



IFT/TE-M-79

17

EFEITOS NÃO LOCAIS SOBRE O TUNELAMENTO DE BARREIRAS

Marco Antonio Candido Ribeiro

Dissertação de Mestrado apresentada no Instituto de Física
Teórica da UNESP.

ORIENTADOR: DIÓGENES GALETTI



São Paulo
Setembro/1990

Dedicado à minha esposa Elizeini e aos meus filhos Marcio e Monique

AGRADECIMENTOS

O autor agradece:

ao Prof. Diógenes Galetti pela amizade, incentivo e motivação com que o orientou durante este trabalho,

à Regina e ao Kokubun pelas discussões e pela ajuda na parte computacional do trabalho respectivamente,

aos colegas de turma Carlos, Felice, Jonas, Kwok, Luiz, e Nélson, cujas amizades tornaram o caminho da aprendizagem menos penoso,

e ao C.N.Pq. pelo apoio financeiro.

RESUMO

É realizado um estudo das influências da não-localidade de uma barreira de potencial sobre o efeito túnel. Para tal, utilizamos uma aproximação semiclássica para o formalismo de integrais de trajetória, escrito no espaço de fase, para obter a amplitude de probabilidade da partícula atravessar uma barreira de potencial não-local. A hamiltoniana não-local que aparece neste formalismo de integrais de trajetória é, sob uma hipótese adiabática, obtida via a representação de Weyl-Wigner da mecânica quântica. São feitos cálculos numéricos para quantificar estas influências.

ABSTRACT

Non-local potential effects on quantum tunnelling are studied, using a semiclassical approximation for the phase space path integral formulation in order to obtain the quantum probability amplitude. There, the non-local Hamiltonian, under an adiabatic hypothesis, is obtained by the Weyl-Wigner representation of quantum mechanics. Numerical calculations give estimates of those effects.

Índice

1	Introdução	1
2	A Formulação das Integrais de Trajetória	3
2.1	O Propagador	3
2.2	Formulação no Espaço de Fase	6
2.3	Formulação no Espaço de Configurações	9
3	Aproximação Semiclássica	11
3.1	Expressão Semiclássica para o Propagador	11
3.2	Penetração de Barreiras via Integrais de Trajetória	17
4	A Hamiltoniana Mapeada	21
4.1	Formulação de Weyl-Wigner - A Transformada de Weyl	21
4.2	Introdução da Hamiltoniana Mapeada	24
4.3	Potencial Não-Local de Forma Gaussiana	26
4.4	Potencial Não-Local de Forma Parabólica	29
4.5	O Propagador de Feynman com Massa Efetiva	31
5	O Propagador com Massa Efetiva	33
5.1	Um Propagador Semiclássico com Massa Efetiva	33
5.2	Penetração de Barreira Não-Local	39
6	Resultados Numéricos	42
6.1	A Massa Efetiva	42
6.2	A Probabilidade de Transmissão e a Não-Localidade	43
7	Conclusão	45
8	Figuras	47
9	Apêndice A	52
10	Apêndice B	54
11	REFERÊNCIAS	58

1 Introdução

Muitas descrições de sistemas físicos envolvem um potencial não-local. Esta característica não-local pode ser causada por várias razões, como por exemplo, uma quebra na simetria da função de onda como na teoria de Hartree-Fock^[1]; um pseudopotencial em física do estado sólido^[2]; ou as condições de auto-consistência que são escolhidas em física da matéria condensada, onde o potencial não-local de partícula única resulta como parte de uma teoria de muitos corpos^[3] ou modelos mais realísticos de laser^[4]. Como exemplos de potenciais não-locais podemos citar o potencial ótico usado em processos de espalhamento nuclear, e o potencial nuclear que descreve a interação da matéria nuclear.

O objetivo desta dissertação é estudar as influências da não-localidade de um potencial sobre o efeito túnel. Por não-localidade entende-se que um potencial é não diagonal no espaço de configuração, em outras palavras, o potencial não depende de apenas um ponto do espaço mas sim de regiões do espaço ao mesmo tempo. Os potenciais tratados aqui são de alcance finito, ou seja, a extensão do espaço sobre o qual o potencial atua é finita.

Para este estudo usaremos o formalismo de Feynman da mecânica quântica^[5,6], pois estamos interessados na amplitude de probabilidade de uma partícula que, incidindo sobre um lado de uma barreira de potencial, aparece do outro lado. É bem verdade que o problema com potenciais locais tem solução através da técnica de aproximação semiclássica WKB^[7] para a equação de Schrödinger, contudo, o presente formalismo evita a complicação inerente na derivação e aplicação de fórmulas de conexão WKB. Para embutir os efeitos da não-localidade no formalismo de Feynman, lançamos mão da formulação de Weyl-Wigner^[8], que é uma outra representação da mecânica quântica. Este estudo será feito sob uma aproximação semiclássica do formalismo de Feynman e com uma hipótese adiabática para o formalismo de Weyl-Wigner, dando assim um caráter aproximativo ao estudo. A apresentação desta dissertação tem também um cunho didático, mostrando, por exemplo, detalhes dos formalismos citados e esperamos, inclusive, que este texto sirva de introdução a outros mais avançados indicados nas referências.

Deste modo, iniciamos a dissertação apresentando no capítulo 2 a introdução ao formalismo de Feynman^[9]. Ali fazemos a dedução da amplitude de probabilidade, ou seja, o propagador de Feynman, bem como obtemos esta formulação no espaço de fase^[10] e depois fazemos a passagem desta formulação para a costumeira, escrita no espaço de configuração. O propagador é uma soma sobre trajetórias, a cada trajetória é associada uma fase, que é

dada pela integral da ação $S = \int L dt$ (L é a lagrangiana) calculada ao longo da trajetória.

No capítulo 3 é obtida uma expressão semiclássica do propagador. Esta expressão é válida no limite $\hbar$ pequeno. É importante realçar a conveniência em se aplicar esta aproximação, a qual carrega correções quadráticas no entorno da trajetória clássica, ao tratamento de problemas cuja solução também é encontrada via a técnica de aproximação WKB, como por exemplo, o efeito túnel.

A introdução à formulação de Weyl-Wigner é feita no capítulo 4. Através deste formalismo é mostrado como é possível associar a cada operador, descrito num espaço de Hilbert, uma função ordinária num espaço de fase. É através de uma função associada ao operador hamiltoniano, a transformada de Weyl do operador $\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})$, que obtemos uma hamiltoniana não-local. Esta expressão não-local é, nos casos unidimensionais de interesse, obtida como uma expansão nos momentos p . Cada termo desta expansão tem como coeficiente uma certa função $V^n(q)$ obtida a partir do potencial não-local. Esta série é tratada com uma hipótese adiabática^[11], o que significa que vamos trabalhar em baixas ordens da expansão, no caso até $n=2$. Num primeiro exemplo, colocamos um potencial gaussiano cuja não-localidade é da forma gaussiana^[12] para ser trabalhada na hamiltoniana não-local e numa segunda aplicação um potencial parabólico também com uma forma não-local gaussiana. É mostrado em ambos os casos que os efeitos não-locais do potencial podem ser colocados na hamiltoniana via uma massa efetiva.

De posse desta lagrangiana, é feita no capítulo 5 uma aproximação semiclássica para um propagador com massa efetiva. É importante frisar que no limite local do potencial, os resultados deste capítulo são exatamente aqueles apresentados no capítulo 3. Aplicamos então este propagador ao problema do efeito túnel e obtemos o fator de transmissão através de uma barreira de potencial não-local.

No capítulo 6 são obtidos resultados numéricos para diversos ensaios do modelo. Por uma análise destes resultados, mostra-se que a não-localidade de uma barreira de potencial inibe a transmissão da partícula.

Na conclusão é feita uma análise das consequências físicas dos resultados desta dissertação, bem como são apontadas aplicações posteriores.

2 A Formulação das Integrais de Trajetória

Este capítulo é destinado ao estudo da formulação de Feynman da mecânica quântica^[5,6], conhecida também como formulação das integrais de trajetória. Feynman, baseado em idéias de Dirac^[13], mostrou que a amplitude de probabilidade de um sistema evoluir de um ponto do espaço-tempo para outro é dado por:

$$P = \sum_{\text{trajetórias}} \exp \frac{iS}{\hbar}$$

onde S é a ação clássica escrita como

$$S = \int L dt$$

com L sendo a lagrangiana deste sistema.

A somatória é sobre todas as trajetórias clássicas possíveis, não apenas sobre aquela que torna mínima a ação clássica entre os pontos iniciais (q_0, t_0) e finais (q_f, t) . Um análogo deste formalismo é dado pelo princípio de Huygens. Tal princípio, em ótica ondulatória, afirma que conhecendo-se a amplitude (e sua derivada) de uma onda em uma dada superfície, a amplitude em um certo ponto p_0 próximo desta superfície pode ser considerada como uma soma de contribuições de todos os pontos da superfície.

Porém, pode-se estudar a propagação, não em termos das frentes de onda, mas utilizando suas trajetórias ortogonais que são os raios da ótica geométrica. A propagação entre pontos distantes seria tratada então como resultado da sucessão de propagações entre pontos vizinhos.

Mas se quisermos descrever a propagação de um ponto a outro do espaço-tempo na mecânica quântica, temos de levar em conta o princípio de incerteza- uma localização precisa num ponto implica na indeterminação completa do momento- e assim, em lugar de considerar apenas uma trajetória determinada ligando dois pontos, temos de considerar todas as trajetórias possíveis, o que efetivamente acontece na formulação de Feynman.

2.1 O Propagador

Uma vez que o propagador desempenha um papel fundamental no formalismo de Feynman, é interessante rever brevemente algumas de suas características.

Digamos que um sistema quântico seja caracterizado por um vetor de estado $|\Psi(t_0)\rangle$ no

instante inicial t_0 . A evolução no tempo deste sistema para um vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ em um instante posterior t qualquer é representada por:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle, \quad (1)$$

onde $\hat{U}(t, t_0)$ representa o operador de evolução temporal definido como solução de:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \quad (2)$$

onde $\hat{H}$ é o hamiltoniano.

O operador de evolução temporal tem as seguintes propriedades^[14]:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}, \quad (3)$$

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}, \quad (4)$$

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0). \quad (5)$$

No caso em que $\hat{H}$ é independente do tempo, devido a (2) temos:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}. \quad (6)$$

Introduzindo em (6) a relação de fechamento:

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = \hat{1}, \quad (7)$$

onde $|\Psi_n\rangle$ são auto-estados da energia definidos por

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle, \quad (8)$$

com

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{m,n}, \quad (9)$$

obtemos a representação espectral de $\hat{U}$ (supusemos por simplicidade que o espectro é discreto).

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{m,n} |\Psi_m\rangle \langle \Psi_n| e^{\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

ou

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_n e^{\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|. \quad (10)$$

Para obtermos o propagador, suponhamos que o sistema seja descrito no espaço de configurações pelas coordenadas $\vec{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_l)$ onde l é o número de graus de liberdade do sistema. Se descrevemos um sistema que está no ponto $\vec{q}_0$ em t_0 pelo vetor de estado $|\vec{q}_0\rangle$, então a probabilidade de que este sistema seja encontrado entre $|\vec{q}\rangle$ e $|\vec{q} + d\vec{q}\rangle$ no instante posterior t é:

$$\begin{aligned} P(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) &= |\langle \vec{q} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle|^2 d\vec{q} \\ &= |K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0)|^2 d\vec{q}, \end{aligned} \quad (11)$$

onde

$$K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) \equiv \langle \vec{q} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle. \quad (12)$$

A expressão (12) define o propagador do estado construído em $(\vec{q}_0, t_0)$ ao novo estado em $(\vec{q}, t)$ e mostra que ela representa uma amplitude de probabilidade da evolução do sistema de um estado para outro. Lançando mão da função de onda no espaço de configurações definida por:

$$\langle \vec{q} | \Psi(t) \rangle = \Psi(\vec{q}, t), \quad (13)$$

e inserindo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\vec{q}_0\rangle \langle \vec{q}_0| d\vec{q}_0 = \hat{1}, \quad (14)$$

na expressão (1), obtemos:

$$\langle \vec{q} | \Psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{q} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle \langle \vec{q}_0 | \Psi(t_0) \rangle d\vec{q}_0;$$

assim

$$\Psi(\vec{q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) \Psi(\vec{q}_0, t_0) d\vec{q}_0. \quad (15)$$

A expressão (15) é o análogo do princípio de Huygens, e notamos também desta expressão que $K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0)$ "propaga" a função Ψ em um tempo t_0 para um tempo posterior

t , o que justifica chamar o propagador de função de Green dependente do tempo^[15]. A representação espectral de K se obtém inserindo (10) em (12)

$$K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, t_0) = \sum_n \Psi_n(\vec{q}) \Psi_n^*(\vec{q}_0) e^{\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}}. \quad (16)$$

2.2 Formulação no Espaço de Fase

Uma vez que mais adiante estaremos interessados em obter uma expressão para o tunelamento de barreiras de potencial via o formalismo das integrais de trajetória escrito no espaço de configurações, é interessante começarmos obtendo este formalismo no espaço de fase e posteriormente passar deste espaço para o espaço de configurações mostrando que não há nenhuma restrição na estrutura do formalismo.

Quando Feynman escreveu sua formulação para a mecânica quântica, lançou mão de uma experiência mental na qual uma partícula se propaga de uma fonte F até um detetor D^[6]. Em um primeiro arranjo da experiência, é colocado um anteparo opaco com dois furos entre a fonte e o detetor de tal forma que, se não é possível determinar por qual dos furos a partícula passa, a amplitude de probabilidade da partícula ir de F até D é a soma das amplitudes para passar por um ou outro furo. Se em um outro arranjo for colocado mais dois anteparos, desta feita, cada um com vários furos, haveram várias rotas alternativas que a partícula poderá tomar. Cada uma destas rotas tem sua própria amplitude e a amplitude total é a soma de todas. Aumentando o número de furos e anteparos, o número de rotas alternativas que interferem aumenta até que, no limite, tem-se que considerar todas as rotas possíveis que iniciam em F e terminam em D. A amplitude total será então a superposição das amplitudes correspondentes a todas as trajetórias possíveis.

O formalismo matemático é introduzido neste contexto da seguinte forma^[16]: divide-se o tempo total entre o instante inicial da propagação, t_0 , e o instante final, t , em N intervalos de tempo $t_i (i = 0, 1, \dots, N)$ tais que $t_0 = 0$ e $t_N = t$. Assim, a propagação de t_0 a t_N se dá através de uma sucessão de propagações intermediárias que, segundo (5), pode ser escrito como:

$$\hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t_N, t_0) = \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \hat{U}(t_1, t_0) \quad (17)$$

Inserindo em (17) conjuntos completos de estados intermediários, o propagador entre a posição inicial $\vec{q}_0$ e a posição final $\vec{q}_f = \vec{q}_N$ toma a forma:

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_f | \hat{U}(t, 0) | \vec{q}_0 \rangle &= \int \dots \int \langle \vec{q}_f | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) | q_{N-2} \rangle \dots \\ &\quad \langle \vec{q}_1 | \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{q}_0 \rangle dq_{N-1} dq_{N-2} \dots dq_1 \end{aligned} \quad (18)$$

O propagador (18) deve ser estudado no limite de infinitas divisões temporais, ou seja:

$$N \rightarrow \infty, \quad \epsilon = \text{Max}(\delta t_i) \rightarrow 0 \quad \text{onde } \delta t_i = t_i - t_{i-1}. \quad (19)$$

Para simplificar, podemos tomar um sistema unidimensional descrito em coordenadas retangulares pela hamiltoniana:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{Q}). \quad (20)$$

Assumindo para $\hat{U}$ a forma da expressão (6) (com $\hat{H}$ independente do tempo) temos:

$$\langle q_i | \hat{U}(t_i, t_{i-1}) | q_{i-1} \rangle = \langle q_i | \exp \frac{(-i\hat{H}\delta t_i)}{\hbar} | q_{i-1} \rangle. \quad (21)$$

Dessa forma, para calcular (18) introduzimos um conjunto completo de estados intermediários do momento:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |p_i\rangle \langle p_i| dp_i = \hat{1}; \quad (22)$$

assim (18) torna-se

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0; t) &= \int \dots \int \langle q_f | \hat{U}(\delta t_N) | p_N \rangle \langle p_N | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \hat{U}(\delta t_{N-1}) | p_{N-1} \rangle \langle p_{N-1} | q_{N-2} \rangle \dots \\ &\quad \langle q_1 | \hat{U}(\delta t_1) | p_1 \rangle \langle p_1 | q_0 \rangle dq_{N-1} \dots dq_1 dp_N \dots dp_1. \end{aligned} \quad (23)$$

Notamos que em (23) há uma integração a mais sobre os momentos com relação às coordenadas. Já que estamos interessados em estudar a propagação no limite de tempos infinitesimais, podemos simplificar a expressão acima fazendo:

$$\langle q_i | \exp \frac{(-i\hat{H}\delta t_i)}{\hbar} | p_i \rangle \langle p_i | q_{i-1} \rangle \approx \langle q_i | [\hat{1} - \frac{i\hat{H}\delta t_i}{\hbar}] | p_i \rangle \langle p_i | q_{i-1} \rangle, \quad (24)$$

onde desprezamos termos de ordem igual ou superior à ϵ^2 .

