

O Limite Clássico do Átomo
de Hidrogênio de acordo
com Transformação KS

por Ademir Luiz Xavier Júnior

Orientador: Prof. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar

Tese submetida ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade
Estadual de Campinas, como parte dos requisitos à obtenção do grau de
Mestre em Ciências

Agosto de 1993

Este exemplar corresponde à redação final da
Tese de Mestrado defendida pelo aluno Ademir
Luiz Xavier Júnior e aprovada pela Comissão
Julgadora. 5/ Abril / 1995



Agradecimentos

Tenho profundo reconhecimento pelos meus pais que tão diligentemente souberam conduzir-me a um ideal superior. A eles, Ademir e Magali, manifesto meus maiores agradecimentos, na impossibilidade que sinto de retribuir, plenamente, tudo que tenho recebido.

A amizade pura é, talvez, uma das formas mais superiores de sentimento humano. Guardo, nessa amizade, admiração e reconhecimento ao prof. Marcus de Aguiar pelo zelo e paciência com que tem ele marcado seu trabalho de orientação sendo, indubitavelmente, um modelo a ser seguido.

Agradeço igualmente à Universidade de Campinas e ao seu Instituto de Física, casas que fraternalmente souberam-me receber, pela possibilidade de realização deste trabalho. Na figura do Instituto de Física reconheço a enorme colaboração que recebi de colegas e amigos. A todos o meu muito obrigado.

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo, órgão de evidente eficiência nesta época tão difícil, manifesto igualmente meu reconhecimento pelo financiamento, com os votos de melhores dias.

Ação, transformação, eterna diversão da mente eterna.

Goethe

Resumo

Neste trabalho, o limite semiclássico e clássico de uma partícula sujeita ao potencial $1/r$ é tratado. Fazemos um estudo do fenômeno de Revivals quânticos usando funções especiais localizadas no regime de grandes números quânticos (princípio de correspondência). Estes estados representam uma partícula evoluindo sobre uma órbita circular.

O comportamento clássico, representado por órbitas de excentricidade arbitrária, é obtido pela aplicação da transformação regularizadora de Kustaanheimo-Stiefel. Tal transformação possibilita a definição de pacotes de onda formalmente idênticos aos estados coerentes de um oscilador harmônico. Algumas questões relacionadas com a redefinição do parâmetro temporal pela introdução de um tempo fictício são discutidas. Uma expressão formal de conexão entre as funções de onda paramétricas geradas pela transformação e as funções reais é obtida via integração de trajetória.

Por fim, retomamos o estudo dos estados coerentes e o comportamento clássico é derivado na forma da equação do movimento (equação de Kepler), onde fica possível associar o tempo fictício com a anomalia excêntrica do movimento. A introdução da dependência com a energia da frequência própria das funções componentes do estado coerente possibilita, no limite de níveis contínuos, a prova da decoerência desses estados que possuem uma estrutura apenas formalmente similar aos verdadeiros estados coerentes.

Abstract

In this work, the semiclassical and classical limit of a particle subjected to the $1/r$ potential is treated. We study the quantum revival phenomenon using special localized functions in the large quantum number regime (correspondence principle). These states correspond to an electron evolving on a circular orbit in a highly excited Hydrogen atom.

The classical behavior represented by orbits with arbitrary eccentricity is obtained by applying the regularized Kustaanheimo-Stiefel transformation in its quantum version. This transformation makes possible the definition of wave packets formally identical to the harmonic oscillator coherent states. Some questions related to the definition of a new temporal parameter, the so called fictitious time, are discussed. A formal connection formula, between the parametric wave functions generated by the transformation and the real wave functions, is proposed.

Finally, we go back to the coherent hydrogen states in two dimensions and the classical behavior is derived in the form of the Kepler equation. It is then possible to associate the fictitious time parameter with the eccentric anomaly for the motion. The introduction of the energy dependent frequency in the quantum evolution gives, in the limit of continuum levels, the proof of an irreversible decoherence of these pseudo-coherent states which have a structure only formally similar to the truly coherent states.

Índice

Introdução	8
1 Estados localizados e Revivals do Hidrogênio	10
1.1 Estados localizados de Brown	10
2 Transformação regularizadora clássica	15
2.1 Exemplo unidimensional	15
2.2 Relações para três dimensões	17
2.3 Forma hamiltoniana da transformação	20
2.4 Algumas propriedades geométricas - Fibrção	22
2.5 Mapeamento de uma rotação paramétrica no plano físico	24
3 Quantização da transformação KS	26
3.1 Forma quantizada da transformação KS	26
4 O Hidrogênio bidimensional	33
4.1 Átomo de Hidrogênio bidimensional	33
4.2 Transformação bidimensional	34
4.3 Limite com contínuo de níveis	39
5 O Propagador do Hidrogênio e a transformação KS	42
5.1 Integrais de trajetória para o Hidrogênio	42
6 O comportamento dinâmico do Hidrogênio no limite clássico 50	
6.1 O modelo bidimensional	50
6.2 Evolução temporal	52
6.3 Caso tridimensional	55
6.4 Evolução temporal com frequência dependente da energia	56
Conclusão	62
Apêndice A	66
Apêndice B	68
Apêndice C	71
Apêndice D	75

Apêndice E.....	77
Bibliografia	80

Introdução

O presente trabalho constitui um estudo detalhado do limite semiclássico esperado para uma partícula ligada a um potencial do tipo coulombiano. A motivação principal do tema foi encontrada no fenômeno de “Revivals” quânticos do Hidrogênio [1, 2] que, recentemente, foram detectados experimentalmente. Tal fenômeno, com origem na distribuição de níveis do potencial de Coulomb, tem vida extremamente curta, dada as condições em que o sistema é levado (fronteira de ionização). Aqui, entretanto, consideramos apenas os aspectos da dinâmica quântica associados às propriedades do potencial $1/r$ e não tratamos da inerente instabilidade eletrodinâmica que estados excitados à níveis elevados possuem em sua evolução temporal.

Para se obter o comportamento clássico (princípio de correspondência) é possível o uso de estados coerentes do Hidrogênio [3]. Estados coerentes análogos aos do oscilador harmônico podem ser convenientemente definidos [4] pela aplicação da transformação de Kustaanheimo-Stiefel (KS) [5, 6] no hamiltoniano do sistema. Não obstante as facilidades introduzidas pela transformação KS na descrição clássica, severas dificuldades aparecem no domínio quântico no tratamento e definição do conceito de tempo. A transformação KS redefine o tempo criando um parâmetro temporal fictício que, do ponto de vista quântico, tem propriedades de operador e não de simples parâmetro. A redefinição do tempo e sua dificuldade de interpretação quântica inviabilizam a derivação da integral de trajetória para o Hidrogênio [7, 8] via função de Green, que constitui um dos problemas ainda não resolvidos em Física Matemática. Outra questão ainda não bem esclarecida é a relação que as funções de onda de Schrödinger guarda com as soluções KS-

transformadas propagadas em tempo fictício. Neste trabalho, uma relação é proposta por meio de integração em trajetória.

A quantização da transformação KS tem sido tratada de maneira um pouco confusa na literatura recente [4, 9, 10] e aqui procuramos fazer um revisão dos diversos tipos de transformações possíveis. Fazemos um estudo especial do átomo de Hidrogênio bidimensional (H2D), que serve como modelo ao sistema tridimensional. O H2D tem as mesmas propriedades do Hidrogênio real (H3D) no limite semiclássico e tem a vantagem de simplificar consideravelmente os cálculos. Algumas questões têm sido levantadas em torno da definição de estados coerentes, possibilitadas pela representação regularizadora [4, 11]. Tendo tais estados a estrutura formal dos estados coerentes de oscilador harmônico, como é obtida a conhecida perda de coerência esperada pela incomensurabilidade da estrutura de níveis de energia do Hidrogênio [4] ? Espera-se, pela teoria, que qualquer estado, exibindo alguma localização em um tempo inicial, sofra alargamento para tempos posteriores com possível realocização (revival). De maneira breve, podemos descrever o presente trabalho nos seguintes itens :

- Estudo do fenômeno de Revival quântico próximo ao limite de ionização por meio de funções convenientemente escolhidas (pacotes de Brown [12]);
- Análise , algo detalhada, da quantização da transformação KS em seus diversos tipos (real e complexa), e preparo de terreno à introdução de estados coerentes do Hidrogênio. A interpretação correta desses estados constitui uma contribuição do trabalho, uma vez que diversos autores [4, 10] não têm ressaltado a mera semelhança formal que tais estados coerentes têm em relação aos estados coerentes do oscilador harmônico;
- Estudo do formalismo de integrais de trajetória do Hidrogênio que não incluem o limite do contínuo e conexão das funções de onda do espaço real com as funções paramétricas;
- Análise dos modelos bidimensionais e tridimensionais do Hidrogênio via transformação KS e obtenção do comportamento clássico, o que inclui o limite semiclássico do tempo fictício (obtenção, dentro do formalismo quântico, da equação de Kepler), além da descrição do fenômeno de alargamento do pacote coerente pela introdução de uma dependência explícita da frequência característica dos estados com a energia.

Capítulo 1

Estados localizados e “Revivals” do Hidrogênio

1.1 *Estados localizados de Brown*

Se tivéssemos que descrever um sistema clássico qualquer, submetido a um potencial atrativo arbitrário, o melhor modelo que poderíamos usar para descrever estados ligados, em primeira aproximação, seria o oscilador harmônico. Um pacote de autofunções harmônicas de incerteza mínima apresenta um comportamento regular no tempo, isto é, não sofre espalhamento. Além disso, um estado quasiclássico harmônico comporta-se dinamicamente como um sistema clássico (ou seja, evolui segundo órbitas clássicas). O oscilador harmônico, quando descrito por um pacote de mínima incerteza, satisfaz, muito plenamente, o princípio de correspondência.

Os sistemas dinâmicos encontrados na natureza dificilmente possuem potenciais perfeitamente harmônicos e, na realidade, só muito aproximadamente podemos considerá-los como tal. Um potencial de grande interesse é o coulombiano que constitui um dos potenciais fundamentais da natureza.

O sistema átomo de Hidrogênio é o mais simples caso de Coulomb. Inicialmente sugerido por Schrödinger [3], seria possível construir estados coerentes para o potencial de Coulomb que se comportariam de modo clássico, conforme prescreve o princípio de correspondência no limite de grandes números quânticos.

O estudo de fenômenos de interferência quântica entre níveis do potencial coulombiano é um exemplo da não completa validade da previsão acima, no sentido de que, a menos que definamos convenientemente um “estado coerente” de Coulomb, não existe um comportamento completamente clássico no limite de grandes números no caso de Coulomb.

No estudo que segue, inicialmente utilizamos funções de onda para o átomo de Hidrogênio sem nodos intermediários e com um valor radial de probabilidade bem pronunciado. Estas funções foram usadas inicialmente por Brown [12] na construção de pacotes de onda de grande momento angular para o Hidrogênio.

Se as funções do Hidrogênio têm a forma (parte radial e angular)

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.1)$$

a equação para a parte radial é

$$-\frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) + \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) + k_{nl}^2 \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (1.2)$$

com

$$v(r) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 r} \quad E_{nl} = -\frac{\hbar^2 k_{nl}^2}{2m}$$

A parte angular é determinada pela equação

$$\left[-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} - l(l+1) \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = 0 \quad (1.3)$$

Tomando-se o limite $r \rightarrow \infty$ na equação radial temos

$$-\frac{d^2}{dr^2} u_{nl}(r) + k_{nl}^2 u_{nl}(r) = 0 \quad (1.4)$$

Podemos usar uma função tentativa localizada da forma

$$u_{nl}(r) = C r^n e^{-k_{nl} r} \quad (1.5)$$

Para tanto, é necessário que k_{nl} satisfaça à relação

$$k_{nl} = \frac{e^2 m}{\hbar^2 n^2} + \frac{[n(n-1) - l(l+1)]}{nr} \quad (1.6)$$

Isso quer dizer que a função tentativa proposta só é autofunção se $l = n - 1$. Assim, encontramos a energia correta com estados de momento angular máximo.

A função de onda (1.5) é uma curva de Poisson e pode ser convenientemente “gaussianizada”

$$R_n(r) = C_n \exp\left[-\frac{(r - l^2 a)^2}{2l^3 a^2}\right] \quad n \approx l \quad (1.7)$$

com valor máximo em $r = l^2 a$

A função angular que satisfaz à equação (1.3) é

$$Y_{ll}(\theta, \phi) = C' \sin^l \theta e^{il\phi} \quad (1.8)$$

Tratando-se de níveis elevados $n \approx l$, o padrão de probabilidade concentra-se no plano xy em um círculo e, sem perda de precisão, podemos escrever a função de onda para um nível n com máximo momento angular na forma

$$\psi_l = C_l \exp\left[-\frac{(r - l^2 a)^2}{2l^3 a^2} - \frac{(\theta - \pi/2)^2}{4 \Delta^2 \theta} + il\phi\right] \quad \Delta \theta = \sqrt{\frac{1}{2l}} \quad (1.9)$$

A função (1.9) é denominada função de Brown e pacotes localizados com essas funções podem ser chamados pacotes de Brown.

Um pacote de onda criado com as funções (1.9) evolui segundo uma órbita circular em torno do centro. As funções (1.9) prestam-se muito bem a uma discussão do fenômeno de Revival quântico tratado por Z. Gaeta e C. Stroud em [1] e também por vários outros [2, 13].

O fenômeno de reformação quântica do Hidrogênio é um exemplo de que não bastam números quânticos grandes para que o limite clássico seja obtido. As funções de onda do Hidrogênio exibem um produto de incerteza $\Delta r \Delta p_r$ que tende a $\hbar/2$ no limite $n \rightarrow \infty$. Não obstante, as projeções $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ exibem um comportamento peculiar para tempos longos. Para pacotes das funções de Brown (9), esperamos em termos clássicos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &\propto \cos \omega_{cl} t \\ \langle y \rangle &\propto \sin \omega_{cl} t \end{aligned} \quad (1.10)$$

onde ω_{cl} é a frequência clássica obtida pelo princípio de correspondência

$$\frac{\partial E_l}{\partial l} = \hbar \omega_{cl} \quad \omega_{cl} = \frac{e^2}{\hbar a l^3} \quad (1.11)$$

onde a é o raio de Bohr ($a = \hbar^2 / e^2 m$).

Construindo um pacote com três funções centrado em $n = l$, com n suficientemente grande (Apêndice A),

$$\psi = C^n \sum_{k=-1}^{k=1} A_{l+k} \psi_{l+k}(r, \theta, \phi) \quad (1.12)$$

e normalizado, encontramos a reformação quântica do pacote como um fenômeno de batimento quântico das três funções produzido pela diferença dos níveis de energia com a evolução no tempo do sistema :

$$\langle x \rangle = 4\pi C^{n^2} \langle r \sin\theta \rangle A_l A_{l+1} \cos\left(\frac{2\pi t}{T_{kp}}\right) \cos\left(\frac{2\pi t}{T_{rev}}\right) \quad (1.13)$$

$$\langle y \rangle = 4\pi C^{n^2} \langle r \sin\theta \rangle A_l A_{l+1} \sin\left(\frac{2\pi t}{T_{kp}}\right) \cos\left(\frac{2\pi t}{T_{rev}}\right) \quad (1.14)$$

onde

$$\omega_{cl} = \frac{2\pi}{T_{kp}} \quad \frac{2E_o}{\hbar l^4} = \frac{2\pi}{T_{rev}} \quad T_{rev} = \frac{2}{3} l T_{kp} \quad E_o = \frac{e^4 m}{2\hbar^2} \quad (1.15)$$

T_{kp} é o período da órbita clássica (de Kepler) e T_{rev} é o período necessário para a reconstrução do pacote [1] na órbita circular. Quando $t_m = mT_{rev}/4$, com m um inteiro, $\langle x \rangle = 0$ e $\langle y \rangle = 0$, com $\langle r \rangle$ constante sempre. Isso significa que em t_m o pacote apresenta-se em um estado de coerência menor que o inicial, com perda da localização inicial. Nesse tempo e em tempos intermediários a a coerência é apenas local, apresentando-se por meio dos revivals fracionários [14].

No caso acima, desprezamos os termos de ordem superior a l^{-4} , mas pode-se mostrar que tais termos superiores só alteram os períodos clássico e de revival de maneira pouco significativa :

$$T_{kp} = \frac{\pi(l^2 + 1)^2 \hbar}{l E_o} \quad T_{rev} = \frac{2l^3}{3l^2 - 1} T_{kp} \quad (1.16)$$

Podemos generalizar o resultado acima (Apêndice A) para uma distribuição simétrica em torno do nível principal l . Expressando os elementos de matriz por

$$F_{k,j}^{(l)} = \int_0^\infty R_{l+k}(r) r^3 R_{l+j}(r) dr \int_0^\pi \Theta_{l+k}(\theta) \sin^2 \theta \Theta_{l+j}(\theta) d\theta$$

onde $\Theta_{l+k}(\theta)$ e $R_{l+k}(r)$ representam a função angular e radial de (1.9). Usando, agora, as integrais

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\phi} \cos\phi d\phi = \pi\delta_{n,m+1} + \pi\delta_{n,m-1} \quad (1.17)$$

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\phi} \sin\phi d\phi = i\pi\delta_{n,m+1} - i\pi\delta_{n,m-1}$$

para fazer a integral angular de $F_{k,j}^{(l)}$, encontramos, para p um número inteiro dependendo do número de funções componentes do pacote ($2p+1$)

$$\langle x \rangle = 2\pi \sum_{k=-p}^{p-1} A_{l+k}^2 F_{k,k}^{(l)} \cos\left[\frac{E_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k+1)^2} \right)\right] \quad (1.18)$$

$$\langle y \rangle = 2\pi \sum_{k=-p}^{p-1} A_{l+k}^2 F_{k,k}^{(l)} \sin\left[\frac{E_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k+1)^2} \right)\right] \quad (1.19)$$

para as posições médias $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ de $2p$ níveis em torno do principal. Aqui, é importante ter l com valor grande (> 100), afim de que a aproximação das funções de Brown possa ser válida, estando o sistema próximo da ionização.

É interessante ressaltar que, se o sistema se comportasse como um oscilador harmônico, teríamos, pela distribuição uniforme de níveis de energia, $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ segundo (1.10), sem deformação alguma no pacote.

As relações (1.18) e (1.19) são também úteis para o cálculo do limite contínuo de níveis. Neste caso, o pacote inicial tem um número arbitrariamente grande de níveis, que tomamos por uma distribuição contínua e avaliamos sua evolução temporal. Para grandes tempos, existe uma deformação irreversível, que leva à destruição do pacote (Capítulo 4).

As expressões obtidas permitem que se faça uma análise do comportamento de pacotes tão só para órbitas circulares. A formação de estados que evoluem semiclassicamente sobre órbitas elípticas exige a introdução de autofunções com número de momento angular diferente de $l - 1$ [15]. A parte radial de tais funções apresenta nodos, ou seja, as funções radiais não são mais localizadas radialmente. O limite de grandes números exigido pelo princípio de correspondência resulta, assim, de difícil tratamento analítico através das autofunções do Hidrogênio ordinárias. Contornamos tal dificuldade pela introdução de estados coerentes do Hidrogênio. Estes estados são bem definidos pela transformação regularizadora de Kustaanheimo-Stiefel (KS) que apresentamos a seguir na sua forma clássica.

Capítulo 2

Transformação regularizadora clássica

2.1 Exemplo unidimensional

As equações básicas do movimento de uma partícula sujeita ao potencial tipo $1/r$ são

$$\ddot{r} + \frac{K^2}{r^2} \dot{r} = 0 \quad \frac{1}{2} \dot{r}^2 - \frac{K^2}{r} = -H_K \quad (2.1)$$

Essas são, respectivamente, a equação para a força e equação de energia para o problema gravitacional de dois corpos. Observa-se que essas equações apresentam uma singularidade em $r=0$. Essa singularidade é fonte de complicações numéricas quando da integração das equações nas proximidades do corpo atrator. A idéia fundamental de uma transformação regularizadora está na eliminação dessa singularidades. As equações são ditas regulares se a velocidade do corpo no espaço transformado bem como o divergente dessa velocidade são funções finitas e contínuas das novas coordenadas e parâmetro temporal.

