

FABIANO MANOEL DE ANDRADE

**FUNÇÕES DE GREEN SEMICLÁSSICAS GENERALIZADAS
E APLICAÇÕES A SISTEMAS LIGADOS**

Dissertação apresentada ao Departamento de Física como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física. Universidade Federal do Paraná.

Orientador:
Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

CURITIBA
2001

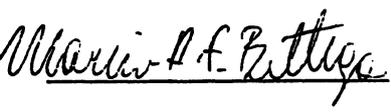
**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

FABIANO MANOEL DE ANDRADE

**TÍTULO : "FUNÇÕES DE GREEN SEMICLÁSSICAS GENERALIZADAS E
APLICAÇÕES A SISTEMAS LIGADOS "**

Em sessão pública, iniciada às nove horas e trinta minutos, nesta data, após um Seminário sobre o assunto de sua tese sob o título acima, e posterior argüição por esta Banca Examinadora, esta decidiu atribuir ao candidato conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
PROF. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ (Orientador/Presidente) (Dpto. Física UFPR)		<u>A</u>
Prof. MARCIO HENRIQUE FRANCO BETTEGA (Dpto. Física UFPR)		<u>A</u>
Prof^a. SANDRA DENISE PRADO (Instituto de Física UFRGS)		<u>A</u>

Curitiba, 20 de Setembro de 2001

*A minha Mãe Maria de Fátima, meu Pai
Manoel Pedro, minhas Irmãs Amanda e
Rafaela e a minha Namorada Micheli, pe-
lo estímulo e compreensão em todos esses
anos.*

Agradecimentos

Ao professor Marcos Gomes pelos seus ensinamentos pela confiança e dedicação. Aos professores Bin Kang Cheng e Marcus Beims pelas suas sugestões. Ao professor Edson Ferrari pelas sugestões com relação ao método de Noumerov. Aos amigos Marcos Cesar Santos, pela ajuda na parte numérica e Carlos Henrique Patsko, pela amizade e incentivo.

Conteúdo

Agradecimentos	i
Conteúdo	ii
Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	xii
Introdução	1
1 Aproximações semiclássicas	4
1.1 Descrevendo a Mecânica Quântica a partir de objetos clássicos	4
1.2 O propagador semiclássico	5

1.3	A função de Green semiclássica	7
2	Generalização da função de Green semiclássica	10
2.1	Uma proposta de generalização do método semiclássico	10
2.2	Função de Green para um único potencial de suporte compacto . . .	11
2.3	Potenciais de suporte compacto segmentados	13
2.4	Como utilizar a função de Green generalizada	16
2.5	Aplicação do método semiclássico generalizado a PCP	19
2.5.1	A construção da função exata	20
2.5.2	Dois pontos de descontinuidade	23
2.5.3	N pontos de descontinuidade	25
2.6	Funções de Green assintóticas	32
3	Funções de Green semiclássicas generalizadas para sistemas ligados e quase-estados	35
3.1	Poços quânticos	35
3.2	Os autovalores de energia	45
3.3	Um índice de Maslov generalizado	55
3.4	O desdobramento de energia para poços duplos	58

3.5	Aplicação da função de Green generalizada para o estudo de quase-estados	62
	Conclusão	68
	A O método WKB	70
A.1	Princípio da Correspondência	70
A.2	A expansão WKB	71
A.3	Aplicação para Estados Ligados	73
	B Integração Numérica da Equação de Schrödinger	79
B.1	O Método Noumerov	79
B.2	Iteração do Método de Noumerov	82
B.3	As Funções de Onda	84
	C Funções de Green Independentes do Tempo	85
C.1	Formalismo	85
C.2	Função de Green e Teoria de Perturbação	90
C.2.1	Expansão Perturbativa da Função de Green	90
	D Variação da fase Δ para os coeficientes de reflexão e transmissão para alguns potenciais	92

D.1 Exemplos	92
E Largura de quase-estados e desdobramento de energia	95
E.1 Relação entre largura de quase-estados e desdobramento de energia .	95

Resumo

Neste trabalho primeiro fazemos uma revisão da chamada função de Green semiclássica. Em seguida calculamos tais funções de Green para duas classes importantes de potenciais: (1) Potenciais Constantes por Partes (PCP) e (2) potenciais que possuam estados ligados que possam ser escritos como soma de barreiras e potenciais degraus, por exemplo, poços quânticos. Para PCP, a função de Green encontrada é de fato a função de Green exata do sistema. Para sistemas ligados, mostramos que dos pólos das funções de Green obtemos expressões analíticas para suas autoenergias, cujos resultados são muito bons quando comparados aos valores calculados numericamente. Calculamos também o desdobramento de energia (“energy splitting”) e o deslocamento de energia (“energy shift”) para os autoestados de poços duplos simétricos e assimétricos, respectivamente. Nossas expressões são as mesmas que as semiclássicas, entretanto, com um índice de Maslov dependente da energia. Isto explica o porquê de nossos resultados serem muito melhores que os semiclássicos usuais. Finalmente, mostramos como a função de Green semiclássica generalizada pode ser usada no estudo de potenciais que possuam quase-estados.

Abstract

In this work we first make a review of the called generalized semiclassical Green's function. Then we calculate this Green's function for two important classes of potentials: (1) piecewise constant potentials (PCP) and (2) bounded potentials which can be written as a sum of barrier and step potentials, e.g., quantum wells. For the PCP the resulting Green's function is indeed exact. For bounded system we show that from the poles of the Green's functions we obtain analytical expressions for the eigenvalues and the results are very good when compared with the values calculate numerically. We also calculate the energy splitting and energy shift for the eigenvalues of symmetric and asymmetric double wells, respectively. Our expressions are the same as the semiclassical formulas, but with a energy dependent Maslov index. This explain why our results are very much better than the usual semiclassical ones. Finally, we show as the generalized semiclassical Green's function can be used in the study of potentials which have quasi-states.

Lista de Figuras

2.1	Exemplos de potenciais de suporte compacto	11
2.2	Soma de vários potenciais de suporte compacto	14
2.3	Grupo de caminhos para uma partícula sair do ponto x_i e chegar no ponto x_f	18
2.4	Exemplo de PCP com quatro pontos de descontinuidade	20
2.5	Potencial com um ponto de descontinuidade (a) para x_i e x_j pertencendo à mesma região e (b) para x_i e x_j pertencendo à regiões diferentes	21
2.6	(a) Potencial para $n = 2$.(b)-(d) Representação esquemática de três possíveis caminhos para $G^{(2)}(x_b, x_a; E)$ no caso de $x_b, x_a < 0$	24
2.7	Divisão do potencial PCP em blocos para o cálculo da função de Green para N pontos de descontinuidade. Os A 's representam as amplitudes em cada um dos pontos de descontinuidades mencionados no texto. .	26
2.8	Grupos de caminhos P_{12} e P_{23} para PCP	27
2.9	Sentidos para os quais uma partícula pode deixar x_a e chegar a x_b . .	28

3.1	(a) Um poço simples é escrito como a soma de dois potenciais, (b) Um poço duplo é escrito como a soma e três potenciais. x_l e x_r são os pontos de retorno à esquerda e à direita do potencial, respectivamente	36
3.2	Pontos de retorno clássico para potenciais (a) quando $E < V(x)$ (b) quando $E > V(x)$	38
3.3	Grupos de caminhos para o poço simples. V_l e V_r são respectivamente os potenciais da esquerda e direita, utilizados para construir o poço simples.	38
3.4	(a) e (b) relação entre as ações clássicas para o Termo A, (c) e (d) relação entre as ações clássicas para o Termo C, (e) e (f) relação entre as ações clássicas para o Termo D. Os sinais (+) e (-) indicam se o termo é somado ou subtraído, respectivamente.	41
3.5	Quatro exemplos esquemáticos de ce para um poço duplo.	43
3.6	Grupos de ce para o poço duplo. x_l e x_r são os pontos de retorno à esquerda e direita à respectivamente e V_l e V_r são os potenciais que juntamente com a barreira são utilizados para a construção do poço duplo.	44
3.7	$c_l = c_r = 50$ $\alpha = 0.15$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$	49
3.8	$c_l = c_r = 50$ $\alpha = 0.3$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$	50
3.9	$c_l = c_r = 50$ $\alpha_l = 0.1$, $\alpha_r = 0.3$ $V_0 = 0.04$, $\gamma = 0.7$	51
3.10	$c_l = c_r = 10$ $\alpha = 0.1$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$	52
3.11	$c_l = 50$, $c_r = 101$ $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.2$, $V_0 = 0.04$, $w = 1$, $\gamma = 1.0$	53

3.12	$c_l = c_r = 50$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.2$, $V_0 = 0.04$, $w = 0.6$, $\gamma = 1.0$	54
3.13	Órbitas para o poço duplo de potencial	57
3.14	Exemplo de barreira que suporta quase-estados	62
3.15	Exemplo de como calcular a energia do quase-estado E_1 e sua largura Γ_1	63
3.16	Potencial com o lado esquerdo infinito	64
3.17	Barreira finita com uma parede infinita e os grupos de caminhos possíveis para a construção da função de Green.	65
3.18	Comportamento típico para um potencial que possui dois quase-estados. A_1 e A_2 são as alturas dos picos 1 e 2, respectivamente.	66
3.19	(a) Variação dos coeficientes de transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para o potencial da figura 3.17, (b) Comportamento da amplitude $ \mathcal{A} ^2 = \frac{T}{F} ^2$ como função da energia.	67
A.1	Domínios relevantes para a aproximação WKB para estados ligados	74
A.2	Potenciais lineares aproximados $V_l(x)$ e $V_r(x)$ válidos nas vizinhanças dos pontos de retorno x_l e x_r , respectivamente.	75
A.3	Comportamento de ξ nos domínios	76
D.1	(a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para uma delta de Dirac: $V(x) = \lambda\delta(x)$	93