Usando a função transformação dada por^[14]:

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(\frac{ipq}{\hbar}\right), \quad (25)$$

e usando a expressão (20) na (24), obtemos

$$\begin{aligned} \langle q_i | \exp\left(\frac{-i\hat{H}\delta t_i}{\hbar}\right) | p_i \rangle \langle p_i | q_{i-1} \rangle &\approx \left[1 - \frac{iH(p_i, q_i)\delta t_i}{\hbar}\right] \\ &\times \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \exp\frac{ip_i q_i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \exp\frac{-ip_i q_{i-1}}{\hbar} \\ &\approx \frac{1}{(2\pi\hbar)} e^{\frac{ip_i(q_i - q_{i-1})}{\hbar}} \exp\left[\frac{-iH(p_i, q_i)\delta t_i}{\hbar}\right], \end{aligned} \quad (26)$$

onde

$$\langle q_i | \hat{H} | p_i \rangle = H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (27)$$

É costumeiro identificar a expressão local (27) como sendo a hamiltoniana clássica associada à partícula.

Substituindo (26) em (23) obtemos, no limite das condições (19):

$$K(q_f, q_0; t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dp_i dq_i}{2\pi\hbar}\right) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N [p_i(q_i - q_{i-1}) - H(p_i, q_i)\delta t_i]\right\}. \quad (28)$$

A expressão (28) pode ser interpretada da seguinte maneira^[10]:

quando dividimos o tempo total de propagação em N partes, na N -ésima aproximação podemos considerar a função $q = q(\tau)$ aproximada por uma função linear indo de q_{i-1} a q_i no intervalo de tempo t_{i-1} a t_i , onde $0 \leq \tau \leq t$.

A função $p = p(\tau)$, no mesmo intervalo, pode ser aproximada por uma constante p_i .

Desta forma, a somatória no expoente (28) pode ser considerada como aproximação da integral:

$$A([p(\tau)], [q(\tau)], q_f, q_0; t) = \int_0^t [p\dot{q} - H(p, q)] d\tau, \quad (29)$$

onde os colchetes nos argumentos $p(\tau)$ e $q(\tau)$ indicam que A é um funcional desses argumentos.

Devido a (29), a expressão (28) para o propagador toma a forma:

$$K(q_f, q_0; t) = \int D[p] D[q] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} A([p, q]; q_f, q_0; t)\right\}, \quad (30)$$

a qual define a integral de trajetória no espaço de fase. O "elemento de volume" no espaço funcional das funções $p(\tau)$, $q(\tau)$ é dado por:

$$D[p]D[q] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{dp_i dq_i}{2\pi\hbar} \right) \right\}. \quad (31)$$

2.3 Formulação no Espaço de Configurações

Para obter o formalismo das integrais de trajetória em sua formulação no espaço de configurações, basta realizar a integração em (28) sobre os momentos, utilizando a expressão^[17]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(ax^2 + bx)] dx = \sqrt{\frac{\pi i}{a}} \exp\left(\frac{-ib^2}{4a}\right), \quad (32)$$

e lembrando que $H(p, q)$ é dada por (27). Assim, obtemos:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_i \exp\left\{ \frac{-i}{\hbar} \left[\frac{p_i^2 \delta t_i}{2m} - p_i(q_i - q_{i-1}) \right] \right\} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t_i} \right)^2 \exp\left[\frac{im}{2\hbar \delta t_i} (q_i - q_{i-1})^2 \right]. \quad (33)$$

Para simplificar, adotaremos as seguintes notações:

$$\delta t_i = \epsilon, \quad \forall i \quad \text{onde } N\epsilon = t. \quad (34)$$

Logo, por (33) temos:

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0; t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int \dots \int \prod_{i=1}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} dq_i \\ &\quad \times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_i - q_{i-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(q_i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

Da mesma forma como na formulação no espaço de fase, aqui podemos fazer uma aproximação sobre a N -ésima partição temporal, desta vez, porém, as trajetórias estão sobre o espaço das configurações. Neste limite (com a simplificação (34)), a somatória no expoente de (35) é um aproximante da integral:

$$\begin{aligned} S([q(\tau)]; q_f, q_0; t) &= \int_0^t \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right] d\tau \\ &= \int_0^t L([q(\tau)], [\dot{q}(\tau)]) d\tau, \end{aligned} \quad (36)$$

onde, L é a lagrangiana clássica associada à hamiltoniana clássica (27). A expressão (36) é a integral de ação calculada ao longo da trajetória $q(\tau)$ no espaço de configurações, ligando o ponto inicial fixo q_0 ao ponto final fixo q_f . A integral de trajetória sobre o espaço de configurações fica representada por:

$$K(q_f, q_0; t) = \int D[q] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S([q(\tau)], q_f, q_0; t) \right\}, \quad (37)$$

onde

$$D[q] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \right\}. \quad (38)$$

A expressão (37) pode ser interpretada como uma superposição de amplitudes de probabilidade correspondentes a todas as trajetórias possíveis para a partícula se deslocar de q_0 para q_f . A fase associada a cada trajetória, que determina os efeitos de interferência, é precisamente dada pela integral de ação calculada ao longo da trajetória.

3 Aproximação Semiclássica

Neste capítulo é feita uma aproximação semiclássica para o formalismo de integrais de trajetória e em seguida, usando esta aproximação, é obtida uma expressão para a probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial. A dificuldade em descrever penetração de barreiras em termos de uma integral de trajetória consiste em que, por definição, não há trajetória clássica possível quando uma partícula quântica atravessa uma barreira. Assim, conceitualmente é difícil entender como uma integral de trajetória dominada por trajetórias clássicas pode ser aplicada a este problema. Contudo, um cálculo intuitivo do coeficiente de transmissão é possível, assumindo-se que a expressão semiclássica para o propagador pode ser estendida analiticamente para a região em que não existem trajetórias clássicas. O resultado obtido com este formalismo está em pleno acordo com o coeficiente de transmissão calculado através da técnica de aproximação WKB^[7].

3.1 Expressão Semiclássica para o Propagador

No capítulo 2 foi mostrado que a amplitude de probabilidade de uma partícula evoluir de uma certa posição q_0 em um tempo t_0 do espaço-tempo para uma outra posição q_f em um tempo posterior t é dada pela superposição de amplitudes de probabilidade correspondentes a todas as trajetórias possíveis ligando q_0 a q_f .

Cada trajetória $q(\tau)$ tem um certo peso determinado por um fator de fase dado pela ação clássica S associada com esta trajetória.

O ponto peculiar acerca da formulação de integrais de trajetória é que todas as trajetórias devem ser incluídas. Por outro lado, no limite clássico, a trajetória $q_{cl}(\tau)$ determinada por

$$m\ddot{q}_{cl}(\tau) = -V'(q_{cl}(\tau)) \quad \left(\dot{} = \frac{d}{d\tau}, \quad ' = \frac{\partial}{\partial q} \right), \quad (39)$$

com as condições de extremo $q_{cl}(t_0) = q_0$, $q_{cl}(t) = q_f$, deve ser a única trajetória relevante. Apenas para tal trajetória faz sentido falar de energia de uma partícula, visto que devido a (39), temos

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{m\dot{q}_{cl}^2(\tau)}{2} + V(q_{cl}(\tau)) \right\} = \dot{q}_{cl}(t) \left\{ m\ddot{q}_{cl}(\tau) + V'(q_{cl}(\tau)) \right\} = 0. \quad (40)$$

Logo:

$$\frac{m\dot{q}_{cl}^2(\tau)}{2} + V(q_{cl}(\tau)) = E, \quad (41)$$

onde E é uma constante do movimento. Pode-se definir E como uma função de q_f, t, q_0, t_0 via:

$$t - t_0 = \int_{q_0}^{q_f} dq \left(\frac{m}{2[E - V(q)]} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (42)$$

Para qualquer outra trajetória $q_{cl}(\tau)$, a expressão clássica $\frac{m\dot{q}^2}{2} + V(q)$ não é constante do movimento.

O limite clássico é obtido com $\hbar \rightarrow 0$. Quando $\hbar$ é muito pequeno em relação as dimensões de massa, tempo, etc envolvidas na ação S , a fase da exponencial

$$e^{\frac{i}{\hbar} S[q(\tau)]}, \quad (43)$$

varia muito rapidamente, até mesmo para pequenas mudanças na trajetória $q(\tau)$. Assim, na integração sobre todas as trajetórias, a rápida mudança de fase fará com que as contribuições de todas essas trajetórias sejam classicamente desprezíveis exceto aquelas para as quais a ação é estacionária, isto é, trajetórias $\bar{q}(\tau)$ que satisfazem

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] = 0, \quad (44)$$

para todos os δq . Mas

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] = \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} [(\dot{\bar{q}} + \delta\dot{q})^2] - V(\bar{q} + \delta q) \right\} - \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{\bar{q}}^2 - V(\bar{q}) \right\}. \quad (45)$$

Fazendo-se uma expansão de Taylor para o potencial $V(\bar{q} + \delta q)$

$$V(\bar{q} + \delta q) = V(\bar{q}) + V'(\bar{q})\delta q + V''(\bar{q})\frac{\delta q^2}{2} + \dots, \quad (46)$$

e desprezando-se termos de ordem igual ou superior a δq^2 , obtemos para (45)

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] \simeq \int_{t_0}^t d\tau \left\{ m\dot{\bar{q}}\delta\dot{q} - V'(\bar{q})\delta q \right\}. \quad (47)$$

Já que todas as trajetórias partem de q_0 e chegam em q_f , $\delta q_0(t_0) = \delta q_f(t) = 0$. Integrando por partes o primeiro membro de (47):

$$\int_0^t m \dot{\bar{q}} \delta \dot{q} d\tau = m \dot{\bar{q}} \delta q|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t \delta q m \ddot{\bar{q}} d\tau, \quad (48)$$

e devido às condições de contorno, o primeiro membro à direita em (48) é nulo; assim para (47) nós obtemos:

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] = - \int_{t_0}^t d\tau \delta q \left\{ m \ddot{\bar{q}} + V'(\bar{q}) \right\}. \quad (49)$$

A fim de que (49) seja nulo para um δq arbitrário, é necessário que:

$$m \ddot{\bar{q}} = -V'(\bar{q}), \quad (50)$$

ou seja, $\bar{q}(\tau) = q_{cl}(\tau)$, a trajetória clássica. Trajetórias clássicas são pontos de fase estacionária na integral de trajetória e, como tal, dominam a integral no limite $\hbar \rightarrow 0$.

No limite semiclássico, onde $\hbar$ é pequeno mas não nulo, é necessário reter apenas pequenos desvios de q_{cl} na integral de trajetória e trabalhar ordens quadráticas em δq :

$$\begin{aligned} S[q_{cl} + \delta q] &= \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\dot{q}_{cl} + \delta \dot{q})^2 - V(q_{cl} + \delta q) \right\} \\ &\cong \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} \dot{q}_{cl}^2 - V(q_{cl}) \right\} + \int_{t_0}^t d\tau \left\{ m \dot{q}_{cl} \delta \dot{q} - V'(q_{cl}) \delta q \right\} + \\ &\quad + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ m \delta \dot{q}^2 - V''(q_{cl}) \delta q^2 \right\}. \end{aligned} \quad (51)$$

Na primeira integral em (51) reconhecemos a expressão para $S[q_{cl}(\tau)]$; a segunda integral é nula devido a (50), assim

$$S[q_{cl} + \delta q] \cong S[q_{cl}] + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ m \delta \dot{q}^2 - V''(q_{cl}) \delta q^2 \right\}. \quad (52)$$

Nesta aproximação a forma de integral de trajetória do propagador, segundo a expressão (37), torna-se

$$\begin{aligned} K(q_f, t; q_0, t_0) &= \int D[\delta q(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[q_{cl} + \delta q]} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} S[q_{cl}]} \int D[\delta q(\tau)] \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ m \delta \dot{q}^2 - V''(q_{cl}) \delta q^2 \right\}. \end{aligned} \quad (53)$$

O propagador é dado pela fase clássica vezes uma integral para a exponencial da variação segunda da ação de uma partícula de massa m viajando em um "potencial" $\frac{V''(q)q^2}{2}$. Notamos que o "potencial" é uma função do tempo através de uma dependência com $q_{cl}(\tau)$.

O cálculo da integral em (53) é apresentado no Apêndice A. O resultado é uma expressão para o propagador que deve ser válido no limite $\hbar \rightarrow 0$:

$$K(q_f, t; q_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[q_{cl}]} \left(2\pi i k(q_f) k(q_0) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (54)$$

onde

$$k(q) = \left(\frac{1}{\hbar} \right) \{ 2m[E_{cl} - V(q)] \}^{\frac{1}{2}}, \quad (55)$$

e E_{cl} é a energia definida implicitamente por (42). Se o potencial for quadrático na posição, essa forma para $K(q_f, t; q_0, t_0)$ é exata já que $V''(q_{cl})$ é constante e não há aproximações adicionais envolvidas para se ir de (53) para (54).