Em uma dimensão a transformação admite uma forma simples. As equações do movimento ficam

$$\ddot{x} + \frac{K^2}{x^2} = 0 \quad \frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{K^2}{x} = -H_K \quad (2.2)$$

Definimos um novo parâmetro temporal pela definição da nova velocidade

$$\frac{dx}{ds} = x \frac{dx}{dt} \quad (2.3)$$

ou, de outra forma

$$x = \frac{dt}{ds} \quad t = \int_{s_0}^s x(s) ds \quad (2.4)$$

Por essa redefinição de tempo, as derivadas temporais de ordem primeira e segunda tornam-se

$$\frac{d}{dt} = \frac{1}{x} \frac{d}{ds} \quad (2.5)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{1}{x^2} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{1}{x^3} \frac{dx}{ds} \frac{d}{ds} \quad (2.6)$$

Assim as equações do movimento, lei de força e energia respectivamente, tornam-se

$$xx'' - x'^2 + K^2x = 0 \quad (2.7)$$

$$x'^2 = 2(K^2x - H_Kx^2) \quad (2.8)$$

aqui as linhas indicam derivação com relação a s . A nova velocidade do corpo vai a zero na colisão com o corpo atrator.

As equações (2.7) e (2.8) são facilmente integradas para o caso $H_K=0$. Para a condição inicial $x(0)=0$ as soluções são

$$x = \left(\frac{9}{2}K^2\right)^{\frac{1}{3}}t^{\frac{2}{3}} \quad (2.9)$$

$$x = \frac{1}{2}K^2s^2 \quad (2.10)$$

A última equação provém das equações regularizadas. A posição da partícula é uma função derivável na origem do espaço transformado.

Se definirmos uma nova coordenada $x = u^2$ e substituirmos na equação de energia (2.8) obtemos

$$2u'^2 = K^2 - H_Ku^2 \quad (2.11)$$

A equação (2.7) pode ser reescrita na forma

$$\frac{d}{ds} \left(\frac{x'^2}{x^2} \right) = -2K^2 \frac{x'}{x^2}$$

que pelo uso de (2.7) e (2.8) torna-se

$$x'' + 2H_Kx = K^2 \quad (2.12)$$

Substituindo (2.12) em (2.11) encontramos

$$u'' + \frac{H_K}{2} u = 0 \quad (2.13)$$

que é a equação de um oscilador harmônico parametrizado pelo tempo s . A integração do problema é, dessa forma, muito simples, já que as equações foram linearizadas.

Em termos básicos, a transformação KS envolve assim os seguintes itens:

- Uma redefinição do tempo. A velocidade do corpo em termos do tempo fictício deve ser nula na origem do centro de força

$$r = \frac{dt}{ds} \quad (2.14)$$

- Uma transformação de coordenadas, em termo das quais as equações de movimento reduzem o problema de Kepler ao oscilador harmônico.

$$\vec{r} = T(\vec{u})$$

2.2 Relações para três dimensões

No tratamento dos casos de interesse, movimento no espaço tridimensional, as equações de movimento fundamentais para o problema perturbado por um potencial V são

$$\ddot{\vec{r}} + \frac{K^2}{r^3} \vec{r} = -\nabla V \quad (2.15)$$

$$\frac{1}{2} \dot{\vec{r}}^2 - \frac{K^2}{r} = H_K \quad (2.16)$$

$$H_K = H + V \quad (2.17)$$

aqui a energia total do movimento \mathcal{E} é dada por $\mathcal{E} = -H$. Aplicando-se as equações (2.5) e (2.6) em (2.15) e (2.16) encontramos, respectivamente

$$r\ddot{r}' - r'\dot{r}' + K^2\vec{r} = r^3(-\nabla V) \quad (2.18)$$

$$\frac{1}{2r^2} r'^2 - \frac{K^2}{r} = -H_K \quad (2.19)$$

As últimas equações correspondem à primeira parte do processo de regularização, onde as equações usuais são escritas em termos do tempo fictício.

A segunda parte da regularização deve envolver algum tipo de transformação de coordenadas. De acordo com [5, 6] o movimento parametrizado deve se dar em um espaço quadridimensional gerado pela transformação

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_3 & -u_4 & -u_1 & -u_2 \\ u_4 & u_3 & u_2 & u_1 \\ u_1 & u_2 & -u_3 & -u_4 \\ u_2 & -u_1 & -u_4 & u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

onde $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ e $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ são as componentes dos vetores no espaço real e paramétrico. A adição de mais uma coordenada é exigida pela transformação, trazendo complicações no cálculo que podem ser facilmente contornadas. Escreveremos genericamente a relação (2.20) como $\vec{r} = L(\vec{u})\vec{u}$. A matriz $L(\vec{u})$ possui uma série de propriedades

$$L(\vec{u})L^t(\vec{u}) = u^2 I \quad (2.21)$$

$$L^{-1}(\vec{u}) = \frac{1}{r} L^t(\vec{u}) \quad (2.22)$$

$$L(\vec{u})' = L(\vec{u}') \quad (2.23)$$

onde I é a matriz identidade e $L^t(\vec{u})$ e $L^{-1}(\vec{u})$ são a matriz transposta e inversa respectivamente. Da última propriedade segue que

$$\vec{r}' = 2L(\vec{u})\vec{u}' \quad \vec{u}' = \frac{1}{2u^2} L^t(\vec{u})\vec{r}'$$

Além disso uma série de teoremas podem ser enunciados [6] para essa transformação :

Teorema 1 Quando dois vetores \vec{u} e \vec{v} satisfazem a relação

$$u_2 v_1 - u_1 v_2 + u_3 v_4 - u_4 v_3 = 0 \quad (2.24)$$

então

$$L(\vec{u})\vec{v} = L(\vec{v})\vec{u} \quad (2.25)$$

relação que chamamos bilinear.

A prova do teorema 1 pode ser obtida diretamente por substituição dos vetores \vec{u} e \vec{v} .

Teorema 2 Quando dois vetores \vec{u} , \vec{v} obedecem a relação bilinear (2.24) então temos a seguinte relação

$$u^2 L(\vec{v})\vec{v} - 2\vec{u} \cdot \vec{v} L(\vec{u})\vec{v} + v^2 L(\vec{u})\vec{u} = 0 \quad (2.26)$$

O último teorema também pode ser provado por substituição direta.

Teorema 3 Seja \vec{q} um vetor no espaço físico. Então devemos considerá-lo como um vetor de quarta componente nula. Definindo

$$\vec{v} = L^t(\vec{u})\vec{q}$$

então \vec{u} e \vec{v} obedecem a relação bilinear.

Podemos provar escrevendo-se

$$L(\vec{u})\vec{v} = L(\vec{u})L^t(\vec{u})\vec{q} = u^2\vec{q}$$

Com esses teoremas podemos obter uma equação de movimento transformada. Aplicando-se as propriedades enunciadas na equação (2.18) bem como

$$\vec{r}' = 2L(\vec{u})\vec{u}'' + 2L(\vec{u}')\vec{u}'$$

obtemos

$$2u^2 L(\vec{u})\vec{u}'' + 2u^2 L(\vec{u}')\vec{u}' - 4\vec{u} \cdot \vec{u}' L(\vec{u})\vec{u}' + K^2 L(\vec{u})\vec{u} = u^6 (-\nabla\vec{V})$$

a última equação pode ser simplificada pelo uso do teorema 2, resultando

$$2u^2 L(\vec{u})\vec{u}'' - 2u'^2 L(\vec{u})\vec{u} + K^2 L(\vec{u})\vec{u} = u^6 (-\nabla\vec{V})$$

multiplicando-se a última equação por $L^{-1}(\vec{u})$ temos

$$\vec{u}'' + \frac{K^2 - 2u'^2}{2u^2} \vec{u} = \frac{u^2}{2} L^t(\vec{u})(-\nabla\vec{V}) \quad (2.27)$$

Obtemos assim uma equação do tipo oscilador harmônico perturbada pela força $-\nabla\vec{V}$. A frequência característica é na verdade uma constante de movimento e depende da energia, como pode ser obtido por meio da equação de energia (2.19)

$$H_K = \frac{K^2 - 2u'^2}{r} \quad r = u^2$$

Se a perturbação for nula, a equação de movimento no espaço paramétrico em tempo fictício é

$$\vec{u}'' + \frac{H_K}{2} \vec{u} = 0 \quad (2.28)$$

A frequência é assim $\omega = \sqrt{\frac{H_K}{2}}$

2.3 Forma hamiltoniana da transformação

Admitamos o movimento puro de Kepler bidimensional, com hamiltoniano dado por

$$H_K = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{K^2}{r} \quad (2.29)$$

onde $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$. A transformação KS corresponde a

$$\frac{dt}{ds} = r \quad \begin{aligned} x_1 &= u_1^2 - u_2^2 \\ x_2 &= 2u_1 u_2 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Podemos mostrar que a transformação acima pode ser colocada em uma forma canônica, embora o corpo completo da transformação não seja uma transformação canônica. Para isso usamos o fato de, para a transformação

$$x_j = f_j(\bar{x}_k) \quad (2.31)$$

termos como função geradora $S(\bar{x}_k, p_k)$

$$S(\bar{x}_k, p_k) = - \sum_{k=0}^n p_k f_k(\bar{x}_0, \dots, \bar{x}_n) \quad (2.32)$$

onde os momentos conjugados são dados por

$$\bar{p}_j(\bar{x}_k, p_k) = - \frac{\partial S}{\partial \bar{x}_j} = - \sum_{k=0}^n p_k \frac{\partial f_k}{\partial \bar{x}_j} \quad (2.33)$$

Resolvendo-se as equações para p_j , obtemos a transformação de momentos. Aplicando-se (2.32) na forma (2.30), incluímos o tempo e energia como coordenadas conjugadas (denotando-se v_1 e v_2 como momentos paramétricos)

$$S = -|E|t - p_1(u_1^2 - u_2^2) - 2p_2 u_1 u_2 \quad (2.34)$$

com o que

$$t = - \frac{\partial S}{\partial |E|} \quad |E| = - \frac{\partial S}{\partial t} \quad (2.35)$$

$$v_1 = - \frac{\partial S}{\partial u_1} = 2(p_1 u_1 + p_2 u_2) \quad (2.36)$$

$$v_2 = - \frac{\partial S}{\partial u_2} = 2(p_2 u_1 - p_1 u_2) \quad (2.37)$$

podemos assim escrever

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ -u_2 & u_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

ou de outra forma

$$\vec{v} = 2L^t(\vec{u})\vec{p} \quad (2.39)$$

A mudança no quadrado do momento total é então

$$v^2 = v^t v = 4p^t L(\vec{u})L^t(\vec{u})\vec{p} = 4rp^2$$

ou seja

$$p^2 = \frac{1}{4r}v^2 \quad (2.40)$$

Com isso, é possível mostrar que o novo hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = r(H_K + |E|) \quad (2.41)$$

com o que, pode-se escrever

$$\frac{du_i}{ds} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial v_i} \quad \frac{dv_i}{ds} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_i} \quad (2.42)$$

que são as equações de Hamilton transformadas. Em uma transformação verdadeiramente canônica, o tempo é um parâmetro comum entre o grupo de coordenadas trocado. Assim, não obstante a forma hamiltoniana (2.42), o mapa KS (que aqui escrevemos em sua forma bidimensional por simplicidade) não constitui uma transformação genuinamente canônica pela introdução do tempo fictício s e pela presença do fator r em (2.41). O hamiltoniano assim transformado torna-se

$$\mathcal{H} = r\left[\frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{K^2}{r} + |E|\right] = \frac{1}{8}v^2 + u^2|E| - K^2$$

Definindo-se $2\omega^2 = |E|$, o hamiltoniano transformado equivale ao de uma partícula de massa $4m$ sujeita à ação de um potencial harmônico (onde m foi aqui colocado igual a 1)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(\frac{v_1^2 + v_2^2}{4}\right) + \frac{1}{2}(4\omega^2)(u_1^2 + u_2^2) - K^2 \quad (2.43)$$

2.4 Algumas propriedades geométricas - Fibração

Na primeira parte vimos algumas das principais propriedades da matriz da transformação de Stiefel. Essas propriedades são válidas tanto para a transformação tridimensional como para a bidimensional (transformação de Levi-Civita). Uma das propriedades fundamentais é a relação bilinear que deve ser satisfeita para quaisquer dois vetores no espaço de parâmetros. Nesse sentido, podemos ver a transformação KS como um mapa de U^4 no espaço físico X^3 definido pela relação $\vec{r} = L(\vec{u})\vec{u}$ onde as distâncias são medidas por $r = u^2$.

Outra propriedade dessa transformação é a não univocidade, chamada *fibração*

Até aqui, usamos a forma da transformação KS utilizada por C. Guerry [4] em seu tratamento dos estados coerentes do Hidrogênio. Para apresentarmos a propriedade de fibração, utilizaremos a forma da transformação contida em [6]. Essa mudança não traz prejuízos à análise da quantização da transformação KS feita posteriormente. A forma da relação bilinear é, entretanto, diferente de (2.24). Podemos obter uma forma inversa para a transformação usada em [6] dada por

$$\begin{aligned}x_1 &= u_1^2 - u_2^2 - u_3^2 + u_4^2 \\x_2 &= 2(u_1 u_2 - u_3 u_4) \\x_3 &= 2(u_1 u_3 + u_2 u_4)\end{aligned}\tag{2.44}$$

com $r = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2$ e relação bilinear $u_4 v_1 - u_3 v_2 + u_2 v_3 - u_1 v_4 = 0$. Se temos o vetor \vec{r} e $x_1 > 0$, com o auxílio das relações acima resolvemos

$$x_1 + r = 2(u_1^2 + u_4^2)\tag{2.45}$$

encontrando u_1 e u_4 . Com esses valores obtemos u_2 e u_3 de

$$u_2 = \frac{u_1 x_2 + x_3 u_4}{x_1 + r}\tag{2.46}$$

$$u_3 = \frac{u_1 x_3 - x_2 u_4}{x_1 + r}\tag{2.47}$$

A forma da relação (2.30) indica que o par u_1, u_4 não é único. Se $x_1 < 0$ temos

$$-(x_1 + r) = 2(u_2^2 + u_3^2)$$

$$u_1 = -\frac{x_2 u_2 + x_3 u_3}{x_1 - r}$$

$$u_4 = -\frac{x_3 u_2 - x_2 u_3}{x_1 - r}$$

Da forma das equações de inversão, todos os pontos em U^4 que satisfazem à forma

$$\begin{aligned} u_1 &= \bar{u}_1 \cos \phi - \bar{u}_4 \sin \phi \\ u_2 &= \bar{u}_2 \cos \phi + \bar{u}_3 \sin \phi \\ u_3 &= -\bar{u}_2 \sin \phi + \bar{u}_3 \cos \phi \\ u_4 &= \bar{u}_1 \sin \phi + \bar{u}_4 \cos \phi \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde $\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3, \bar{u}_4$ é um ponto origem da fase arbitrária ϕ , formam um contínuo de pontos que aqui chamamos de fibra de \vec{r} , e que corresponde a um único vetor \vec{r} no espaço real. Está claro também que fibras diferentes nunca se cruzam, pois correspondem a diferentes pontos do espaço real.

Uma interpretação geométrica pode agora ser dada à relação bilinear. Para isso calculamos a direção da fibra $\tau_{\bar{u}}$ como parametrizada por ϕ

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= -\bar{u}_1 \sin \phi - \bar{u}_4 \cos \phi \\ \dot{u}_2 &= -\bar{u}_2 \sin \phi + \bar{u}_3 \cos \phi \\ \dot{u}_3 &= -\bar{u}_2 \cos \phi - \bar{u}_3 \sin \phi \\ \dot{u}_4 &= \bar{u}_1 \cos \phi - \bar{u}_4 \sin \phi \end{aligned} \quad (2.49)$$

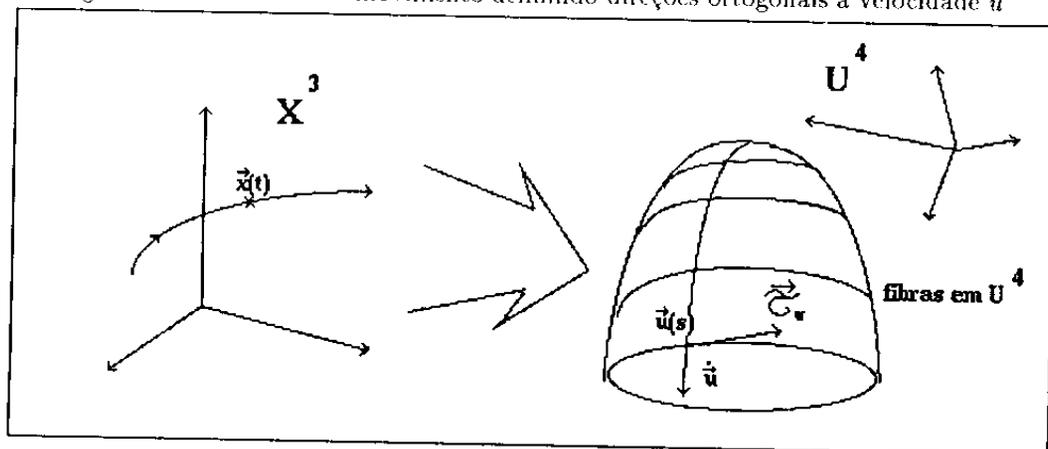
As relações (2.49) são obtidas pela derivação da fibra (2.48) com relação a ϕ . Definimos a direção para $\phi = 0$, $\vec{\tau}_{\bar{u}} = (-\bar{u}_4, \dot{u}_3, -\bar{u}_2, \bar{u}_1)$. A relação bilinear é dada por (onde \vec{v} é o do teorema 3)

$$\vec{\tau}_{\bar{u}} \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.50)$$

O movimento do corpo no espaço real pode assim ser visto como gerando um contínuo de fibras no espaço paramétrico (fig 1), de tal forma que qualquer outro vetor paramétrico \vec{v} , tendo um correspondente no espaço real, deve ser perpendicular à direção das fibras geradas pelo movimento dos u 's (teorema 3). Em particular a velocidade do corpo é um vetor físico que assim deve ser perpendicular, no espaço paramétrico, à direção da fibra gerada pelo movimento (representado na fig. 1)

$$u_4 \dot{u}_1 - u_3 \dot{u}_2 + u_2 \dot{u}_3 - u_1 \dot{u}_4 = 0 \quad (2.51)$$

fig. 1 Tubo de fibras do movimento definindo direções ortogonais a velocidade $\dot{\vec{u}}$



2.5 Mapeamento de uma rotação paramétrica no plano físico

Nessa parte tratamos brevemente da imagem no plano físico gerada por uma rotação de coordenadas em um plano paramétrico dado .

Inicialmente definimos como plano de Levi-Civita todo plano gerado por vetores \vec{a} e \vec{b} com componentes satisfazendo a relação bilinear

$$a_1b_4 - a_2b_3 + a_3b_2 - a_4b_1 \quad (2.52)$$

com essa definição podemos enunciar

Teorema 4 *Quaisquer vetores contidos no plano de Levi-Civita satisfazem a relação bilinear.*

A prova se obtém escrevendo-se vetores gerais

$$\vec{u} = \lambda\vec{a} + \mu\vec{b} \quad \vec{v} = \lambda'\vec{a} + \mu'\vec{b}$$

e montando-se a relação bilinear para as componentes dos vetores \vec{u} e \vec{v} .