D.2	(a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para a barreira qua- drada: $V(x) = V_0$ se $0 < x < d$ e $V(x) = 0$ em outra situação	93
D.3	(a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para o potencial de Rosen-Morse: $V(x) = W_0 / \cosh^2 \beta x$	94
E.1	No potencial acima fazendo $\tilde{L} \rightarrow \infty$ obtemos o potencial da figura 3.17.	96
E.2	No potencial acima fazendo $W_0 \rightarrow 0$ obtemos o potencial da figura 3.17	96
E.3	No potencial acima fazendo $\alpha \rightarrow 0$ obtemos o potencial da figura 3.17	96
E.4	Potencial para o cálculo de $E_{ps}(L)$	97

Lista de Tabelas

3.1	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.7 em unidades atômicas	49
3.2	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.8 em unidades atômicas	50
3.3	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.9 em unidades atômicas	51
3.4	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.10 em unidades atômicas	52
3.5	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.11 em unidades atômicas	53
3.6	Autovalores de energia para o potencial da figura 3.12 em unidades atômicas	54

Introdução

A Mecânica Quântica (MQ) teve seu início como uma tentativa de se entender fatos que classicamente não podiam ser explicados. No começo do século, fenômenos tais como a radiação de corpo negro, efeito foto-elétrico e a estrutura discreta do espectro de emissão atômica levaram cientistas a reformular a Física Clássica. No início, tentou-se apenas uma reestruturação das idéias clássicas, moldando-as de forma a abranger os novos fenômenos que estavam surgindo. Dentre estas tentativas (e que costumamos chamar de antiga MQ) a mais importante é devido a Niels Bohr que, com seus postulados, descreveu os valores corretos dos níveis de energia do átomo de Hidrogênio. Bohr associou ao elétron, trajetórias bem definidas, órbitas em torno do núcleo atômico, e propôs que o momento angular destas órbitas fosse quantizado através da relação

$$\oint p_q dq = n\hbar, \quad (1)$$

onde n é um número inteiro e \hbar é a constante de Planck ($h = 6,62608 \times 10^{-34} Js$) dividida por 2π , constante esta introduzida por Planck no estudo da radiação de corpo negro.

Alguns anos depois, Schrödinger, Heisenberg, Born e outros formularam a MQ como é conhecida nos dias atuais. Porém MQ moderna não permite que as partículas sejam pensadas como estruturas pontuais que seguem trajetórias com posição e momento bem definidos. Este fato é expresso pelo princípio da incerteza de Heisenberg, segundo o qual, não podemos determinar simultaneamente o momento e a posição

de uma partícula com precisão melhor do que aquela permitida pelo princípio da incerteza. Assim, a visão quântica mostra que no mundo sub-atômico a Mecânica Clássica (MC) não se aplica.

Entretanto, o comportamento quântico é basicamente caracterizado pela constante de Planck e , portanto, a transição do quântico para o clássico dá-se quando \hbar é pequeno comparado aos outros parâmetros relevantes do sistema. Assim, a associação da MC com a MQ ainda pode existir, mas com de um ponto de vista diferente daquele pensado na antiga MQ. Estruturas clássicas tais como órbitas periódicas, ações clássicas, etc., podem ser usadas não para descrever o problema físico em si, mas sim, para construir objetos matemáticos tais como função de onda e função de Green que fornecem toda a informação sobre o sistema em questão. Este procedimento é chamado de aproximação semiclássica em MQ e é um campo de pesquisa de intenso trabalho [1–8].

As aproximações semiclássicas são de grande interesse, não somente no entendimento dos fundamentos da mecânica quântica, mas também como uma ferramenta prática para os cálculos, usuais em áreas tão distintas como física nuclear e matéria condensada. Em algumas situações, entretanto, a aproximação semiclássica pode não fornecer resultados com a precisão desejada. Por exemplo, para os níveis de menor energia de algumas classes de potenciais unidimensionais (1D) as autoenergias obtidas através de cálculos semiclássicos podem desviar das autoenergias exatas por volta de 10% [9]. Também, quando aplicados a potenciais constantes por partes, os resultados da aproximação WKB ¹ (esta aproximação consiste na expansão da equação de Schrödinger em potências de \hbar , para maiores informações ver apêndice A) são pobres.

O desenvolvimento tecnológico permite hoje em dia a construção de estruturas unidimensionais microscópicas regulares tais como poços quânticos e super-redes [10],

¹Devido a G. Wentzel, H. A. Kramers e L. Brillouin

onde fenômenos quânticos são relevantes. Assim do ponto de vista prático é de grande importância possuir formas diferentes de obter as autoenergias de sistemas 1D. Obviamente, existem técnicas numéricas tal como o método de Noumerov (ver apêndice C), mas em algumas situações é mais apropriado um método analítico, como por exemplo, para investigar a influência de diferentes fatores na separação (“splitting”) de energia em poços duplos que representam: sistemas químicos como a molécula de amônia [11]; junções de dupla-camada [12]; e pontos quânticos (“quantum dots”) [13]. Uma possível candidata para fornecer métodos analíticos para a solução de tais sistemas seria a aproximação semiclássica usual, mas como descrito anteriormente esta pode não ser satisfatória em alguns sistemas tais como poços quânticos.

A literatura [14–17] tem mostrado que melhorias na função de Green semiclássica de Van Vleck-Gutzwiller [8] podem ser alcançadas escrevendo-se a função de Green semiclássica G como uma soma sobre caminhos clássicos, contanto que incorpore-se efeitos quânticos locais através de uma amplitude semiclássica generalizada. De fato, esta idéia foi usada com sucesso para estudar espalhamento por múltiplos potenciais em 1D [18, 19]. Nesta monografia mostraremos que tal função de Green semiclássica generalizada pode ser facilmente construída para sistemas quânticos ligados e em especial para poços quânticos, sendo portanto, uma extensão e uma melhoria de técnicas semiclássicas no estudo de problemas em 1D.

O presente trabalho tem como objetivo obter a função de Green semiclássica (G) para sistemas ligados e a partir dos pólos de G obter expressões analíticas para suas autoenergias. Como iremos mostrar, nossas expressões finais são generalizações das fórmulas semiclássicas usuais, pois possuem um índice de Maslov dependente da energia. Isto faz com que os nossos resultados analíticos sejam muito precisos quando comparados aos cálculos numéricos. Aplicamos, então, nossos resultados no cálculo de diversas grandezas de interesse, como o desdobramento e deslocamento de energia em poços duplos simétricos e assimétricos, respectivamente, e também no estudo de sistemas que possuam quase-estados.

Capítulo 1

Aproximações semiclássicas

1.1 Descrevendo a Mecânica Quântica a partir de objetos clássicos

Os conceitos fundamentais da MQ não podem ser obtidos da MC. No entanto, em alguns casos, muito do comportamento quântico pode ser entendido a partir da conexão com a dinâmica do sistema clássico análogo: estamos então no limite semiclássico da MQ. Em termos concretos, o limite semiclássico da MQ é dado quando a constante de Planck \hbar torna-se pequena ao ser comparada às grandezas características do sistema, que por abuso de linguagem escrevemos $\hbar \rightarrow 0$. Um método muito útil que segue tal linha é o método da aproximação WKB. Nesta aproximação, faz-se uma proposta para a função de onda do sistema como sendo $\psi = A \exp[(i/\hbar)S]$, onde S é a ação clássica e A a amplitude da função de onda. Aqui observamos a associação de um objeto clássico, a ação clássica, com a função de onda da MQ, exemplificando o uso de estruturas clássicas para calcular quantidades quânticas. Substituindo ψ dada acima na equação de Schrödinger e expandindo a equação resultante em potências de \hbar , no limite semiclássico, ou seja $\hbar \rightarrow 0$ obtemos, em ordem zero de \hbar , a

equação de Hamilton-Jacobi da MC. Para sistemas ligados os autoestados de energia podem ser obtidos semiclassicamente da aproximação EBK ¹, na qual os autoestados de energia são obtidos da equação de quantização $\oint pdq = 2\pi\hbar(n + \beta/4)$, onde $n = 0, 1, 2, 3 \dots$, β é um número (chamado índice de Maslov) inteiro e a integral é realizada sobre uma órbita fechada do movimento da partícula.

Além da função de onda, outros objetos matemáticos em MQ também possuem uma descrição semiclássica muito interessante, em especial a função de Green, que fornece toda a informação sobre o sistema quântico (autoestados, autoenergias, evolução temporal do sistema após uma transformada de Fourier, etc), essa função será o objeto de nosso maior interesse ao longo deste trabalho.

A seguir faremos uma breve discussão sobre o propagador e a função de Green e como ambos são calculados semiclassicamente.