Para um potencial geral nós temos:

$$\begin{aligned} S[q_{cl}] &= \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{m\dot{q}_{cl}^2}{2} - V(q_{cl}) \right\} \\ &= \int_{t_0}^t d\tau \left\{ m\dot{q}_{cl}^2 - E_{cl} \right\} \\ &= -E_{cl}(t - t_0) + \int_{q_0}^{q_f} dq \left\{ 2m[E_{cl} - V(q)] \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (56)$$

Assim, a aproximação semiclássica para propagador é dada por

$$K(q_f, t; q_0, t_0) = \left(2\pi i k(q_f) k(q_0) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(i \int_{q_0}^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right). \quad (57)$$

Uma vez que estaremos interessados em estudar nos próximos capítulos, o comportamento da formulação de integrais de trajetória quando fazemos alterações no potencial $V(q)$, é muito interessante observar de uma maneira explícita como o propagador, na aproximação semiclássica, atua sobre uma função de onda. Os resultados que agora vamos obter nos servirão como um guia, pois devemos retornar a eles quando removermos tais características. De acordo com a expressão (15), para uma partícula que se move em uma dimensão entre q_0 e q_f , temos

$$\Psi(q_f, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t; q_0, t_0) \Psi(q_0, t_0) dq_0. \quad (58)$$

Em (58) utilizaremos a forma (57) para o propagador e as funções de onda WKB^[7] para regiões classicamente permitidas

$$\Psi_{WKB}(x_1, t_1) = \frac{1}{[k_W(x_1)]^{\frac{1}{2}}} \exp\left(i \int_c^{x_1} k_W(x) dx - \frac{i E_W t_1}{\hbar}\right), \quad (59)$$

onde c é um parâmetro arbitrário e $\hbar k_W(x) = \{2m[E_W - V(x)]\}^{\frac{1}{2}}$, com E_W sendo a energia da função de onda WKB. Estamos utilizando estas funções de onda neste cálculo, porque o fator de fase que aparece em (57) é indicativo dos fatores exponenciais que aparecem nas funções de onda WKB, que também são utilizadas para descrever a física de um sistema quântico no limite $\hbar \rightarrow 0$. É possível mostrar^[18] que no limite semiclássico, o propagador de Feynman é idêntico àquele obtido usando na expressão (16) uma soma sobre funções de onda WKB quando a soma (integral) é realizada na aproximação de fase estacionária^[19]. Inserindo (59) e (57) em (58) obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(q_f, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \left(2\pi i k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} e^{\frac{-i}{\hbar} E(t-t_0)} \exp\left(i \int_{q_0}^{q_f} k(q) dq\right) \\ &\times \frac{1}{[K_W(q_0)]^{\frac{1}{2}}} \exp\left(i \int_c^{q_0} k_W(q) dq - \frac{i}{\hbar} E_W t_0\right). \end{aligned} \quad (60)$$

Calcularemos a integral sobre q_0 em (60) na aproximação de fase estacionária. Em geral esta aproximação significa que

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{ih(x)} \\ &\cong g(x_0) e^{ih(x_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i[\frac{(x-x_0)^2}{2}]h''(x_0)} \\ &= g(x_0) e^{ih(x_0)} \left(\frac{2\pi i}{h''(x_0)} \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (61)$$

onde x_0 é o ponto de fase estacionária determinado por $h'(x_0) = 0$. No nosso caso

$$h(q_0) = -\frac{E \Delta t}{\hbar} + \int_{q_0}^{q_f} k(q) dq + \int_c^{q_0} k_W(q) dq - \frac{E_W t_0}{\hbar} \quad (\Delta t = t - t_0).$$

Na verdade, a equação (60) não é correta uma vez que há regiões da variável de integração, q_0 , classicamente inacessíveis para a partícula de energia E_W . Todavia, na aproximação de fase estacionária estes valores de q_0 não contribuem. Enfatizamos que em (60) $\hbar k(q) = \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}$, onde $E = E(q_0, q_f; \Delta t)$ é uma função de q_0 , a variável de integração. A aproximação de fase estacionária em q_0 requer que nós encontremos primeiro o ponto $q_0 = \bar{q}_0$ tal que

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial q_0} \left(-E\Delta t + \int_{q_0}^{q_f} \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} dq + \int_c^{q_0} \{2m[E_W - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} dq - E_W t_0 \right) \\
&= \frac{\partial E}{\partial q_0} \left\{ -\Delta t + \int_{q_0}^{q_f} m \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{-1}{2}} dq \right\} - \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} + \{2m[E_W - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} \\
&= \{2m[E_W - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} - \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{62}$$

Os dois termos em $\frac{\partial E}{\partial q_0}$ se cancelam, de acordo com (42) que define $E(q_0, q_f; \Delta t)$. O ponto estacionário $\bar{q}_0$ é aquele valor de q_0 para o qual

$$E = E_{cl}(\bar{q}_0, q_f; \Delta t) = E_W. \tag{63}$$

A aproximação de fase estacionária para (60) fica sendo

$$\begin{aligned}
\Psi(q_f, t) &= \frac{1}{[k(\bar{q}_0)]^{\frac{1}{2}}} \left(2\pi i k(\bar{q}_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} \\
&\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_W(t - t_0) + i \int_{\bar{q}_0}^{q_f} k(q) dq + i \int_c^{\bar{q}_0} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} E_W t_0 \right\} \\
&\times \left(\frac{2\pi i}{\hbar''(\bar{q}_0)} \right)^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

ou simplesmente

$$\Psi(q_f, t) = \frac{\Gamma}{[k(q_f)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_W t + i \int_c^{q_f} k(q) dq \right), \tag{64}$$

onde

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \left(2\pi i k^2(\bar{q}_0) \int_{\bar{q}_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} \\
&\times \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial}{\partial q_0} \left\{ [2m(E_W - V(q))]^{\frac{1}{2}} - [2m(E - V(q))]^{\frac{1}{2}} \right\}_{q_0=\bar{q}_0} \right)^{\frac{-1}{2}}.
\end{aligned} \tag{65}$$

Contudo,

$$\frac{\partial}{\partial q_0} \left\{ [2m(E_W - V(q))]^{\frac{1}{2}} - [2m(E - V(q))]^{\frac{1}{2}} \right\}_{q_0=\bar{q}_0} = -\frac{m}{\hbar k(\bar{q}_0)} \frac{\partial E}{\partial q_0} \Big|_{q_0=\bar{q}_0}. \tag{66}$$

Da definição (42) para E , nós vemos que

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial \Delta t}{\partial q_0} \Big|_{q_0=\bar{q}_0} = \frac{\partial}{\partial q_0} \left[\int_{q_0}^{q_f} dq \left(\frac{m}{2(E - V(q))} \right)^{\frac{1}{2}} \right]_{q_0=\bar{q}_0} \\
&= -\frac{m}{\hbar k(\bar{q}_0)} - \left(\frac{m^2}{\hbar^3} \int_{\bar{q}_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right) \frac{\partial E}{\partial q_0} \Big|_{q_0=\bar{q}_0}
\end{aligned} \tag{67}$$

ou

$$\frac{\partial E}{\partial q_0} \Big|_{q_0=\bar{q}_0} = -\frac{\hbar^2}{mk(\bar{q}_0)} \left(\int_{\bar{q}_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{-1}. \tag{68}$$

Daí,

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \left\{ 2\pi i k^2(\bar{q}_0) \left(\int_{\bar{q}_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right) \frac{1}{2\pi i \hbar} \left(-\frac{m}{\hbar k(\bar{q}_0)} \right) \left[-\frac{\hbar^2}{mk(\bar{q}_0)} \left(\int_{\bar{q}_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{-1} \right] \right\}^{\frac{-1}{2}} \\
&= 1.
\end{aligned} \tag{69}$$

Assim, quando o propagador de Feynman é usado na aproximação de fase estacionária, a função de onda WKB é propagada em uma função de onda WKB em um tempo posterior.

3.2 Penetração de Barreiras via Integrais de Trajetória

Na seção 3.1 estabelecemos uma aproximação semiclássica para o propagador, a qual é utilizada para investigar a física de um sistema no limite $\hbar$ pequeno.

Uma vez que neste mesmo limite é usada, na mecânica quântica usual, a técnica de aproximação WKB, e sendo possível demonstrar a equivalência entre o propagador na forma de integral de trajetória e o propagador obtido usando uma soma sobre funções de onda WKB, podemos concluir que problemas normalmente tratáveis pelos métodos WKB podem também ter soluções pela técnica de integral de trajetória^[20]. Um exemplo clássico é o problema de penetração de barreira, que é geralmente tratado combinando-se funções de onda WKB nos pontos de retorno^[7].

Assim, consideremos uma partícula de massa m incidindo sobre uma barreira de potencial (fig.1) e descrita por um pacote de onda que é uma superposição de funções de onda propagando para direita, com momento do centro do pacote $p_0 = (2mE_0)^{\frac{1}{2}}$. A superposição é composta por funções de onda com energias menores que a intensidade máxima $V_{máx}$ a fim de garantir que a partícula não possa escapar sobre o topo da barreira, mas antes deve penetrar a barreira a fim de poder aparecer à direita ($q_f \gg b$). Os pontos de retorno clássicos, a e b , são definidos por

$$V(a) = V(b) = E_0, \quad a < b. \quad (70)$$

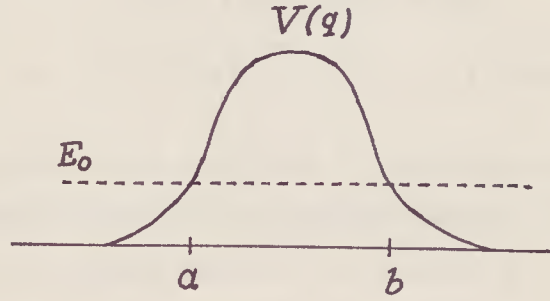


figura 1 - Barreira de potencial unidimensional. A partícula incide da esquerda com energia $E_0 < V_{\text{máx}}$. Os pontos de retorno clássicos são a e b .

Suponhamos que no tempo t_0 o pacote esteja centrado em um ponto c distante à esquerda, da barreira ($c \ll a$). Em termos de funções de onda WKB, o pacote de onda no tempo t_0 é dado por

$$\Psi(q_0, t_0) = \int_0^\infty dE \phi(E) \Psi_{WKB}(q_0, c, E) \quad (71)$$

onde

$$\Psi_{WKB}(q_0, c, E) = [k(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \exp\left(i \int_c^{q_0} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} E t_0\right) \quad (72)$$

e

$$k(q) = \frac{1}{\hbar} \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}. \quad (73)$$

Quando $V(q) = 0$,

$$\int_c^{q_0} k(q) dq = k(q_0 - c), \quad (74)$$

e uma análise do pacote de onda mostra que $\Psi(q_0, t_0)$ está localizado em redor de $q_0 = c$.

A função peso $\phi(E)$ em (71) tem o pico na energia E_0 , com

$$0 \ll E_0 \ll V_{\text{máx}},$$

e se anula para $E > V_{\text{máx}}$.

A evolução no tempo do pacote de onda pode ser calculada por meio do propagador

$$\begin{aligned}\Psi(q_f, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t; q_0, t_0) \Psi(q_0, t_0) dq_0 \\ &= \int_0^{\infty} \phi(E) dE \int_{-\infty}^{\infty} K(q_f, t; q_0, t_0) \Psi_{WKB}(q_0, c, E) dq_0.\end{aligned}\quad (75)$$

Neste ponto nós encontramos um problema. Nós queremos calcular $\Psi(q_f, t)$ para tempos tais que a partícula esteja localizada em posições distantes à direita da barreira, $q_f \gg b$. Contudo, não existem trajetórias clássicas com energia $E < V_{\text{máx}}$ que ligam pontos em lados opostos da barreira quando $T = t - t_0$ é real. Além disso, na seção 3.1 a integração sobre q_0 na (75) foi realizada usando a aproximação semiclássica para $K(q_f, t; q_0, t_0)$ e fazendo uma aproximação de fase estacionária sobre o ponto $\bar{q}_0$ definido por

$$E_{cl}(q_f, \bar{q}_0; T) = E. \quad (76)$$

Este procedimento é impossível aqui; todavia, um cálculo intuitivo do coeficiente de transmissão é possível se nós assumimos que a expressão semiclássica para $K(q_f, t; q_0, t_0)$ pode ser analiticamente estendida na região proibida. Então para $q_f > b$ temos do cálculo realizado a partir de (58) até (69) a integral:

$$\begin{aligned}\Psi(q_f, t) &= \int_0^{\infty} dE \phi(E) [k(q_f)]^{\frac{-1}{2}} \exp\left(i \int_c^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} Et\right) \\ &= \int_0^{\infty} dE \phi(E) [k(q_f)]^{\frac{-1}{2}} \exp\left(i \int_c^a k(q) dq + i \int_a^b \kappa_0(q) dq + i \int_b^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} Et\right) \\ &= \int_0^{\infty} dE \phi(E) [k(q_f)]^{\frac{-1}{2}} \\ &\quad \times \exp\left(i \int_c^a k(q) dq - \int_a^b \kappa_0(q) dq + i \int_b^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} Et\right);\end{aligned}\quad (77)$$

aqui na região $a < q < b$ nós definimos

$$\kappa_0(q) = i\kappa_0(q) = \frac{i}{\hbar} \{2m[V(q) - E_0]\}^{\frac{1}{2}}, \quad (78)$$

e vamos remover a exponencial com κ_0 para fora da integral (77) porque é uma função que varia lentamente com E e não contribui com um fator de fase dependente da energia. Assim,

$$\begin{aligned} \Psi(q_f, t) \cong & \exp\left(-\int_a^b \kappa_0(q) dq\right) \int_0^\infty dE \phi(E) [k(q_f)]^{\frac{-1}{2}} \\ & \times \exp\left(i \int_c^a k(q) dq + i \int_b^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} Et\right). \end{aligned} \quad (79)$$

Comparando (79) a (71), nós observamos que o pacote de onda transmitido tem a mesma forma do pacote de onda incidente, exceto por fatores de fase associados com a propagação até a barreira e após esta. A penetração da barreira, contudo, introduz um fator multiplicativo $T(E_0)$:

$$T(E_0) = \exp\left(-\int_a^b \kappa_0(q) dq\right). \quad (80)$$

A probabilidade de transmissão através da barreira de potencial é então

$$|T(E_0)|^2 = \exp\left(-2 \int_a^b \kappa_0(q) dq\right), \quad (81)$$

que é o coeficiente de transmissão WKB padrão^[7]. Contudo, usando o formalismo de integral de trajetória foi eliminada a necessidade de se utilizar fórmulas de conexão a fim de combinar funções de onda através dos pontos de retorno. O simples resultado (80), o qual foi possível obter estendendo analiticamente o propagador de Feynman semiclássico sobre um território onde não existem trajetórias clássicas, pode ser melhor interpretado e justificado^[20], quando em vez de procurar trajetórias clássicas para $(t - t_0)$ real, nós permitimos $(t - t_0)$ ser complexo e procuramos trajetórias que satisfaçam a lei de Newton, $m\ddot{q}_{cl} = -V'(q_{cl})$, e que conectam q_0, q_f com uma energia clássica menor que $V_{máx}$.

4 A Hamiltoniana Mapeada

Em nossa introdução à formulação das integrais de trajetória feita no capítulo 2, afirmamos que a função $H(p, q)$ que aparece na integral da ação do propagador escrito no espaço de fase é normalmente identificada como sendo a hamiltoniana clássica. Neste capítulo iremos desenvolver um formalismo, baseado em um trabalho apresentado por Galetti, Mizrahi e Pimentel^[11], que justificará a substituição desta hamiltoniana clássica por uma expressão quântica, a transformada de Weyl do operador hamiltoniano^[8]. Na verdade usaremos no lugar da função clássica apenas os primeiros termos de uma expansão em séries de potência nos momentos p desta transformada. Isto equivale afirmar que iremos trabalhar neste formalismo em uma aproximação adiabática. Uma vez que a transformada de Weyl faz parte da formulação de Weyl-Wigner para a mecânica quântica e que esta formulação é muito conveniente na obtenção de métodos semiclássicos poderemos estudar o comportamento dos resultados obtidos no capítulo 3, em especial aquele para o fator de tunelamento de barreira, quando fazemos correções na hamiltoniana. Começaremos este capítulo com uma breve introdução à formulação de Weyl-Wigner e depois aplicaremos esta formulação aos nossos propósitos.

4.1 Formulação de Weyl-Wigner - A Transformada de Weyl

Para representar as grandezas físicas (observáveis) e os estados de um sistema nós utilizamos, na representação usual da mecânica quântica, respectivamente os operadores e vetores de estado num espaço de Hilbert. A formulação de Weyl-Wigner propõe que tanto os estados quanto os observáveis do sistema sejam representados por funções ordinárias no espaço de fase. Nessa nova formulação, a transformada de Weyl faz o papel do operador da mecânica quântica usual enquanto que a função de Wigner ocupa o lugar dos vetores de estado.