Uma rotação no plano paramétrico pode assim ser definida

$$\vec{u} = \rho(\vec{a}\cos\phi + \vec{b}\sin\phi) \quad (2.53)$$

$$\vec{v} = \sigma(\vec{a}\cos\psi + \vec{b}\sin\psi) \quad (2.54)$$

Nessas últimas equações temos $\vec{a} \cdot \vec{b} = 0$. Temos na verdade um sistema de equações, que podemos resolver para \vec{b}

$$a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 + a_4b_4 = 0$$

$$a_4b_1 - a_3b_2 + a_2b_3 - a_1b_4 = 0$$

Pela estrutura da matriz KS de transformação (2.20) temos que os vetores

$$\vec{a}' = (-a_2, a_1, a_4, -a_3) \quad \vec{a}'' = (-a_3, -a_4, a_1, a_2)$$

satisfazem ao sistema de equações acima. O vetor \vec{b} é da forma

$$\vec{b} = k'\vec{a}' + k''\vec{a}'' \quad (2.55)$$

com

$$\vec{a}' \cdot \vec{a}'' = 0 \quad k'^2 + k''^2 = 1$$

Se aplicarmos os vetores \vec{a} e \vec{b} na transformação (2.44), obtemos a imagem no plano físico. Definimos $\vec{\alpha} = L(\vec{a})\vec{a}$ e $\vec{\beta}$, que por substituição direta são

$$-\vec{\alpha} = L(\vec{b})\vec{b} \quad \vec{\beta} = L(\vec{a})\vec{b} \quad (2.56)$$

Pelas propriedades da matriz $L(\vec{u})$ e sua inversa temos

$$\vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} = 0$$

o que indica que $\vec{\alpha}$ e $\vec{\beta}$ são dois vetores ortogonais gerando um plano no espaço físico. Como o plano de Levi-Civita passa pela origem, o plano imagem também corta a origem. Calculemos o vetor físico

$$L(\vec{u})\vec{v} = \rho\sigma[\cos\phi L(\vec{a}) + \sin\phi L(\vec{b})][\cos\psi\vec{a} + \sin\psi\vec{b}]$$

onde usamos os vetores (2.53) e (2.54). Aplicando as propriedades de ortogonalidade acima escritas e a propriedade (2.25), podemos reduzir a última expressão a

$$L(\vec{u})\vec{v} = \rho\sigma[\cos(\phi + \psi)\vec{\alpha} + \sin(\rho + \sigma)\vec{\beta}] \quad (2.57)$$

O mapeamento no plano físico é obtido fazendo-se $\vec{u} = \vec{v}$, com o que temos

$$\vec{r} = L(\vec{u})\vec{u} = \rho^2(\cos 2\phi\vec{\alpha} + \sin 2\phi\vec{\beta}) \quad (2.58)$$

as coordenadas polares no plano físico são assim dadas pelos valores de ρ^2 e 2ϕ .

Capítulo 3

Quantização da transformação KS

3.1 Forma quantizada da transformação KS

No capítulo anterior, introduzimos a transformação KS clássica definida para um espaço paramétrico de quatro dimensões. Nesse novo espaço, a descrição do movimento se dá sobre uma superfície denominada fibra que vincula as soluções possíveis da equação de movimento, resolvida em tal espaço, ao grupo de soluções com interesse físico. A condição de vínculo surge do fato de matriz $L(\vec{u})$ satisfazer às propriedades (2.21), (2.22), (2.23), além dos teoremas 1, 2 e 3. Posição e velocidades paramétricas devem, então, satisfazer

$$u_2 \frac{du_1}{ds} - u_1 \frac{du_2}{ds} + u_3 \frac{du_4}{ds} - u_4 \frac{du_3}{ds} = 0 \quad (3.1)$$

Nesse capítulo, introduziremos a forma quantizada da transformação KS e descreveremos os problemas que surgem com a transformação inversa, quando da evolução temporal.

Formalmente é esperado que se possa converter a equação de Schrödinger do problema de Coulomb em uma equação correspondente descrevendo um oscilador harmônico paramétrico. Na verdade, devemos saber converter, por meio da transformação KS, a função hamiltoniana do problema de Coulomb. Escrevendo-se a equação de Schrödinger independente do tempo para o problema do elétron com carga e e massa m , admitindo-se

fixo o centro do potencial, temos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)\psi = -|E|\psi; \quad \nabla^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad (3.2)$$

aplicamos a transformação (2.20), notando-se que

$$\frac{\partial V}{\partial u_j} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial V}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial u_j}$$

ou seja,

$$\nabla_{\vec{u}} V = 2L'(\vec{u})\nabla_{\vec{x}} V \quad (3.3)$$

Multiplicando-se por $L(\vec{u})$ a última equação e das propriedades (2.21) e (2.22), temos

$$\nabla_{\vec{x}} V = \frac{1}{2u^2} L(\vec{u})\nabla_{\vec{u}} V \quad (3.4)$$

do que

$$\nabla_{\vec{x}}^2 = \frac{1}{4u^2} \nabla_{\vec{u}}^2 \quad (3.5)$$

aqui $\nabla_{\vec{x}}^2$ tem a forma

$$\nabla_{\vec{x}}^2 = \nabla^2 + \frac{\partial^2}{\partial x_4^2}$$

com

$$\frac{\partial}{\partial x_4} = \frac{1}{2u^2} (u_2 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_1 \frac{\partial}{\partial u_2} + u_4 \frac{\partial}{\partial u_3} - u_3 \frac{\partial}{\partial u_4}) \quad (3.6)$$

Desta forma, a reação (3.2) torna-se equivalente a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{4r} \nabla_{\vec{u}}^2 - \frac{\mathcal{X}^2}{4r} \right] \psi - \frac{e^2}{r} \psi = -|E|\psi \quad (3.7)$$

com $\mathcal{X} = \frac{\partial}{\partial x_4}$. Se multiplicarmos (3.7) por r e impusermos

$$\mathcal{X}\psi = 0 \quad (3.8)$$

o problema resulta equivalente ao problema de um oscilador harmônico 4D com equação equivalente

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{u}}^2 \Psi(\vec{u}) + |E|u^2 \Psi(\vec{u}) = e^2 \Psi(\vec{u}) \quad (3.9)$$

onde denotamos a função transformada por Ψ e definimos uma nova massa $M = 4m$. Pode-se justificar o vínculo (3.8) pela necessidade de a função $\Psi(\vec{u})$ ter o mesmo valor sobre toda a fibra no espaço paramétrico gerada pela transformação (2.20). Desta maneira, eliminamos o grau de liberdade excedente introduzido por (2.20).

Apartir de (3.9) é imediata a definição de operadores escada

$$\begin{aligned} a_i &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} u_i + i \frac{1}{\sqrt{2M\omega\hbar}} v_i \\ a_i^\dagger &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} u_i - i \frac{1}{\sqrt{2M\omega\hbar}} v_i \end{aligned} \quad (3.10)$$

As equações (3.10) obedecem às relações de comutação $[a_i^\dagger, a_j] = \delta_{ij}$ com i igual a 1, 2, 3 ou 4. O momento paramétrico v_i é determinado por $v_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial u_i}$. Com tais definições, a relação (3.9) torna-se

$$\hbar\omega \left(\sum_{i=1}^4 a_i^\dagger a_i + 2 \right) |\Psi(\vec{u})\rangle = \epsilon^2 |\Psi(\vec{u})\rangle \quad (3.11)$$

onde definimos a frequência dependente da energia

$$\omega = \sqrt{\frac{2|E|}{M}} \quad (3.12)$$

Dado que $\Psi(\vec{u}) = \langle \vec{u} | \Psi \rangle$ com

$$|\Psi(\vec{u})\rangle = |n_1 n_2 n_3 n_4\rangle$$

temos, por meio da aplicação das relações

$$\begin{aligned} a_i |n_j\rangle &= \sqrt{n_i} \delta_{ij} |n_i - 1\rangle \\ a_i^\dagger |n_j\rangle &= \sqrt{n_i + 1} \delta_{ij} |n_i + 1\rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

em (3.9), a energia para cada estado

$$E = -\frac{m\epsilon^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (3.14)$$

onde $n = (n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + 2)/2$. A relação de energia é assim obtida corretamente. Os valores do conjunto n_i que equivalem às funções reais

do Hidrogênio são determinados pela relação de vínculo (3.8). Algumas observações são necessárias sobre os estados Ψ e sua evolução temporal

- A equação (3.9) define apenas autoestados, uma vez que para cada uma das autofunções $|n_1 n_2 n_3 n_4\rangle$ está associado apenas um valor de frequência. Em outras palavras, cada autoestado tem um valor de frequência característico, ao contrário de um oscilador harmônico vulgar cujas autofunções tem a mesma frequência.

A equação dependente do tempo é

$$\mathcal{H}_s \Psi(\vec{u}, s) = i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Psi(\vec{u}, s) \quad (3.15)$$

por (3.9) temos que o quadrado da carga pode ser associado a derivação em tempo fictício

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \longrightarrow e^2 \quad (3.16)$$

Do que se infere que o operador evolução em tempo fictício pode ser escrito como

$$\mathcal{U}(s) = e^{-\frac{ie^2 \hat{s}}{\hbar}} \quad (3.17)$$

onde \hat{s} tem função de operador determinada pela definição (2.14), ou seja

$$\hat{s} = \int_0^t \frac{1}{\hat{r}(t)} dt \quad (3.18)$$

A evolução em tempo fictício de Ψ é, assim, complicada e depende da exata aplicação de (3.18) à função Ψ .

- Como já dissemos, devido à condição de vínculo, nem toda autofunção de (3.9) tem sentido físico. A condição $\mathcal{X}\Psi = 0$ permite obter a degenerescência correta do Hidrogênio. Na verdade, as funções de onda do Hidrogênio são descritas como combinações de autofunções de (3.9) com a mesma frequência.

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1 n_2 n_3 n_4} C_{n_1 n_2 n_3 n_4} |n_1 n_2 n_3 n_4\rangle$$

Obtemos $C_{n_1 n_2 n_3 n_4}$ da diagonalização do operador (3.7)

$$\mathcal{X} = a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3$$

com o qual só consideramos autovalores nulos de acordo a (3.8). O operador \mathcal{X} não é diagonal na representação dada por (2.20) e, no estudo de estados excitados, a diagonalização requerida não é prática.

Podemos evitar a diagonalização de \mathcal{X} pela aplicação de outra transformação que deixe o operador de vínculo diagonal. Isso pode ser feito pela definição de novos operadores de criação e destruição [4] b_1, b_2, b_3, b_4 dados por

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 1 \\ 1 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Apartir de (3.19), podemos definir uma nova transformação KS. Esta será dada por $\vec{x} = K(\vec{q})\vec{q}$ com operadores

$$\begin{aligned} b_i &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} q_i + i \frac{1}{\sqrt{2M\omega\hbar}} p_i \\ b_i^\dagger &= \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} q_i - i \frac{1}{\sqrt{2M\omega\hbar}} p_i \end{aligned} \quad (3.20)$$

A matriz $K(\vec{q})$ é dada por

$$K(\vec{q}) = \begin{pmatrix} q_2 & q_1 & q_4 & q_3 \\ -iq_2 & -iq_1 & iq_4 & iq_3 \\ q_3 & -q_4 & q_1 & -q_2 \\ iq_3 & -iq_4 & -iq_1 & iq_2 \end{pmatrix}$$

A transformação assim obtida é, na verdade, a mesma usada em [10]. Definindo

$$\zeta_a = \sqrt{2}q_1 \quad \zeta_b = \sqrt{2}q_4 \quad \zeta_a^* = \sqrt{2}q_3 \quad \zeta_b^* = \sqrt{2}q_2$$

temos

$$\vec{q}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_a \quad \zeta_b^* \quad \zeta_a^* \quad \zeta_b)$$

$$x_1 + ix_2 = 2\zeta_a\zeta_b^*$$

$$x_1 - ix_2 = 2\zeta_a^*\zeta_b$$

$$x_3 = \zeta_a\zeta_a^* - \zeta_b\zeta_b^*$$

$$\begin{aligned}
r &= \zeta_a \zeta_a^* + \zeta_b \zeta_b^* \\
\vec{\nabla}_\zeta^t &= \vec{\nabla}_x^t K(\vec{\nabla}) \\
K(\vec{\zeta}) K^t(\vec{\zeta}^*) &= rI
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$r \nabla_x^2 = \vec{\nabla}_\zeta^t \vec{\nabla}_\zeta^* = \left(\frac{\partial}{\partial \zeta_a} \frac{\partial}{\partial \zeta_a^*} + \frac{\partial}{\partial \zeta_b} \frac{\partial}{\partial \zeta_b^*} \right)$$

Com uso de (3.1) podemos escrever \mathcal{X} na forma diagonal

$$\mathcal{X} = i(b_1^\dagger b_1 - b_2^\dagger b_2 - b_3^\dagger b_3 + b_4^\dagger b_4) \tag{3.22}$$

e o hamiltoniano de (3.11) fica

$$\mathcal{H}_\zeta = \hbar\omega \left(\sum_{i=1}^4 b_i^\dagger b_i + 2 \right) \tag{3.23}$$

Os novos autoestados da equação de Schrödinger escrita na representação ζ são $|\Psi(\vec{\zeta})\rangle = |m_1 m_2 m_3 m_4\rangle$ e são solução da equação independente do tempo

$$\left[4 \left(\frac{\partial}{\partial \zeta_a^*} \frac{\partial}{\partial \zeta_a} + \frac{\partial}{\partial \zeta_b^*} \frac{\partial}{\partial \zeta_b} \right) + \lambda - \eta^4 (\zeta_a^* \zeta_a + \zeta_b^* \zeta_b) \right] |\Psi(\vec{\zeta})\rangle = 0 \tag{3.24}$$

onde $\lambda = \frac{8mc^2}{\hbar^2}$ e $\eta^4 = -\frac{8mE}{\hbar^2}$. A condição (3.8) implica em $m_1 + m_4 = m_2 + m_3$ que fornece a degenerescência correta.

Apartir das relações acima pode-se definir estados coerentes. Usamos a definição formal destes estados que tem a propriedade de serem autoestados dos operadores (3.20). Se $|z\rangle = |z_1 z_2 z_3 z_4\rangle$

$$b_1 |z\rangle = z_1 |z\rangle, \quad \langle z| b_1^\dagger = \langle z| z_1^*, \dots \tag{3.25}$$

formalmente podemos escrever

$$|z\rangle = \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \frac{z_1^{m_1} z_2^{m_2} z_3^{m_3} z_4^{m_4}}{\sqrt{m_1! m_2! m_3! m_4!}} |m_1 m_2 m_3 m_4\rangle \tag{3.26}$$

Aqui também a condição de vínculo $\mathcal{X}\psi = 0$ é importante segundo [10]. Essa é imposta sobre (3.26) por uma integração na fibra σ (σ vem da da transformação KS colocada em forma polar [16]), de forma que o estado

coerente representando um estado localizado do Hidrogênio é dado por $|\hat{z}\rangle$ (aqui N é uma constante de normalização)

$$|\hat{z}\rangle = N \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{2\pi} |z\rangle \quad (3.27)$$

É importante lembrar que os estados formando (3.26) tem todos frequências características diferentes devido à dependência explícita de ω com a energia. A representação acima é chamada de forma complexa da transformação KS. As autofunções de (3.24) filtradas pelo vínculo (3.8) são as autofunções do Hidrogênio 3D escritas em termos dos ζ 's.

Não perdemos detalhes da descrição física se tentarmos, mais uma vez, simplificar o problema. A transformação KS pode ser definida para um espaço bidimensional [6]. Neste caso, a transformação não tem grau de liberdade excedente e, assim, não há condição de vínculo. Podemos, sem perda alguma, iniciar um estudo do Hidrogênio bidimensional [9, 17]. Não existe diferença significativa na distribuição de níveis de energia entre o modelo bidimensional e o Hidrogênio em três dimensões :

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n - 1/2)^2}$$

onde n é um número inteiro. O problema de Coulomb bidimensional é um modelo perfeito aos estados do Hidrogênio real que possuem uma probabilidade fortemente concentrada sobre um plano. Os estados coerentes 2D também, no limite clássico, fornecem as elipses de Kepler conforme exige o princípio de correspondência.

Capítulo 4

O Hidrogênio bidimensional

4.1 Átomo de Hidrogênio bidimensional

Nesta secção introduzimos as relações necessárias à descrição quântica de um átomo bidimensional (Apêndice B). Em duas dimensões [17], escrevemos a equação de Schrödinger para o Hidrogênio usando o laplaciano em coordenadas polares :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{r}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

Como é usual temos $\psi(\vec{r}) = P(r)\Phi(\phi)$ e, com $x = \beta r$ e $\beta = \frac{8\pi^2 m e^2}{N\hbar^2}$, encontramos para a parte radial

$$x\frac{d^2P}{dx^2} + \frac{dP}{dx} - \frac{l^2}{x}P - \frac{xP}{4} + P = 0 \quad (4.2)$$

A solução é encontrada usando $P(x) = G(x)x^{|l|}e^{-\frac{x}{2}}$ em (4.2)

$$x\frac{d^2G}{dx^2} + (2|l| + 1 - x)\frac{dG}{dx} + (N - |l| + 1/2)G = 0 \quad (4.3)$$

que é a equação de Laplace satisfeita por polinômios de Laguerre. As autofunções do átomo bidimensional são assim [17]

$$\psi_{nl}(r, \phi) = \beta\sqrt{\frac{(n - |l| - 1)!}{(n + |l| + 1)!(2n - 1)}}(\beta r)^{|l|}e^{-\frac{\beta r}{2}}\mathcal{L}_{n-|l|-1}^{2|l|}(\beta r)\frac{e^{il\phi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.4)$$

com

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n-1/2)^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.5)$$

Existem diferenças entre os sistemas H2D e H3D. No átomo bidimensional, a nuvem eletrônica está mais próxima do núcleo do que em H3D. A distribuição de níveis de energia tem a mesma forma (lei $1/n^2$) com um fator $1/2$ de diferença no denominador. Devido à forma das auto-funções, polinômios de Laguerre, podemos obter estados de momento angular máximo com funções de onda semelhantes aos estados de Brown do capítulo 1.

4.2 Transformação bidimensional

Por outro lado, podemos tratar o átomo H2D [9] através da transformação KS e obter estados coerentes sem vínculos de restrição, o que simplifica consideravelmente o problema. Lembramos que, no espaço paramétrico, o tempo s obedece a (2.14) com o que aplicamos a forma bidimensional complexa da transformação KS [9] (Apêndice B)

$$\begin{aligned} x_1 + ix_2 &= 2\xi^2 \\ x_1 - ix_2 &= 2\xi^{*2} \\ r &= 2\xi\xi^* \end{aligned} \quad (4.6)$$

(ou em coordenadas polares $\xi = \sqrt{\frac{r}{2}} \exp(i\frac{\phi}{2})$). A equação

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)\psi = E\psi$$

pela relação (4.6), torna-se equivalente a

$$\left(-\frac{1}{\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\xi^*} + \eta^2\xi\xi^*\right)\Psi(\vec{\xi}) = \frac{\lambda}{2\eta^2}\Psi(\vec{\xi}) \quad (4.7)$$

onde definimos

$$\eta^4 = -\frac{8mE}{\hbar^2} \quad \lambda = \frac{8me^2}{\hbar^2}$$

Na obtenção de (4.7) fazemos uso das propriedades do divergente da transformação (4.6)(Apêndice B)

$$\vec{\nabla}_{\xi}^{\dagger} = 2\vec{\nabla}^{\dagger}L(\vec{\xi})$$

$$\vec{\nabla}_{\xi}^* = 2L^*(\vec{\xi})\vec{\nabla}$$

$$L(\vec{\xi})L^*(\vec{\xi}) = 2\xi\xi^*I$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi\partial\xi^*} = 2r\nabla^2$$

onde

$$L(\vec{\xi}) = \begin{pmatrix} \xi & \xi^* \\ -i\xi & i\xi^* \end{pmatrix}$$

A equação (4.7) é formalmente semelhante a (3.24) e, deste modo, é também possível a definição de operadores de criação e destruição

$$g_1 = \frac{1}{\eta\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi} + \eta^2\xi^*\right) \quad g_1^{\dagger} = \frac{1}{\eta\sqrt{2}}\left(-\frac{\partial}{\partial\xi^*} + \eta^2\xi\right) \quad (4.8)$$

$$g_2 = \frac{1}{\eta\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi^*} + \eta^2\xi\right) \quad g_2^{\dagger} = \frac{1}{\eta\sqrt{2}}\left(-\frac{\partial}{\partial\xi} + \eta^2\xi^*\right)$$

Com (3.12) podemos escrever a equação de Schrödinger (4.7) independente do tempo na forma

$$(g_1g_1^{\dagger} + g_2g_2^{\dagger} + 1)|n_1n_2\rangle = \frac{\lambda}{2\eta^2}|n_1n_2\rangle \quad (4.9)$$

com $|n_1n_2\rangle$ como autoestado. Esses estados são tais que

$$g_1|n_1n_2\rangle = \sqrt{n_1}|n_1 - 1n_2\rangle \quad (4.10)$$

$$g_2|n_1n_2\rangle = \sqrt{n_2}|n_1n_2 - 1\rangle \dots$$

Da operação de g_1 e g_2 em (4.9) temos

$$E = -\frac{2mc^4}{\hbar^2(n_1 + n_2 + 1)^2} \quad (4.11)$$

Pela definição (4.6) derivamos o operador momento angular L nesta representação

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{i}{2}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi} - \xi^*\frac{\partial}{\partial\xi^*}\right) \quad L = \frac{\hbar}{2}(g_1^{\dagger}g_1 - g_2^{\dagger}g_2) \quad (4.12)$$

Sabemos que a parte dependente de ϕ das autofunções do Hidrogênio obedece à equação

$$\frac{\partial}{\partial \phi} |\Psi_{nl}(\vec{r})\rangle = l |\Psi_{nl}(\vec{r})\rangle$$

e, assim, da aplicação de (4.12), temos $n_1 - n_2 = 2l$. A relação de energia (4.11) torna-se igual a (4.5) com $n = n_2 + l + 1$.

