)(q''P - p''Q) \quad (\text{A.8})$$

$$+ \frac{T}{2n^2}(P^2 + Q^2)^2$$

$$C_3 = 4(Qp'' - Pq'')^2 - (P^2 + Q^2)^2 + 4(P^2 + Q^2)(Qq'' + p''P) \quad (\text{A.9})$$

$$- 4(P^2 + Q^2)(p''^2 - B''^2) - \frac{T^2(P^2 + Q^2)^2}{4n^2}.$$

Não resolveremos a equação (A.6), já que tratamos somente dos elementos diagonais no Capítulo 3. Estamos procurando na verdade  $\partial\alpha/\partial q''$  e  $\partial\alpha/\partial p''$ . Para isso derivamos simplesmente (A.6) em termos de  $q''$  e  $p''$  e substituímos os elementos diagonais. Temos diretamente de (A.6) que

$$\frac{\partial\alpha}{\partial x''} = - \left( \frac{\partial C_1}{\partial x''}\alpha^2 + \alpha \frac{\partial C_2}{\partial x''} + \frac{\partial C_3}{\partial x''} \right) / \left( 2\alpha C_1 + C_2 \right), \quad (\text{A.10})$$

onde  $\partial/\partial x''$  denota a derivação em termos de  $q''$  ou  $p''$ . É necessário, dessa forma, obter as derivadas  $\partial C_1/\partial x''$ ,  $\partial C_2/\partial x''$  e  $\partial C_3/\partial x''$ , o que é feito facilmente:

$$C_1|_{q,p} = -4n^2 p^2 B^2, \quad (\text{A.11})$$

$$C_2|_{q,p} = -16n^2qp^3, \quad (\text{A.12})$$

$$C_3|_{q,p} = 4p^4(T^2 + 4n^2), \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial q''}|_{q,p} = 4p^2qn^2, \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial q''}|_{q,p} = 4p^2(qT - 2n^2p), \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial q''}|_{q,p} = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial p''}|_{q,p} = -4n^2B^2p, \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial p''}|_{q,p} = -16n^2p^2q + 4p^2(pT - 2n^2q), \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial p''}|_{q,p} = 8p^3(T^2 + 4n^2). \quad (\text{A.19})$$

A substituição em (A.10) conduz diretamente às equações (3.47).

# Apêndice B

## Derivadas $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ para trajetórias tipo I $\rightarrow$ II $\rightarrow$ I.

A partir das equações (4.78) temos

$$\frac{\partial f_1}{\partial p'_1} = x'_2 \Delta^2 - 2a, \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial x'_2} = p'_1 \Delta^2 - (T - \Delta)a, \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial \Delta} = 2\Delta p'_1 x'_2 - x'_2 a, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial p'_1} = 2p'_1 \Delta^2 + 4[2p'_1 - p'' - p' - x'_2(T - \Delta)], \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial x'_2} = -2x'_2 \Delta^2 - (T - \Delta)[2p'_1 - p'' - p' - x'_2(T - \Delta)], \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial \Delta} = 2\Delta(p_1'^2 - x_2'^2 - 2V_0) + 2x'_2[2p'_1 - p' - p'' - x'_2(T - \Delta)], \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial p'_1} = \Delta - T, \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial x'_2} = -2, \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial \Delta} = p'_1. \quad (\text{B.9})$$

Também

$$\frac{\partial f_1}{\partial q''} = 0, \quad \frac{\partial f_2}{\partial q''} = 0, \quad \frac{\partial f_3}{\partial q''} = 1, \quad (\text{B.10})$$

e

$$\frac{\partial f_1}{\partial p''} = a, \quad \frac{\partial f_2}{\partial p''} = -2[p'_1 - p' - p'' - x'_2(T - \Delta)], \quad \frac{\partial f_3}{\partial p''} = 0. \quad (\text{B.11})$$

# Apêndice C

## Determinação de $\nabla \bar{V}_1(x_1, p_2)$ e $\nabla^2 \bar{V}_1(x_1, p_2)$ para uma barreira de potencial

Dado o potencial suavizado na forma

$$\bar{V}_1(x_1, p_2) = \frac{\epsilon p_2^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_1)^2} \cos[2(x-x_1)p_2] V(x) dx, \quad (\text{C.1})$$

forneçemos aqui suas derivadas. Derivando-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{V}_1}{\partial x_1} &= \frac{2\epsilon p_2^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_1)^2} \{(x-x_1) \cos[(x-x_1)p_2] + \\ &+ p_2 \sin[2(x-x_1)p_2]\} V(x) dx, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{V}_1}{\partial p_2} &= \frac{2\epsilon p_2^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_1)^2} \{p_2 \cos[2(x-x_1)p_2] + \\ &- (x-x_1) \sin[2(x-x_1)p_2]\} V(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Dai