Sabemos que na mecânica quântica os autovetores $|p\rangle$ e $|q\rangle$ dos operadores momento e coordenadas $\hat{P}$ e $\hat{Q}$, para um sistema de uma única partícula que se move em uma dimensão, satisfazem as equações de autovalores

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (82)$$

onde p e q são os autovalores. O conjunto completo de autovalores satisfaz as relações de completudeza

$$\int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}, \quad \int dq |q\rangle \langle q| = \hat{1}, \quad (83)$$

(onde $\hat{1}$ é operador unitário no espaço de Hilbert) e as relações de ortogonalidade

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad \langle q|q'\rangle = \delta(q - q'). \quad (84)$$

Os operadores $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ por sua vez obedecem as regras de comutação

$$[\hat{P}, \hat{P}] = 0, \quad [\hat{Q}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{P}, \hat{Q}] = -i\hbar \hat{1}. \quad (85)$$

Na representação das coordenadas o autovetor do momento tem a função de onda

$$\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}pq}. \quad (86)$$

O traço de um operador $\hat{A}$ qualquer da mecânica quântica é dado por

$$Tr \hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle p|\hat{A}|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q|\hat{A}|q\rangle. \quad (87)$$

Usando-se as relações (83) podemos escrever a seguinte identidade para um operador $\hat{A}$ qualquer

$$\hat{A} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dp'' \int_{-\infty}^{\infty} dp' \int_{-\infty}^{\infty} dq'' \int_{-\infty}^{\infty} dq' |q''\rangle \langle q''|p''\rangle \langle p''|\hat{A}|p'\rangle \langle p'|q'\rangle \langle q'|, \quad (88)$$

que usando (86), fica sendo:

$$\hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^{\infty} dp'' \int_{-\infty}^{\infty} dp' \int_{-\infty}^{\infty} dq'' \int_{-\infty}^{\infty} dq' |q''\rangle e^{\frac{i}{\hbar}p''q''} \langle p''|\hat{A}|p'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}p'q'} \langle q'|. \quad (89)$$

Fazendo a seguinte mudança de variáveis

$$\begin{aligned} q' &= q - \frac{v}{2}, & q'' &= q + \frac{v}{2} \\ p' &= p - \frac{u}{2}, & p'' &= p + \frac{u}{2}, \end{aligned} \quad (90)$$

sendo o jacobiano desta transformação igual a 1, podemos escrever $dq'' dq' dp'' dp' = dq dp dv du$; assim temos

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_{-\infty}^{\infty} du e^{\frac{i}{\hbar}(qu+pv)} |q + \frac{v}{2}\rangle \langle p + \frac{u}{2}|\hat{A}|p - \frac{u}{2}\rangle \langle q - \frac{v}{2}|, \quad (91)$$

que pode ser escrita na seguinte forma

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dq a(p, q) \Delta(p, q), \quad (92)$$

onde

$$a(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{\frac{i}{\hbar}qu} \langle p + \frac{u}{2} | \hat{A} | p - \frac{u}{2} \rangle \quad (93)$$

e

$$\Delta(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{\frac{i}{\hbar}pv} |q + \frac{v}{2}\rangle \langle q - \frac{v}{2}|. \quad (94)$$

A função $a(p, q)$ é a transformada de Weyl do operador $\hat{A}$ com respeito aos operadores de momento e de coordenadas $\hat{P}$ e $\hat{Q}$. Por (93) podemos associar a cada operador $\hat{A}$, que atua no espaço de Hilbert, com uma álgebra não comutativa, uma função $a(p, q)$, no espaço de fase com álgebra comutativa (c-number). De (93) também temos que $a(p, q)$ será uma função real se o operador $\hat{A}$ for hermitiano. É costumeiro dizer que o operador $\hat{A}$, definido no espaço de Hilbert, foi "mapeado" no espaço de fase via $\Delta(p, q)$. A expressão (94) é o operador delta que constitui uma base de operadores no espaço de fase. Para obter as expressões (93) e (94), nós escolhemos a variável p para compor o elemento de matriz $\langle p'' | \hat{A} | p' \rangle$, porém podemos escrevê-lo em termos da variável q e obter expressões análogas à (93) e (94), a saber

$$a(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{\frac{i}{\hbar}pv} \langle q - \frac{v}{2} | \hat{A} | q + \frac{v}{2} \rangle \quad (95)$$

e

$$\Delta(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} du e^{\frac{i}{\hbar}qu} |p - \frac{u}{2}\rangle \langle p + \frac{u}{2}|. \quad (96)$$

O que foi mostrado até aqui sobre a formulação de Weyl-Wigner já é o bastante para os nossos propósitos, porém esta formulação da mecânica quântica é muito mais ampla do que o apresentado, sendo também muito rica em aplicações. Atualmente, por exemplo, ela tem sido aplicada à mecânica estatística, em problemas da mecânica quântica, química quântica, física nuclear, óptica quântica, etc^[8,21].

4.2 Introdução da Hamiltoniana Mapeada

No capítulo 2 nós obtivemos a seguinte expressão para o propagador, escrito no espaço de fase

$$K(q_f, q_0; t) = \int D[p]D[q] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t (p\dot{q} - H(p, q))d\tau\right\}, \quad (97)$$

onde $D[p]D[q]$, o elemento de volume no espaço funcional, é definido segundo (31). A função $H(p, q)$, que é normalmente identificada como sendo a hamiltoniana clássica, será tratada quanticamente aqui a partir da função mapeada, no espaço de fase, do operador $\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})$ inicialmente definido no espaço de Hilbert. Para tal, usaremos a transformada de Weyl do operador $\hat{H}$, definida segundo (95)

$$H(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{\frac{i}{\hbar}pv} H(q, v), \quad (98)$$

onde

$$H(q, v) = \langle q - \frac{v}{2} | \hat{H} | q + \frac{v}{2} \rangle. \quad (99)$$

Introduzindo as novas variáveis

$$x' = q - \frac{v}{2}, \quad x = q + \frac{v}{2}, \quad (100)$$

a expressão (98) pode ser escrita na seguinte forma

$$H(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} d(x - x') e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} H(x, x'), \quad (101)$$

onde

$$H(x, x') = \langle x | \hat{H} | x' \rangle. \quad (102)$$

Para resolver a integral em (98) vamos supor para (99) um núcleo de um operador geral da forma

$$\langle q - \frac{v}{2} | \hat{H} | q + \frac{v}{2} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(v) + V(q, v), \quad (103)$$

que em termos das variáveis x, x' fica sendo

$$\langle x | \hat{H} | x' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(x - x') + V(x, x'), \quad (104)$$

em (103) e (104), δ'' denota a derivada segunda da distribuição delta de Dirac nas respectivas variáveis.

Utilizando (103) em (98) obtemos

$$H(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{\frac{i}{\hbar}pv} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(v) \right) + \int_{-\infty}^{\infty} dv e^{\frac{i}{\hbar}pv} V(q, v). \quad (105)$$

Na primeira integral em (105) usamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{d^m(x)}{dx^m} \delta(x) = (-)^m \frac{d^m}{dx^m} f(x)|_{x=0}$$

e obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-)^2 \frac{d^2}{dv^2} e^{\frac{i}{\hbar}pv} |_{v=0} = \frac{p^2}{2m}; \quad (106)$$

na segunda integral expandimos a exponencial segundo

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \quad (107)$$

para obter

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{\hbar^n} p^n V^{(n)}(q), \quad (108)$$

onde

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dv v^n V(q, v) \quad (109)$$

são, segundo a teoria da probabilidade^[22], os momentos sobre a origem de n-ésima ordem associados à $V(q, v)$.

Assim de (105), (106) e (108) temos

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{\hbar^n} p^n V^{(n)}(q). \quad (110)$$

A expressão (110) será a função a ser usada em (97) no lugar da hamiltoniana clássica, contudo, é óbvio que para isto (110) deve possuir todas as boas qualidades da expressão clássica além, é claro, de alguma nova informação quântica introduzida via o formalismo de Weyl. De fato, se tivéssemos utilizado em (98) um núcleo da forma $H(q, v) = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta''(v) + V(q) \delta(v)$ teríamos obtido o resultado padrão para $H(p, q)$. A forma de (103) ou (104) nos mostra que o potencial V é não-local. Assim, para explorar convenientemente $V^{(n)}(q)$

vamos colocar um potencial não-local $V(q, v)$ para ser integrado em (109); desse modo estaremos introduzindo em $H(p, q)$ os efeitos da não-localidade do potencial.

4.3 Potencial Não-Local de Forma Gaussiana

A expressão não-local para $V(q, v)$, a ser usada em (109), deve satisfazer alguns requisitos que podem ser melhor esclarecidos quando usamos V como função das variáveis x, x' . Se o número de partículas é conservado, o núcleo deve satisfazer a condição de hermiticidade ($\hat{V} = \hat{V}^\dagger$)

$$\langle x | \hat{V} | x' \rangle = (\langle x' | \hat{V} | x \rangle)^*$$

ou

$$V(x, x') = V^*(x', x), \quad (111)$$

e se temos simetria por reversão temporal, V é real e, portanto, por (111) será simétrico:

$$V(x, x') = V(x', x). \quad (112)$$

Há um importante exemplo de não-localidade, o potencial ótico, que em geral tem uma parte absorvente e, portanto, não é hermitiano e nem é real. Contudo, em muitas aplicações ele é ainda simétrico. Além de (111) e (112), nós queremos um potencial $V(x, x')$ simples no manuseio. Um potencial que atende à estas condições pode ser escrito na seguinte forma^[12]

$$V(x, x') = NV_0 e^{-2\alpha(x+x')^2} e^{-\frac{\beta}{2}(x-x')^2}; \quad (113)$$

um potencial gaussiano cuja não-localidade é expressa na forma gaussiana. Em (113), N é uma constante de normalização da parte não-local determinada via

$$N \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\frac{\beta}{2}\omega^2} = 1,$$

assim

$$N = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}}. \quad (114)$$

É importante normalizar a não-localidade para posteriormente calcularmos corretamente o limite local do potencial, ainda em (113), os parâmetros reais α e β tem ordens de magnitude

$$\alpha \sim \frac{1}{2L^2}, \quad \beta \sim \frac{2}{b^2}, \quad (115)$$

com L sendo a largura do potencial e b o alcance da não-localidade. A constante real V_0 está relacionada a intensidade do potencial.

Utilizando a mudança de variáveis (100), nós obtemos para (113)

$$V(q, v) = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} V_0 e^{-8\alpha q^2 - \frac{\beta}{2}v^2}. \quad (116)$$

Usando (116) em (109) nós obtemos para os momentos

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} V_0 e^{-8\alpha q^2} \int_{-\infty}^{\infty} dv v^n e^{-\frac{\beta}{2}v^2}; \quad (117)$$

usando agora o seguinte resultado^[9]

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-r^2 x^2} dx = \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{r^{n+1}}, \quad \text{para } n \text{ par e } n+1, r > 0 \quad (118)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-r^2 x^2} dx = 0, \quad \text{para } n \text{ impar}$$

nós obtemos para (117)

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} V_0 e^{-8\alpha q^2} \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{(\frac{\beta}{2})^{\frac{n+1}{2}}}. \quad (119)$$

Em (119) somente sobreviveram os valores pares de n , o que implica que $H(p, q)$ contém apenas potências pares de p .

Ainda podemos escrever (119) na seguinte forma

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} V_0 e^{-8\alpha q^2} \frac{\Gamma(\frac{n+1}{2})}{\beta^{\frac{n+1}{2}}} 2^{\frac{n+1}{2}}, \quad (120)$$

como n é par, $\frac{n+1}{2} = m + \frac{1}{2}$ com $m = \frac{n}{2}$, logo

$$\Gamma(m + \frac{1}{2}) = \frac{(2m-1)(2m-3)(2m-5)\dots 1}{2^m} \sqrt{\pi} \quad \text{onde } m = 1, 2, 3, \dots$$

assim (120) toma a forma

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} V_0 e^{-8\alpha q^2} \frac{(n-1)!!}{2^m} \frac{2^m \sqrt{2\pi}}{\beta^{\frac{n}{2}} \sqrt{\beta}}$$

ou

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n (n-1)!!}{n! \beta^{\frac{n}{2}}} V_0 e^{-8\alpha q^2}. \quad (121)$$

O momento de ordem zero, $V^{(0)}(q)$, é

$$V^{(0)}(q) = V_0 e^{-8\alpha q^2}, \quad (122)$$

que tem a forma de um potencial local sem nenhuma correção. A expressão (122) fará o papel do potencial local em $H(p, q)$.

O momento de ordem dois, $V^{(2)}(q)$, é

$$V^{(2)}(q) = \frac{V_0}{2\beta} e^{-8\alpha q^2} \quad (123)$$

O segundo momento $V^{(2)}(q)$ fará o papel de correção da massa, pois é o coeficiente do termo de ordem dois da expansão nos momentos p . Uma vez que estamos trabalhando em uma aproximação adiabática, a expressão para $H(p, q)$ carrega termos até p^2 e (110) toma a forma

$$H(p, q) \cong \frac{p^2}{2m} + V^{(0)}(q) - \frac{p^2}{\hbar^2} V^{(2)}(q)$$

ou

$$H(p, q) \cong p^2 \left[\frac{1}{2m} - \frac{V^{(2)}(q)}{\hbar^2} \right] + V^{(0)}(q) \quad (124)$$

Aqui nós definimos

$$\frac{1}{2M(q)} = \left[\frac{1}{2m} - \frac{V^{(2)}(q)}{\hbar^2} \right] \quad (125)$$

como sendo a massa efetiva da partícula.

É importante observar agora o que acontece quando desprezamos os efeitos da não-localidade do potencial; de fato, quando fizermos o limite $\beta \rightarrow \infty$ (ou $b \rightarrow 0$), devemos recuperar as expressões locais para $H(p, q)$ e $M(q)$. Aplicando o limite $\beta \rightarrow \infty$ às expressões (122) e (123) temos

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V^{(0)}(q) = V_0 e^{-8\alpha q^2}, \quad (126)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V^{(2)}(q) = 0.$$

Assim, o limite de (125) fica sendo

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2M(q)} = \frac{1}{2m}, \quad (127)$$

ou seja, no limite local a massa efetiva é a própria massa constante da partícula. Do mesmo modo o limite de (124) é

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} H_{n-l}(p, q) = H_l(p, q), \quad (128)$$

novamente recuperamos a expressão padrão, hamiltoniana local, quando fazemos o limite local para (124).

A expressão para a hamiltoniana não-local (124), pode ser escrita usando-se a definição (125)(sob a hipótese adiabática) como

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2M(q)} + V^{(0)}(q). \quad (129)$$

Inserindo (123) em (125), nós obtemos a expressão para a massa efetiva quando o potencial é da forma gaussiana

$$\frac{1}{2M(q)} = \frac{1}{2m} - \frac{V_0}{2\beta\hbar^2} e^{-8\alpha q^2}. \quad (130)$$

4.4 Potencial Não-Local de Forma Parabólica

Continuando a exigir todas as condições colocadas no início da seção 4.3, do núcleo do operador potencial $V(x, x')$, estudamos uma forma parabólica deste, escrevendo-o sob a forma

$$V(x, x') = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \left[V_0 - \frac{k}{2}(x + x')^2 \right] e^{-\frac{\beta}{2}(x-x')^2}. \quad (131)$$

Em (131), tanto V_0 quanto β tem as mesmas definições anteriores e k é um parâmetro real proporcional à energia dividida pelo quadrado da largura da barreira. Usando a mudança de variáveis (100), nós obtemos para (131)

$$V(x, x') = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} [V_0 - 2kq^2] e^{-\frac{\beta}{2}v^2}. \quad (132)$$

Inserindo (132) em (109) obtemos os momentos

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} [V_0 - 2kq^2] \int_{-\infty}^{\infty} dv v^n e^{-\frac{\beta}{2}v^2}. \quad (133)$$

A integral em (133) é resolvida da mesma maneira que em (117) levando ao resultado

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n}{n!} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} [V_0 - 2kq^2] \frac{(n-1)!!}{2^{\frac{n}{2}} \beta^{\frac{n}{2}}} \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta^{\frac{1}{2}}} 2^{\frac{n}{2}}$$

ou

$$V^{(n)}(q) = \frac{(-)^n (n-1)!!}{n! \beta^{\frac{n}{2}}} (V_0 - 2kq^2). \quad (134)$$

O momento de ordem zero, $V^{(0)}(q)$, é dado neste caso por

$$V^{(0)}(q) = V_0 - 2kq^2, \quad (135)$$

que será o potencial local.

O momento de ordem dois, $V^{(2)}(q)$, é

$$V^{(2)}(q) = \frac{V_0 - 2kq^2}{2\beta}, \quad (136)$$

o qual será a correção da massa para um potencial parabólico.