Com a definição dos operadores g , ficam igualmente estabelecidos os estados coerentes como autoestados destes operadores

$$g_1 |z_1 z_2\rangle = z_1 |z_1 z_2\rangle, g_2 |z_1 z_2\rangle = z_2 |z_1 z_2\rangle, \dots$$

Nosso objetivo aqui é estabelecer as vantagens dos estados coerentes de g como uma boa descrição, embora aproximada, de um pacote de onda e sua evolução temporal. Esta evolução será dada, à princípio, por

$$|z_1 z_2[s]\rangle = e^{[-\frac{1}{2}(|z_1|^2 + |z_2|^2)]} \sum_{n_1 n_2}^{\infty} \frac{z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} e^{(i e^2 s_{n_1 n_2} / \hbar)} |n_1 n_2\rangle \quad (4.13)$$

onde $s_{n_1 n_2}$ é o tempo fictício conjugado à pseudo-energia e^2 . O estado (4.13), quando centralizado em grandes valores de n_1 e n_2 , deve corresponder a pacotes evoluindo sobre círculos ou elipses médias.

Independente da forma de $s_{n_1 n_2}$, é possível obter [9] uma forma aproximada da evolução temporal do pacote que só é válida para pacotes que evoluem sobre órbitas circulares (Apêndice C). Para tanto, calculamos os valores de $\langle x_1 \rangle$ e $\langle x_2 \rangle$. Inicialmente, aplicamos uma parametrização sobre os valores de z_1 e z_2

$$\begin{aligned} z_1 &= \gamma \cos \chi e^{-i\Delta} \\ z_2 &= \gamma \sin \chi e^{i\Delta} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Centralizamos (4.13) em um máximo para valores $n_1 = N_1$ e $n_2 = N_2$. Uma primeira aproximação consiste em considerar os estados (4.13) tais que os autovalores obtidos pela aplicação dos operadores g sejam z_1 e z_2 com parâmetro de tempo real aproximado. Isto quer dizer

$$\begin{aligned} g_1 |z_1 z_2\rangle &= \gamma \cos \chi e^{-i(\Delta + \omega t)} |z_1 z_2\rangle \\ g_2 |z_1 z_2\rangle &= \gamma \sin \chi e^{i(\Delta - \omega t)} |z_1 z_2\rangle \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde denotamos $\omega = 2E_0/\hbar\gamma^6$, com $E_0 = 2me^4/\hbar^2$. Usando a relação de Stirling (C.3), encontramos máximos de $|z_1|^{n_1}|z_2|^{n_2}/\sqrt{n_1!n_2!}$ para valores

$$N_1 = \gamma^2 \cos^2 \chi$$

$$N_2 = \gamma^2 \sin^2 \chi$$

Assim $N_1 + N_2 = \gamma^2$. Expandimos a energia (4.5) em torno de N_1 e N_2

$$E \cong -\frac{E_0}{(n_1 + n_2)^2} \simeq -\frac{E_0}{\gamma^4} + \hbar\omega(\delta_1 + \delta_2), \quad n_1 = N_1 + \delta_1 \quad n_2 = N_2 + \delta_2 \quad (4.16)$$

até primeira ordem com $\omega = \frac{4E_0}{\hbar\gamma^6}$. É importante frisar que a aproximação (4.16) só é válida como primeira aproximação, pois a evolução dos estados (4.13) é determinada pelo tempo fictício s . Trocamos, assim, os coeficientes de evolução $\exp(i e^2 s_{n_1 n_2} / \hbar)$ por $\exp(-i E_{aprox} t / \hbar)$. Calculamos os valores médios de x_1, x_2 e r pela aplicação dos operadores

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2\eta^2} (g_1^2 + g_2^{\dagger 2} + g_1 g_2^\dagger + g_2^\dagger g_1 + g_1^{\dagger 2} + g_2^2 + g_1^\dagger g_2 + g_2 g_1^\dagger) \\ x_2 &= \frac{i}{2\eta^2} (g_1^2 - g_1^{\dagger 2} + g_2^{\dagger 2} - g_2^2 + g_1 g_2^\dagger - g_1^\dagger g_2 + g_2^\dagger g_1 - g_2 g_1^\dagger) \\ r &= \frac{1}{\eta^2} (g_1 + g_2^\dagger)(g_1^\dagger + g_2) \end{aligned} \quad (4.17)$$

com os quais obtemos (Apêndice C)

$$\begin{aligned} \langle x_1 \rangle &\cong \frac{\gamma^2}{\eta^2} [\cos 2\Delta (\cos 2\omega t + \sin 2\chi) - \cos 2\chi \sin 2\Delta \sin 2\omega t] \\ \langle x_2 \rangle &\cong \frac{\gamma^2}{\eta^2} [\sin 2\Delta (\cos 2\omega t + \sin 2\chi) + \cos 2\chi \cos 2\Delta \sin 2\omega t] \\ \langle r \rangle &\cong \frac{\gamma^2}{\eta^2} [1 + \sin \chi \cos 2\omega t] \end{aligned} \quad (4.18)$$

As equações (4.18) podem ser ligadas pela relação

$$\frac{[\langle x_1 \rangle - (\gamma^2/\eta^2) \sin 2\chi]^2}{(\gamma^2/\eta^2)^2} + \frac{\langle x_2 \rangle^2}{[(\gamma^2/\eta^2) \cos 2\chi]^2} = 1 \quad (4.19)$$

A relação acima é a equação de uma elipse com sistema de coordenadas centrado no foco. Se descrevermos uma elipse com equação $x'^2/a^2 + y'^2/b^2 = 1$

em um sistema (x, y) com centro trasladado de $a\epsilon$ e girado de $\alpha = -2\Delta$, temos (Aoêndice C)

$$x = a\cos\alpha(\cos\theta + a\epsilon) + b\sin\alpha\sin\theta$$

$$y = -a\sin\alpha(\cos\theta + a\epsilon) + b\cos\alpha\sin\theta$$

precisamente as relações (4.18) para x_1 e x_2 , através das quais resulta a excentricidade da elipse ser dada por $\epsilon = \sin 2\chi$ e o semi-eixo maior $a = \gamma^2/\eta^2$ e menor $b = \gamma^2/\eta^2 \cos 2\chi$.

Os estados coerentes de g permitem, desta maneira, a obtenção do comportamento clássico, conforme manda o princípio de correspondência. O comportamento detalhado do pacote (o que inclui o aparecimento de deformações e Revivals) só pode ser obtido, com essa transformação, pela aplicação correta da evolução segundo o tempo fictício s . O reescalamento do tempo $dt/ds = r$ introduz dificuldades que são resolvidas classicamente notando-se que s é proporcional à conhecida anomalia excêntrica U da Mecânica Celeste [18]. Esta grandeza é expressa na conhecida equação de Kepler do movimento planetário.

$$t = \sqrt{\frac{ma^3}{e^2}}(U - \epsilon \sin U) \quad (4.20)$$

onde a é o semi-eixo maior. Pela equação anterior

$$\frac{dt}{dU} = \sqrt{ma/e^2} \quad r \quad (4.21)$$

pelo que $U = \sqrt{e^2/ma} s$. A evolução temporal aproximada feita acima tem maior validade para o caso em que a correspondente órbita clássica é circular, ou seja, quando $\chi = 0$. Neste caso o estado coerente correspondente pode ser escrito

$$|z, 0, t\rangle = \exp(-\gamma^2/2) \sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{z_1^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \exp(-iE_{n_1}t/h) |n_1, 0\rangle \quad (4.22)$$

representando, aproximadamente um “estado coerente de Coulomb” e descrevendo um pacote centrado em níveis quânticos elevados evoluindo sobre órbita clássica circular. A expressão (4.22) não é exata, entretanto. Podemos, agora, calcular o valor médio de x_1 , x_2 e r usando as expressões

operatoriais (4.17) para o pacote $|z, 0, t\rangle$. Para x_1 temos elementos de matriz

$$\langle 0, m|x|n, 0\rangle = \frac{1}{2\eta^2} [\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(b+2)}\delta_{m,n+2}]$$

com isso (Apêndice C)

$$\langle x_1 \rangle = \frac{|z_1|^2}{\eta^2} e^{-\gamma^2} \sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{|z_1|^2}{n_1!} \cos\left[\frac{(E_{n_1+2} - E_{n_1})}{\hbar} t - 2\Delta\right] \quad (4.23)$$

Lembrando-se que $n_1 - n_2 = 2l$ ($l=1,2,3,\dots$) e $n_2 = 0$ temos a relação de energia

$$E_{2l} = -\frac{2me^4}{\hbar^2(n_1+1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(l+1/2)^2}$$

com a qual podemos escrever

$$\langle x_1 \rangle = \frac{|z_1|^2}{\eta^2} e^{-\gamma^2} \sum_{l=0,1,2,\dots}^{\infty} \frac{|z_1|^{4l}}{(2l)!} \cos\left[\frac{(E_{2l+1} - E_{2l})}{\hbar} t - 2\Delta\right] \quad (4.24)$$

A relação anterior pode ser comparada a (1.18). Formalmente, estas duas relações são semelhantes. Este resultado mostra o que já se esperava, o estado (4.22) apresenta as mesmas propriedades dos estados “circulares” de Brown desenvolvidos no Capítulo 1. Se temos $|z_1|^{4l}/(2l)!$ suficientemente localizado, de forma que a soma infinita de estados $|n_1, 0\rangle$ possa ser substituída por um conjunto limitado, obtemos a destruição do pacote, com sua respectiva formação após o tempo característico T_{rev} , além dos revivals fracionários. O resultado (4.24) é consequência das semelhanças que existem entre os sistemas H2D e H3D, bem como das propriedades da transformação KS complexa usada.

4.3 Limite com contínuo de níveis

Se admitirmos uma localização do pacote ao redor de valores extremamente elevados de n_1 , de forma que podemos substituir a soma (4.23) por uma integral em um contínuo (Apêndice D), podemos estudar o comportamento do pacotes para grandes tempos ($t \gg T_{rev}$). Usando a fórmula de Stirling, escrevemos

$$\frac{|z_1|^n}{\sqrt{n!}} = \exp\left[\frac{1}{2}\left(\gamma^2 - \frac{\nu^2}{2\gamma^2}\right)\right]$$

com $\nu = n - \gamma^2$. Por isso,

$$|z, 0, 0\rangle = \frac{1}{(2\pi\gamma^2)^{1/4}} \exp(-\gamma^2/2) \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \exp(-\frac{\nu^2}{4\gamma^2}) |\gamma^2 + \nu, 0\rangle \quad (4.25)$$

A evolução temporal é obtida com a expansão de energia até segunda ordem

$$E \simeq -\frac{E_o}{\gamma^4} + \hbar\omega\nu - \frac{3\hbar\omega\nu^2}{2\gamma^2} \quad (4.26)$$

O limite é

$$|z, 0, t\rangle = (2\pi\gamma^2)^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\frac{\nu^2}{4\gamma^2} + \omega\hbar\nu t + i\frac{3\hbar\omega\nu^2 t}{2\gamma^2}) |\gamma^2 + \nu, 0\rangle d\nu \quad (4.27)$$

Para $\langle x_1 \rangle$ temos

$$\langle x_1 \rangle = \frac{1}{\eta^2} \exp(-\frac{18\omega^2 t^2}{\gamma^2} - \frac{1}{2\gamma^2})(\gamma^2 \cos 2\omega t + 6\omega t \sin 2\omega t) \quad (4.28)$$

O resultado indica que os termos de ordem superior da expansão de energia, na verdade, o termo de segunda ordem, contribuem, no limite de níveis contínuos, para a destruição irreversível do pacote. Nandi e Shastri [9] observaram que o período de deformação é, entretanto, muito maior que o tempo de decaimento por instabilidade eletrodinâmica de um tal estado excitado.

O resultado acima, poderia ter sido obtido diretamente dos valores médios calculados através das funções de Brown (1.18), notando-se que $\omega_{cl} = 2\omega$ e $\omega_{cl} = 2E_o/\hbar t^3$ e usando o fato de

$$\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k+1)^2} = \frac{1}{l^2} \left[\frac{2}{l} - \frac{(6k+3)}{l^2} + \frac{12k(k+1)+4}{l^3} - \dots \right] \quad (4.29)$$

O decaimento exponencial é o resultado do cancelamento provocado por termos de ordem superior no limite considerado. A descrição do comportamento de um pacote quanto ao fenômeno de Revival é importante o número de funções integrantes desse pacote. Se temos apenas dois níveis, não há nenhuma deformação ou reformação, apenas uma oscilação do tipo Rabi entre esses dois níveis, na frequência dada pela diferença de energia. Essa frequência, no limite semiclássico, é a própria frequência de Kepler. Com três níveis, já vimos (Capítulo 1) que a evolução temporal é harmônica, porém com amplitudes dependentes do período de Revival como

em um batimento. Com mais níveis, somamos cossenos para $\langle x_1 \rangle$ e obtemos uma evolução temporal que segue a frequência clássica ω_{cl} na média, com reformação do pacote em T_{rev} e eventos intermediários [14]. Quando consideramos o limite de contínuos de níveis e correções de frequência de evolução temporal, existe uma distribuição irreversível do pacote ao longo da órbita em um tempo dado por

$$T_d = \frac{1}{3\pi} \sqrt{l} T_{kp} \quad (4.30)$$

onde T_{kp} é o período de Kepler. Após esse tempo, encontramos uma distribuição uniforme de probabilidade ao longo da órbita. No capítulo seguinte, iniciamos um breve estudo das integrais de trajetória do Hidrogênio através da transformação KS, onde veremos as complicações geradas pelo tempo fictício.

Capítulo 5

O propagador do Hidrogênio e a transformação KS

5.1 *Integrais de trajetória para o Hidrogênio.*

Até o presente momento, uma tradução completa em Mecânica Quântica do significado do tempo fictício s introduzido pela transformação KS não foi feita. A questão tem origem na própria definição do passo deste tempo :

$$ds = \frac{dt}{r(t)}$$

Classicamente, se temos um relógio R_t que mede o tempo real com um intervalo Δt constante, o “relógio de tempo fictício” R_s será regulado de tal forma que seus intervalos sejam calculados pela regra $\Delta s = \Delta t/r(t)$. Isto significa que o relógio s corre mais lentamente nas regiões próximas à origem, parando de funcionar nesta. Em termos quânticos, temos um pro' lema real a tratar, uma vez que o “relógio quântico de tempo fictício” será obrigado a fazer, incessantemente, medidas sobre o sistema, a cada intervalo de tempo Δt , a fim de determinar a posição $r(t)$ e calcular seu tempo próprio s . Mas aqui temos a grave questão da imprecisão de r e, neste caso, somos obrigados a falar de uma conseqüente imprecisão no tempo de R_s . Por tal raciocínio, associamos um caráter operatorial ao tempo fictício, que vai complicar o tratamento da evolução temporal de estados escritos na representação da transformação KS.

A princípio, podemos pensar na possibilidade de se fazer a propagação em tempo s por meio de integrais de trajetória. A motivação fundamental ao método prende-se à maneira como se calcula a propagação nesse formalismo. Seja $\Psi(\vec{x}, 0)$ a função de onda no tempo $t = 0$ no ponto \vec{x} e $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$ o kernel ou integral de trajetória para o Hidrogênio, então a função de onda propagada de t no ponto \vec{x}' pode ser escrita como

$$\Psi(\vec{x}', t) = \int K(\vec{x}', \vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, 0) d\vec{x} \quad (5.1)$$

Tudo o que temos a fazer é calcular o objeto $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$.

No problema transformado, temos em mãos um novo espaço (para métrico) e um novo tempo s . Sendo $\Psi(\vec{u}, 0)$ a função de onda inicial no espaço paramétrico U^2 (bidimensional por simplicidade), podemos, formalmente e semelhantemente, escrever

$$\Psi(\vec{u}', s) = \int K_u(\vec{u}', \vec{u}, s) \Psi(\vec{u}, 0) d^2\vec{u} \quad (5.2)$$

onde $K_u(\vec{u}', \vec{u}, s)$ é o kernel transformado e $\Psi(\vec{u}', s)$ é a função propagada segundo o tempo fictício no espaço transformado. Entretanto, a simples obtenção de $\Psi(\vec{u}', s)$ não resolve o problema, temos que saber derivar, a partir deste resultado, a função correspondente $\Psi(\vec{x}', t)$. Em termos representativos, devemos fazer a conexão

$$\Psi(\vec{u}, s) \longrightarrow \Psi(\vec{x}, t)$$

que chamaremos de conexão $U - X$. Esta pode ser vista como uma espécie de operador que, agindo sobre uma função do espaço paramétrico definida para um tempo s , torna a função do espaço real no tempo t correspondente.

Antes de estabelecermos a forma de $U - X$, devemos aqui algumas considerações sobre o kernel $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$. Da definição conhecida de integral de trajetória [19], soma ponderada sobre todas as trajetórias possíveis ao sistema com pesos correspondentes à ação associada à cada trajetória, temos que $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$ deve conter informação de todos os estados possíveis ao sistema, o que, para o Hidrogênio, inclui níveis não ligados. No problema que estudamos, vamos, entretanto, limitar nosso espaço de Hilbert de forma a tratar somente dos estados ligados. Assim o kernel, tanto para o espaço real como para o espaço paramétrico, é considerado apenas para as trajetórias compatíveis como os estados ligados do elétron. Lembramos que estamos interessados apenas na dinâmica de estados ligados.

No tratamento que segue, consideramos um átomo de Hidrogênio bidimensional. O kernel do espaço paramétrico é, obviamente, a integral de trajetória do oscilador harmônico bidimensional [7, 20]. A conexão entre as duas representações pode ser feita pela correspondente função de Green [20].