1.2 O propagador semiclássico

O limite semiclássico também pode ser aplicado ao propagador usual em MQ. O propagador fornece a evolução temporal do sistema quântico, ou seja, dado um estado quântico em um tempo t_0 , podemos encontrar o estado quântico em t ($t > t_0$) através da integral do produto do propagador e da função de onda do estado inicial, ou seja:

$$\psi(x, t) = \int_{t_0}^t K(x, x_0; t, t_0) \psi(x_0, t_0) dx_0. \quad (1.1)$$

Na abordagem de Feynman da MQ [20] o propagador é dado pela soma de todos os possíveis caminhos para uma partícula sair de um ponto a e chegar em um ponto b , modulado pela respectiva ação clássica ($C = (2\pi i\hbar\varepsilon/m)^{1/2}$, $\dot{x} = dx/dt$)

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{C} \iint \dots \int e^{(i/\hbar)S(b,a)} \frac{dx_1}{C} \frac{dx_2}{C} \dots \frac{dx_{N-1}}{C} \quad (1.2)$$

¹Devido à Einstein-Brillouin-Keller

onde

$$S(b, a) = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt, \quad (1.3)$$

e pode ser escrito numa notação mais compacta,

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S(b, a)} \mathcal{D}[r(t)]. \quad (1.4)$$

No limite semiclássico ($\hbar \rightarrow 0$), a exponencial da ação no propagador ($e^{\frac{i}{\hbar} S(b, a)}$) varia muito rapidamente entre os vários caminhos possíveis de a até b , fazendo com que as amplitudes destes caminhos sofram interferência destrutiva cancelando-se mutuamente. Entretanto, a interferência destrutiva não acontece na vizinhança daqueles caminhos especiais \bar{x} 's, para os quais ΔS é pequeno sob pequenas variações dos caminhos. De fato, da MC [21] estes \bar{x} 's são as trajetórias clássicas que unem os pontos a e b . Então, no limite semiclássico as trajetórias que mais contribuem para o propagador (1.4) são justamente as trajetórias clássicas \bar{x} 's [8, 22].

Matematicamente, o processo correto para tomar o limite semiclássico do propagador é expandir a ação em (1.4) em torno da trajetória clássica até o termo de segunda ordem, negligenciando termos de ordem superior. O termo de ordem mais baixa é a própria ação da trajetória clássica, o termo de primeira ordem, que representa a derivada da ação clássica é nulo [21]. O termo de segunda ordem foi analisado por Marston Morse [8]. Morse demonstrou que, para intervalos de tempo suficientemente pequenos, a variação de segunda ordem, considerada como uma forma quadrática dos deslocamentos δx de todos os possíveis caminhos ao redor de uma dada trajetória é positiva e, portanto, a trajetória clássica para intervalos de tempo suficientemente curtos é de fato um mínimo entre todos os possíveis caminhos. Neste termo de segunda ordem existe uma série de tempos distintos que são chamados de conjugados de t_a (tempo inicial) e a medida que o intervalo de tempo aumenta, a segunda variação adquire um autovalor negativo cada vez que t_b (tempo final) passa por um tempo conjugado.

Após feita a expansão até segunda ordem, a integração sobre dx pode ser efetuada,

uma vez que este termo é quadrático. Em coordenadas generalizadas a solução final é (para detalhes da obtenção ver [23])

$$K_{scl}(q_b, t_b; q_a, t_a) = \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} (2\pi\hbar)^{-f/2} \sqrt{M} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q_b, t_b; q_a, t_a) - \kappa \frac{\pi}{2}\right), \quad (1.5)$$

onde

$$M = \det\left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q_b \partial q_a}\right), \quad (1.6)$$

provêm do termo de segunda ordem da aproximação. κ é chamado de índice de Morse e é o número de tempos conjugados no intervalo $t_b - t_a$ (ou seja o número de auto-valores negativos do termo de segunda ordem) e f é a dimensão do espaço. Esta fórmula foi primeiramente escrita por Van Vleck em 1928 [24], logo depois do desenvolvimento da equação de Schrödinger.

1.3 A função de Green semiclássica

A função de Green na MQ é um objeto matemático importante definido pela equação

$$[E - \mathcal{H}(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.7)$$

onde $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ é o operador Hamiltoniano, definido como

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

No apêndice B apresentamos uma discussão completa sobre as propriedades de G .

O nosso interesse é a função de Green no limite semiclássico, a qual é obtida tomando-se a transformada de Fourier da fórmula de Van Vleck (1.5),

$$G_{scl}(q_b, q_a; E) = \int_0^\infty K_{scl}(q_b, t_b; q_a, t_a) e^{\frac{i}{\hbar} E t} dt. \quad (1.9)$$

Calcular a integral em (1.9) não é uma tarefa fácil. Para tal, usamos o *método de fase estacionária*, onde precisamos calcular o ponto estacionário do expoente

$S(q_b, t_b; q_a, t_a) + Et$, como função do tempo. Os cálculos são discutidos em [7] e fornecem a seguinte forma para a função de Green semiclássica de Van Vleck e Gutzwiller [8]

$$G_{scl}(q_b, q_a; E) = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{\frac{f+1}{2}}} \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} \sqrt{(-1)^{f+1} D_{cl}} \exp[-i\frac{\pi}{2}\eta] \exp[\frac{i}{\hbar}S_{cl}(q_b, q_a; E)] \quad (1.10)$$

onde

$$D_{cl} = \frac{1}{|\dot{q}_b||\dot{q}_a|} \det' \left(-\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial q_b \partial q_a} \right) \quad (1.11)$$

$$S(q_b, q_a; E) = \int_{q_a}^{q_b} p dq. \quad (1.12)$$

Nas equações acima f é a dimensão do espaço, η é o número de pontos conjugados entre q_a e q_b , com energia E constante. Pontos conjugados são os pontos da trajetória nos quais o determinante $(-\partial^2 S/\partial q_b \partial q_a)$ torna-se singular. Os termos $|\dot{q}_b|$ e $|\dot{q}_a|$ em D_{cl} são as velocidades nos pontos q_a e q_b , respectivamente e D_{cl} é interpretada como a densidade de caminhos e é chamada de amplitude semiclássica. O fator $(-1)^{f+1}$ assegura que a expressão sob a raiz seja positiva para trajetórias curtas.

A expressão \det' em (1.11) indica a omissão da primeira linha e coluna da matriz $(-\partial^2 S/\partial q_b \partial q_a)$. Este determinante é igual a 1 para sistemas unidimensionais. S é a ação da partícula entre os pontos q_a e q_b .

A expressão (1.10) e seu traço, a fórmula do traço de Gutzwiller [8], fornecem bons resultados na resolução semiclássica de sistemas quânticos, como a partícula livre em dimensões ímpares (onde na realidade fornecem os resultados exatos), o problema de Kepler anisotrópico, o átomo de Hélio [8, 25–27], etc. De fato, esta expressão fornece resultados exatos para potenciais quadráticos em 1-D.

Apesar do sucesso dos resultados semiclássicos, alguns problemas, tais como tunelamento, não podem ser descritos adequadamente pelo método semiclássico usual, isto é, considerando somente as trajetórias que são soluções reais da equação de Hamilton-Jacobi. Desta forma, é interessante tentar melhorar a expressão (1.10),

sem modificar muito sua estrutura. Observando cuidadosamente esta equação, notamos que uma das fontes de problemas está associada aos pontos de retorno clássico (onde $E = V$). Nestes pontos a velocidade da partícula $|\dot{q}|$ é nula fazendo com que o termo D_{cl} divirja. Assim, uma tentativa de melhorar esta expressão é justamente modificar a amplitude semiclássica D_{cl} . No próximo capítulo discutiremos uma possibilidade de generalização da função de Green semiclássica seguindo esta linha de raciocínio.

Capítulo 2

Generalização da função de Green semiclássica

2.1 Uma proposta de generalização do método semiclássico

Existem diferentes maneiras de se tentar melhorar a aproximação semiclássica para o propagador e a função de Green. Por exemplo: (i) uso de trajetórias complexas estendendo as variáveis clássicas para o plano complexo. Desta forma, obtêm-se trajetórias com valores complexos dentro das regiões classicamente proibidas [28–33]. Recentemente, tunelamento multidimensional [34] e tunelamento caótico [35, 36] foram discutidos desta forma. (ii) No domínio do tempo, considerando a representação inicial do propagador semiclássico em termos da propagação de pacotes de ondas Gaussianos procedendo somente com tempos reais e trajetórias clássicas [37–39]. (iii) Considerar para o sistema uma versão semiclássica da mecânica de matrizes de Heisenberg, a qual de uma certa forma ‘evita’ o problema de conexão das regiões clássicas distintas ([40, 41] e referências lá contidas).

Apesar de existirem os métodos citados no parágrafo anterior, seria muito bom melhorar a equação (1.10) sem modificar muito a sua forma, pois esta é fisicamente intuitiva e possui uma estrutura matemática simples, evitando técnicas relativamente complicadas como as usadas nos métodos já mencionados. Atualmente, alguns resultados na literatura [14, 15] mostram que efeitos não clássicos podem ser incorporados na fórmula semiclássica através de uma amplitude semiclássica W , com a função de Green então sendo escrita como $G_{\text{gen}} = \sum_{cl} W \exp[i/\hbar S_{cl}]$, com W mais geral do que a densidade de caminhos D_{cl} . Para alguns exemplos específicos, foi mostrado que a transformada de Fourier exata para G (o propagador) pode ser escrita como uma fórmula semiclássica *generalizada*. Em um trabalho recente, MGE da Luz e colaboradores [18] mostraram que para potenciais de suporte compacto a função de Green exata pode ser escrita na forma $G_{\text{gen}} = \sum_{cl} W \exp[i/\hbar S_{cl}]$. Nas próximas seções passamos a discutir tais resultados.