Novamente o limite local pode ser verificado fazendo $\beta \rightarrow \infty$ em (135) e (136), assim

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V^{(0)}(q) = V_0 - 2kq^2 \quad (137)$$

e

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} V^{(2)}(q) = 0. \quad (138)$$

Verificamos novamente que no limite $\beta \rightarrow \infty$ obtemos as expressões locais para $H(p, q)$ e $M(q)$.

A massa efetiva, no caso de uma barreira parabólica, é dada por

$$\frac{1}{2M(q)} = \frac{1}{2m} - \frac{(V_0 - 2kq^2)}{2\hbar^2 \beta}, \quad (139)$$

enquanto que a hamiltoniana não-local é

$$H(p, q) \cong \frac{p^2}{2M(q)} + (V_0 - 2kq^2). \quad (140)$$

Olhando para (134), (121) e (110), nós concluímos que para uma forma gaussiana de não-localidade e um potencial $V(q, v) = V_1(q)V_2(v)$ existe uma expressão geral para a massa efetiva dada por

$$\frac{1}{2M(q)} = \frac{1}{2m} \left[1 - \frac{mV^{(0)}(q)}{\hbar^2\beta} \right]$$

ou

$$M(q) = \frac{m}{1 - \frac{mV^{(0)}(q)}{\hbar^2\beta}} \quad (141)$$

4.5 O Propagador de Feynman com Massa Efetiva

De acordo com o que foi desenvolvido nas seções anteriores, nós podemos escrever agora um propagador no espaço de fase^[11], cuja hamiltoniana não-local é dada por

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2M(q)} + V(q), \quad (142)$$

onde $M(q)$ é dada por (141) e $V(q) = V^{(0)}(q)$. Assim substituindo (142) em (97) nós encontramos

$$K(q_f, q_0; t) = \int D[p]D[q] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} A([p, q]; q_f, q_0; t) \right\}, \quad (143)$$

com

$$A([p, q]; q_f, q_0; t) = \int_0^t \left[p\dot{q} - \frac{p^2}{2M(q)} - V(q) \right] d\tau. \quad (144)$$

Seguindo o mesmo procedimento da seção 2.3, integramos sobre o espaço dos momentos e obtemos a expressão do propagador no espaço de configurações

$$K(q_f, q_0; t) = \int D[q] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S([q]; q_f, q_0; t) \right\}, \quad (145)$$

onde

$$D[q] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left(\frac{M(q)}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \right\}, \quad (146)$$

e o funcional de ação é dado por

$$\begin{aligned} S([q]; q_f, q_0; t) &= \int_0^t \left[\frac{1}{2} M(q) \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right] d\tau \\ &= \int_0^t L([q(\tau)], [\dot{q}(\tau)]) d\tau, \end{aligned} \tag{147}$$

L sendo a lagrangiana não-local associada à hamiltoniana não-local (142).

Todo o formalismo desenvolvido neste capítulo nos mostra que, quando levamos em conta efeitos de não-localidade do potencial, alteramos a inércia da partícula.

5 O Propagador com Massa Efetiva

Ao introduzir, no capítulo anterior, os efeitos de não-localidade do potencial, verificamos que a hamiltoniana anteriormente assumida como sendo clássica dá lugar a uma hamiltoniana não-local, cuja diferença para aquela anterior, sob uma hipótese adiabática, é possuir uma massa efetiva $M(q)$ dependente da posição. Com esta hamiltoniana não-local escrevemos o propagador no espaço de fase, passando depois para a formulação no espaço de configurações, esta por sua vez dada em termos de uma lagrangiana também com massa efetiva.

De posse desta lagrangiana poderemos, neste capítulo, realizar uma aproximação semiclássica para o propagador, pois o princípio de ação mínima continua valendo e as equações de Euler-Lagrange, geradas por este princípio, são gerais e não fazem distinções entre sistemas com massas constantes ou massas efetivas. Assim, do ponto de vista do formalismo de não-localidade para o potencial, nessa aproximação adiabática, trabalhar com uma lagrangiana efetiva é como trabalhar com um formalismo clássico de lagrangiana para uma partícula cuja massa depende da posição.

Sob este novo enfoque estudaremos os resultados dos efeitos de um potencial não-local no tunelamento de barreira de potencial e, uma vez que já obtemos no capítulo 3 tais resultados para um potencial local, será importante verificar estes novos resultados no limite local do potencial.

5.1 Um Propagador Semiclássico com Massa Efetiva

Segundo o que foi desenvolvido no capítulo anterior, nós obtivemos uma lagrangiana dada por

$$L(q, \dot{q}; \tau) = \frac{M(q(\tau))\dot{q}^2(\tau)}{2} - V(q(\tau)), \quad (148)$$

sendo as equações de movimento obtidas via a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0. \quad (149)$$

Daí,

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{d}{d\tau} (M(q(\tau))\dot{q}(\tau)) = \frac{\partial M(q)}{\partial q} \dot{q}^2 + M(q)\ddot{q} \equiv M'(q)\dot{q}^2 + M(q)\ddot{q} \quad (150)$$

e

$$\frac{\partial L}{\partial q} = \frac{\dot{q}^2(\tau)}{2} \frac{\partial M(q)}{\partial q} - \frac{\partial V(q)}{\partial q} \equiv \frac{M'(q)\dot{q}^2}{2} - V'(q). \quad (151)$$

De (150) e (151) temos para (149)

$$\frac{M'(q)\dot{q}^2}{2} + M(q)\ddot{q} = -V'(q), \quad (152)$$

que determina a trajetória de uma partícula com massa dependente da posição. Se esta partícula tivesse uma massa constante, a (152) se reduziria simplesmente a (39). Naturalmente a trajetória determinada por (152) também satisfaz as condições de extremo $q(t_0) = q_0$ e $q(t) = q_f$. No movimento descrito por (152) também identificamos a quantidade conservada

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{M(q(\tau))\dot{q}^2(\tau)}{2} + V(q(\tau)) \right\} &= \left\{ M(q)\dot{q}\ddot{q} + \frac{\dot{q}^3}{2}M'(q) + V'(q)\dot{q} \right\} \\ &= \dot{q} \left\{ \frac{M'(q)\dot{q}^2}{2} + M(q)\ddot{q} + V'(q) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (153)$$

Aqui definiremos

$$\frac{M(q)\dot{q}^2}{2} + V(q) = E, \quad (154)$$

a energia associada à partícula com massa variável. Se fizermos em (154)

$$M(q)\dot{q} = P, \quad (155)$$

obtemos

$$\frac{P^2}{2M(q)} + V(q) = E. \quad (156)$$

Logo, a energia dada por (142) também tem a qualidade de ser uma quantidade conservada ao longo da trajetória. É claro que isto ocorre porque esta energia não carrega uma dependência explícita no tempo. Podemos relacionar E , em (154), como função de q_f, t, q_0 e t_0 via

$$t - t_0 = \int_{q_0}^{q_f} dq \left(\frac{M(q)}{2[E - V(q)]} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (157)$$

Nós já sabemos que a trajetória $q(\tau)$, de uma partícula de massa constante, cuja ação S satisfaz o princípio de ação mínima, $\delta S = 0$, para qualquer implemento δq , é a única a ser levada em conta na integral de trajetória no limite clássico. Aqui, de novo, temos que comprovar esta afirmação, desta feita com $M(q)$, procurando trajetórias $\bar{q}(\tau)$ para as quais

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] = 0. \quad (158)$$

Mas

$$\begin{aligned} S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] &= \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(\bar{q} + \delta q)(\dot{\bar{q}} + \delta \dot{q})^2}{2} - V(\bar{q} + \delta q) \right\} + \\ &\quad - \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2} - V(\bar{q}) \right\}, \end{aligned} \quad (159)$$

que, fazendo-se as seguintes expansões

$$\begin{aligned} M(\bar{q} + \delta q) &= M(\bar{q}) + M'(\bar{q})\delta q + \frac{M''(\bar{q})\delta q^2}{2} + \dots \\ V(\bar{q} + \delta q) &= V(\bar{q}) + V'(\bar{q})\delta q + \frac{V''(\bar{q})\delta q^2}{2} + \dots, \end{aligned} \quad (160)$$

e retendo termos até a primeira ordem em δq , torna-se

$$\begin{aligned} S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] &\simeq \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2} + M(\bar{q})\dot{\bar{q}}\delta \dot{q} + \frac{M'(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2}\delta q - \frac{M(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2} + \right. \\ &\quad \left. + V(\bar{q}) - V(\bar{q}) - V'(\bar{q})\delta q \right\} \\ &\simeq \int_{t_0}^t d\tau \left\{ M(\bar{q})\dot{\bar{q}}\delta \dot{q} + \frac{M'(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2}\delta q - V'(\bar{q})\delta q \right\}. \end{aligned} \quad (161)$$

O primeiro termo à direita em (161) pode ser integrado por partes

$$\int_{t_0}^t d\tau M(\bar{q})\dot{\bar{q}}\delta \dot{q} = M(\bar{q})\dot{\bar{q}}\delta q \Big|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t d\tau \delta q (M'(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2 + M(\bar{q})\ddot{\bar{q}}). \quad (162)$$

Uma vez que o primeiro termo à direita em (162) é nulo devido às condições de extremo, obtemos para (161)

$$S[\bar{q} + \delta q] - S[\bar{q}] = - \int_{t_0}^t d\tau \delta q \left\{ \frac{M'(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2} + M(\bar{q})\ddot{\bar{q}} + V'(\bar{q}) \right\}. \quad (163)$$

A expressão (163) será nula, para um δq arbitrário, se

$$\frac{M'(\bar{q})\dot{\bar{q}}^2}{2} + M(\bar{q})\ddot{\bar{q}} = -V'(\bar{q}), \quad (164)$$

ou seja, a trajetória $\bar{q}(\tau)$ é a trajetória $q(\tau)$ definida por (152). Através de (164) chegamos a conclusão de que no limite clássico, $\hbar \rightarrow 0$, a trajetória de extremo é a única que necessita ser considerada na integral de trajetória, mesmo que a partícula tenha uma massa variável.

Para obter-se uma aproximação semiclássica basta trabalhar-se até a segunda ordem em δq . Assim

$$\begin{aligned} S[q + \delta q] &\cong \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \left[\frac{M(q)}{2} + \frac{M'(q)\delta q}{2} + \frac{M''(q)\delta q^2}{2} \right] (\dot{q}^2 + 2\dot{q}\delta\dot{q} + \delta\dot{q}^2) + \right. \\ &\quad \left. - \left[V(q) + V'(q)\delta q + \frac{V''(q)\delta q^2}{2} \right] \right\} \\ &\cong \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(q)\dot{q}^2}{2} - V(q) \right\} + \int_{t_0}^t d\tau \left\{ M(q)\dot{q}\delta\dot{q} + \frac{M'(q)\dot{q}^2\delta q}{2} - V'(q)\delta q \right\} + \\ &\quad + \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(q)\delta\dot{q}^2}{2} + M'(q)\dot{q}\delta q\delta\dot{q} + \frac{M''(q)\dot{q}^2\delta q^2}{4} - \frac{V''(q)\delta q^2}{2} \right\}, \quad (165) \end{aligned}$$

Devido a (148) e (164), nós temos para (165)

$$\begin{aligned} S[q + \delta q] &\cong S[q] + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ M(q)\delta\dot{q}^2 + 2M'(q)\dot{q}\delta q\delta\dot{q} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{M''(q)\dot{q}^2}{2}\delta q^2 - V''(q)\delta q^2 \right\}. \quad (166) \end{aligned}$$

Integrando por partes o segundo termo a direita em (166), temos

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t d\tau M'(q)\dot{q}\delta q\delta\dot{q} &= M'(q)\dot{q}\delta q^2|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t d\tau \delta q \frac{d}{d\tau} \left\{ M'(q)\dot{q}\delta q \right\} \\ &= - \int_{t_0}^t d\tau \delta q \left\{ M''(q)\dot{q}^2\delta q + M'(q)\ddot{q}\delta q + M'(q)\dot{q}\delta\dot{q} \right\}, \end{aligned}$$

logo

$$2 \int_{t_0}^t d\tau M'(q)\dot{q}\delta q\delta\dot{q} = - \int_{t_0}^t d\tau \left[M''(q)\dot{q}^2\delta q^2 + M'(q)\ddot{q}\delta q^2 \right],$$

ou

$$2M'(q)\dot{q}\delta q\delta\dot{q} = -M''(q)\dot{q}^2\delta q^2 - M'(q)\ddot{q}\delta q^2. \quad (167)$$

Substituindo (167) em (166) obtemos

$$S[q + \delta q] \cong S[q] + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ M(q) \delta \dot{q}^2 - M''(q) \dot{q}^2 \delta q^2 - M' \ddot{q} \delta q^2 + \frac{M'' \dot{q}^2}{2} \delta q^2 - V''(q) \delta q^2 \right\},$$

ou simplesmente

$$S[q + \delta q] \cong S[q] + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ M(q) \delta \dot{q}^2 - \frac{M''(q) \dot{q}^2}{2} \delta q^2 - M'(q) \ddot{q} \delta q^2 - V''(q) \delta q^2 \right\}. \quad (168)$$

Definindo

$$F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) = V''(q) + M'(q) \ddot{q} + \frac{M''(q) \dot{q}^2}{2}, \quad (169)$$

temos para (168)

$$S[q + \delta q] \cong S[q] + \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left\{ M(q) \delta \dot{q}^2 - F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) \delta q^2 \right\}. \quad (170)$$

Em (169), F aparece como função de β , o parâmetro ligado à não-localidade do potencial $V(q)$, porque $M(q)$ carrega a dependência em β . No limite local, $\beta \rightarrow \infty$, a expressão (170) retorna a (52). Utilizando (170), podemos escrever a aproximação semiclássica para o propagador como

$$K(q_f, t; q_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \int D[\delta q] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} \left[M(q) \delta \dot{q}^2 - F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) \delta q^2 \right] \right\}, \quad (171)$$

assim, o propagador é dado pela exponencial de ação para uma partícula de massa $M(q)$, vezes uma integral para a exponencial da variação segunda da ação para esta partícula viajando sob um "potencial" $\frac{F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) q^2}{2}$. Utilizando o resultado do Apêndice B, no qual calculamos a integral em (171), podemos escrever o propagador na aproximação semiclássica como

$$K(q_f, t; q_0, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \left(\frac{2\pi i}{m^2} k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (172)$$

Utilizando (148), podemos escrever a ação $S[q]$ como

$$S[q] = \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \frac{M(q) \dot{q}^2}{2} - V(q) \right\}, \quad (173)$$

a qual usando (154), (155) e mudando a variável de integração para q , também pode ser escrita como

$$S[q] = -E(t - t_0) + \int_{q_0}^{q_f} dq [2M(q)(E - V(q))]^{\frac{1}{2}}. \quad (174)$$

Inserindo (174) em (172) obtemos para o propagador semiclássico

$$\begin{aligned} K(q_f, t; q_0, t_0) &= \left(\frac{2\pi i}{m^2} k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} \\ &\times \exp \left\{ i \int_{q_0}^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right\}. \end{aligned} \quad (175)$$

Uma vez que estamos interessados em estudar a influência da forma não-local do potencial sobre o tunelamento de barreiras de potencial, temos que observar como o propagador (175) atua sobre uma função de onda. Esta observação pode ser feita explicitamente, fazendo-se o propagador agir segundo (15). Dada a forma de (175), e devido ao interesse no cálculo da amplitude de probabilidade, antes mesmo de obtermos a função de onda que descreve o sistema, adotaremos uma função de onda do tipo WKB para uma partícula com massa variável $M(q)$:

$$\varphi(x_1, t_1) = \frac{1}{[k_l(x_1)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left(i \int_c^{x_1} k_l(x) dx - \frac{i}{\hbar} E_l t_1 \right), \quad (176)$$

onde

$$\hbar k_l(x) = \{2M(x)[E_l - V(x)]\}^{\frac{1}{2}} \quad (177)$$

com E_l sendo a energia da função $\varphi(x_1, t_1)$.