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \int_0^\infty K(\vec{x}', \vec{x}, t) e^{iEt/\hbar} dt \quad (5.3)$$

onde E é a energia. Escrevendo-se $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$ como função do tempo fictício s da definição (2.14)

$$K(\vec{x}', \vec{x}, t) = \int_0^\infty \delta(t - \int_0^s r ds) K(\vec{x}', \vec{x}, s) r' ds \quad (5.4)$$

podemos escrever, introduzindo-se (5.4) em (5.3)

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \int_0^\infty P(\vec{x}', \vec{x}, s) e^{ie^2 s/\hbar} ds \quad (5.5)$$

onde $P(\vec{x}', \vec{x}, s)$ é chamado de promotor [8]

$$P(\vec{x}', \vec{x}, s) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^N \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 x_j}{r_j} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{m \Delta^2 x_j}{2sr_j} + sEr_j \right) \right] \quad (5.6)$$

Aplicando-se a transformação KS sobre $P(\vec{x}', \vec{x}, s)$, só podemos obter a correspondente $K(\vec{u}', \vec{u}, s)$, o kernel transformado. Assim

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \frac{1}{4} \int_0^\infty K(\vec{u}', \vec{u}, s) e^{ie^2 s/\hbar} ds \quad (5.7)$$

Como $G(\vec{x}', \vec{x}, t)$ é a transformada de Fourier de $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$ (5.3), podemos escrever a conexão $U - X$ entre os kernels na forma

$$K(\vec{x}', \vec{x}, t) = \frac{1}{4} \int_0^\infty \int_0^\infty K(\vec{u}', \vec{u}, s) e^{i(e^2 s - Et)/\hbar} dE ds \quad (5.8)$$

A conexão para a função de onda é escrita aplicando-se (5.8) em (5.1)

$$\Psi(\vec{x}', t) = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{i(e^2 s - Et)/\hbar} \tilde{\Psi}(\vec{u}', s) dE ds \quad (5.9)$$

onde

$$\tilde{\Psi}(\vec{u}', s) = \int K(\vec{u}', \vec{u}, s) \Psi(\vec{u}, 0) u^2 d^2 u \quad (5.10)$$

aqui usamos o fato de o jacobiano da transformação ser $4(u_1 + u_2)$, obtido da transformação KS bidimensional (Apêndice E)

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & -u_2 \\ u_2 & u_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad dt = r ds \quad r = u_1^2 + u_2^2 \quad (5.11)$$

A equação (5.9) constitui um esquema formal para o cálculo da propagação de uma função de onda via tempo fictício. Algumas observações são, todavia, necessárias. Na equação (5.9), o kernel é a conhecida forma [19] (Apêndice E)

$$K(\vec{u}', \vec{u}, s) = \frac{M\omega}{2\pi i \hbar s \sin \omega s} \exp\left\{ \frac{iM\omega}{2\hbar s \sin \omega s} [(u'^2 + u^2) \cos \omega s - 2\vec{u}' \cdot \vec{u}] \right\} \quad (5.12)$$

que é o propagador do oscilador harmônico escrito em termos das coordenadas KS bidimensionais reais, onde $M = 4m$, m a massa do elétron, e $\omega = \omega(E)$ a frequência definida pela transformação (3.12). Entretanto, desde que se considere o problema original, ω tem uma dependência explícita com a energia. Neste sentido, uma questão importante é a do significado da expansão espectral de (5.12). Segundo a equação de Schrödinger independente do tempo, obtida pela aplicação de (5.11) segundo descrito no Capítulo 2

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_u^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 \right) \Psi_u = e^2 \Psi_u$$

com $\omega = \sqrt{2|E|/M}$ vemos que, fixando-se um valor de ω , um conjunto infinito de funções é solução desta equação, que são os polinômios de Hermite já conhecidos. Entretanto, tais soluções não são físicas, no sentido de não corresponderem à solução do problema de Coulomb. O truque da transformação KS pode levar a se esquecer deste fato. Admitindo-se uma quantização dos valores de ω (que corresponde à equação dos níveis de energia do Hidrogênio), restringimos o conjunto de funções solução, com cada valor de ω quantizado correspondendo a apenas uma autofunção. E as podem ser ditas como sendo autofunções do “operador frequência ao quadrado”. Retomando à decomposição espectral, posto que podemos escrever (5.12) na forma

$$K(\vec{u}', \vec{u}, s) = \sum_{n_1 n_2} \Psi_{n_1}^*(u_1) \Psi_{n_1}(u'_1) \Psi_{n_2}^*(u_2) \Psi_{n_2}(u'_2) e^{-i\omega(n_1+n_2+1)s} \quad (5.13)$$

onde Ψ_{n_1} e Ψ_{n_2} são autofunções do problema do oscilador, notamos que esta não contém nenhuma informação quanto à frequência. De fato, a frequência

é, na realidade, um parâmetro livre e as autofunções em (5.13) incluem tanto as autofunções reais transformadas do Hidrogênio como as soluções puramente formais. A redução à forma espectral do Hidrogênio (decomposição espectral de $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$) pode, em princípio, ser obtida aplicando-se (5.13) na forma (5.8). Como ω é tomado livre, a integral em tempo fictício resulta na equação para os níveis de energia e em uma função delta que torna automática a integral em energia. A forma resultante

$$K(\vec{u}', \vec{u}, t) = \frac{Me^2}{2\hbar^2} \sum_{n_1 n_2} \frac{\Psi_{n_1}^*(u_1) \Psi_{n_1}(u'_1) \Psi_{n_2}^*(u_2) \Psi_{n_2}(u'_2)}{(n_1 + n_2 + 1)^2} e^{-iE_{n_1 n_2} t / \hbar} \quad (5.14)$$

com

$$E_{n_1 n_2} = \frac{Me^4}{2\hbar(n_1 + n_2 + 1)^2}$$

é uma relação híbrida, onde ainda deve se aplicar a transformação KS bidimensional inversa para se obter $K(\vec{x}', \vec{x}, t)$. Tal transformação não é a simples aplicação do mapa inverso de (5.11), mas um processo muito mais complexo, que envolve a combinação das funções (5.15) de forma a se obter as autofunções do Hidrogênio (polinômios de Laguerre na parte radial). Partindo-se, porém, das relações

$$K(\vec{x}', \vec{x}, t) = \sum_{n,l} \psi_{nl}(\vec{r}') \psi_{nl}^*(\vec{r}) e^{-iE_n t / \hbar} \quad (5.15)$$

onde $\psi_{nl}(\vec{r})$ é dado por (4.4) e as funções transformadas $\Psi_n(u)$ são dadas por

$$\Psi_n(u) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{e^{-\varrho^2/2}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\varrho), \quad \varrho = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} u \quad (5.16)$$

podemos escrever os kernels $K(\vec{u}', \vec{u}, t) = K_u$ e $K(\vec{x}', \vec{x}, t) = K_r$

$$K_u = \sum_{n_1=0, n_2=0}^{\infty} e^{[-\beta n_1 (\frac{r'_1+r_1}{2})]} e^{-i \frac{E_{n_1}}{\hbar} t} \frac{H_{n_1}(u_1) H_{n_2}(u_2) H_{n_1}(u'_1) H_{n_2}(u'_2)}{2^{n_1+n_2} n_1! n_2!} \quad (5.17)$$

$$K_r = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=-(n-1)}^{n-1} e^{[-\beta n (\frac{r'_r+r_r}{2})]} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \quad (5.18)$$

$$\frac{(n - |l| - 1)!}{(n + |l| - 1)!} \mathcal{L}_{n+|l|-1}^{2|l|}(\beta r') \mathcal{L}_{n+|l|-1}^{2|l|}(\beta r) e^{i l (\phi' - \phi)} (r' r)^{|l|}$$

onde $n_1 + n_2 = 2n - 1$ para K_r . Constitui um bom exercício de Matemática a conversão completa de (5.17) em (5.18).

Retornando-se à aplicação da fórmula (5.9) devemos representar

$$\tilde{\Psi}(\vec{u}', s) = \int K_\omega(\vec{u}', \vec{u}, s) \Psi_{\bar{\omega}}(\vec{u}, 0) u^2 d^2u \quad (5.19)$$

onde $\bar{\omega}$ é o autovalor correspondente de $\Psi_{\bar{\omega}}(\vec{u}, 0)$. Note que $\tilde{\Psi}(\vec{u}', s)$ depende de E via ω . Antes de percebermos a distinção entre ω e $\bar{\omega}$, realizamos a integração em u de (5.10) para o primeiro e segundo estado do Hidrogênio. O resultado não permite que se tire nenhuma conclusão. As contas são tediosas e não trataremos aqui. A aplicação correta de (5.19) para o primeiro nível é também bastante embaraçada, mas o resultado $\tilde{\Psi}(u', s)$ permite se concluir que a integração completa de (5.9) não é factível. De fato, a função do primeiro nível

$$\Psi_{\bar{\omega}}(\vec{u}, 0) \propto \exp\left[-\frac{2me^2}{\hbar^2}(u_1^2 + u_2^2)\right]$$

em (5.9) por (5.12) resulta

$$\tilde{\Psi}(\vec{u}', s) = \frac{M^2\omega}{2\pi i \hbar s \sin\omega s} \frac{c^2}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{iM\omega}{2\hbar s \sin\omega s}(u_1'^2 + u_2'^2) \cos\omega s\right] I_{u_1} I_{u_2} + (5.20)$$

+ termos trocados em u_1 e u_2

onde I_{u_1} e I_{u_2} são dados pela integral

$$I_u = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\left(\frac{iM\omega}{2\hbar s \sin\omega s} \cos\omega s - \frac{2me^2}{\hbar^2}\right)u^2 - 2u'u\right] u^2 du \quad (5.21)$$

Esta integral pode ser calculada a partir de

$$I = \frac{1}{4\gamma^2} \frac{\partial^2 \mathcal{I}}{\partial \lambda^2}$$

onde

$$\mathcal{I} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[(i\alpha - \beta)u^2 - 2\gamma\lambda u] u^2 du \quad (5.22)$$

assim obtemos

$$I = \frac{\sqrt{\pi}}{(\alpha^2 + \beta^2)^{1/4}} \left[\frac{2\beta\gamma\lambda(\alpha + \beta)}{(\alpha^2 + \beta^2)^2} - \frac{2\gamma^2\lambda^2 - (\alpha + \beta)}{2(\alpha^2 + \beta^2)} \right] \exp\left(\frac{\beta\gamma^2\lambda^2}{\alpha^2 + \beta^2}\right) \cdot (5.23)$$

$$\exp\left[\frac{i}{2} \arctan\left(\frac{\beta}{\alpha}\right) + \frac{\gamma^2\alpha}{\alpha^2 + \beta^2}\right]$$

identificando os parâmetros e fazendo $\lambda = 1$,

$$\alpha = \frac{M\omega}{2\hbar} \cotg\omega s \quad \beta = \frac{2me^2}{\hbar^2} \quad \gamma = u'$$

é fácil ver que uma posterior integração de (5.23) em s não pode ser expressa por funções elementares (não há integração analítica).

Por outro lado, se tivéssemos, de fato, demonstrado a possibilidade de integração analítica de (5.9), teríamos também, há muito, a relação fechada da integral de trajetória para o Hidrogênio! A derivação desta relação não é tarefa simples. Conforme diz A. Inomata [8]: "...parece que a transformação de tempo não integrável não tem lugar no cálculo de integrais de trajetória". Mais uma vez compreende-se tal dificuldade pela definição do tempo fictício $ds = dt/r(t)$ e do processo de soma sobre trajetórias. Neste processo, deve-se tomar a contribuição de todos os caminhos possíveis nos quais o tempo corre diferentemente.

Não envolvendo o tempo, a função de Green pode ser calculada exatamente [7, 20]. A relação (5.9) permanece, ainda assim, como um meio formal de se obter a propagação temporal. Os estados coerentes bidimensionais da transformação (5.11) têm a forma (Capítulo 5)

$$|w_1 w_2\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|w_1|^2 + |w_2|^2)} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1 n_2\rangle \quad (5.24)$$

onde as autofunções do Hidrogênio são dadas por combinações lineares de

$$\Psi_{\vec{\omega}_n} = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2} \Psi_{n_1 m_2 \vec{\omega}_{m_1 m_2}}, \quad \langle \vec{u} | n_1 m_2 \rangle = \Psi_{n_1 m_2 \vec{\omega}_{m_1 m_2}}(\vec{u}) \quad (5.25)$$

com coeficientes $C_{m_1 m_2}$ obtidos da diagonalização do operador momento angular gerado pela transformação (5.11). Assim

$$\langle \vec{u} | w_1 w_2 \rangle = e^{-\frac{1}{2}|w|^2} \sum_{n_1 n_2} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} \Psi_{n_1 n_2 \vec{\omega}_{n_1 n_2}}(\vec{u}), \quad |w|^2 = |w_1|^2 + |w_2|^2$$

com o que, temos

$$\langle \vec{x} | w_1 w_2, t \rangle = e^{-\frac{1}{2}|w|^2} \sum_{n_1 n_2} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_u^{\infty} e^{i(\epsilon^2 s - Et)/\hbar} K_{\omega}(\vec{u}', \vec{u}, s) \Psi_{n_1 n_2}(\vec{u}, 0) u^2 du_1 du_2 dE ds \quad (5.26)$$

com \vec{u}' , aplicamos a relação (5.11) $\vec{x} = L(\vec{u}')\vec{u}'$. A relação (5.26) constitui a forma propagada completa de um estado coerente formal do Hidrogênio.

Se não podemos tratar o problema regularizado quântico exatamente, podemos, ao menos, tratar o limite semiclássico. Neste limite esperamos reobter as órbitas clássicas, elipses ou circunferências, para uma função de onda suficientemente localizada. A evolução temporal deverá ser segundo o tempo fictício, e uma conexão com o tempo real deverá ser obtida. Este tratamento é feito no capítulo seguinte.

Capítulo 6

O comportamento dinâmico do Hidrogênio no limite clássico

6.1 *O modelo bidimensional*

Já exploramos as propriedades fundamentais da transformação KS bidimensional complexa e uma delas é a preservação da diagonalidade do operador momento angular. Aqui introduziremos a transformação bidimensional não complexa, que resulta numa representação não diagonal para o momento angular, mas que tem a vantagem de deixar o hamiltoniano numa forma idêntica ao hamiltoniano de um oscilador harmônico (3.9) bidimensional. Esta transformação foi aplicada no capítulo anterior (5.11) na obtenção das integrais de trajetória do Hidrogênio.

Aqui também propomos um novo desenvolvimento no estudo do limite semiclassical do Hidrogênio baseado nas transformações U polarizadas. Aplicamos a transformação (5.11)

$$\begin{aligned}x_1 &= u_1^2 - u_2^2 \\x_2 &= 2u_1 u_2 \\u^2 = r &= u_1^2 + u_2^2\end{aligned}\tag{6.1}$$

ou seja, $\vec{x} = L(\vec{u})\vec{u}$. A matriz $L(\vec{u})$ tem as mesmas propriedades da transformação KS para o oscilador quadridimensional (2.21,2.22,2.23), mas não

há condição de vínculo, o que simplifica consideravelmente o problema como já dissemos. Podemos escrever a transformação (6.1) com variáveis polares

$$\begin{aligned} u_1 &= \sqrt{r} \cos \phi / 2 \\ u_2 &= \sqrt{r} \sin \phi / 2 \end{aligned} \quad (6.2)$$

As equações clássicas do movimento evoluem, nas novas coordenadas u_1 e u_2 , segundo a definição de tempo fictício $ds = dt/r(t)$. A equação de Schrödinger transformada é

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_u^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 u^2\right) \Psi_u = e^2 \Psi_u \quad (6.3)$$

com $M = 4m$ e $\omega = \sqrt{2|E|/M}$. A transformação (6.1) tem, como desvantagem, o fato de a base formada pelas autofunções não deixar o operador momento angular L diagonal. Não obstante, mostraremos que tal fato não impede a obtenção do limite semiclássico.

Na equação (6.3), ω^2 atua como um operador, pela sua dependência com a energia. Para a construção de estados coerentes, definimos os operadores escada (3.10) com i igual a 1 e 2 apenas. Para cada nível de energia obtido de (6.3) existe um conjunto de operadores (3.10). Podemos, assim, escrever

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_u^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 u^2 = \hbar \omega (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1) \quad (6.4)$$

com o que temos

$$\omega = \frac{e^2}{\hbar(n_1 + n_2 + 1)} \quad |E| = \frac{2m e^2}{\hbar^2(n_1 + n_2 + 1)^2} \quad (6.5)$$

Definimos um estado coerente pela relação

$$|w_1 w_2 \rangle = e^{-\frac{1}{2}(|w_1|^2 + |w_2|^2)} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1 n_2 \rangle; \langle \omega \rangle \quad (6.6)$$

Para um oscilador harmônico, a dependência com a energia não existe, já que ω é apenas um parâmetro. Esta importante observação não é encontrada na literatura existente sobre o assunto [4, 10, 9]. *Consideraremos o estado (6.6) bem localizado, de forma que, estados componentes com ordem muito diferente da média (máximo), possam ser desprezados.* Por isso, denotamos a dependência com a frequência por $\langle \omega \rangle$ no estado $|n_1 n_2 \rangle$. Essa localizabilidade, que pode ser convenientemente ajustada pela escolha

dos w_1 e w_2 , corresponde à aplicação do princípio de correspondência. Por esse meio, no limite semiclassical, podemos obter os valores esperados para diferentes quantidades dinâmicas.

A energia média

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \langle w_1 w_2 | \hbar \omega (a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1) | w_1 w_2 \rangle = e^2 \quad (6.7)$$

resulta na frequência média

$$\langle \omega \rangle = \frac{e^2}{\hbar (w_1^* w_1 + w_2^* w_2 + 1)} \quad (6.8)$$

e, como $|E| = M\omega^2/2$,

$$\langle |E| \rangle = \frac{M e^4}{2\hbar^2 (w_1^* w_1 + w_2^* w_2 + 1)} \quad (6.9)$$

A posição e momento paramétrico são calculados trivialmente

$$\begin{aligned} \langle u_1 \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\langle \omega \rangle}} (w_1 + w_1^*) & \langle u_2 \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\langle \omega \rangle}} (w_2 + w_2^*) \\ (\Delta u_i)^2 &= \frac{\hbar}{2M\langle \omega \rangle} \\ \langle v_1 \rangle &= -i\sqrt{\frac{M\langle \omega \rangle \hbar}{2}} (w_1 - w_1^*) & \langle v_2 \rangle &= -i\sqrt{\frac{M\langle \omega \rangle \hbar}{2}} (w_2 - w_2^*) \\ (\Delta v_i)^2 &= M\langle \omega \rangle \hbar \\ \Delta u_i \Delta v_j &= \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (6.10)$$

O pacote representado por (6.6) obedece ao princípio de Heisenberg em grau mínimo de incerteza. Observemos, por outro lado, que o cálculo exato dos valores médios de posição e momento poderia ser obtido, operacionalmente, pela substituição direta da dependência da frequência com os operadores escada na definição dos operadores de criação e destruição (3.10). Essas relações podem ser resolvidas para os operadores posição e momento e, embora mais complicadas, resultam numa expressão formal para o cálculo.

6.2 Evolução temporal

A evolução em tempo fictício pode ser feita invocando-se, mais uma vez, o princípio de correspondência. Se tomarmos um estado coerente muito

localizado (dependendo da escolha de coeficientes w_1 e w_2) podemos impor uma evolução temporal em tempo fictício segundo a frequência média $\langle \omega \rangle$. Devido ao estado de alta localizabilidade (limite semiclássico), os níveis relevantes no pacote têm frequência característica não diferindo muito da frequência média. Mostraremos que este raciocínio conduz ao comportamento orbital do pacote esperado pela mecânica clássica. Propomos assim:

$$|w_1 w_2 s \rangle = e^{-\frac{1}{2}(|w_1|^2 + |w_2|^2)} \sum_{n_1 n_2} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} e^{-i\langle \omega \rangle (n_1 + n_2 + 1)s} |n_1 n_2 \rangle \quad (6.11)$$

As posições paramétricas tornam-se assim

$$\begin{aligned} \langle u_1 s \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\langle \omega \rangle}} (w_1 e^{-i\langle \omega \rangle s} + w_1^* e^{i\langle \omega \rangle s}) \\ \langle u_2 s \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\langle \omega \rangle}} (w_2 e^{-i\langle \omega \rangle s} + w_2^* e^{i\langle \omega \rangle s}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Escrevendo-se de maneira simplificada, denotaremos $\langle \omega \rangle = \omega$ e

$$\begin{aligned} w_1 &= |w_1| e^{i\gamma_1} \\ w_2 &= |w_2| e^{i\gamma_2} \end{aligned} \quad (6.13)$$

com isso, temos

$$\begin{aligned} \langle u_1 s \rangle &= |w_1| \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega}} \cos(\omega s + \gamma_1) \\ \langle u_2 s \rangle &= |w_2| \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega}} \cos(\omega s + \gamma_2) \end{aligned} \quad (6.14)$$

O sistema (6.14) define uma elipse no plano paramétrico. Escolhemos, por conveniência, $\gamma_1 = 0$ e $\gamma_2 = -\pi/2$ (o que equivale à escolha das coordenadas iniciais do pacote), com o que

$$\begin{aligned} \langle u_1 s \rangle &= 2|w_1| \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \cos \omega s \\ \langle u_2 s \rangle &= 2|w_2| \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \sin \omega s \end{aligned} \quad (6.15)$$

O movimento no plano real é obtido por

$$\langle x_1 \rangle = \langle u_1 \rangle^2 - \langle u_2 \rangle^2 \quad \langle x_2 \rangle = 2 \langle u_1 \rangle \langle u_2 \rangle \quad (6.16)$$

com a ressalva de que $\Delta x_1 \rightarrow 0$, $\Delta x_2 \rightarrow 0$, a medida que $\Delta u_1 \rightarrow 0$ e $\Delta u_2 \rightarrow 0$ com o limite $\hbar \rightarrow 0$. Usando $\cos^2 \omega s = (1 + \cos 2\omega s)/2$ e $\sin^2 \omega s =$

$(1 - \cos\omega s)/2$ temos, da aplicação de (6.16),

$$\begin{aligned} \langle x_1 s \rangle &= \frac{2\hbar}{M\omega} \left[-\frac{|w_1|^2 - |w_2|^2}{2} + \frac{|w_1|^2 + |w_2|^2}{2} \cos 2\omega s \right] \\ \langle x_2 s \rangle &= \frac{2\hbar}{M\omega} |w_1| |w_2| \sin 2\omega s \end{aligned} \quad (6.17)$$

Eliminando a dependência com s temos

$$\left[\frac{\langle x_1 \rangle + \frac{2\hbar}{M\omega} \left(\frac{|w_2|^2 - |w_1|^2}{2} \right)}{\frac{2\hbar}{M\omega} \left(\frac{|w_1|^2 + |w_2|^2}{2} \right)} \right]^2 + \left[\frac{\langle x_2 \rangle}{\frac{2\hbar |w_1| |w_2|}{M\omega}} \right]^2 = 1 \quad (6.18)$$

a equação de uma elipse para o plano real. Os parâmetros da elipse são semi-eixo maior $a = \hbar(|w_1|^2 + |w_2|^2)/M\omega$, semi-eixo menor $b = 2\hbar|w_1||w_2|/M\omega$ e excentricidade $\epsilon = \frac{|w_2|^2 - |w_1|^2}{|w_1|^2 + |w_2|^2}$.