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{V}_1}{\partial x_1^2} &= \frac{2\epsilon p_2^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_1)^2} \{2[(x-x_1)^2 - p_2^2 - 1/2] \cos[2(x-x_1)p_2] \\ &+ 4p_2(x-x_1) \sin[2(x-x_1)p_2]\} V(x) dx, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

e

$$\frac{\partial^2 \bar{V}_1}{\partial p_2^2} = -\frac{\partial^2 \bar{V}_1}{\partial x_1^2}. \quad (\text{C.5})$$

Finalmente

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{V}_1}{\partial x_1 \partial p_2} &= \frac{2e^{p_2^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-x_1)^2} \{2[p_2^2 - (x-x_1)^2 + 1/2] \sin[2(x-x_1)p_2] \\ &+ 4p_2(x-x_1) \cos[2(x-x_1)p_2]\} V(x) dx \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

# Apêndice D

## Obtenção de $\partial^2 H / \partial u \partial v$

Apartir das relações

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{x_1}{b} - \frac{x_2}{c} \right) + i \left( \frac{p_2}{b} + \frac{p_1}{c} \right) \right], \quad (\text{D.1})$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{x_1}{b} + \frac{x_2}{c} \right) + i \left( \frac{p_2}{b} - \frac{p_1}{c} \right) \right], \quad (\text{D.2})$$

com as quais obtemos (2.4) e (2.5), encontramos

$$\frac{\partial^2}{\partial u \partial v} = \left\{ \left[ b^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial p_2^2} \right) + c^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial p_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) \right] - 2i \left( b^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial p_2} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial p_1} \right) \right\}, \quad (\text{D.3})$$

que pode ser escrita simplesmente como

$$\frac{\partial^2}{\partial u \partial v} = \frac{1}{2} \left[ \frac{b}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} - i \frac{\partial}{\partial p_2} \right) \right]^2 + \frac{1}{2} \left[ \frac{c}{2} \left( \frac{\partial}{\partial p_1} - i \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right]^2. \quad (\text{D.4})$$

Aplicando a  $H = H_1 + iH_2$ , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} &= \frac{1}{8} \left\{ \left[ b^2 \left( \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_2^2} \right) + c^2 \left( \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_1^2} - \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_2^2} \right) + \right. \right. \\ &+ 2 \left( b^2 \frac{\partial^2 H_2}{\partial x_1 \partial p_2} + c^2 \frac{\partial^2 H_2}{\partial x_2 \partial p_1} \right) \left. \right] + i \left[ b^2 \left( \frac{\partial^2 H_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 H_2}{\partial p_2^2} \right) + \right. \\ &+ \left. \left. c^2 \left( \frac{\partial^2 H_2}{\partial p_1^2} - \frac{\partial^2 H_2}{\partial x_2^2} \right) - 2 \left( b^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1 \partial p_2} + c^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_2 \partial p_1} \right) \right] \right\}, \quad (\text{D.5}) \end{aligned}$$

que, por sua vez, pode ser simplificado usando-se as relações de Cauchy para um hamiltoniano analítico

$$\frac{\partial H_1}{\partial x_1} = \frac{\partial H_2}{\partial p_2}, \quad \frac{\partial H_1}{\partial p_1} = \frac{\partial H_2}{\partial x_2}, \quad \frac{\partial H_2}{\partial x_1} = -\frac{\partial H_1}{\partial p_2}, \quad \frac{\partial H_2}{\partial p_1} = -\frac{\partial H_1}{\partial x_2}. \quad (\text{D.6})$$

Assim

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} = \frac{1}{2} \left( b^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1^2} + c^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_1^2} \right) - \frac{1}{2} i \left( b^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1 \partial p_2} + c^2 \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_1 \partial x_2} \right), \quad (\text{D.7})$$

ou seja, só permanece dependência da parte real de  $H_1$ ,

Finalmente, se nos restringirmos a hamiltonianos do tipo

$$H_1 = \frac{1}{2}(p_1^2 - x_2^2) + V_1(x_1, p_2), \quad (\text{D.8})$$

encontramos

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u \partial v} = \frac{1}{2} b^2 \left( \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1^2} - i \frac{\partial^2 H_1}{\partial x_1 \partial p_2} \right) + \frac{1}{2} c^2. \quad (\text{D.9})$$