Assim, temos que calcular a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \varphi(q_f, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \left(\frac{2\pi i}{m^2} k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} e^{\frac{-i}{\hbar} E(t-t_0)} \\ &\times \exp \left(i \int_{q_0}^{q_f} k(q) dq \right) \frac{1}{[k_l(q_0)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left(i \int_c^{q_0} k_l(q) dq - \frac{i}{\hbar} E_l t_0 \right). \end{aligned} \quad (178)$$

Todos os comentários feitos sobre a expressão (60) também são aplicados a (178) com ênfase ao fato que $\hbar k(q) = \{2M(q)[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}$ com $E = E(q_0, q_f; \Delta t)$, definido via (157). Agora, (178) é calculada sob a aproximação de fase estacionária. Logo

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial q_0} \left(-E\Delta t + \int_{q_0}^{q_f} \{2M(q)[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} dq + \int_c^{q_0} \{2M(q)[E_l - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} dq - E_l t_0 \right) \\
&= \frac{\partial E}{\partial q_0} \left[-\Delta t + \int_{q_0}^{q_f} dq \left(\frac{M(q)}{2[E - V(q)]} \right)^{\frac{-1}{2}} \right] + \\
&\quad - \{2M(q)[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}} + \{2M(q)[E_l - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{179}$$

uma vez que os dois termos que multiplicam $\frac{\partial E}{\partial q_0}$ se anulam devido a (157), nós chegamos a conclusão que o ponto estacionário $\bar{q}_0$ é o valor de q_0 para o qual

$$E_l = E(\bar{q}_0, q_f; \Delta t) = E. \tag{180}$$

Assim, na aproximação de fase estacionária, (178) toma a forma

$$\begin{aligned}
\varphi(q_f, t) &= \left(\frac{2\pi i}{m^2} k^2(\bar{q}_0) \int_{\bar{q}_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} \frac{1}{[k(q_f)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_l t + i \int_c^{q_f} k(q) dq \right) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{2\pi i \hbar} \frac{\partial}{\partial q_0} \left\{ [2M(q)(E_l - V(q))]^{\frac{1}{2}} - [2M(q)(E - V(q))]^{\frac{1}{2}} \right\}_{q_0=\bar{q}_0} \right)^{\frac{-1}{2}}.
\end{aligned} \tag{181}$$

A expressão (181) tem como limite local a expressão (64). Os cálculos do primeiro e do último parenteses em (181) são efetuados de uma maneira totalmente análoga àquela da expressão (65), apenas levando-se em conta aqui que $M(\bar{q}_0)$ é a massa da partícula no ponto inicial de propagação $\bar{q}_0$, onde o potencial ainda não atua ou seja $V(q) = 0$, logo $M(\bar{q}_0) = m$. Dessa maneira obtemos para (181)

$$\varphi(q_f, t) = \frac{1}{[k(q_f)]^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} E_l t + \int_c^{q_f} k(q) dq \right). \tag{182}$$

Através de (182) observamos que o propagador (175) atuando sobre uma função de onda do tipo WKB para uma partícula de massa efetiva, propaga esta função em uma função semelhante em um tempo posterior. É importante frisar que no limite local do potencial, todas as expressões contidas nesta seção recaem naquelas da seção 3.1.

5.2 Penetração de Barreira Não-Local

Nesta seção iremos calcular uma expressão para o coeficiente de transmissão através de uma barreira de potencial com características não-locais. Todo o trabalho desenvolvido até aqui converge para esta aplicação. Que a não-localidade do potencial se reflete sobre

a massa da partícula é um fato já constatado, um exemplo disso é o potencial nuclear sob o qual o nucleon tem uma massa no estado ligado que é cerca de 0,7 daquela no estado livre; contudo, nós nos propusemos a estudar os efeitos da não-localidade da barreira de potencial sobre o tunelamento.

Deste modo, trataremos uma partícula com as mesmas características daquela da seção 3.2, incidindo sobre uma barreira não-local, com o propagador dado por (175). O pacote de onda que representa esta partícula é uma superposição de funções de onda do tipo (176), sendo escrito como

$$\varphi(q_0, t_0) = \int_0^\infty dE \phi(E) \varphi(q_0, c, E). \quad (183)$$

Todos os comentários acerca do pacote (183) e a função peso $\phi(E)$ são análogos àqueles encontrados na seção 3.2. A evolução temporal do pacote pode ser descrito segundo

$$\varphi(q_f, t) = \int_0^\infty \phi(E) dE \int_{-\infty}^\infty K(q_f, t; q_0, t_0) \varphi(q_0, c, E) dq_0. \quad (184)$$

Aqui novamente fazemos uma extensão analítica do propagador sobre a região no interior da barreira proibida classicamente, e utilizamos os resultados obtidos no final da seção anterior para escrever

$$\begin{aligned} \varphi(q_f, t) \cong & \exp\left(-\int_a^b \kappa_0(q) dq\right) \\ & \times \int_0^\infty dE \phi(E) \frac{1}{[k(q_f)]^{\frac{1}{2}}} \exp\left(i \int_c^a k(q) dq + i \int_b^{q_f} k(q) dq - \frac{i}{\hbar} E t\right), \end{aligned} \quad (185)$$

onde a e b são os pontos de retorno clássicos e $\kappa_0(q)$ é definido segundo

$$\kappa_0(q) = \frac{1}{\hbar} \{2M(q)[V(q) - E_0]\}^{\frac{1}{2}}, \quad (186)$$

sendo E_0 a energia com que a partícula incide sobre a barreira.

Assim, a amplitude de probabilidade $T(E_0)$ para a partícula atravessar uma barreira de potencial não-local é dada por

$$T(E_0) = \exp\left(-\int_a^b \kappa_0(q) dq\right), \quad (187)$$

sendo a probabilidade de transmissão dada por

$$|T(E_0)|^2 = \exp\left(-2 \int_a^b \frac{1}{\hbar} \{2M(q)[V(q) - E_0]\}^{\frac{1}{2}} dq\right). \quad (188)$$

Esta expressão semiclássica carrega a informação da não-localidade do potencial embutida na massa efetiva da partícula $M(q)$, dada pela expressão (141). O limite local da expressão (188) é dado pela expressão (81).

6 Resultados Numéricos

Neste capítulo será feita uma aplicação específica do resultado obtido, na seção 5.2, para a probabilidade de transmissão de uma partícula através de uma barreira de potencial não-local. A exemplo de Peierls e Vinh Mau^[19], que aplicam um potencial não-local do tipo dado por (113) ao estudo do espalhamento de um nucleon por dois tipos de núcleos alvo, nós iremos aplicar este mesmo potencial não-local gaussiano para estudar a transmissão de uma partícula através desta barreira de potencial. Nas duas situações estudadas a barreira de potencial tem largura distinta, com parâmetro α definido segundo (115) igual a 1 fm^{-2} e 2 fm^{-2} e possui uma intensidade $V_0 = 10 \text{ MeV}$. Esses valores foram escolhidos para efeitos de cálculo somente, não correspondendo a nenhum ajuste de qualquer núcleo particular. A partícula, um nucleon, com $\frac{m}{\hbar^2} \approx 0,024 \text{ MeV}^{-1} \text{ fm}^{-2}$, incide sobre a barreira de potencial com diversas energias, todas bem abaixo da intensidade V_0 .

Nós resolvemos numericamente a integral que aparece na probabilidade de transmissão, dada por (188), usando para tal o método de Gauss^[24] e com os resultados construímos gráficos, transmissão contra não-localidade e percentual de inibição de transmissão contra não-localidade, usando o programa Grapher. Através da expressão (141) foi possível fazer um estudo da dependência da massa efetiva $M(q)$ com a posição e a não-localidade, sempre utilizando o potencial (113). Neste estudo é utilizado o programa gráfico Surfer. A seguir apresentamos os resultados destes estudos.

6.1 A Massa Efetiva

Na seção 4.4, nós obtivemos a expressão para a massa efetiva que, quando estamos trabalhando numa aproximação adiabática com uma barreira de potencial dada por (113), pode ser escrita como

$$M(q) = \frac{m}{1 - \frac{mV_0}{\hbar^2\beta} e^{-8\alpha q^2}}, \quad (189)$$

onde $\frac{1}{\beta} = \frac{b^2}{2}$, com b sendo o alcance da não-localidade. Esta expressão diverge, refletindo o caráter aproximativo de nossos cálculos, quando

$$b = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{mV_0 e^{-8\alpha q^2}}}. \quad (190)$$

Vemos então que a não-localidade carrega uma dependência na posição q e cresce exponencialmente com esta. Se a não-localidade atingir o valor dado por (190), a massa efetiva $M(q)$ será infinitamente maior que a massa m da partícula e inibirá totalmente, segundo (188), a transmissão desta através da barreira de potencial. Não podemos nos esquecer que além de trabalhar em uma aproximação adiabática na dedução de (189), nós também estamos sob uma aproximação semiclássica em (147).

No caso particular em $q = 0$, e para valores descritos na introdução deste capítulo, o valor de b para o qual $M(q)$ diverge é $b \approx 2,89 \text{ fm}$. A divergência da massa efetiva desaparece exponencialmente com a posição e, para os valores $|q| \geq 1$, converge rapidamente para a massa m da partícula.

A figura 2 mostra o gráfico da massa efetiva $M(q)$ como função da não-localidade e da posição. O pico representa o ponto em que a massa é 25 vezes maior que a massa m , neste ponto o valor do parâmetro da não-localidade é $b = 2,82 \text{ fm}$ (na figura foi feito $y = \frac{1}{\beta}$, assim para $b = 2,82 \text{ fm}$ corresponde a $y = 4 \text{ fm}$). No ponto $b \approx 2,89 \text{ fm}$ ($y \approx 4,16 \text{ fm}$) a massa efetiva diverge. Neste gráfico fizemos $\alpha = 1 \text{ fm}^{-2}$, contudo, o valor escolhido não altera o ponto de divergência sobre o plano $q = 0$.

6.2 A Probabilidade de Transmissão e a Não-Localidade

O quanto a não-localidade afeta a probabilidade de transmissão, dada por (188), é o resultado numérico mais importante deste trabalho. Com este resultado podemos quantificar a influência da barreira de potencial não-local sobre o efeito túnel. Inserindo (189) em (188), nós obtemos a probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial gaussiana não-local:

$$|T(E_0)|^2 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \left\{ \frac{2m}{1 - \frac{mV_0}{\hbar^2\beta} e^{-8\alpha q^2}} [V(q) - E_0] \right\}^{\frac{1}{2}} dq\right), \quad (191)$$

onde os pontos de retorno clássicos, a e b , são determinados por

$$V_0 e^{-8\alpha q^2} = E_0, \quad (192)$$

que, para uma barreira simétrica em torno da origem, determina

$$a = -\sqrt{\frac{1}{8\alpha} \ln \frac{V_0}{E_0}} \quad e \quad b = +\sqrt{\frac{1}{8\alpha} \ln \frac{V_0}{E_0}} \quad (193)$$

As figuras 3 e 4 mostram a probabilidade de transmissão como função da não-localidade (aqui foi feito $x = \frac{1}{\beta}$). Na figura 3, onde a largura α é igual a 1 fm^{-2} , são traçadas curvas para energias cinéticas de 1 a 4 MeV . Evidentemente quanto maior a energia com que a partícula incide sobre a barreira de potencial, maior será a probabilidade de transmissão. Ao ponto zero do eixo da não-localidade corresponde o limite local do potencial e a probabilidade de transmissão tem seu valor máximo, conforme aumenta a não-localidade a transmissão diminui. Devido à massa efetiva, o fator de transmissão vai a zero quando a não-localidade atinge, no gráfico, aproximadamente $4,1 \text{ fm}$ ($b \approx 2,89 \text{ fm}$); isso ocorre igualmente para energias diferentes porque a massa efetiva não carrega dependência na energia cinética.

Na figura 4, a largura α é igual a 2 fm^{-2} , o gráfico tem as mesmas características do anterior, contudo, no limite local ($b = 0$) o fator de transmissão é maior. Isto se deve ao fato que quanto maior α , mais estreita é a barreira de potencial, o que facilita a transmissão. Também neste gráfico o ponto de divergência ($|T(E_0)|^2 = 0$) é aquele em que $b \approx 2,89 \text{ fm}$, isto se deve ao fato que este ponto está no plano $q = 0$.

Para concluir o estudo desta aplicação, mostramos nas figuras 5 e 6 o percentual de inibição do fator de transmissão como função do alcance da não-localidade do potencial. Na figura 5, o potencial tem largura $\alpha = 1 \text{ fm}^{-2}$, e na figura 6, o potencial tem largura $\alpha = 2 \text{ fm}^{-2}$. No primeiro caso, para uma energia cinética de 1 MeV , para um alcance de 2 fm da não-localidade, teríamos 20% a menos da transmissão no limite local do potencial.

No segundo caso, para uma mesma energia cinética e para um mesmo alcance da não-localidade, temos cerca de 15% a menos no fator de transmissão no limite local do potencial.

Chegamos, então, a conclusão que uma barreira de potencial não-local é "sentida" pela partícula como uma barreira de potencial local mais "larga" ou, numa maneira análoga, é como se a energia cinética da partícula diminuísse quando a barreira de potencial é não-local.

7 Conclusão

Aqui faremos uma síntese das consequências físicas dos resultados desta dissertação. Inicialmente notamos que, explorando convenientemente a conexão existente entre os formalismos de Feynman e Weyl-Wigner, pudemos transportar os efeitos da não-localidade do potencial, pelo menos nas condições assumidas, para a massa da partícula, tornando-a portadora de uma dependência na posição e no parâmetro de não-localidade. Esta conexão fica mais evidente quando lembramos que os dois formalismos se prestam ao estudo de fenômenos quânticos no limite quasiclássico e ambos são escritos no espaço de fase. Foi através da transformada de Weyl do operador hamiltoniano, o que chamamos de hamiltoniana mapeada, que nós fizemos o transporte dos efeitos não-locais do potencial para a massa efetiva. Lembramos que esta hamiltoniana mapeada é uma função de argumentos com uma álgebra comutativa, contudo, estes argumentos carregam todas as informações quânticas do operador hamiltoniano. A transformada de Weyl do operador $\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q})$, que é na verdade uma transformada de Fourier do núcleo do operador $H(q, v)$ (o qual devido à sua forma nos mostra que o potencial V é não-local), baldeia os efeitos da não-localidade para os momentos p .

Um outro ponto que devemos levantar seria a identificação das situações físicas em que os efeitos da não-localidade são importantes, em outras palavras, através de uma análise dos resultados numéricos obtidos fazer um balanço da influência da não-localidade sobre o efeito túnel. Antes, porém, de analisar estes resultados vamos fazer alguns comentários acerca de um estudo feito também sobre a não-localidade do potencial, no qual Peierls e Vinh Mau^[12] especulam sobre correções a serem feitas a uma forma aproximada local para um potencial não-local nuclear. Segundo aqueles autores, esta forma aproximada é conseguida quando $\frac{L}{b} \gg 1$, sendo L a distância sobre a qual o potencial atua e b o alcance da não-localidade, que é usualmente bem satisfeita no interior de núcleos grandes, onde L pode ser tomada da ordem do diâmetro nuclear. Contudo, se o núcleo for pequeno haverá grandes correções a serem feitas na forma local do potencial. Se $\frac{b}{L}$ é grande, o potencial não-local não pode ser aproximado por nenhuma interação local. Agora, em nosso estudo sobre os efeitos da não-localidade do potencial sobre a penetração de barreiras, observando os dados numéricos, nós chegamos a conclusão que, para um mesmo alcance da não-localidade do potencial e para uma mesma energia cinética da partícula incidente, o percentual de inibição do fator de transmissão é maior para a barreira de potencial com um

parâmetro α (inverso do quadrado da largura do potencial) menor, ou seja, o percentual de inibição é maior para a barreira de potencial "mais larga". Assim, efeitos não-locais seriam importantes na transmissão através de barreiras de potencial com larguras intermediárias, pois em barreiras muito extensas o efeito túnel é muito reduzido.