O valor médio de r é calculado de $\langle r \rangle = \langle u_1 \rangle^2 + \langle u_2 \rangle^2$ resultando

$$\langle r \rangle = \frac{\hbar}{M\omega} (|w_1|^2 + |w_2|^2) \left[1 - \left(\frac{|w_2|^2 - |w_1|^2}{|w_1|^2 + |w_2|^2} \right) \cos 2\omega s \right] \quad (6.19)$$

onde $\Delta r \rightarrow 0$ quando $\hbar \rightarrow 0$. Lembrando a definição do tempo fictício, podemos escrever a relação conectando o tempo real t e tempo fictício s , apenas pela integração de (6.19) em s temos

$$t = \frac{a}{2\omega} [2\omega s - \epsilon \sin 2\omega s] \quad (6.20)$$

Reobtemos, assim, a relação clássica de Kepler (4.20), onde identificamos a relação que existe entre o tempo fictício s e a anomalia excêntrica U (4.21). Esta constitui, talvez, a primeira derivação, a partir de princípios puramente quânticos, da equação do movimento puro de Kepler.

O momento angular para o sistema pode ser igualmente calculado na média. Sendo

$$L = \frac{i\hbar}{2} (a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2) \quad (6.21)$$

então

$$\langle L \rangle = |w_1| |w_2| \hbar \sin(\gamma_2 - \gamma_1) \quad (6.22)$$

aplicando-se os parâmetros $\gamma_1 = 0$ e $\gamma_2 = \pi/2$

$$\langle L \rangle = |w_1| |w_2| \hbar \quad (6.23)$$

se $\gamma_1 = \gamma_2$, então $\langle L \rangle = 0$, caso em que o movimento é unidimensional.

6.3 Caso tridimensional

Para o caso tridimensional, generalizamos os resultados anteriores por meio da transformação (2.20) $\vec{x} = L(\vec{u})\vec{u}$ no espaço paramétrico U^4 . O fato de o operador momento angular não ser diagonal nesta representação não traz embaraços na obtenção do limite clássico. A equação de Schrödinger transformada (3.7)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_u^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 u^2 - \frac{\mathcal{X}^2}{4u^2}\right)\Psi_u = e^2\Psi_u \quad (6.24)$$

e a definição de operadores criação e destruição (3.10) permitem, também, a definição de estados coerentes

$$|w\rangle = e^{-\frac{1}{2}|w|^2} \sum_{[n]} \frac{w_1^{n_1} w_2^{n_2} w_3^{n_3} w_4^{n_4}}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! n_4!}} |n_1 n_2 n_3 n_4\rangle \quad (6.25)$$

onde por $[n]$ entendemos o conjunto de números n_1, n_2, n_3 e n_4 que começam todos nulos e $|w|^2 = |w_1|^2 + |w_2|^2 + |w_3|^2 + |w_4|^2$. O estado coerente $|w\rangle$ tem as mesmas propriedades que o estado bidimensional (6.6) com respeito à incerteza e valores médios (6.10), porém deve também satisfazer ao vínculo devido ao operador \mathcal{X}

$$w_2^* w_1 - w_1^* w_2 + w_3^* w_4 - w_4^* w_3 = 0 \quad (6.26)$$

que é obtido de

$$\langle \mathcal{X} \rangle = 0 \quad (6.27)$$

Para a evolução temporal, admitimos o mesmo argumento de localizabilidade do pacote (6.25) e aplicamos o fator de propagação temporal $\exp[-i\langle\omega\rangle s(n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + 2)]$, onde

$$\langle\omega\rangle = \frac{\epsilon^2}{\hbar(w_1^* w_1 + w_2^* w_2 + w_3^* w_3 + w_4^* w_4)} \quad (6.28)$$

Com isso, temos os valores médios das variáveis paramétricas

$$\langle u_i \cdot s \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\langle\omega\rangle}} (w_i^* e^{-i\langle\omega\rangle s} + w_i e^{i\langle\omega\rangle s}) \quad (6.29)$$

com i igual a 1, 2, 3 e 4. Se fizermos

$$w_i = \alpha_i + i\beta_i = |w_i|e^{i\gamma_i} \quad (6.30)$$

temos

$$\langle u_i, s \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{M \langle \omega \rangle}} (\alpha_i \cos \langle \omega \rangle s - \beta_i \sin \langle \omega \rangle s) \quad (6.31)$$

ou usando a notação de vetores

$$\langle \vec{u}, s \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{M \langle \omega \rangle}} (\vec{\alpha} \cos \langle \omega \rangle s - \vec{\beta} \sin \langle \omega \rangle s) \quad (6.32)$$

O movimento resultante no espaço paramétrico é o de oscilador harmônico restrito ao vínculo. Tomando $\vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} = 0$, o que equivale à escolha de condições iniciais, podemos calcular $\langle r(s) \rangle = \langle u_1, s \rangle^2 + \langle u_2, s \rangle^2 + \langle u_3, s \rangle^2 + \langle u_4, s \rangle^2$, resultando

$$\begin{aligned} \langle r(s) \rangle &= \frac{2\hbar}{M\omega} [\alpha^2 \cos^2 \langle \omega \rangle s + \beta^2 \sin^2 \langle \omega \rangle s] = \\ & \frac{2\hbar}{M\langle \omega \rangle} \left[\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} - \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2} \right) \cos 2 \langle \omega \rangle s \right] \end{aligned} \quad (6.33)$$

Comparando-se com a equação em r de uma elipse $r = a(1 - \epsilon \cos U)$, podemos obter os parâmetros da elipse no espaço X^3 , semi-eixo maior $a = \hbar(\alpha^2 + \beta^2)/M \langle \omega \rangle$ e excentricidade $\epsilon = (\beta^2 - \alpha^2)/\alpha^2 + \beta^2$. Pela integração de (6.33) em s temos, novamente, a equação de Kepler

$$\begin{aligned} t &= \frac{\hbar(\alpha^2 + \beta^2)}{M\langle \omega \rangle} \int_0^s \left[1 - \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2 + \beta^2} \right) \cos 2 \langle \omega \rangle s' \right] ds' = \\ & \frac{a}{2\langle \omega \rangle} [U - \epsilon \sin U] \end{aligned} \quad (6.34)$$

onde $U = 2 \langle \omega \rangle s$ é a anomalia excêntrica.

6.4 Evolução temporal com frequência dependente da energia

O cálculo de evolução fictícia realizado aqui resultou no limite clássico esperado para os valores médios das quantidades dinâmicas que caracterizam o movimento. Em vista das suposições feitas na localização do pacote que justificaram a aplicação do fator de evolução de um oscilador harmônico, nenhuma informação sobre a forma do pacote coerente pode ser obtida. Para tanto temos de levar em conta a forma particular com que cada autoestado componente do pacote evolui. Podemos introduzir esta forma particular

de evolução diretamente sobre a frequência. Aqui propomos, com o fim de se provar de uma maneira semi-quantitativa a deformação do pacote, uma evolução temporal para o átomo bidimensional que leve em conta a dependência da frequência. Para maior simplicidade nos cálculos, tomamos o limite do contínuo de níveis, onde um estado coerente simples $|z\rangle$, de apenas uma variável pode ser escrito

$$|z\rangle = \frac{1}{(\pi N)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\nu^2}{2N}\right) |\nu + N\rangle d\nu \quad (6.35)$$

onde a exponencial representa uma distribuição gaussiana centrada em N (aqui $\nu = n - N$). Faremos uma expansão no valor médio da frequência de modo a levar em conta a dependência desta com a particular distribuição de níveis de energia do Hidrogênio. Notamos, entretanto, que, a princípio, essa dependência deve ser assinalada também aos estados componentes do pacote (6.11). Aqui, entretanto, por simplicidade desprezaremos tal dependência e, em nosso cálculo aproximado, é suficiente lembrar que admitiremos uma correção pequena na frequência média principal. Dessa forma, garantiremos e simplificamos em muito a possibilidade do cálculo das variáveis dinâmicas do sistema, permitindo uma análise do comportamento deste.

Assim, uma vez que a frequência média é dada por

$$\omega_0 = \langle \omega \rangle = \frac{e^2}{h(w_1^* w_1 + w_2^* w_2)} \quad (6.36)$$

usamos a relação exata de frequência

$$\omega = \frac{e^2}{h(n_1 + n_2 + 1)} \quad (6.37)$$

expandida em torno dos valores que caracterizam a média $|w_1|^2 \simeq N_1$, $|w_2|^2 \simeq N_2$ (no limite $\hbar \rightarrow 0$)

$$\omega \simeq \omega_0 + \frac{\partial \omega}{\partial n_1} (n_1 - N_1) + \frac{\partial \omega}{\partial n_2} (n_2 - N_2) \quad (6.38)$$

pelo que

$$\omega \simeq \frac{e^2}{h(w_1^* w_1 + w_2^* w_2)} - \frac{e^2}{h(w_1^* w_1 + w_2^* w_2)^2} [(n_1 - N_1) + (n_2 - N_2)] \quad (6.39)$$

Introduzimos a notação $\Omega = e^2/\hbar(w_1^*w_1 + w_2^*w_2)^2$, com o que o fator de evolução temporal com frequência dependente da energia pode ser escrito

$$\begin{aligned} \exp[-\omega s(n_1 + n_2 + 1)] &= \exp[-\omega_0 s(n_1 + n_2 + 1) + \\ &+ i\Omega s(n_1 + n_2 + 1)(n_1 - N_1 + n_2 - N_2)] \end{aligned} \quad (6.40)$$

Em $s=0$, o pacote coerente no limite de níveis contínuos é

$$|w_1 w_2 \rangle = \left(\frac{1}{\pi^2 N_1 N_2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{[-\frac{\nu_1^2}{2N_1} - \frac{\nu_2^2}{2N_2}]} |\nu_1 + N_1, \nu_2 + N_2 \rangle d\nu_1 d\nu_2 \quad (6.41)$$

com $\nu_1 = n_1 - N_1$ e $\nu_2 = n_2 - N_2$. Por meio de (6.40) temos

$$\begin{aligned} |w_1 w_2, s \rangle &= \left(\frac{1}{\pi^2 N_1 N_2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\frac{\nu_1^2}{2N_1} - \frac{\nu_2^2}{2N_2} + i(\nu_1 + N_1)\gamma_1 + \\ &+ i(\nu_2 + N_2)\gamma_2 - \omega_0 s(\nu_1 + \nu_2 + N_1 + N_2 + 1) + \\ &+ i\Omega s(\nu_1 + \nu_2)(\nu_1 + \nu_2 + N_1 + N_2 + 1)] |\nu_1 + N_1, \nu_2 + N_2 \rangle d\nu_1 d\nu_2 \end{aligned} \quad (6.42)$$

representando um estado coerente propagado em tempo fictício no limite do contínuo de níveis. Em (6.42), usamos $w_1 = |w_1|e^{i\gamma_1}$ e $w_2 = |w_2|e^{i\gamma_2}$. Calculamos os valores médios de u_1 e u_2 . Na realidade, só precisamos do cálculo de u_1 já que o cálculo para u_2 é idêntico. Como $u_1 = \sqrt{\hbar/2M\omega}(a_1 + a_1^\dagger)$ temos

$$\begin{aligned} \langle u_1 \rangle &\cong \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0\pi^2 N_1 N_2}} \int \int \int \int \exp[-\frac{(\nu_1^2 + \nu_1'^2)}{2N_1} - \frac{(\nu_2^2 + \nu_2'^2)}{2N_2} \\ &+ i(\nu_1 - \nu_1')\gamma_1 + i(\nu_2 - \nu_2')\gamma_2 - \omega_0 s(\nu_1 - \nu_1' + \nu_2 - \nu_2') + \\ &+ i\Omega s[(\nu_1^2 - \nu_1'^2) + (\nu_1 - \nu_1')(N_1 + N_2) + 2(\nu_1\nu_2 - \nu_1'\nu_2') + \\ &+ (\nu_2 - \nu_2')(N_1 + N_2)]] \sqrt{\nu_1 + N_1} \delta(\nu_2 - \nu_2') \\ &(\delta(\nu_1' - \nu_1 + 1) + \delta(\nu_1' - \nu_1 - 1)) d\nu_1 d\nu_1' d\nu_2 d\nu_2' \end{aligned} \quad (6.43)$$

Fazendo-se as integrais das funções delta, temos

$$\begin{aligned} \langle u_1(s) \rangle &\cong 2\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0\pi^2 N_1 N_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{[-\frac{\nu_1^2}{N_1} - \frac{\nu_2^2}{N_2}]} \\ &\sqrt{\nu_1 + N_1} \cos[\omega_0 s - \gamma_1 - \Omega s(2\nu_1 + 2\nu_2 + N_1 + N_2)] d\nu_1 d\nu_2 \end{aligned} \quad (6.44)$$

Analiseemos, inicialmente, o caso $\Omega = 0$, onde não há dependência da energia com a frequência. Neste caso, a integral em ν_2 é imediata (gaussiana) e igual a 1. A integral em ν_1 pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{1}{\pi N_1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu_1 \exp(-\frac{\nu_1^2}{N_1}) \sqrt{\nu_1 + N_1} &\cong \\ \sqrt{\frac{1}{\pi N_1}} e^{-N_1} \int_0^{\infty} \exp(-\frac{x^2}{N_1} + 2x) \sqrt{x} dx & \end{aligned} \quad (6.45)$$

onde tomamos $x = \nu_1 + N_1$. De acordo com [21] (pag 337), esta integral é do tipo

$$\int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-\beta x^2 - \gamma x} dx = (2\beta)^{-p/2} \Gamma(p) e^{\frac{\gamma^2}{8\beta}} \mathcal{D}_{-p}(\frac{\gamma}{\sqrt{2\beta}}) \quad (6.46)$$

com $\text{Re}\beta > 0$ e $\text{Re}p > 0$. Aqui a função $\mathcal{D}_p(z)$ é chamada de função parabólica cilíndrica e tem, como representação, a integral

$$\mathcal{D}_p(z) = \frac{e^{-z^2/4}}{\Gamma(-p)} \int_0^{\infty} e^{-zx - x^2/2} x^{-p-1} dx \quad (6.47)$$

aqui z é um número complexo qualquer. No caso que tratamos $p = \frac{3}{2}$, $\beta = 1/N_1$ e $\gamma = -2$. Como $z = -\sqrt{2N_1}$ e $|z| \gg |p|$, podemos utilizar a forma assintótica de $\mathcal{D}_p(z)$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_p(z) \sim e^{-z^2/4} z^p (1 - \frac{p(p-1)}{2z^2} + \frac{p(p-1)(p-2)(p-3)}{8z^4} - \dots) - \\ - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-p)} e^{i\pi p} e^{z^2/4} z^{-p-1} (1 + \frac{(p+1)(p+2)}{2z^2} + \dots) \end{aligned} \quad (6.48)$$

a expressão acima é válida somente para $\pi/4 < \text{arg } z < 5\pi/4$. Se nos restringirmos apenas aos termos de primeira ordem, uma vez que $N_1 \gg 3/16$, encontramos para o caso $\Omega = 0$

$$\begin{aligned} \langle u_1(s) \rangle &= 2|w_1| \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} \cos(\omega_0 s + \gamma_1) \\ \langle u_2(s) \rangle &= 2|w_2| \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} \cos(\omega_0 s + \gamma_2) \end{aligned} \quad (6.49)$$

onde substituímos $|w_1|^2 = N_1$, $|w_2|^2 = N_2$. Temos assim, para a aproximação dos níveis contínuos, o mesmo resultado obtido anteriormente (6.14).

O caso $\Omega \neq 0$, com $\omega_0 \gg \Omega$ é calculado pelas mesmas integrais. Devemos calcular a integral (6.44), e para isso, abrimos o cosseno em exponenciais. A integral em ν_2 é da forma gaussiana, resultando

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\frac{\nu_2^2}{N_2} + 2i\Omega s \nu_2) d\nu_2 = \sqrt{\pi} N_2 \exp(-\Omega^2 s^2 N_2) \quad (6.50)$$

Para a integral em ν_1 , usamos a aproximação $x = \nu_1 + N_1$ e obtemos a integral

$$\sqrt{\frac{1}{\pi N_1}} e^{-N_1 - 2i\Omega s N_1} \int_0^\infty \exp\left[-\frac{x^2}{N_1} + (2 + 2i\Omega s)x\right] \sqrt{x} dx \quad (6.51)$$

Utilizando as relações (6.46) com $p = 3/2$ e (6.48) com $p = -3/2$, $\gamma = 2 + 2i\Omega s$ e $N_1 \gg 1$, encontramos, para tempos curtos $s \ll 2/\Omega$

$$\langle u_1(s) \rangle \cong 2|w_1| \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} e^{-\Omega^2 s^2 (|w_1|^2 + |w_2|^2)} \cos(\omega_0 s + \gamma_1) \quad (6.52)$$

$$\langle u_2(s) \rangle \cong 2|w_2| \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} e^{-\Omega^2 s^2 (|w_1|^2 + |w_2|^2)} \cos(\omega_0 s + \gamma_2)$$

Se tomarmos $\gamma_1 = 0$ e $\gamma_2 = -\pi/2$, encontramos a elipse anterior com um decrescimento exponencial dos valores médios de u_1 e u_2 . Este decrescimento é em muito semelhante ao obtido por Nandi e Shastry [9], com a diferença de que, neste caso, tratamos uma elipse (excentricidade arbitrária) enquanto que em [9], apenas o caso de órbitas circulares no limite semiclássico é tratado, pois no caso de excentricidade nula os tempos reais e fictícios são proporcionais. Já sabemos que o decrescimento nos valores médios das variáveis u_1 e u_2 é causado pelo alargamento do pacote. Da exponencial, podemos estabelecer um período de tempo característico, medido em termos do tempo fictício, que representa um período médio de decoerência do pacote. Tal período é igual a

$$T_s = \frac{\hbar^2 (|w_1|^2 + |w_2|^2)^3}{e^4} \quad (6.53)$$

O valor médio de r é, entretanto, invariável e concorda com o resultado clássico. Como $r = u_1^2 + u_2^2$, em termos dos operadores criação e destruição, r é da forma

$$r = \frac{\hbar}{2M\omega} (a_1^2 + a_1^{\dagger 2} + a_2^2 + a_2^{\dagger 2} + 2a_1^{\dagger} a_1 + 2a_2^{\dagger} a_2 - 2) \quad (6.54)$$

No cálculo do valor médio $\langle r \rangle$, os operadores na forma a^2 e $a^{\dagger 2}$ resultam em termos que decrescem exponencialmente com a evolução do pacote devido ao alargamento. Os termos resultantes, em longos tempos, fazem

$$\langle r \rangle \cong \frac{\hbar}{M \langle \omega \rangle} (|w_1|^2 + |w_2|^2) \quad (6.55)$$

já que os termos do tipo $a^\dagger a$ resultam não dependentes do tempo. O valor $\langle r \rangle$ assim obtido é igual ao semi-eixo maior da elipse. Este resultado é análogo ao clássico como dissemos. Sendo $r = a(1 - \epsilon \cos U)$ a equação polar da elipse em termos da anomalia excêntrica U , o valor médio da distância ao foco de um corpo em movimento elíptico é

$$\langle r \rangle_{cl} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} a(1 - \epsilon \cos U) dU = a \quad (6.56)$$

Os cálculos aqui realizados permitem que se evidencie o espalhamento do pacote “coerente” ao longo da órbita, devido à estrutura própria de níveis do Hidrogênio. Realizamos estes cálculos apenas para ilustrar o fato de que estados do tipo (6.11), evoluídos em tempo fictício apresentam, de maneira inegável, uma decoerência a longo prazo, o que os desclassifica da categoria de “estados coerentes”. Podemos, talvez, denominá-los de “estados coerentes formais”, já que sua estrutura formal é idêntica à dos estados coerentes de um oscilador harmônico. A coerência, neste caso, deve ser testada pela evolução temporal.