2.2 Função de Green para um único potencial de suporte compacto

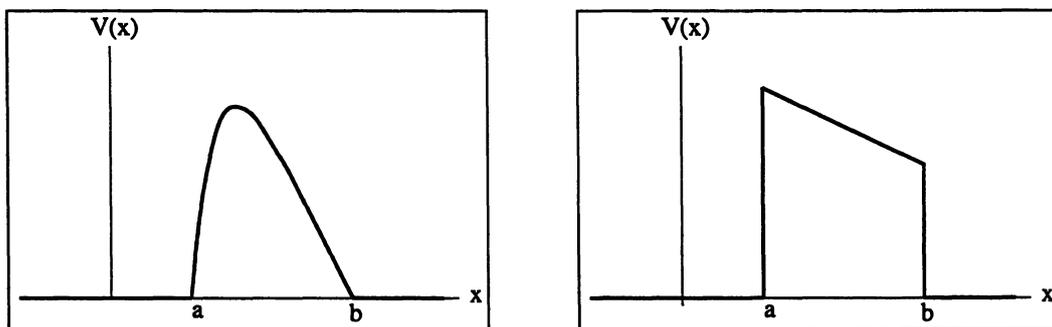


Figura 2.1: Exemplos de potenciais de suporte compacto

Aqui iremos seguir as idéias expostas na referência [18] para obter a função de Green para um único potencial de suporte compacto, como aqueles da fig. 2.1. Sendo $\{\psi_n, \psi_k\}$ o grupo completo de soluções da equação de Schrödinger para o potencial

acima (ψ_n e ψ_k sendo, respectivamente, a função de onda para os estados ligados e estados de espalhamento com energias E_n e $\hbar^2 k^2/(2m)$), a função de Green associada ao deslocamento de uma partícula entre os pontos x_i e x_f com energia E , pode ser obtida através da expansão espectral da função de Green (ver apêndice B)

$$\begin{aligned} G &= G^{(e.l.)}(x_f, x_i; E) + G^{(e.e.)}(x_f, x_i; E) \\ &= \sum_n \frac{\psi_n(x_f)\psi_n^*(x_i)}{E - E_n} + \int_0^\infty dk \frac{\psi_k(x_f)\psi_k^*(x_i)}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde $G^{(e.l.)}$ representa a função de Green associada aos estados ligados (e.l.) e $G^{(e.e.)}$ a função de Green associada aos estados de espalhamento (e.e.).

As soluções de espalhamento $\psi_k^{(\pm)}(x)$ de uma onda plana chegando da esquerda (+) e da direita (-) são dadas por

$$\psi_k^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp[\pm ikx] + \mathcal{R}^{(\pm)}(k) \exp[\mp ikx] & \begin{cases} x < a & \text{para (+)} \\ x > b & \text{para (-)} \end{cases} \\ \mathcal{A}^{(\pm)} u_k(x) + \mathcal{B}^{(\pm)}(k) s_k(x) & a < x < b \\ \mathcal{T}(k) \exp[\pm ikx] & \begin{cases} x > b & \text{para (+)} \\ x < a & \text{para (-)} \end{cases} \end{cases} \quad (2.2)$$

onde $\mathcal{R}^{(\pm)}$, $\mathcal{A}^{(\pm)}$, $\mathcal{B}^{(\pm)}$, \mathcal{T} são coeficientes quânticos obtidos das condições de contorno, a e b estão representados na fig. 2.1. Note que escrevemos $\mathcal{T}(k)$ no lugar de $\mathcal{T}^{(\pm)}(k)$, pois $\mathcal{T}^{(+)}(k) = \mathcal{T}^{(-)}(k) = \mathcal{T}$ [42]. $u_k(x)$ e $s_k(x)$ são duas soluções (fundamentais) independentes da equação de Schrödinger na região onde $V(x) \neq 0$, o que corresponde, para $E > V$ ($E < V$), a ondas propagando (decaindo) para a direita (esquerda), respectivamente. Mencionamos também que quando a função de onda de espalhamento é propriamente estendida para o plano complexo- k (na localização de uma energia de ligação) então o resultado é a função de onda do estado ligado.

Vamos assumir que $G^{(e.l.)} = 0$ na equação (2.1). Isto é legítimo para potenciais que não permitem estados ligados [43]. Na referência [18] os autores argumentam que os resultados finais também são válidos para potenciais atrativos, mas isto não será discutido aqui.

Por conveniência, vamos analisar as possibilidades: $(--)$ $x_i, x_f < a$; $(-+)$ $x_i < a$ e $x_f > b$; $(+-)$ $x_i > b$ e $x_f < a$; e $(++)$ $x_i, x_f > b$. Então, inserindo as equações (2.2) em (2.1), e calculando as integrais [18], encontramos

$$G_{\mp\mp}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \{ \exp[ik|x_f - x_i|] + \mathcal{R}^{(\pm)}(k) \exp[\mp ik(x_f + x_i)] \} \quad (2.3)$$

e

$$G_{\pm\mp}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \mathcal{T}(k) \exp[ik|x_f - x_i|]. \quad (2.4)$$

Queremos chamar a atenção para o formato das funções de Green obtidas. Para o caso de reflexão ($G_{\mp\mp}(x_f, x_i, k)$), o primeiro termo representa a propagação de uma partícula livre entre os pontos x_i e x_f e o segundo a propagação de uma partícula livre entre os pontos x_i e x_f sendo refletida pelo potencial em questão. No caso de transmissão ($G_{\pm\mp}(x_f, x_i; k)$), o único termo representa a propagação de uma partícula livre entre os pontos x_i e x_f sendo transmitida através do potencial. Assim vemos que G nas equações acima, está escrita como uma soma de caminhos, $G_{\text{gen}} = \sum W \exp[(i/\hbar)S]$, porém W está relacionado com os coeficientes quânticos de transmissão e reflexão e não mais com as amplitudes semiclássicas usuais, eq. (1.10).

2.3 Potenciais de suporte compacto segmentados

O passo natural agora é estender esta construção para o potencial dado por

$$V(x) = \sum_{j=1}^N V^{(j)}(x), \quad (2.5)$$

figura 2.2. Neste caso, no entanto (ver [18]), não é interessante utilizar a expansão espectral para a função de Green (2.1). O método mais apropriado é a expansão perturbativa da função de Green. Suponha que podemos escrever o Hamiltoniano como $H = \tilde{H} + V$, onde \tilde{H} é o Hamiltoniano do sistema não perturbado e seja \tilde{G} a

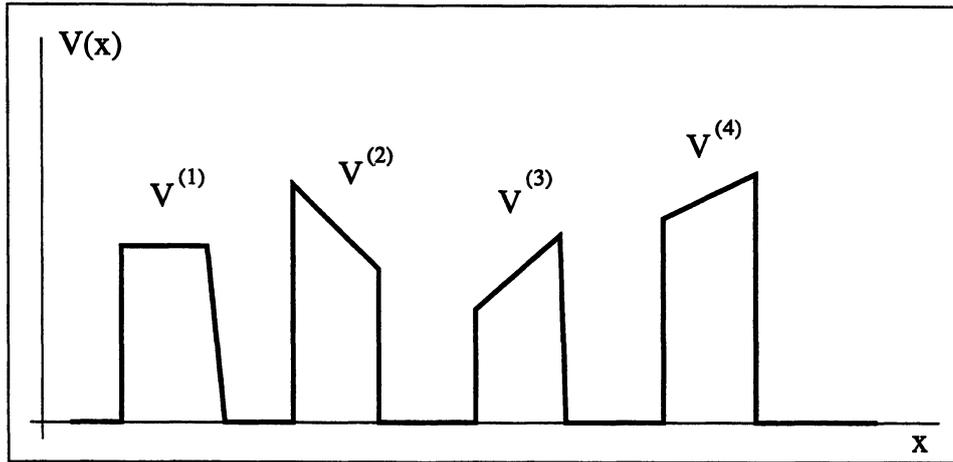


Figura 2.2: Soma de vários potenciais de suporte compacto

função de Green para \tilde{H} . Então G para o H total é dado por (ver apêndice B, eq. (C.42))

$$G(x_f, x_i; z) = \tilde{G}(x_f, x_i; z) + \int dx_1 \tilde{G}(x_f, x_1; z) V(x_1) \tilde{G}(x_1, x_i; z) + \iint dx_2 dx_1 \tilde{G}(x_f, x_2; z) V(x_2) \tilde{G}(x_2, x_1; z) V(x_1) \tilde{G}(x_1, x_i; z) + \dots \quad (2.6)$$

O procedimento a seguir é trabalhado em detalhes na ref. [18]. Os potenciais individuais são adicionados um de cada vez no cálculo, ou seja, supomos $H = H^{(0)} + V^{(1)}$ e obtem-se $G^{(1)}$ de (2.6). Depois, faz-se $H = \tilde{H} + V^{(2)}$, com $\tilde{H} = H^{(0)} + V^{(1)}$ (para o qual já se conhece $G^{(1)}$) e de (2.6) obtem-se $G^{(2)}$. Isso é realizado até que todos os potenciais tenham sido inseridos no Hamiltoniano. Mais especificamente, consideramos primeiro o Hamiltoniano da partícula livre, $H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{(2m)} \frac{d^2}{dx^2}$, então $G^{(0)}$ é a função de Green da partícula livre e $V(x)$ um único potencial $V^{(1)}$. Então de (2.6), $G^{(1)}$ é dada como uma série de integrais sobre as ações clássicas e sobre $V^{(1)}$. Nesta expansão de $G^{(1)}$ podemos associar formalmente a $V^{(1)}$ seus respectivos coeficientes de reflexão e transmissão $\mathcal{R}^{(1)}$ e $\mathcal{T}^{(1)}$. Neste momento, tem-se em mãos a função de Green $G^{(1)}$ para o potencial $V = V^{(1)}$. O próximo passo é adicionar a perturbação devido ao potencial $V^{(2)}$, tendo a função de Green G_1 como a função de Green do problema não perturbado. Então, $H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{(2m)} \frac{d^2}{dx^2} + V^{(1)}$, $V(x) = V^{(2)}$

e a equação (2.6) leva a uma série envolvendo $\mathcal{R}^{(1)}$, $\mathcal{T}^{(1)}$, ações clássicas e $V^{(2)}$. Novamente podemos identificar na série expressões correspondendo aos $\mathcal{R}^{(2)}$ e $\mathcal{T}^{(2)}$ associados com o potencial $V^{(2)}$. O processo é repetido recursivamente até que todos os N potenciais $V^{(j)}$'s sejam incluídos [18]. Todas as séries se reduzem a uma soma infinita composta de amplitudes quânticas, que podem ser somadas exatamente por serem séries geométricas.