Realçamos também o caráter aproximativo de nossos cálculos. Este caráter está contido no truncamento na segunda ordem da expansão em série de potências nos momentos p que aparece na hamiltoniana mapeada, e se manifesta na divergência da massa efetiva em relação ao parâmetro da não-localidade. Este foi o preço a ser pago quando fizemos a escolha por uma hamiltoniana padrão (quadrada em p), a qual nos possibilitou incorporar os efeitos da não-localidade na massa efetiva; por trás desta escolha está a possibilidade de se passar do formalismo de Feynman escrito no espaço de fase para o mesmo escrito no espaço de configuração. Também não podemos esquecer da aproximação semiclássica feita no propagador, escrito no espaço de configuração, que contém uma lagrangiana ligada à hamiltoniana mapeada.

Por fim, será interessante verificar este modelo em potenciais compostos por uma parte repulsiva, com característica local e outra atrativa, com característica não-local. Este tipo de aplicação poderia, por exemplo, vir a explicar as diferenças existentes entre os dados experimentais e resultados teóricos para a fusão nuclear a baixas energias, verificada, por exemplo, em colisões abaixo da barreira coulombiana. Em astrofísica nuclear, até pouco tempo atrás, não havia estimativas teóricas para a fusão nuclear, e as previsões eram obtidas por extrapolações de curvas para fusão em altas e médias energias. Em muitos cálculos teóricos para a fusão nuclear não são levados em conta os efeitos não-locais do potencial nuclear.

8 Figuras

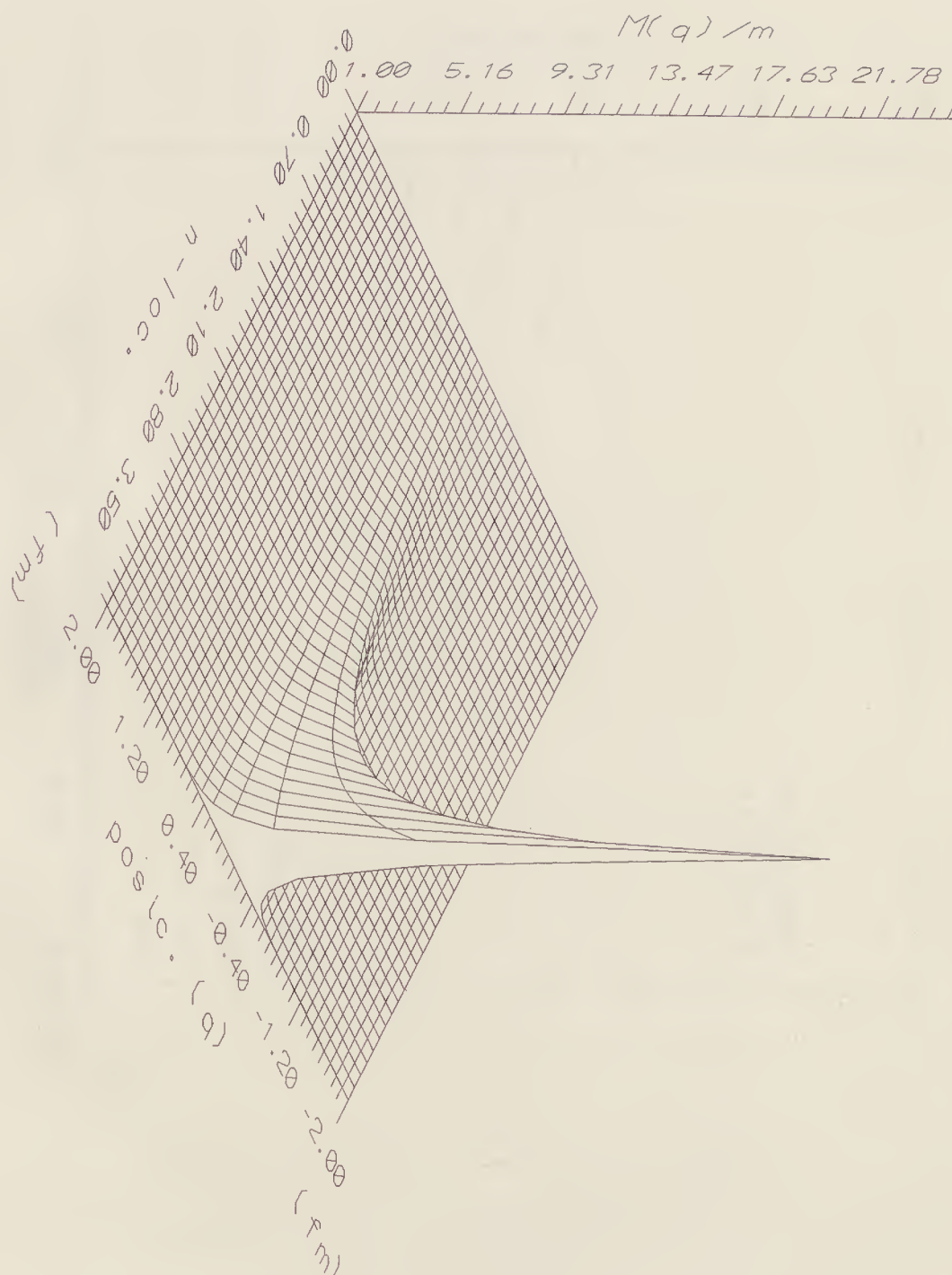


figura 2 - Relação entre a massa efetiva $M(q)$ e a massa da partícula m como função do alcance da não-localidade $(\frac{1}{\beta})$ e a posição (q) .

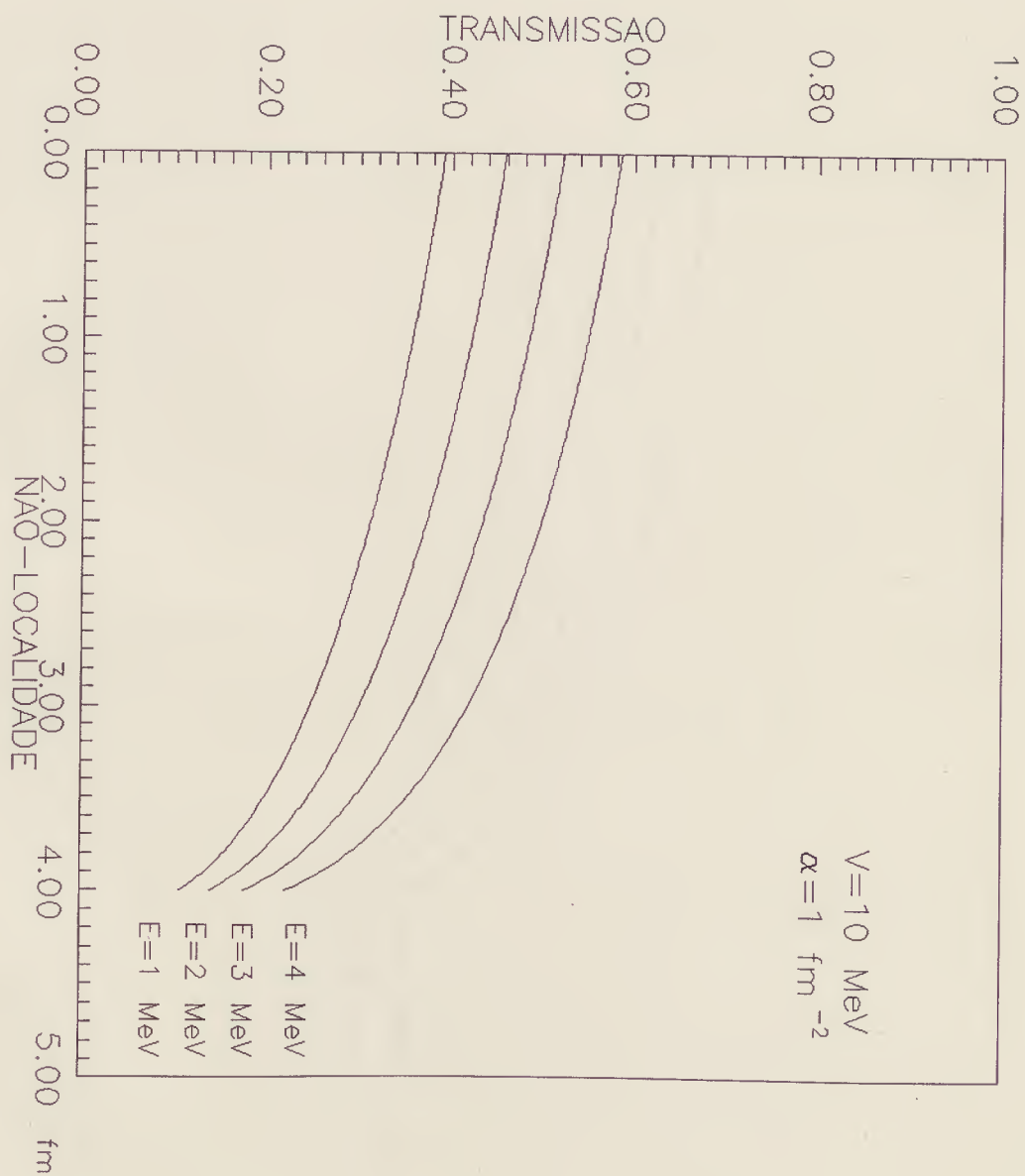


figura 3 - Fator de transmissão como função do alcance da não-localidade ($\frac{1}{\rho}$).

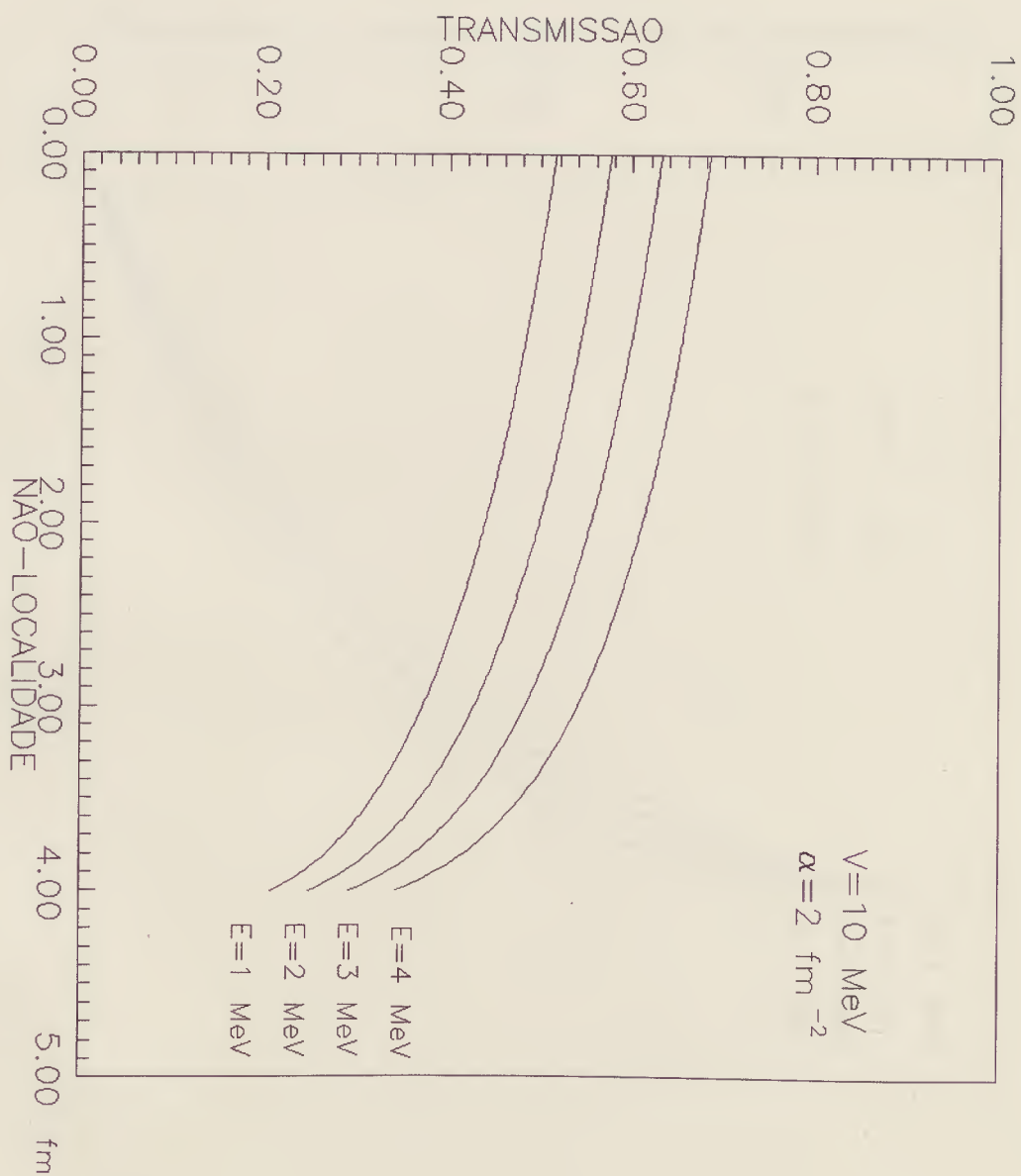


figura 4 - Fator de transmissão como função do alcance da não-localidade ($\frac{1}{\beta}$).

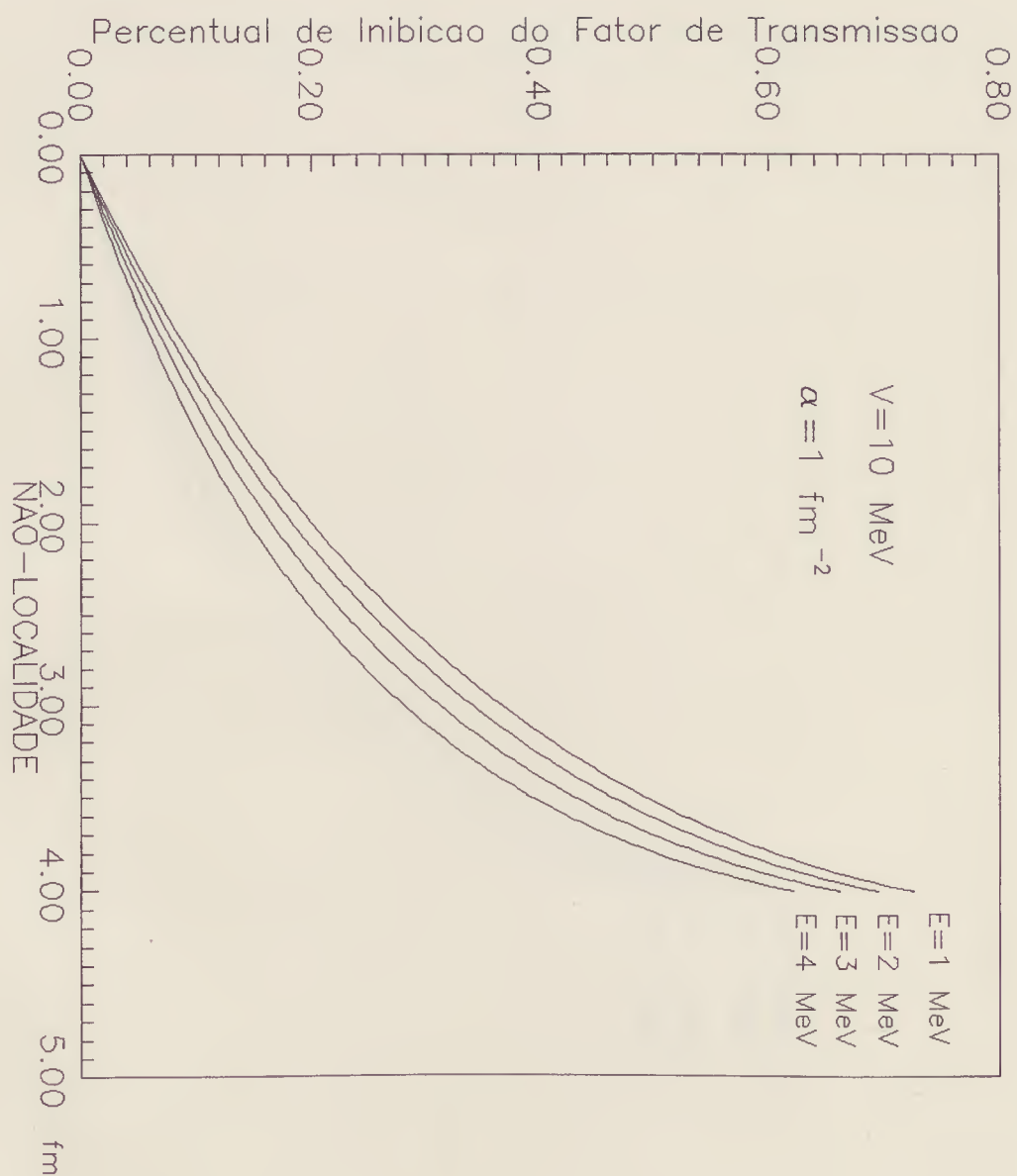


figura 5 - Percentual de inibição do fator de transmissão como função do alcance da não-localidade ($\frac{1}{\beta}$).