Conclusão

Temos presentemente realizado um amplo estudo do limite semiclássico do átomo de Hidrogênio em que a representação de uma transformação com origem clássica foi desenvolvida em sua forma quântica e certos aspectos de difícil tratamento neste limite foram, na medida das possibilidades, discutidos.

Iniciamos o estudo com o tratamento de estados de alta localização, que se obtêm diretamente como solução da equação de Schrödinger. Tais estados ilustram, de uma maneira clara, a perda de coerência de um pacote localizado de ondas evoluindo sobre uma órbita média circular. A estrutura de níveis do Hidrogênio (lei de energia de Bohr) gera, não só um alargamento, mas, para um número finito de funções componentes, uma posterior localização (1.13), (1.14).

A introdução da transformação regularizadora de Kustaanheimo-Stiefel possibilitou o tratamento de órbitas no limite semiclássico com excentricidade arbitrária. A dificuldade central do uso da transformação KS na Mecânica Quântica está na implementação do tempo fictício no formalismo quântico. É possível uma interpretação deste tempo, na qual surge a necessidade de se associar um caráter operacional a ele (consequência da definição clássica $dt = rds$). O estudo da possibilidade de evolução em tempo fictício, via integrais de trajetória (Capítulo 5), resultou na derivação de uma função de onda propagada em tempo fictício (5.9) no espaço paramétrico via integrais de trajetória, que não obstante ser um caminho formal à derivação da evolução temporal, esbarra em dificuldades de cálculo analítico, que têm como origem a falta de uma forma fechada para a integral de trajetória do

Hidrogênio [8]. Por sua vez, entendemos que a dificuldade de derivação dessa integral está na própria definição de tempo fictício, que exige seu conhecimento preciso ao longo de cada trajetória que se soma.

Se a forma propagada exata de uma função de onda paramétrica não pode ser tratada explicitamente, consideramos a possibilidade de uma evolução temporal aproximada no limite semiclássico, onde o comportamento geral do sistema em consideração, exibindo alguma localização, deve seguir, de forma aproximada, o comportamento clássico. Em particular, restringimo-nos ao estudo do Hidrogênio bidimensional. O estudo de “estados coerentes do Hidrogênio” definidos na literatura [4, 10, 9] possibilitou uma reinterpretação do significado do termo coerente em se tratando do potencial de Coulomb.

Utilizando do princípio de correspondência, propomos uma evolução temporal aos estados coerentes formais do Hidrogênio, cuja frequência de pico (associada aos estados de maior probabilidade) surge como parâmetro natural governando a propagação desses estados. No cálculo de variáveis dinâmicas, posição e velocidade paramétricas e, na posterior determinação das variáveis reais, posição no espaço físico, pode-se determinar completamente a órbita clássica associada às variáveis que caracterizam o estado coerente admitido. Nesta derivação, os parâmetros que caracterizam a órbita, tais como o semi-eixo maior e excentricidade, puderam ser diretamente associados às variáveis quânticas do pacote (no caso w_1 e w_2). A evolução em tempo fictício, utilizando o argumento de correspondência clássica que justifique a aplicação do fator de propagação temporal harmônico $\exp[-i\omega_s(n_1 + n_2 + 1)]$ resultou na derivação quântica da equação do movimento planetário (equação de Kepler), que tem importância fundamental no cálculo planetário. Desse modo mostrou-se, partindo-se puramente de variáveis quânticas, que uma partícula sujeita ao potencial de Coulomb deve mover-se exatamente como prevê a Mecânica Clássica no limite de grandes números quânticos e estados suficientemente localizados.

A conexão entre a anomalia excêntrica (U) e o tempo fictício torna-se, desse modo, evidente. Na literatura [10, 9], o comportamento clássico para átomos reais (H3D) é obtido pela imposição, na representação transformada KS complexa, de uma localização no valor do momento angular associado ao estado, assim como uma localização em torno de algum plano no espaço real (por exemplo, $\langle z \rangle \simeq 0$, com $\Delta z \cong 0$ em $\hbar \rightarrow 0$). Do nosso tratamento, por sua vez, a correspondência com o limite clássico é mais direta, bastando dois vínculos (ortogonalidade dos vetores componentes do movimento e relação bilinear), que a transformação KS exige para que o

movimento se dê em um plano (plano de Levi-Civita [6]) no espaço real com orientação arbitrária.

O trabalho também torna ao seu início com a proposta de cálculo de evolução temporal com variação de frequência. Alguns autores [4, 10, 9], que, pioneiramente, iniciaram o estudo da questão, não indicaram, em nenhum lugar, a dependência que cada estado transformado harmônico tem em sua frequência característica ω com a energia. Esse fato é crucial para se compreender a diferença entre os estados coerentes de um oscilador harmônico e os estados propostos para o Hidrogênio. Assim, um deles [4], falando sobre o alargamento do pacote previsto para os estados do Hidrogênio, diz (pag 11): "*As discussed in Ref. 11, these states will disperse and the wave packet will not resemble itself for a very long time since the energy levels are not commensurable, i. e., integer spaced. We note, however, that going from one picture to the other involves a constraint and a time-dependent unitary transformation. This may have the effect of making the a_{nlm} functions of time or introducing a time-dependent potential in addition to the Coulomb one*". Este autor, em nenhum momento, considerou a dependência das frequências dos estados componentes do pacote com a energia, de forma que o fato de "os níveis de energia não serem comensuráveis, i. e., espaçados por inteiros" é agora carregado pelas frequências, que, não só não são iguais, mas também levam em si a incomensurabilidade. Para C. Guerry, o surgimento de um potencial dependente do tempo, além do potencial coulombiano, é visto como uma possível explicação à coerência dos novos estados KS-transformados.

Posteriormente, o mesmo autor [11] faz uso de funções localizadas radialmente, chamadas de "funções Sturmianas" que são evoluídas em tempo fictício. Essas funções são tomadas como uma representação de estados coerentes com localização radial e, no limite de grandes números quânticos, usando a conexão clássica apontada em [18], o comportamento do valor médio $\langle r \rangle$ é mostrado como satisfazendo à evolução clássica (equação de Kepler). A representação destes estados coerentes radiais não mostra dispersão, mas apenas um fenômeno de "compressão generalizada" (generalized squeezing) ao redor de uma posição média. Por nossa vez, utilizando a argumentação sobre a localização e introduzindo, explicitamente, a dependência da frequência com a energia, obtemos, para a evolução do pacote, o princípio de um alargamento para tempos curtos. Tal alargamento se dá, entretanto, ao longo da órbita e, dos resultados que obtemos, não nos é possível tirar qualquer conclusão sobre o comportamento radial. O pacote, evoluído em torno da frequência principal média $\langle \omega \rangle$, tem incerteza nas

variáveis u_1 e u_2 que vão a zero no limite $\hbar \rightarrow 0$. Essas incertezas geram uma indeterminação Δr , que, neste caso, é constante. Talvez, por meio de um cálculo mais elaborado, seja possível mostrar o fenômeno de squeezing para os estados $|w_1 w_2 s\rangle$. Fica, entretanto, ainda indeterminada não só a relação das funções Sturmianas de [11] com as soluções dependentes do tempo de Schrödinger (“As yet there is no clear answer to this question”), como também a relação entre o estado evoluído exatamente $|w_1 w_2 s\rangle$ com a correspondente função de Schrödinger.

Por fim, alguma observação é necessária com relação ao princípio de correspondência. Em geral, entende-se por tal princípio o limite $n \rightarrow \infty$ (grandes números quânticos). Pode-se, entretanto, mostrar que esse limite não tem validade universal [22, 23]. A correspondência com a Mecânica Clássica pode vir não apenas pela coalescência da frequência de emissão quântica com a frequência clássica, mas, em um sentido mais geral, podemos falar de uma correspondência entre comportamentos esperados (a saber, quântico \rightarrow clássico). Há também, neste caso, que se considerar a correspondência clássica no sentido notado por Planck ($\hbar \rightarrow 0$). Entendemos que, se o comportamento dinâmico de um sistema deve seguir, em algum limite, o comportamento clássico, uma inevitável localização do sistema em tal limite deve ser tomada. Os estados coerente têm o propósito, deliberado na sua forma, de reproduzir, na média, a evolução clássica. Nesse trabalho, entretanto, o estudo mostra que, mesmo pelo uso de tais estados (localização e regime de números grandes), onde todo o cuidado possível é tomado para que se reproduzam os caracteres dinâmicos clássicos, a Mecânica Quântica deixa sua marca indelével, seja pelo surgimento de uma irreversível delocalização (que ocorre para $t \rightarrow \infty$), ou de uma posterior reformação nos padrões de probabilidade. Também pelo exemplo de sistema aqui considerado, distinguimos claramente a diferença entre os limites $\hbar \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$, já que, se admitirmos \hbar fixo o limite de tempos longos pode levar a uma decoerência irreversível do sistema com um resultado muito diferente do obtido pelo limite $\hbar \rightarrow 0$ tomado inicialmente. Um sistema simples como o do Hidrogênio leva, naturalmente, a uma distinção clara entre uma teoria clássica e uma descrição quântica dos sistemas.

Apêndice A

Neste apêndice calculamos os valores médios de $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$ para um pacote do tipo

$$\Psi(t) = \sum_{k=-p}^p A_{l+k} \psi_{l+k} \exp\left[\frac{iE_0 t}{\hbar(l+k)^2}\right] \quad (\text{A.1})$$

onde ψ_{l+k} são as funções localizadas de Brown (1.9), $E_0 = \frac{e^4 m}{2\hbar^2}$ e p um número inteiro. O valor de $\langle x \rangle$ é calculado pela relação

$$\begin{aligned} \langle x \rangle = & \sum_{k=-p}^p \sum_{j=-p}^p A_{l+k}^* A_{l+j} \int_0^\infty R_{l+k} r^3 R_{l+j} dr \int_0^\pi \Theta_{l+k} \sin^2 \theta \Theta_{l+j} d\theta \\ & \int_0^{2\pi} e^{i(j-l)\phi} \cos \phi d\phi \exp\left[\frac{iE_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+j)^2} - \frac{1}{(l+k)^2}\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Denotando-se

$$F_{k,j}^{(l)} = \int_0^\infty R_{l+k}(r) r^3 e_{l+j}(r) dr \int_0^\pi \Theta_{l+k} \sin^2 \theta \Theta_{l+j} d\theta \quad (\text{A.3})$$

temos da aplicação de (1.17)

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = & \pi \sum_{k=-p}^p A_{l+k}^* A_{l+k+1} F_{k,k+1}^{(l)} \exp\left[\frac{iE_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k+1)^2} - \frac{1}{(l+k)^2}\right)\right] + \\ & + A_{l+k}^* A_{l+k-1} F_{k,k-1}^{(l)} \exp\left[-\frac{iE_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k-1)^2}\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

como $A_{l+p+1} = 0$ e $A_{l-p-1} = 0$ e admitindo os A_{l+k} coeficientes reais, por simplicidade, encontramos

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = & \pi \sum_{k=-p}^{p-1} A_{l+k} A_{l+k+1} F_{k,k+1}^{(l)} \exp\left[\frac{iE_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k+1)^2} - \frac{1}{(l+k)^2}\right)\right] + \\ & + \pi \sum_{k=-p+1}^p A_{l+k} A_{l+k-1} F_{k,k-1}^{(l)} \exp\left[-\frac{iE_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k-1)^2}\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Aplicando uma distribuição gaussiana aos coeficientes A_{l+k} e A_{l+k-1} e notando que, da propriedade de localizabilidade das funções de Brown, podemos simplificar

$$F_{k,k+1}^{(l)} \cong F_{k,k-1}^{(l)} \cong F_{k,K}^{(l)} \quad (\text{A.6})$$

Por esses meios

$$\langle x(t) \rangle = 2\pi \sum_{-p}^p A_{l+k}^2 F_{k,K}^{(l)} \cos\left[\frac{E_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k+1)^2} - \frac{1}{(l+k)^2}\right)\right] \quad (\text{A.7})$$

enquanto que $\langle y \rangle$ torna-se

$$\langle y(t) \rangle = 2\pi \sum_{k=-p}^p A_{l+k}^2 F_{k,k}^{(l)} \sin\left[\frac{E_0 t}{\hbar} \left(\frac{1}{(l+k)^2} - \frac{1}{(l+k+1)^2}\right)\right] \quad (\text{A.8})$$

Notamos que, no cálculo de $\langle z(t) \rangle$, este resulta nulo, já que $\langle \cos\theta \rangle = 0$. Para obtermos os resultados devemos usar $p=1$ e as relações de aproximação

$$\frac{1}{(l-1)^2} - \frac{1}{l^2} = \frac{2}{l^3} + \frac{3}{l^4} + \frac{4}{l^5} + \dots \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{1}{l^2} - \frac{1}{(l+1)^2} = \frac{2}{l^3} - \frac{3}{l^4} + \frac{4}{l^5} - \dots \quad (\text{A.10})$$

que valem para $l \gg 1$. Além disso, também usamos

$$\cos(x + \Delta x) + \cos(x - \Delta x) = 2\cos x \cos \Delta x \quad (\text{A.11})$$

$$\sin(x + \Delta x) + \sin(x - \Delta x) = 2\sin x \cos \Delta x \quad (\text{A.12})$$

como relações de soma de senos e cossenos válidas para $\frac{\Delta x}{x} \ll 1$.

Apêndice B

Aqui apresentaremos a resolução do átomo de Hidrogênio bidimensional (autofunções e fórmula de energia). Partimos da equação independente do tempo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}\right)\psi = E\psi \quad (\text{B.1})$$

que em coordenadas polares é escrita

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + r\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right]\psi + \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi + \frac{e^2}{r}\psi = E\psi \quad (\text{B.2})$$

Se tomarmos $\psi = P(r)\Phi(\varphi)$ temos duas equações

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + l^2\Phi = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{1}{r}\frac{dP}{dr} + \frac{d^2P}{dr^2} - \frac{l^2P}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)P = 0 \quad (\text{B.4})$$

A solução da equação angular é simples e tem a forma

$$\Phi = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{B.5})$$

onde l é um número inteiro. Se substituirmos a variável r por $x = \frac{N\hbar^2}{2me^2}r = \beta r$ e fizermos $E = -\frac{me^4}{N^2\hbar^2}$ temos a equação radial

$$\frac{1}{x}\frac{dP}{dx} + \frac{d^2P}{dx^2} - \frac{l^2P}{x^2} + \frac{P}{x} - \frac{P}{A} = 0 \quad (\text{B.6})$$

Propomos, para a obtenção da solução, uma solução tentativa na forma

$$P(x) = G(x)x^{|l|}e^{-x/2} \quad (\text{B.7})$$

com isso (B.6) torna-se

$$x \frac{d^2 G}{dx^2} + (2|l| + 1 - x) \frac{dG}{dx} + (N - |l| - 1/2)G = 0 \quad (\text{B.8})$$

Se nos lembrarmos da equação de Laguerre [24]

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (k + 1 - z) \frac{d}{dz} + p \right] \mathcal{L}_p^k(z) = 0 \quad (\text{B.9})$$

temos que (B.8) tem a mesma forma com $p = N - |l| - 1/2$ e $k = 2|l|$. Logo, $G(x) = \mathcal{L}_{N-|l|-1/2}^{2|l|}(x)$. Também devemos ter $N - 1/2$ um número inteiro, pelas propriedades dos polinômios de Laguerre, e denotaremos esse número por n . Assim, de maneira formal temos a solução radial

$$P(r) = C_{nl} (\beta r)^{|l|} \exp\left(-\frac{\beta r}{2}\right) \mathcal{L}_{n-|l|-1}^{2|l|}(\beta r) \quad (\text{B.10})$$

como

$$\int_0^\infty e^{-z} z^k \mathcal{L}_p^k \mathcal{L}_q^k dz = \frac{(p+k)!}{p!} \delta_{p,q} \quad (\text{B.11})$$

obtemos a normalização

$$C_{nl} = \beta \sqrt{\frac{(n - |l| - 1)!}{(n + |l| - 1)!^3 (2n - 1)}} \quad (\text{B.12})$$

e a energia correta

$$E = -\frac{m e^4}{\hbar^2 (n - 1/2)^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.13})$$

A solução (B.10) permite que se obtenha funções localizadas do tipo de Brown (1.9)

$$\psi(r, \varphi) = C' \exp\left[-\frac{(r - n^2 a)^2}{2n^3 a^2} + i m \varphi\right] \quad (\text{B.14})$$

onde a é o raio de Bohr.

Por outro lado, é possível a solução de (B.1) de acordo com a transformação KS bidimensional complexa

$$\begin{aligned} x + iy &= 2\xi^2 \\ x - iy &= 2\xi^{*2} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Para isso, definimos as constantes $\lambda = \frac{8me^2}{\hbar^2}$, $\eta^4 = -\frac{8mE}{\hbar^2}$ e fazemos algumas transformações em (B.1), de forma que possamos escrever esta equação na forma

$$(4r\nabla^2 + \lambda - \eta^4 r)\psi = 0 \quad (\text{B.16})$$

Da transformação (B.15) obtemos as derivadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} &= 2\xi \frac{\partial}{\partial x} - 2i\xi \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial \xi^*} &= 2\xi^* \frac{\partial}{\partial x} + 2i\xi^* \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

por meio das quais temos

$$\vec{\nabla}_{\xi}^t \cdot \vec{\nabla}_{\xi^*} = 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \xi^*} = 4r \nabla_x^2 \quad (\text{B.18})$$

Com isso, a equação (B.16) torna-se

$$\left(\frac{1}{\eta^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \xi^*} + \eta^2 \xi \xi^* \right) \psi = \frac{\lambda}{2\eta^2} \psi \quad (\text{B.19})$$

segue, então, todo desenvolvimento traçado no capítulo 4.