Uma análise cuidadosa das funções de Green obtidas através destas séries, revela que a função de Green pode ser colocada exatamente na seguinte forma (para x_f, x_i fora das regiões da ação dos potenciais) [18],

$$G_{\text{gen}}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{ce}} W_{\text{ce}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{ce}}(x_f, x_i; k) \right]. \quad (2.7)$$

onde ce é entendido como ‘caminho de espalhamento’, S_{ce} e W_{ce} são, respectivamente, sua ação clássica e amplitude correspondente. Desta forma, vemos que os efeitos não clássicos são introduzidos na fórmula semiclássica usual através dessa amplitude semiclássica generalizada, que depende dos coeficientes de reflexão e transmissão dos potenciais individuais $V^{(j)}$'s.

Antes de discutir a expressão acima em mais detalhes, é interessante comparar (2.7) com a fórmula de Van Vleck-Gutzwiller (1.10) para $f = 1$. Vemos que as equações (1.10) e (2.7) são similares, com o termo $m/(\hbar k)^2 W_{\text{ce}}$ fazendo o papel do termo $\sqrt{D_{\text{cl}}} \exp[-i\pi\eta/2]$. Entretanto, W_{ce} é mais geral que a amplitude semiclássica pois leva em conta efeitos puramente quânticos, como tunelamento. Para o caso de tunelamento, W é igual ao coeficiente transmissão e não diverge nos pontos de retorno clássicos.

Em (2.7), um ‘caminho de espalhamento’ representa uma trajetória onde a partícula começa em x_i , sofre múltiplas reflexões entre as paredes dos potenciais e finalmente chega em x_f . Os pesos W_{ce} são construídos da seguinte maneira. Cada vez que a partícula se choca contra um $V^{(j)}$, esta pode ser refletida ou transmitida pelo potencial. No primeiro caso, W_{ce} ganha um fator $R^{(j)}$ (reflexão) e no segundo, ganha

um fator $T^{(j)}$ (transmissão). W_{ce} total é então o produto de todas as amplitudes parciais para aquele caminho de espalhamento particular. S_{ce} é a ação clássica para ‘o caminho de espalhamento livre’, ou seja, é dado por $S_{ce} = kL_{ce}$, onde L_{ce} é o comprimento total da trajetória da partícula (sempre tomado fora das regiões de ação dos potenciais de suporte compacto). Notar que aqui estamos usando R e T ao invés de \mathcal{R} e \mathcal{T} (os coeficientes de reflexão e transmissão quânticos). Isto é feito por uma simples comodidade do cálculo e temos que $\mathcal{R}^\pm = R^\pm \exp[\pm 2ikc]$ e $\mathcal{T} = T \exp[-ikd]$, com c o ponto de retorno da partícula ao ser refletida pelo potencial e d a largura do suporte compacto do potencial.

Na fórmula (2.7) é preciso fazer a soma de um número infinito de ‘caminhos de espalhamento’, o que a princípio pode parecer muito difícil. Entretanto, tal cálculo pode ser feito por uma simples classificação diagramática das trajetórias, a qual é uma forma prática para identificar e efetuar as séries geométricas mencionadas anteriormente. Esta classificação dos caminhos é discutida em detalhe em [18] e será exemplificada na próxima seção para a obtenção da função de Green semiclássica generalizada para Potenciais Constantes por Partes (PCP). PCP são úteis para descrever sistemas realísticos na matéria condensada, tais como pontos quânticos e super-redes [10]. Os cálculos, a seguir, representam o primeiro resultado novo obtido em nosso trabalho.

2.4 Como utilizar a função de Green generalizada

No sentido de fornecer um exemplo de como a fórmula (2.7) é utilizada e como as séries geométricas aparecem, vamos considerar os potenciais de suporte compacto idênticos na fig. 2.3(a).

Precisamos somar todos os possíveis caminhos para uma partícula sair do ponto x_i e chegar ao ponto x_f . Como mostrado na fig. 2.3, vamos considerar o caso onde

partícula é transmitida através das barreiras. A partícula deixa $x_i < x_1$ vai até x_1 . No ponto x_1 , a partícula pode tunelar ou ser refletida. Como estamos interessados na função de Green com ponto de chegada x_f , não consideramos a reflexão. Então, a partícula tunela até x_2 . Neste caminho W_{ce} ganha uma contribuição T , com T o coeficiente de transmissão do potencial V . Entre os pontos x_2 e x_3 a partícula sofre M múltiplas reflexões. Por simplicidade vamos assumir que os potenciais são idênticos e simétricos, então a contribuição para W_{ce} é $[R]^{2M}$, onde R é o coeficiente de reflexão do potencial V . Se os potenciais fossem diferentes o processo seria o mesmo, porém teríamos que utilizar os coeficientes de reflexão de cada potencial. Em seguida, a partícula tunela para x_4 e W_{ce} novamente ganha a contribuição T e finalmente chega até x_f . As figuras fig. 2.3(b)-(d) mostram três exemplos esquemáticos para estes ce . A função de Green semiclássica generalizada é então a soma de todos esses caminhos e é escrita como ($E = \hbar^2 k^2 / 2m$)

$$\begin{aligned}
 G_{\text{gen}}(x_f, x_i, E) &= \frac{m}{ik\hbar^2} \left\{ T \exp [ik(x_1 - x_i)] \right. \\
 &\quad \times \sum_{M=0}^{\infty} [R]^{2M} \exp [ik(2M + 1)(x_3 - x_2)] \\
 &\quad \left. \times T \exp [ik(x_f - x_4)] \right\} \\
 &= \frac{m}{ik\hbar^2} T_{\text{gen}}^d \exp [ik(x_1 - x_i) + ik(x_f - x_4)], \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

onde

$$T_{\text{gen}}^d = \frac{T^2 \exp [ik(x_3 - x_2)]}{1 - R^2 \exp [ik(x_3 - x_2)]}, \quad (2.9)$$

é o coeficiente de transmissão total do potencial $V + V$.

O método acima consiste em fazer a soma dos ce , mas quando o número de potenciais aumenta isso pode ser bastante tedioso de ser feito. No entanto existe uma forma mais simples e direta para que a soma acima seja realizada. Esta forma consiste em uma classificação diagramática dos possíveis ce e será descrita como segue.

A partícula deixa o ponto x_i , chega ao ponto x_1 e tunela até o ponto x_2 . Neste

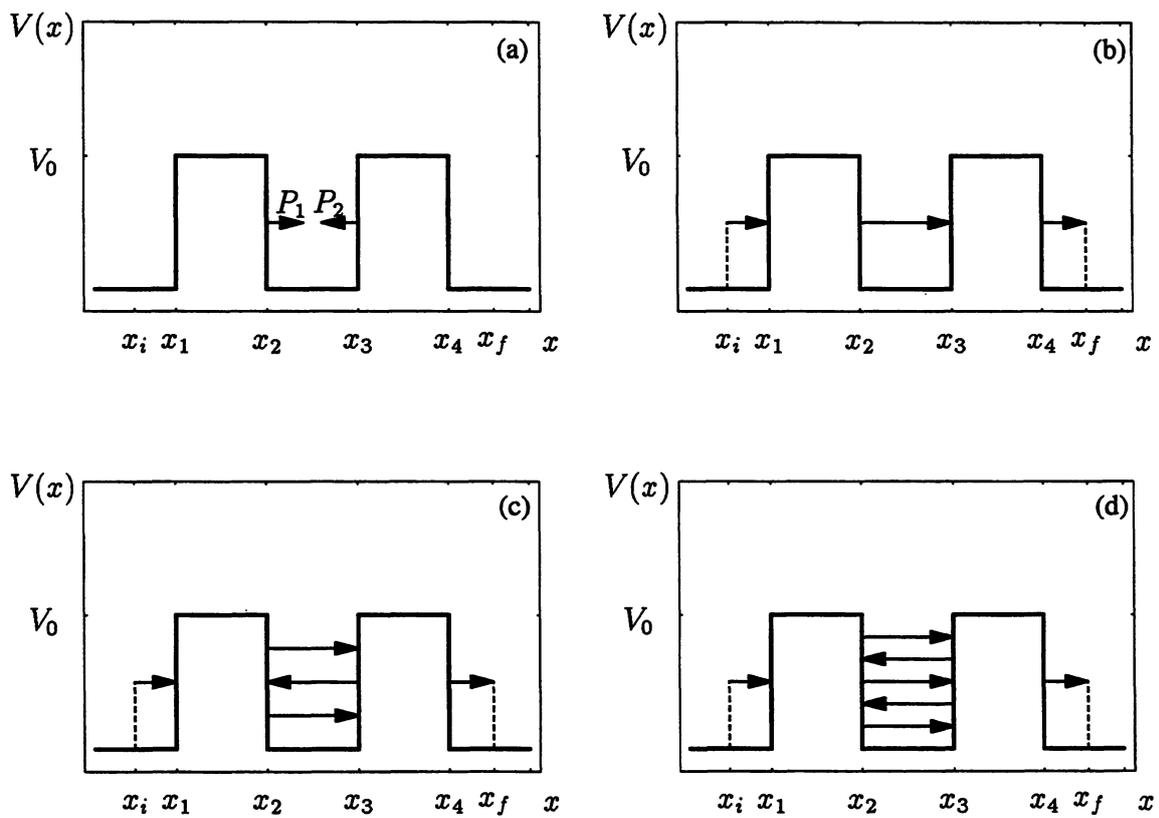


Figura 2.3: Grupo de caminhos para uma partícula sair do ponto x_i e chegar no ponto x_f