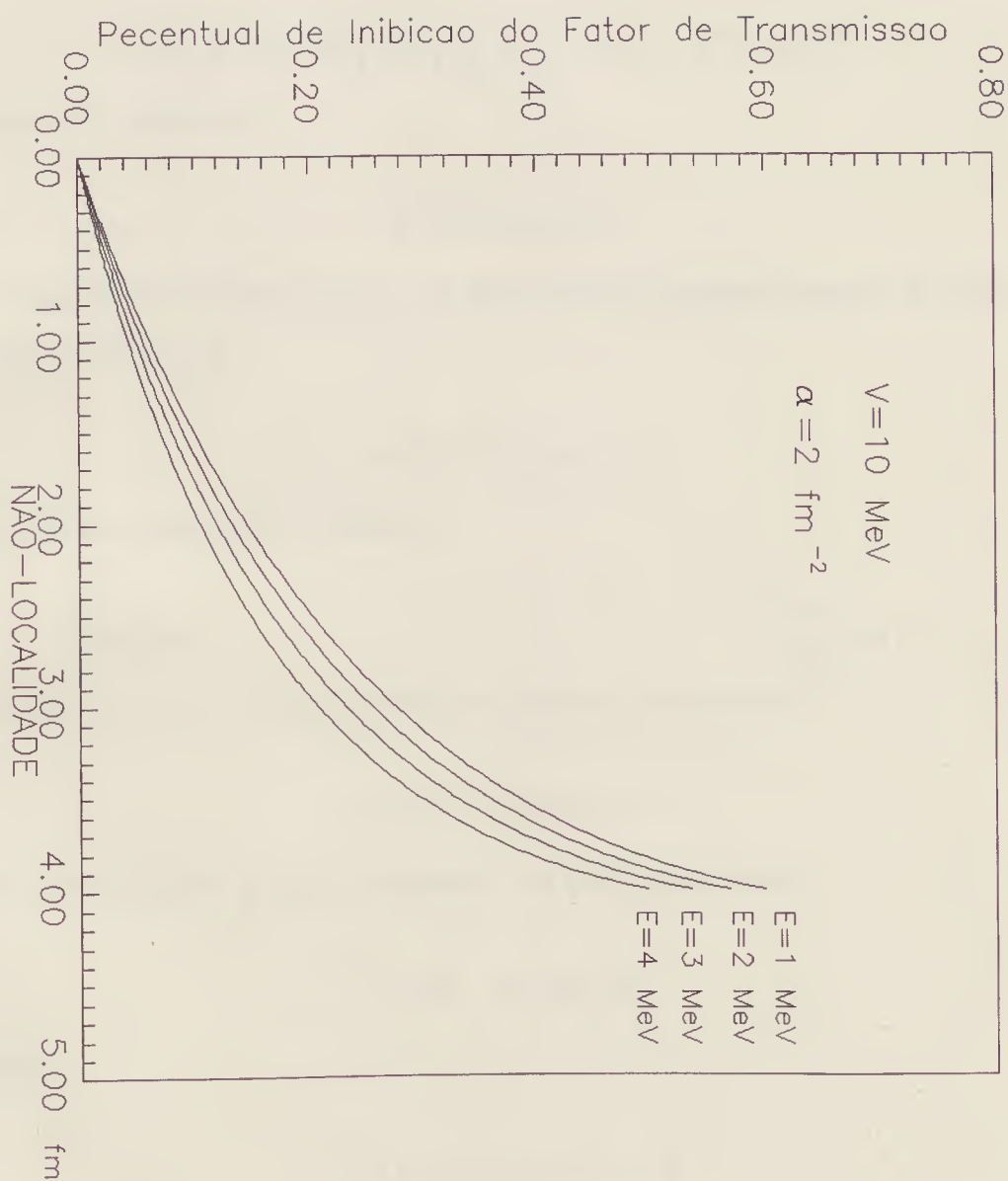


figura 6 - Percentual de inibição do fator de transmissão como função do alcance da não-localidade ($\frac{1}{\beta}$).

9 Apêndice A

Cálculo da integral da expressão (53), dada por:

$$\Phi = \int D[\delta q(\tau)] \left\{ \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} [m(\delta \dot{q})^2 - V''(q_{cl}) \delta q^2] \right\}. \quad (194)$$

De Coleman^[23], temos que:

$$\Phi = N(\Psi(\tau))^{\frac{-1}{2}}, \quad (195)$$

onde N é um fator de normalização a ser determinado posteriormente, e Ψ é uma função do tempo que obedece a:

$$m\ddot{\Psi} + V''(q_{cl})\Psi = 0, \quad (196)$$

e está sujeita às condições de extremo:

$$\Psi(t_0) = 0, \quad \frac{d\Psi}{d\tau} \Big|_{\tau=t_0} = 1. \quad (197)$$

Introduzindo $v(\tau) = \dot{q}_{cl}(\tau)$, nós notamos que devido à (39) temos

$$m\ddot{v}(\tau) + V''(q_{cl})v(\tau) = 0. \quad (198)$$

De (198) podemos isolar $V''(q_{cl})$ e substituir em (196) para obter

$$v(\tau)\ddot{\Psi} - \ddot{v}(\tau)\Psi = 0, \quad (199)$$

que justifica

$$\frac{d}{d\tau} \left(v(\tau)\dot{\Psi} - \dot{v}(\tau)\Psi \right) = 0. \quad (200)$$

Integrando (200) no tempo, usando as condições (197) para fixar a constante de integração, obtemos

$$v(\tau)\dot{\Psi} - \dot{v}(\tau)\Psi = v(t_0). \quad (201)$$

Já que (201) é equivalente a

$$v^2(\tau) \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\Psi}{v(\tau)} \right) = v(t_0), \quad (202)$$

nós encontramos

$$\Phi = N \left(\dot{q}(t_0) \dot{q}(t) \int_{t_0}^t \frac{d\tau}{\dot{q}^2(\tau)} \right)^{\frac{-1}{2}}. \quad (203)$$

Em termos de $k = \frac{mv}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \{2m[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}$:

$$\Phi = N' \left(k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}} \quad (204)$$

A variável de integração foi trocada para q com $d\tau = \frac{dq}{\dot{q}}$ e $N' = N(\frac{m}{\hbar})^{\frac{-1}{2}}$. A constante de normalização N' é fixada comparando (204) ao propagador para uma partícula livre^[5] ($V(q) = 0$, logo $k = ct = \frac{(q_f - q_0)m}{\hbar(t - t_0)}$)

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{1}{2}} &= N' \left(\frac{(q_f - q_0)}{k} \right)^{\frac{-1}{2}} \\ &= N' \left((q_f - q_0) \frac{\hbar(t - t_0)}{m(q_f - q_0)} \right)^{\frac{-1}{2}}, \end{aligned} \quad (205)$$

da qual nós encontramos que $N' = (\frac{1}{2\pi i})^{\frac{1}{2}}$. Assim

$$\Phi = \left(2\pi i k(q_0) k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} \frac{dq}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}}, \quad (206)$$

que é o resultado usado em (54).

10 Apêndice B

Nós temos que calcular a integral da expressão (171) dada por

$$\Xi = \int D[\delta q] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} [M(q)(\delta \dot{q})^2 - F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) \delta q^2] \right\}, \quad (207)$$

onde

$$F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) = V''(q) + M'(q)\ddot{q} + \frac{M''(q)\dot{q}^2}{2}. \quad (208)$$

Análogamente ao apêndice A, Ξ é da forma

$$\Xi = C(\Psi(t))^{\frac{-1}{2}}, \quad (209)$$

onde C é uma constante de normalização e $\Psi(\tau)$ é a solução da equação de movimento associada à lagrangiana

$$L = \frac{M(q)}{2} \dot{\Psi}^2 - \frac{F}{2} \Psi^2. \quad (210)$$

Utilizando a equação de Euler-Lagrange, obtemos de (210) a seguinte equação de movimento

$$M'(q)\dot{q}\dot{\Psi} + M(q)\ddot{\Psi} + F\Psi = 0, \quad (211)$$

com $\Psi(\tau)$ sujeita às seguintes condições de contorno

$$\Psi(t_0) = 0, \quad \frac{d\Psi}{d\tau} \Big|_{t=t_0} = 1. \quad (212)$$

Usando agora (152), na qual adotamos a notação $v(\tau) = \dot{q}$, nós temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{M'(q)v^2}{2} + M(q)\dot{v} + V'(q) \right\} &= \left\{ \frac{M''(q)v^3}{2} + M'(q)v\dot{v} + M'(q)v\dot{v} + M(q)\ddot{v} + \right. \\ &\quad \left. + V''(q)v \right\} = 0. \end{aligned} \quad (213)$$

De acordo com (208)

$$vF(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) = vV''(q) + M'(q)v\dot{v} + \frac{M''(q)v^3}{2}, \quad (214)$$

então (213) tem a forma

$$M'(q)v\dot{v} + M(q)\ddot{v} + vF(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) = 0,$$

ou

$$M'(q)v\dot{v} + M(q)\ddot{v} = -vF(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta). \quad (215)$$

De (215) temos para $F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta)$

$$F(q, \dot{q}, \ddot{q}; \beta) = -M'(q)\dot{v} - \frac{M(q)\ddot{v}}{v}. \quad (216)$$

Substituindo (216) em (211) temos

$$M'(q)v^2\dot{\Psi} + M(q)v\ddot{\Psi} - M'(q)v\dot{v}\Psi - M(q)\ddot{v}\Psi = 0, \quad (217)$$

que é equivalente a

$$\frac{d}{d\tau} \left(M(q)v\dot{\Psi} - M(q)\dot{v}\Psi \right) = 0. \quad (218)$$

Fazendo-se a integração de (218), encontramos

$$M(q)v\dot{\Psi} - M(q)\dot{v}\Psi = c, \quad (219)$$

onde c é a constante de integração, que pode ser determinada admitindo-se que

$$\text{para } \tau = t_0 \quad \text{temos } q_0 = q(t_0), \quad (220)$$

e usando as condições (212). Assim obtemos

$$c = M(q_0)v(t_0).$$

Logo, (219) é escrita como

$$M(q)v\dot{\Psi} - M(q)\dot{v}\Psi = M(q_0)v(t_0),$$

ou

$$v^2 \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\Psi}{v} \right) = \frac{M(q_0)v(t_0)}{M(q)}. \quad (221)$$

Integrando (221), usando novamente as condições (212), chegamos em

$$\Psi(\tau) = M(q_0)\dot{q}(t_0)\dot{q}(t) \int_{t_0}^t \frac{d\tau}{M(q)\dot{q}^2(\tau)}. \quad (222)$$

Usando (222) em (209), podemos escrever

$$\Xi = C \left(M(q_0)\dot{q}(t_0)\dot{q}(t) \int_{t_0}^t \frac{d\tau}{M(q)\dot{q}^2(\tau)} \right)^{\frac{-1}{2}}. \quad (223)$$

Usando a definição (155), podemos escrever

$$k(q) = \frac{P}{\hbar} = \frac{M(q)\dot{q}(\tau)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \{2M(q)[E - V(q)]\}^{\frac{1}{2}}, \quad (224)$$

então para t_0 temos

$$\dot{q}(t_0) = \frac{k(q_0)\hbar}{M(q_0)}, \quad (225)$$

e para t temos

$$\dot{q}(t) = \frac{k(q_f)\hbar}{M(q_f)}, \quad (226)$$

e lembrando que $dq = \dot{q}d\tau$, obtemos para (223)

$$\Xi = C \left(\frac{1}{\hbar M(q_f)} k(q_0)k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}}, \quad (227)$$

ou

$$\Xi = C' \left(k(q_0)k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}}, \quad (228)$$

onde

$$C' = C(\hbar M(q_f))^{\frac{1}{2}}. \quad (229)$$

A constante de normalização C' é fixada por comparação com o propagador para a partícula livre. Neste caso $V(q) = 0$, logo $M(q) = m$ e $k = cte$, assim (228) se reduz a

$$\Xi = C' \left(\frac{m^2(q_f - q_0)}{k} \right)^{\frac{-1}{2}} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (230)$$

logo

$$C' = \left(\frac{m^2}{2\pi i} \right)^{\frac{1}{2}},$$

com a qual escrevemos

$$\Xi = \left(\frac{2\pi i}{m^2} k(q_0)k(q_f) \int_{q_0}^{q_f} dq \frac{M^2(q)}{k^3(q)} \right)^{\frac{-1}{2}}, \quad (231)$$

o resultado usado no capítulo 5. É importante notar que no limite local do potencial, $M(q) \rightarrow m$, e todas as expressões deste apêndice recaem nas expressões similares do apêndice A.

11 REFERÊNCIAS

- [1] J. M. Ziman, *Principle of the Theory of Solids* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1964), p.96 .
- [2] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, N. Y., 1971), p.322 .
- [3] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear Structure* (Benjamin, N. Y., 1969), Vol.1, p.217 .
- [4] B. Baseia and H. M. Nussenzveig, *Opt. Acta* 31, 39 (1984);
J. C. Penaforte and B. Baseia, *Phys. Rev. A* 30, 1401 (1984);
J. C. Penaforte and B. Baseia, *Phys. Let.* 107 A, 250 (1985).
- [5] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* 20, 267 (1948).
- [6] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, N. Y., 1965).
- [7] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, N. Y., 1961), cap.7 .
- [8] S. R. de Groot and L. G. Suttorp, *Foundations of Electrodynamics* (North Holland, Amsterdam, 1972), cap.6 .
- [9] Veja-se por exemplo H. M. Nussenzveig, *Integrais de Trajetória* curso ministrado na I Escola de Verão de Partículas e Campos, I.F.T.
- [10] C. Garrod, *Rev. Mod. Phys.* 38, 483 (1966).

- [11] D. Galetti, S. S. Mizrahi and B. M. Pimentel, Phys. Sc. 27, 72 (1983).
- [12] R. Peierls and N. V. Mau, Nuc. Phys. A 343, 1 (1980).
- [13] P. A. M. Dirac, Rev. Mod. Phys. 17, 195 (1945).
- [14] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin, N. Y., 1985), caps. 1, 2
- [15] F. W. Byron and R. W. Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, N. Y., 1970), Vol. 2, cap. 7 .
- [16] M. S. Marinov, Phys. Rep. 60, 1 (1980).
- [17] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press. N. Y., 1965), p. 307 .
- [18] B. R. Holstein and A. R. Swift, Am. J. Phys. 50, 829 (1982).
- [19] A. Erdelyi, *Asymptotic Expansions* (Dover, N. Y., 1956), cap. 2 .
- [20] B. R. Holstein and A. R. Swift, Am. J. Phys. 50, 833 (1982).
- [21] M. C. Tijero, *A Mecânica Quântica no Espaço de Fase* monografia do exame de qualificação M.04/89-I.F.T.
- [22] B. Gnedenko, *Teoria della Probabilità* (Riuniti, Roma, 1978) cap. 5
- [23] S. Coleman, *The Whys of Subnuclear Physics* Proceedings of the 1977 International School of Subnuclear Physics (Plenum, N. Y. 1979) p. 805 .
- [24] B. Carnahan, H. A. Luther and J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods* (Wiley, N. Y., 1969) cap. 2 .