# Bibliografia

- [1] M. J. Giannoni, A. Voros e J. Zinn-Justin, “*Caos and quantum physics*”, Les Houches, session LII (1989) North-Holland ed.
- [2] J. M. Van Vleck, *Prod. Acad. Nat. Sci. USA*, **14** (1928) 178.
- [3] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.*, **8** (1967) 1979.
- [4] E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, **40** (1932) 749.
- [5] K. Husimi, *Proc. Phys. Math. Soc. Japan*, **22** (1940) 264.
- [6] R.J. Glauber, *Phys. Rev.*, **131** (1963) 2766.
- [7] J. R. Klauder e B. Skargerstam, “*Coherent-States, application in Physics and Mathematical Physics*”, World Scientific Pub. (1985).
- [8] A. Voros, *Phys. Rev. A*, **40** (1989) 6814.
- [9] Referência [1], curso 9.
- [10] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.*, **75** (1981) 2923.
- [11] M. Herman e E. Kluk, *Chem. Phys.*, **91** (1984) 27.
- [12] F. Grossmann e A. L. Xavier Jr., *J. Chem. Phys.*, submetido.
- [13] E. Schrödinger, *Naturwissenschaften*, **14** (1926) 664.
- [14] H. M. Nussenzveig, “*Introduction to Quantum Optics*”, Gordon & Breach Science Publishers 1973.

- [15] J. R. Klauder e E. C. G. Sudarshan, “*Fundamentals of Quantum Optics*”, W. A. Benjamin, Inc. 1968.
- [16] R. P. Feynman e A. R. Hibbs, “*Quantum Mechanics and Path Integrals*”, McGrall-Hill, NY, 1965.
- [17] J. R. Klauder, in “*Path Integrals*”, Proceedings of the NATO Advanced Summer Institute, ed. G. J. Papadopoulos and J. T. Devreese, Plenum NY (1978) 5; J. R. Klauder, *Phys. Rev. D*, **19** (1979)
- [18] M. Baranger e M. A. M. de Aguiar, não publicado.
- [19] N. Bleinstein, R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansion of Integrals*, Dover Publ., Inc., NY (1986).
- [20] S. Adachi, *Ann. of Phys.*, **195** (1989) 45.
- [21] Referência [1], curso de M. Berry e referências nele.
- [22] M. Baranger, K. T. Davies e J. H. Mahoney, *Ann. Phys.*, **186** (1988) 95.
- [23] V. Bargmann, *Comm. Pure Appl. Math.*, **14** (1961) 187.
- [24] J. R. Klauder, *J. Math. Phys.*, **8** (1967) 2392.
- [25] M. A. M. de Aguiar e A. L. Xavier Jr., *Phys. Lett.*, **164** (1992) 279.
- [26] A. L. Xavier Jr. e M. A. M. de Aguiar, *Ann. of Phys.*, **252** (1997) 458,
- [27] G. F. Carrier, M. Krook e C. F. Pearson, *Functions of a Complex Variable*, McGrall-Hill book Co. (1966)
- [28] A. L. Xavier Jr., M. A. M. de Aguiar, *Phys. Rev. A*, **54** (1996) 1808.
- [29] D. W. McLaughlin, *J. Math Phys.*, **13** (1972) 1099.
- [30] Revisões extensas sobre as questões de tempo de tunelamento são encontradas em: E. H. Hauge e J. A. Stovngeng, *Rev. Mod. Phys.*, **61** (1989) 917; R. Landauer e Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.*, **66** (1994) 217.

- [31] S. Collins, D. Lowe e J. R. Baker, *J. Phys. C*, **20** (1987) 6213.
- [32] A. Einstein, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.*, **19** (1917) 82.
- [33] C. R. Leavens, *Found. Phys.*, **25** (1995) 229.
- [34] D. Bohm, *Phys. Rev.*, **85** (1952) 180.
- [35] R. Landauer e Th. Martin, *Solid State Comm.*, **84** (1992) 115.
- [36] D. Sokolovski e L. M. Baskin, *Phys. Rev. A*, **36** (1987) 4604.
- [37] S. S. Chibeni, *Concepções de Ciência* (não publicado).
- [38] M. A. M. de Aguiar, *Phys. Rev. A*, **48** (1993) 2567.
- [39] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press NY, London (1965).
- [40] F. Großmann, E. J. Heller, *Chem. Phys. Lett.*, **241**, 45 (1995).
- [41] P. Kustaanheimo e E. Stiefel, *J. Reine Angew. Math.*, **218**, (1965) 204.
- [42] E. Stiefel e G. Scheifele, *Linear and Regular Celestial Mechanics*, Springer Verlag (1971).
- [43] A. Inomata, *Phys. Lett. A*, **87**, (1982) 387.
- [44] J. Parker e G. R. Stroud Jr., *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986) 716.
- [45] M. Hénon, *Quart. Appl. Math.*, **27** (1969) 291.
- [46] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.*, **8** (1967) 1979; **10** (1969) 1004; **12** (1971) 343.
- [47] A. M. Ozório de Almeida e J. H. Hannay, *J. Phys. A*, **20** (1987) 5873.
- [48] M. Kuś, F. Haake e D. Delande, *Phys. Rev. Lett.* (1993) 221.