ponto x_2 o grupo das todas as possíveis trajetórias pode ser chamado de P_1 como mostra a fig. 2.3(a). P_1 possui duas contribuições: 1) propagação até x_3 seguido de reflexão e um grupo de possíveis trajetórias P_2 , fig. 2.3(a); 2) propagação até x_3 , transmissão até x_4 e finalmente chegando em x_f . Assim a forma de $G_{\text{gen}}(x_f, x_i, E)$, P_1 e P_2 são

$$G_{\text{gen}}(x_f, x_i, E) = \frac{m}{ik\hbar^2} \exp [ik(x_1 - x_i)] T P_1, \quad (2.10)$$

$$P_1 = \exp [ik(x_3 - x_2)] \left\{ \begin{array}{l} R P_2 \\ T \exp [ik(x_f - x_4)], \end{array} \right. \quad (2.11)$$

$$P_2 = \exp [ik(x_3 - x_2)] R P_1. \quad (2.12)$$

onde o '{' representa a divisão da trajetória. A forma equivalente de P_1 é

$$P_1 = \exp [ik(x_3 - x_2)] (R P_2 + T \exp [ik(x_f - x_4)]). \quad (2.13)$$

Resolvendo (2.12) e (2.13) para P_1 temos

$$P_1 = \frac{T \exp [ik(x_3 - x_2)] \exp [ik(x_f - x_4)]}{1 - R^2 \exp [ik(x_3 - x_2)]}. \quad (2.14)$$

Substituindo (2.14) em (2.10) obtemos novamente a equação (2.8). Este método será utilizado nas próximas seções.

2.5 Aplicação do método semiclássico generalizado a PCP

Esta seção tem como objetivo generalizar os resultados obtidos na tese de mestrado de Vicentini [44]. PCP são uma classe de potenciais onde, novamente a aproximação semiclássica (1.10) e WKB não fornecem resultados satisfatórios devido às discontinuidades destes potenciais. Os PCP são dados por (ver fig. 2.4)

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{ll} u_0 & \text{se } x < x_1 \quad (\text{região } 0) \\ u_j & \text{se } x_j \leq x < x_{j+1} = x_j + d_j \quad (\text{região } j) \\ u_n & \text{se } x \geq x_n \quad (\text{região } n) \end{array} \right. \quad (2.15)$$

Os valores u_j , d_j e x_j são, respectivamente, a altura do potencial, o comprimento da região j e a localização do j -ésimo ponto de descontinuidade. Sem perda de generalidade, vamos supor $u_0 = 0$ e $x_1 = 0$. Vamos introduzir também os números de onda nas diferentes regiões com $k_j = \sqrt{2m(E - u_j)/\hbar} = i\mu_j$. No sentido de se obter as equações em uma forma geral, não iremos distinguir os casos em que k_j é real ou imaginário ($i\mu_j$), exceto quando mencionado.

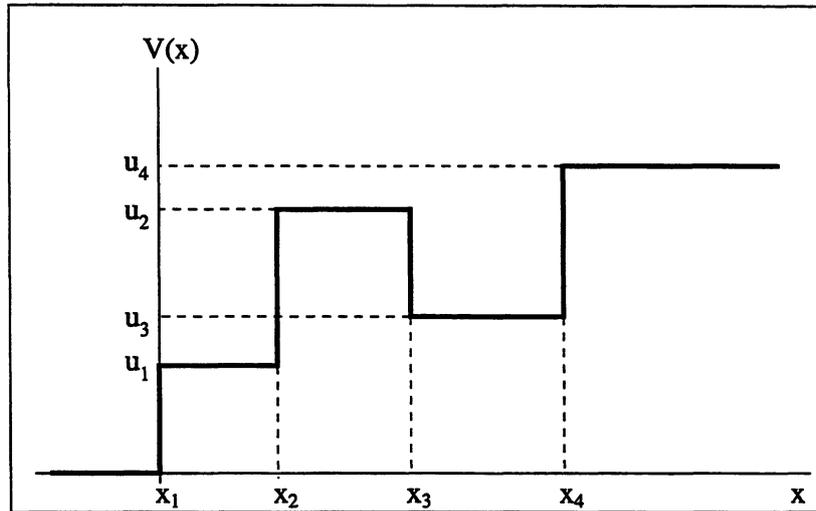


Figura 2.4: Exemplo de PCP com quatro pontos de descontinuidade

2.5.1 A construção da função exata

A função de Green é dada pela equação (2.7), que aqui reescrevemos na seguinte forma:

$$G_{j,l}^{(n)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2} \sum_{\text{caminhos}} \frac{1}{\sqrt{k_j k_l}} a_{j,l}^{(n)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{caminho}}(x_b, x_a; k_0)\right], \quad (2.16)$$

onde $S_{\text{caminho}}(x_b, x_a; k_0) = \hbar \int_{x_a}^{x_b} k_{\text{caminho}} dx$ e j e l , indicam, respectivamente, a quais regiões x_a e x_b pertencem. Para o caso mais simples onde temos apenas um ponto de descontinuidade, $n = 1$, se x_a e x_b pertencentes à mesma região, fig. 2.5(a), $j = 0$ e $l = 0$, os dois possíveis caminhos fornecem:

$$G_{0,0}^{(1)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k_0} \left\{ \exp[ik_0|x_b - x_a|] + a_{0,0}^{(1)} \exp[-ik_0(x_b + x_a)] \right\}. \quad (2.17)$$

Se x_a e x_b pertencentes à regiões diferentes, fig. 2.5(b) , $j = 0$ e $l = 1$, o único caminho fornece

$$G_{0,1}^{(1)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_0 k_1}} a_{0,1}^{(1)} \exp [i(k_1 x_b + k_0 x_a)]. \quad (2.18)$$

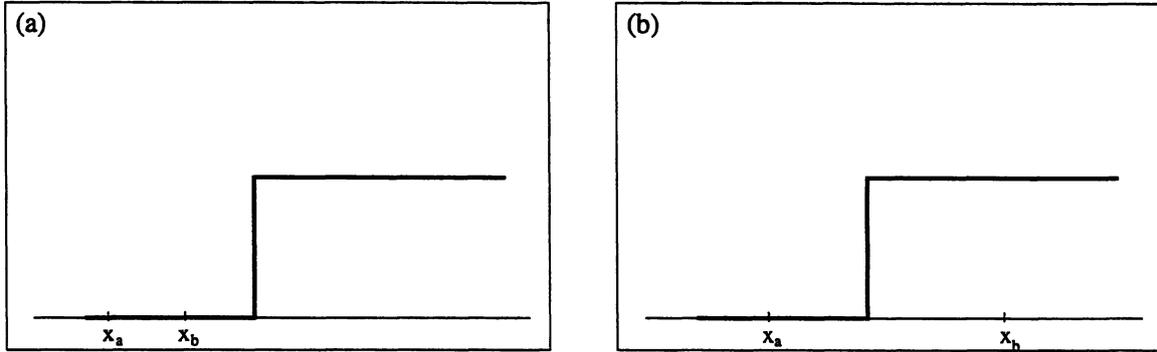


Figura 2.5: Potencial com um ponto de descontinuidade (a) para x_i e x_j pertencendo à mesma região e (b) para x_i e x_j pertencendo à regiões diferentes

O primeiro termo na (2.17) é a contribuição do caminho clássico direto entre os pontos x_a e x_b . Mas o segundo termo (único) em (2.17) ((2.18)) é a contribuição do caminho refletido (transmitido) que é clássico quando k_1 é imaginário (real) e quântico quando k_1 é real (imaginário). Os coeficientes a 's, como mostrado em [18], são de fato os coeficientes quânticos (a menos de uma fase) das funções de onda. Assim, os coeficientes a 's para um único ponto de descontinuidade são escritos [45]

$$a_{0,0}^{(1)} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \quad \text{e} \quad a_{0,1}^{(1)} = \sqrt{\frac{k_1}{k_0}} \frac{2k_0}{k_0 + k_1}, \quad (2.19)$$

os quais fornecem as funções de Green corretas em (2.17)-(2.18). Similarmente, temos [45]

$$a_{1,1}^{(1)} = -a_{0,0}^{(1)} \quad \text{e} \quad a_{1,0}^{(1)} = \sqrt{\frac{k_0}{k_1}} \frac{2k_1}{k_0 + k_1}. \quad (2.20)$$

Observe que se k_1 for real, $|a_{0,0}^{(1)}|^2$ ($|a_{1,1}^{(1)}|^2$) e $|a_{0,1}^{(1)}|^2$ ($|a_{1,0}^{(1)}|^2$) são, respectivamente, as probabilidades de reflexão e transmissão para ondas planas vindas da esquerda (direita) [46].

Para calcular a função exata para n pontos de descontinuidade, dado que para PCP não há superposição dos potenciais, utilizamos os coeficientes dados nas

equações (2.19) e (2.20) como blocos de construção. Para tanto, vamos resumir e generalizar esses coeficientes como

$$\begin{aligned} a_{j-1,j-1}^{(j)} &= -a_{j,j}^{(j)} = \frac{k_{j-1} - k_j}{k_{j-1} + k_j} \\ a_{j-1,j}^{(j)} &= \sqrt{\frac{k_j}{k_{j-1}} \frac{2k_{j-1}}{k_{j-1} + k_j}} \\ a_{j,j-1}^{(j)} &= \sqrt{\frac{k_{j-1}}{k_j} \frac{2k_j}{k_{j-1} + k_j}}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Os superescritos indicam o j -ésimo ponto de descontinuidade e os subscritos representam, respectivamente, as regiões antes e depois da reflexão ou transmissão.