Apêndice C

Neste apêndice mostraremos detalhes da derivação da equação de órbita elíptica realizada primeiramente em [9]. Nessa referência, faz-se uso do estado coerente

$$|z_1 z_2 \rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}(|z_1|^2 + |z_2|^2)\right] \sum \frac{z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1 n_2 \rangle \quad (\text{C.1})$$

Faremos aqui o desenvolvimento da evolução temporal aproximada segundo o tempo real. Aplicando a parametrização

$$\begin{aligned} z_1 &= \gamma \cos \chi e^{-i\Delta} \\ z_2 &= \gamma \sin \chi e^{i\Delta} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Se aplicarmos a relação de Stirling válida para grandes valores de n

$$n! \approx n^n e^{-n} \quad (\text{C.3})$$

podemos obter os máximos para $f = |z_1|^{n_1} |z_2|^{n_2} / \sqrt{n_1! n_2!}$ com relação aos valores de n_1 e n_2 . Para isso substituímos a parametrização (C.2) em f

$$f = (\gamma \cos \chi n_1^{-1/2} e^{1/2})^{n_1} (\gamma \sin \chi n_2^{-1/2} e^{1/2})^{n_2} \quad (\text{C.4})$$

A função f tem valores máximos para certos valores $n_1 = N_1$ e $n_2 = N_2$ onde também o $\ln f$ tem valor máximo. Esse logaritmo é

$$\ln f = n_1 \left[\ln(\gamma \cos \chi) - \frac{1}{2} \ln n_1 + \frac{1}{2} \right] + n_2 \left[\ln(\gamma \sin \chi) - \frac{1}{2} \ln n_2 + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{C.5})$$

e tem máximos para

$$\frac{\partial \ln f}{\partial n_1} = 0 \quad \frac{\partial \ln f}{\partial n_2} = 0 \quad (\text{C.6})$$

do que resultam os valores de máximo

$$N_1 = \gamma^2 \cos^2 \chi \quad N_2 = \gamma^2 \sin^2 \chi \quad (\text{C.7})$$

Fazemos, assim, a expansão da energia em torno desses valores $n_1 = N_1 + \delta_1$ e $n_2 = N_2 + \delta_2$. Por esse meio, o estado coerente é denotado

$$|z_1 z_2 \rangle \simeq |\gamma \cos \chi e^{-i(\Delta + \omega t)}; \gamma \sin \chi e^{i(\Delta - \omega t)} \rangle \quad (\text{C.8})$$

A aplicação do operador g_1 , por exemplo, resulta

$$g_1 |z_1 z_2 \rangle = \gamma \cos \chi e^{-i(\Delta + \omega t)} |z_1 z_2 \rangle \quad (\text{C.9})$$

Das relações operatoriais (4.17) obtemos

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle = & \frac{1}{2\eta^2} [\gamma^2 \cos^2 \chi e^{-2i(\Delta + \omega t)} + \gamma^2 \cos^2 \chi e^{2i(\Delta + \omega t)} + \\ & + \gamma^2 \sin^2 \chi e^{2i(\Delta - \omega t)} + \gamma^2 \sin^2 \chi e^{-2i(\Delta - \omega t)} + 2\gamma^2 \cos \chi \sin \chi e^{-2i\Delta} + \\ & + 2\gamma^2 \cos \chi \sin \chi e^{2i\Delta}] \quad (\text{C.10}) \end{aligned}$$

que pode ser escrito como

$$\langle x(t) \rangle = \frac{\gamma^2}{\eta^2} [\cos 2\Delta (\cos 2\omega t + \sin 2\chi) - \cos 2\chi \sin 2\Delta \sin 2\omega t] \quad (\text{C.11})$$

quanto a $\langle y(t) \rangle$ temos

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle = & \frac{1}{2\eta^2} [\gamma^2 \cos^2 \chi e^{-2i(\Delta + \omega t)} - \gamma^2 \cos^2 \chi e^{2i(\Delta + \omega t)} + \\ & + \gamma^2 \sin^2 \chi e^{2i(\Delta - \omega t)} - \gamma^2 \sin^2 \chi e^{-2i(\Delta - \omega t)} + 2\gamma^2 \cos \chi \sin \chi e^{-2i\Delta} + \\ & - 2\gamma^2 \cos \chi \sin \chi e^{2i\Delta}] \quad (\text{C.12}) \end{aligned}$$

que resulta

$$\langle y(t) \rangle = \frac{\gamma^2}{\eta^2} [\sin 2\Delta (\cos 2\omega t + \sin 2\chi) + \cos 2\chi \cos 2\Delta \cos 2\omega t] \quad (\text{C.13})$$

O valor de r é calculado de modo semelhante.

Para interpretarmos as relações (C.11) e (C.13) escrevemos a equação de uma elipse com foco no centro do sistema de coordenadas, a o semi-eixo maior, b o semi-eixo menor e c a excentricidade

$$\frac{(x - ac)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (\text{C.14})$$

Giramos o sistema de coordenadas para x' e y' de um ângulo α

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a\cos\theta + a\epsilon \\ b\sin\theta \end{pmatrix} \quad (\text{C.15})$$

onde θ é um parâmetro da curva descrita em coordenadas polares. Assim, temos

$$\begin{aligned} x' &= a\cos\alpha(\cos\theta + a\epsilon) + b\sin\alpha\sin\theta \\ y' &= -a\sin\alpha(\cos\theta + a\epsilon) + b\cos\alpha\sin\theta \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Podemos, obviamente, fazer um cálculo mais completo envolvendo diretamente a soma (C.1). Restringimo-nos ao caso de excentricidade nula ($\chi = 0$) por sabermos ser este o caso de especial aplicação do fator de propagação temporal segundo o tempo real. Assim, o pacote coerente com dependência temporal é

$$|z, 0, t\rangle = \exp(-\frac{1}{2}\gamma^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) |n, 0\rangle \quad (\text{C.17})$$

como

$$r = \frac{1}{\eta^2} (g_1 g_1^\dagger + g_2 g_2^\dagger + g_1 g_2 + g_1^\dagger g_2^\dagger) \quad (\text{C.18})$$

temos

$$r|n, 0\rangle = \frac{1}{\eta^2} [(n+1)|n, 0\rangle + \sqrt{n+1}|n+1, 0\rangle] \quad (\text{C.19})$$

pelo que o valor médio de r na representação de estados coerentes é dado por

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{1}{\eta^2} \exp(-\gamma^2) \sum_{m,n} \frac{z^n z^m}{\sqrt{m!n!}} \exp[i(\frac{E_m - E_n}{\hbar})t] \\ &\quad ((n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}) \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

que resulta em uma constante, independente da energia

$$\langle r \rangle = \frac{|z|^2 + 1}{\eta^2} e^{(|z|^2 - \gamma^2)} \quad (\text{C.21})$$

Para o cálculo de x aplicamos (4.17) com os elementos de matriz

$$\langle m, 0|x|n, 0\rangle = \frac{1}{2\eta^2} [\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}] \quad (\text{C.22})$$

pelo que

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \frac{1}{2\eta^2} \exp(-\gamma^2) \left[\sum_n \frac{z^{*n-2} z^n}{\sqrt{(n-2)!n!}} \sqrt{(n+1)(n+2)} \exp\left[\frac{i(E_{n+2}-E_n)t}{\hbar}\right] + \right. \\
&\quad \left. + \sum_n \frac{z^{*n+2} z^n}{\sqrt{(n+2)!n!}} \sqrt{(n+1)(n+2)} \exp\left[\frac{i(E_{n+2}-E_n)t}{\hbar}\right] \right] = \\
&= \frac{e^{-\gamma^2}}{2\eta^2} \left[z^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^* z)^{n-2}}{(n-2)!} \exp\left[-\frac{i(E_n-E_{n-2})t}{\hbar}\right] + \right. \\
&\quad \left. + z^{*2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^* z)^n}{n!} \exp\left[\frac{i(E_{n+2}-E_n)t}{\hbar}\right] \right] \tag{C.23}
\end{aligned}$$

Se substituirmos a parametrização $z = \bar{z} \exp(i\Delta)$ encontramos justamente

$$\langle x(t) \rangle = \frac{|z|^2 \exp(-\gamma^2)}{\eta^2} \sum_l \frac{(z^* \bar{z})^{2l}}{(2l)!} \cos[(E_{l+1} - E_l)t/\hbar - 2\Delta] \tag{C.24}$$

com $E_l = -me^4/2\hbar^2 l^2$. Para $\langle y \rangle$, obtemos senos.

Apêndice D

Límite do contínuo de níveis - Utilizando os “pacotes circulares”, calculamos $\langle x(t) \rangle$ no limite de muitos níveis que são considerados distribuídos continuamente. Para isso usamos uma função conveniente representando uma aproximação para $\frac{|z|^n}{\sqrt{n!}}$. Como n é tomado grande, expandimos em torno de $N = \gamma^2$ e usamos a relação de Stirling (C.3) com $\nu = n - N$

$$\frac{|z|^n}{\sqrt{n!}} \simeq \left(1 + \frac{\nu}{\gamma^2}\right)^{-(\nu+\gamma^2/2)} e^{\nu+\gamma^2/2} \quad (\text{D.1})$$

Fazendo-se uma expansão do termo entre parênteses, temos

$$\frac{|z|^2}{\sqrt{n!}} \propto \exp\left[\frac{1}{2}\left(\gamma^2 - \frac{\nu^2}{2\gamma^2}\right)\right] \quad (\text{D.2})$$

Assim, podemos escrever

$$|z, 0 \rangle = (2\pi\gamma^2)^{-1/4} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\nu^2}{4\gamma^2}\right) |\gamma^2 + \nu, 0 \rangle \quad (\text{D.3})$$

como

$$E \simeq \frac{E_0}{\gamma^4} + \hbar\omega\delta - \frac{3\omega\delta^2}{2\gamma^2} \quad (\text{D.4})$$

passamos ao limite do contínuo

$$|\gamma^2, t \rangle = (2\pi\gamma^2)^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \exp\left[-\frac{\nu^2}{4\gamma^2} + i\omega h\nu + i\frac{3\omega t\nu^2}{2\gamma^2}\right] |\gamma^2 + \nu, 0 \rangle \quad (\text{D.5})$$

Observando-se os elementos de matriz de x nos auto-estados temos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle = & \frac{(2\pi\gamma^2)^{-1/2}}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu d\nu' \exp\left[-\frac{\nu^2}{4\gamma^2} - \frac{\nu'^2}{4\gamma^2} + i\omega h(\nu - \nu')t + \right. \\ & \left. + i\frac{3}{2}\hbar\omega\left(\frac{\nu^2 - \nu'^2}{\gamma^2}\right)t\right] \frac{(\gamma^2 + \nu)}{2} (\delta(\nu - \nu' + 2) + \delta(\nu - \nu' - 2)) \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Fazendo-se uma das integrais, temos $\nu^2 - \nu'^2 = 2\nu(\nu - \nu')$ com o que

$$\langle x(t) \rangle = \frac{(2\pi\gamma^2)^{-1/2}}{\eta^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu(\nu + \gamma^2) \exp\left(-\frac{\nu^2}{2\gamma^2}\right) \cos\left(2\omega t - \frac{6\omega t\nu}{\gamma^2}\right) \quad (\text{D.7})$$

A última integral pode ser facilmente calculada de acordo com [21] (integral 3.896)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-q^2 x^2} \sin[p(x + \lambda)] dx &= \sqrt{\frac{\pi}{q^2}} e^{-p^2/4q^2} \sin p\lambda \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-q^2 x^2} \cos[p(x + \lambda)] dx &= \sqrt{\frac{\pi}{q^2}} e^{-p^2/4q^2} \cos p\lambda \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

A parte da integral (D.7) que contém γ^2 resulta

$$= \frac{1}{\eta^2} \exp\left(-\frac{18\omega^2 t^2}{\gamma^2}\right) \gamma^2 \cos 2\omega t \quad (\text{D.9})$$

Quanto a parte que contém ν , devemos integrar por partes

$$u = \cos\left[\frac{6\omega t}{\gamma^2}(\nu - \gamma^2/3)\right] \quad d\nu = \nu \exp\left(-\frac{\nu^2}{2\gamma^2}\right) d\nu \quad (\text{D.10})$$

que resulta na expressão

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\eta^2} \exp\left(-\frac{18\omega^2 t^2}{\gamma^2}\right) [\gamma^2 \cos 2\omega t + 6\omega t \sin 2\omega t] \quad (\text{D.11})$$

Apêndice E

De acordo à referência [7], podemos facilmente transformar a integral de trajetória no espaço real para a integral no espaço paramétrico. Inicialmente, escrevemos a identidade

$$K(\vec{x}^f, \vec{x}, t) = \int_0^\infty \delta(t - \int_0^s r ds') K(\vec{x}^f, \vec{x}, s) dt \quad (E.1)$$

onde t representa o tempo real e s o tempo fictício. Aqui \vec{x}^f é o ponto final e \vec{x} é o ponto inicial.

Em duas dimensões, $K(\vec{x}^f, \vec{x}, t)$ é da forma

$$K(\vec{x}^f, \vec{x}, t) = \int \exp[i/\hbar \int_0^t \mathcal{L}(\dot{\vec{x}}, \vec{x}, t') dt'] D^2 x(t) \quad (E.2)$$

onde $\mathcal{L}(\dot{\vec{x}}, \vec{x}, t)$ é a função lagrangeana associada ao movimento. A forma acima é dada explicitamente por

$$K(\vec{x}^f, \vec{x}, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right) \quad (E.3)$$

$$\int \dots \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \epsilon \left[\frac{(r_k - r_{k-1})^2}{2\epsilon} - V(r_k) \right] \right\} \prod_{k=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right) d^2 x_k$$

onde $\epsilon = t_k - t_{k-1}$. Aplicamos a definição de tempo fictício

$$\frac{dt}{ds} = r \quad \sigma = \frac{t_k - t_{k-1}}{r_k} \quad (E.4)$$

com o potencial $V(r_k) = -\frac{c^2}{r_k}$, pelo que

$$K(\vec{x}^f, \vec{x}) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar r_k \sigma} \right) \quad (E.5)$$

$$\int \dots \int \exp\left[\sum_{k=1}^N \frac{i}{\hbar} \left(\frac{m \Delta^2 r_k}{2\sigma r_k} + \sigma c^2 \right) \right] \prod_{k=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar r_k \sigma} \right) d^2 x_k$$

onde $\Delta \vec{x}_k = \vec{x}_k - x_{k-1}$. Devemos aplicar (E.5) em (E.1), entretanto, inicialmente notamos que

$$\int_0^s r(s') ds' = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \sum_{k=1}^N r_k \sigma \quad (\text{E.6})$$

e resolveremos o problema por meio da função de Green

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \int_0^\infty dt K(\vec{x}', \vec{x}, t) \exp(i \frac{Et}{\hbar}) \quad (\text{E.7})$$

aplicando-se (E.1) com a forma explícita de $K(\vec{x}', \vec{x}, s)$

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(i \frac{Et}{\hbar}) \delta(t - \int_0^s r s' ds') K(\vec{x}', \vec{x}, s) r' ds dt \quad (\text{E.8})$$

onde fizemos $dt = r' ds$ com $r' = r_N$. Invertendo os fatores das exponenciais, encontramos facilmente

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \int_0^\infty \exp(i \frac{E^2 s}{\hbar}) P(\vec{x}', \vec{x}, s) ds \quad (\text{E.9})$$

onde $P(\vec{x}', \vec{x}, s)$ é o promotor

$$P(\vec{x}', \vec{x}, s) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} (\frac{M}{2\pi i \hbar \sigma})^N \int \exp[i/\hbar \sum_{j=1}^N (\frac{m \Delta^2 x_j}{2s r_j} + s E r_j)] \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 x_j}{r_j} \quad (\text{E.10})$$

O promotor é, na verdade, a integral de trajetória no espaço paramétrico. Devemos, a seguir, aplicar a transformação

$$\begin{aligned} x_1 &= u_1^2 - u_2^2 \\ x_2 &= 2u_1 u_2 \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Do cálculo do jacobiano da transformação temos que

$$dx_j^1 dx_j^2 = 4r_j du_j^1 du_j^2 \quad (\text{E.12})$$

$$\Delta^2 x_j = 4r_j \Delta^2 u_j \quad (\text{E.13})$$

com isso, o promotor torna-se

$$P(\vec{u}', \vec{u}, s) = \frac{1}{4} \lim_{\sigma \rightarrow 0} (\frac{M}{2i\pi \hbar \sigma})^N \int \dots \int \exp[i/\hbar \sum_{j=1}^N s (\frac{M}{2} \frac{\Delta^2 u_j}{s^2} + E u_j^2)] \prod_{j=1}^{N-1} d^2 u_j \quad (\text{E.14})$$

Denotando o promotor por $K(\vec{x}', \vec{x}, s)$, temos

$$G(\vec{x}', \vec{x}, E) = \frac{1}{4} \int \exp\left(\frac{ie^2 s}{\hbar}\right) K(\vec{u}', \vec{u}, s) ds \quad (\text{E.15})$$

A função de Green no espaço real é, assim, a transformada de Fourier do propagador no espaço paramétrico em tempo fictício com fator de transformação $\exp(ie^2 s/\hbar)$. O quadrado da carga tem o papel de uma pseudo-energia, exatamente como na equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador.

O promotor para a transformação complexa pode ser escrito substituindo-se as relações de transformação entre as coordenadas u_1 , u_2 e ξ e ξ^* . A relação entre essas é

$$u_1 = \frac{1}{2}(\xi + \xi^*) \quad (\text{E.16})$$

$$u_2 = \frac{1}{2i}(\xi - \xi^*) \quad (\text{E.17})$$

Dessas relações segue que

$$(u_j^{(1)} - u_{j-1}^{(1)})^2 + (u_j^{(2)} - u_{j-1}^{(2)})^2 = (\xi_j - \xi_{j-1})(\xi_j^* - \xi_{j-1}^*) \quad (\text{E.18})$$

e também

$$du_j^{(1)} du_j^{(2)} = d\xi_j d\xi_j^* \quad (\text{E.19})$$

Assim, o promotor torna-se, por substituição

$$P(\xi', \xi, s) = \frac{1}{4} \lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \sigma}\right)^N \int \dots \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N s \left[\frac{M}{2} \frac{(\xi_j - \xi_{j-1})(\xi_j^* - \xi_{j-1}^*)}{s^2} + E \xi_j \xi_j^* \right]\right] \prod_{j=1}^{N-1} d\xi_j d\xi_j^* \quad (\text{E.20})$$

Bibliografia

- [1] Z.D.Gaeta e G.R. Stroud Jr. Classical and quantum mechanical dynamics of a quasiclassical state of the hydrogen atom. *Phys.Rev.A*, 42:6308, 1990.
- [2] J. Parker e G.R.Stroud Jr. Coherence and decay of rydberg wave packets. *Phys. Rev. Lett.*, 56:716, 1986.
- [3] Erwin Schroedinger. Der stetige uebergang von der mikro- zur makro-mechanik. *Naturwissenschaftler*, 14:137, 1926.
- [4] C.Guerry. Coherent states and the kepler coulomb problem. *Phys. Rev. A*, 33:6, 1986.
- [5] P.Kustaanheimo e E.Stiefel. Perturbation theory of kepler motion based on spinor regular motion. *J.Reine Angew. Math*, 218:204, 1965.
- [6] E.Stiefel e G.Sheifele. *Linear and Regular Celestial Mechanics*. Springer Verlag Berlin-Heidelberg, 1971.
- [7] R. Ho e A. Inomata. Exact path-integral treatment of the hydrogen atom. *Phys. Rev. Lett.*, 48:231, 1982.
- [8] A. Inomata. *Proceedings of the Adriatico Reserch Conference on Path Integrals Methods with Applications*. World Scientific, 1987
- [9] S.Nandi e C.S. Shastry. Classical limit of the two-dimensional and the three-dimensional hydrogen atom. *J.Phys. A*, 22:1005, 1989.
- [10] G.Ghosh D.Bhaumik, B.Dutta Roy. Classical limit of the hydrogen atom. *J.Phys. A, Math and Gen.*, 19:1355, 1986.
- [11] C.C. Guerry e J.Kiefer. Radial coherent states for the coulomb problem. *Phys. Rev. A*, 37:665, 1988.

- [12] L.S.Brown. Classical limit of the hydrogen atom. *Am. J. Phys.*, 41:525, 1973.
- [13] J.Yeazell e C.R. Stroud Jr. Observation of fractional revival in the evolution of a rydberg atomic wave packet. *Phys. Rev. A*, 43:5153, 1991.
- [14] I.Sh. Averbukh e N.F.Perelman. Fractional revivals: Universality in the long-term evolution of quantum wave packets beyond the correspondence principle dynamics. *Phys. Lett. A*, 39:449, 1989.
- [15] D.R. Snieder. Elliptical orbits in quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 51:801, 1983.
- [16] J.M. Gracia-Bondia. Hydrogen atom in the phase-space formulation of quantum mechanics. *Phys. Rev. A*, 10:691, 1984.
- [17] B.Zaslav e M.E.Zandler. Two-dimensional analog to the hydrogen atom. *Am. J. Phys.*, 35:1118, 1987.
- [18] B.R.Johnson. Time variables in propagators and coherent states for the kepler-coulomb problem. *Phys. Rev. A*, 35:1412, 1987.
- [19] R.P.Feynman. *Quantum theory and Path Integrals*. Mc. Graw-Hill, 1965.
- [20] A.Inomata. Exact path-integral for the two dimensional coulomb problem. *Phys. Lett. A*, 87:387, 1982.
- [21] I.S.Gradshcheyn e I.M. Ryzhik. *Table of Integrals Series and Products*. Academic Press, inc., 1970.
- [22] C.G. Cabrera e M. Kiwi. Large quantum-number states and the correspondence principle. *Phys. Rev. A*, 36:2995, 1987.
- [23] R.L. Liboff. The correspondence principle revisited. *Phys. Today*, 37:50, 1984.
- [24] G.Arffken. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press Inc., 1985.