Com base no que foi exposto na seção 2.3, estabelecemos as seguintes regras:

1. propagação de y até z na região j produz $\exp[ik_j|z - y|]$;
2. reflexão no ponto de descontinuidade x_j para a esquerda (direita) produz um fator $a_{j-1,j-1}^{(j)}(a_{j,j}^{(j)})$;
3. transmissão através do ponto de descontinuidade x_j da esquerda (direita) produz um fator $a_{j-1,j}^{(j)}(a_{j,j-1}^{(j)})$.

Com estas regras em mente, a função de Green (2.6) pode ser reescrita como

$$G_{j,l}^{(n)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_j k_l}} \sum_{\text{caminho}} \prod_r f_r, \quad (2.22)$$

onde a soma é sobre todos os possíveis caminhos clássicos e f_r 's são os fatores apropriados das regras 1-3 associados a cada caminho conectando x_a e x_b . Notamos que (2.22) pode ser pensada como uma versão exata da aproximação em [47].

Em princípio, as partes mais difíceis no cálculo da expressão acima são enumerar todos os caminhos e somar suas contribuições. Entretanto, como vimos na seção 2.3, (2.22) é sempre uma série geométrica e, portanto, pode ser somada exatamente.

2.5.2 Dois pontos de descontinuidade

No sentido de deixar o assunto mais claro, primeiramente vamos calcular (2.22) para $n = 2$, fig. 2.6(a). Na fig. 2.6(b)-(d), mostramos três possíveis caminhos no caso de $x_a, x_b < x_1 = 0$. Usando as regras 1-3 da seção anterior, as contribuições dos caminhos mostradas na figura 2.6 são:

- figura 2.6 (b) $\exp [ik_0|x_b - x_a|]$,
- figura 2.6 (c) $a_{0,0}^{(1)} \exp [-ik_0(x_b + x_a)]$ e
- figura 2.6 (d) $a_{0,1}^{(1)} [a_{1,1}^{(2)}]^2 a_{1,1}^{(1)} a_{1,0}^{(1)} \exp [-ik_0(x_b + x_a)]$.

Coletando todas as possíveis trajetórias, temos:

$$G_{0,0}^{(2)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k_0} (\exp [ik_0|x_b - x_a|] + A_R \exp [-ik_0(x_b + x_a)]), \quad (2.23)$$

com

$$A_R = a_{0,0}^{(1)} + a_{0,1}^{(1)} a_{1,0}^{(1)} \sum_{n=1}^{\infty} [a_{1,1}^{(2)}]^n [a_{1,1}^{(1)}]^{n-1} \exp [2ink_1 d_1] = a_{0,0}^{(1)} + \frac{a_{0,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} a_{1,0}^{(1)} \exp [2ink_1 d_1]}{1 - a_{1,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} \exp [2ik_1 d_1]} \quad (2.24)$$

A_R acima é o coeficiente de reflexão total para o potencial.

Analogamente, se $x_a < 0$ e $x_b > x_2$, então

$$G_{0,2}^{(2)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_0 k_2}} A_T \exp [ik_2(x_b - d_1) - ik_0 x_a], \quad (2.25)$$

com

$$A_T = a_{0,1}^{(1)} a_{1,2}^{(2)} \exp [ik_1 d_1] \sum_{n=0}^{\infty} [a_{1,1}^{(2)} a_{1,1}^{(1)}]^n \exp [2ink_1 d_1] = \frac{a_{0,1}^{(1)} a_{1,2}^{(2)} \exp [k_1 d_1]}{1 - a_{1,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} \exp [2ik_1 d_1]}. \quad (2.26)$$

sendo o coeficiente de reflexão total do potencial.

Note que A_R e $A_T \exp [-ik_2 d_1]$ são, respectivamente, as amplitudes semiclássicas generalizadas de reflexão e transmissão totais para uma onda plana vindo da

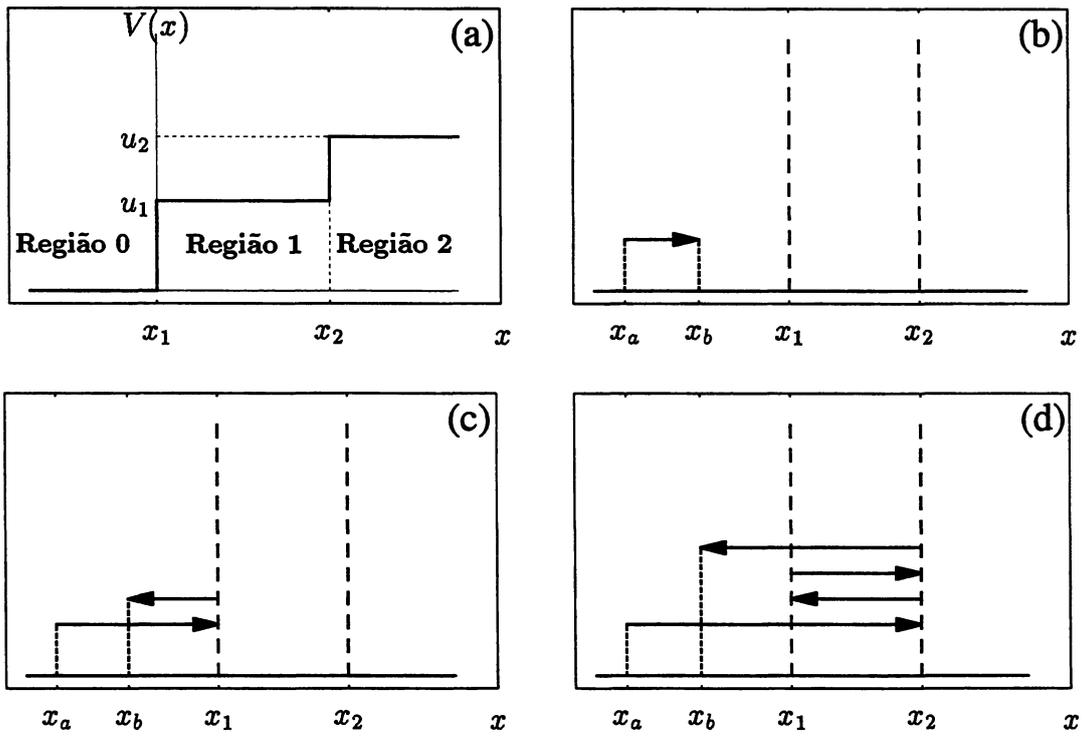


Figura 2.6: (a) Potencial para $n = 2$.(b)-(d) Representação esquemática de três possíveis caminhos para $G^{(2)}(x_b, x_a; E)$ no caso de $x_b, x_a < 0$.

esquerda [46]. Para o caso de $0 < x_a < x_2$ e $x_b > x_2$,

$$G_{1,2}^{(2)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_1 k_2}} (A_T \exp [ik_2(x_b - d_1) + ik_1(d_1 - x_a)] + A_I \exp [ik_2(x_b - d_1) + ik_1(d_1 + x_a)]), \quad (2.27)$$

onde

$$A_D = a_{1,2}^{(2)} \sum_{n=0}^{\infty} [a_{1,1}^{(2)} a_{1,1}^{(1)}]^n \exp [2ink_1 d_1] = \frac{a_{1,2}^{(2)}}{1 - a_{1,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} \exp [2ik_1 d_1]}$$

$$A_I = a_{1,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} \sum_{n=0}^{\infty} [a_{1,1}^{(2)} a_{1,1}^{(1)}]^n \exp [2ink_1 d_1] = \frac{a_{1,1}^{(1)} a_{1,2}^{(2)}}{1 - a_{1,1}^{(1)} a_{1,1}^{(2)} \exp [2ik_1 d_1]}. \quad (2.28)$$

Todas as outras funções de Green para as diferentes possibilidades para os pontos finais são obtidas da mesma forma.

As equações (2.23)-(2.28) (e também (2.17)- (2.20)) reproduzem as equações da Ref. [48]. Adicionalmente, com a ajuda de (2.21) podemos facilmente derivar de (2.25) e (2.26) que: (a) $A_R = -1$ e $A_T = 0$ para o potencial de uma parede infinita; e (b) $A_R = R^{(\delta)} = -\gamma/(1+\gamma)$ e $A_T = T^{(\delta)} = 1/(1+\gamma)$, $\gamma = im\lambda/k_0\hbar^2$, (fazendo $u_2 = 0$ e tomando o limite $d_1 \rightarrow 0$ e $u_1 \rightarrow \infty$, mas mantendo $u_1 d_1 = \lambda$) para o potencial-delta com intensidade λ . Com isso, as funções de Green para estes sistemas [49–51] são obtidas exatamente como casos especiais de nossos resultados.

2.5.3 N pontos de descontinuidade

Para um n geral, os infinitos caminhos conectando os pontos x_a com x_b em (2.22) devem ser todos somados. Como são sempre séries geométricas [18] podemos sempre realizar a soma exatamente. Para isso utilizaremos o método discutido na seção 2.4.

Por simplicidade vamos fazer $x_b > x_a$. Uma vez conhecido a qual região x_a e x_b pertencem, podemos dividir o potencial em três blocos: o bloco da esquerda (L), que inclui todas as partes à esquerda de x_j se $x_j < x_a < x_{j+1}$; o bloco da direita (R),

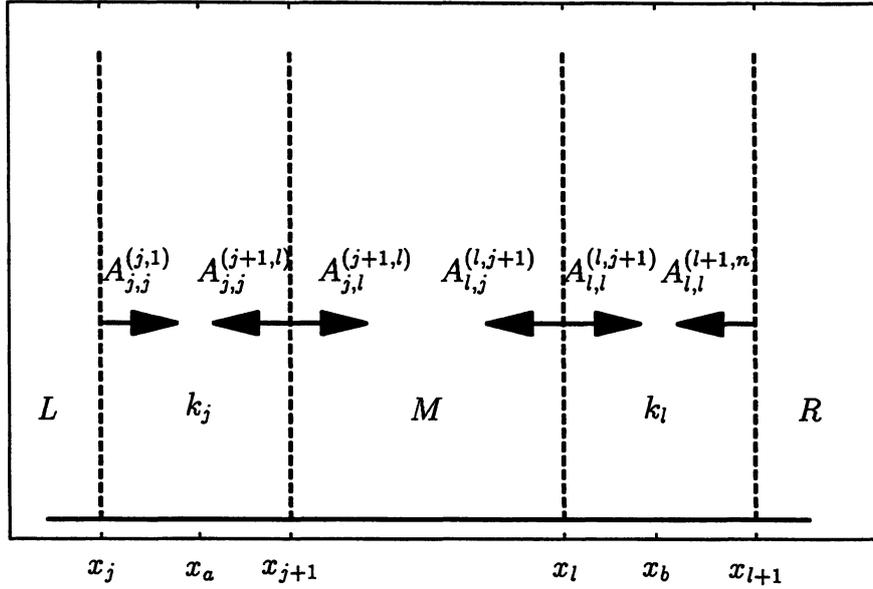


Figura 2.7: Divisão do potencial PCP em blocos para o cálculo da função de Green para N pontos de descontinuidade. Os A 's representam as amplitudes em cada um dos pontos de descontinuidades mencionados no texto.

que incluí todas as partes à direita de x_{l+1} se $x_l < x_b < x_{l+1}$; e o bloco do meio (M), que incluí as partes entre x_{j+1} e x_l . As regiões j e l , onde estão situados x_a e x_b são excluídos na definição dos blocos, fig 2.7. Para escrevermos as equações, $A_{p,q}^{(t,v)}$ representa: se $p = q$ a amplitude de reflexão no ponto de descontinuidade t entre as regiões t e v e se $p \neq q$ a amplitude de transmissão no ponto de descontinuidade t entre as regiões t e v .

Uma partícula inicialmente em x_a pode: (1) ir diretamente para $x = x_{j+1}$, (2) ir para à esquerda, bater no potencial $V^{(j)}$ em $x = x_j$ e então ir para à direita e chegar ao ponto $x = x_{j+1}$. Em analogia com a seção 2.4, existe um grupo infinito de possíveis caminhos para uma partícula deixar $x = x_{j+1}$, e vamos chamá-los de P_{12} , fig. 2.8. Então, pela ref. [18] e regras (1)-(3) da seção 2.5.1, a função de Green pode ser escrita como

$$G_{j,l}^{(n)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_j k_l}} \begin{cases} \exp[ik_j(x_{j+1} - x_a)]P_{12} \\ A_{j,j}^{(j,1)} \exp[ik_j(x_a - x_j) + ik_j d_j]P_{12}. \end{cases} \quad (2.29)$$

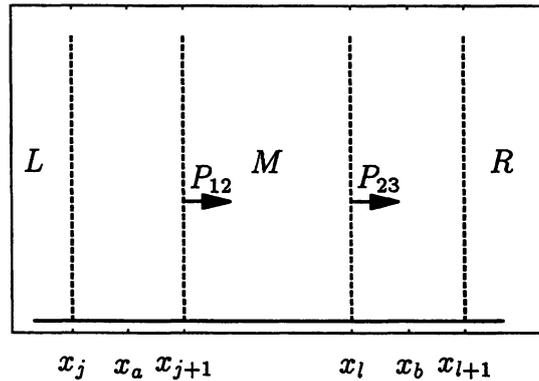


Figura 2.8: Grupos de caminhos P_{12} e P_{23} para PCP

Qualquer caminho em P_{12} pertence a uma das duas possibilidades: (1) transmissão através de $V^{(j+1)}$, seguida por uma das trajetórias no grupo P_{23} , ou (2) reflexão por $V^{(j+1)}$ e então por $V^{(j)}$, finalmente alcançando novamente $x = x_{j+1}$. Então, P_{12} é dado por

$$P_{12} = \begin{cases} A_{j,l}^{(j+1,l)} P_{23} \\ A_{j,j}^{(j+1,1)} A_{j,j}^{(j,1)} \exp[2ik_j d_j] P_{12}. \end{cases} \quad (2.30)$$

De forma similar, temos (fig. 2.8)

$$P_{23} = \begin{cases} \exp[ik_l(x_b - x_l)] \\ A_{l+1,j}^{(n)} \exp[ik_l d_l] \end{cases} \begin{cases} \exp[ik_l(x_{l+1} - x_b)] \\ \exp[ik_l d_l] \end{cases} \begin{cases} A_{l,l}^{(l,j+1)} P_{23} \\ A_{l,j}^{(l,j+1)} A_{j,j}^{(j,1)} \exp[2ik_j d_j] P_{12}. \end{cases} \quad (2.31)$$

Observe que a partícula finalmente alcança x_b pela esquerda ou pela direita, fig. 2.9. Esta pode, uma vez na região $x_l < x < x_{l+1}$, voltar para a região $x_j < x < x_{j+1}$, sendo refletida para a frente e para trás. Todas estas possibilidades são levadas em conta em (2.31).

Então, da seção 2.4 as formas equivalentes das (2.29)-(2.31) são

$$P_{12} = A_{j,l}^{(j+1,l)} P_{23} + A_{j,j}^{(j+1,1)} A_{j,j}^{(j,1)} \exp[2ik_j d_j] P_{12}. \quad (2.32)$$

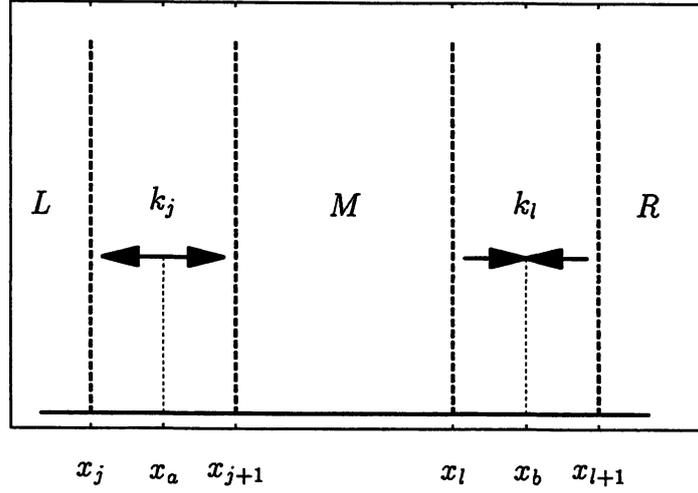


Figura 2.9: Sentidos para os quais uma partícula pode deixar x_a e chegar a x_b

$$P_{23} = \exp [ik_l(x_b - x_l)] + A_{l,l}^{(l+1,n)} \exp [ik_l d_l] \left\{ \exp [ik_l(x_{l+1} - x_b)] + \exp [ik_l d_l] \left\{ A_{l,l}^{(l,j+1)} P_{23} + A_{l,j}^{(l,j+1)} A_{j,j}^{(j,1)} \exp [2ik_j d_j] P_{12} \right\} \right\}. \quad (2.33)$$

Resolvendo (2.32) e (2.33) e substituindo o resultado em (2.29), finalmente obtemos a função de Green *exata* para o PCP,

$$G_{j,l}^{(n)}(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_j k_l}} \frac{A_{j,l}^{(j+1,l)}}{B_{j,l}^{(n)}} \left\{ \exp [ik_j(x_{j+1} - x_a) + ik_l(x_b - x_l)] + A_{l,l}^{(l+1,n)} \exp [ik_j(x_{j+1} - x_a) + ik_l d_l + k_l(x_{l+1} - x_b)] + A_{j,j}^{(j,1)} \exp [ik_j(x_a - x_j) + ik_j d_j + k_l(x_b - x_a)] + A_{j,j}^{(j,1)} A_{l,l}^{(l+1,n)} \exp [ik_j(x_a - x_j) + ik_j d_j + ik_l d_l + k_l(x_{l+1} - x_b)] \right\}, \quad (2.34)$$

onde

$$B_{j,l}^{(n)} = \left(1 - A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,1)} \exp [2ik_j d_j] \right) \left(1 - A_{l,l}^{(l,j+1)} A_{l,l}^{(l+1,n)} \exp [2ik_l d_l] \right) - A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,l}^{(j+1,l)} A_{l,j}^{(l,j+1)} A_{l,l}^{(l+1,n)} \exp [2i(k_j d_j + k_l d_l)]. \quad (2.35)$$

Os quatro termos em (2.34) correspondem respectivamente às contribuições dos

caminhos deixando x_a para e alcançando x_b da: direita e esquerda; direita e direita; esquerda e esquerda; esquerda e direita. As amplitudes $A_{j,j}^{(j+1,l)}$, $A_{l,l}^{(l,j+1)}$, $A_{j,l}^{(j+1,l)}$, $A_{j,j}^{(l,j+1)}$, são devidas ao bloco M; $A_{j,j}^{(j,1)}$ a L e $A_{l,l}^{(l+1,n)}$ a R. Elas são obtidas através das seguintes relações de recursão ($0 \leq s \leq r-1$, $1 \leq r \leq n$)

$$\begin{aligned} A_{s,s}^{(s+1,r)} &= a_{s,s}^{(s+1)} + \frac{a_{s,s+1}^{(s+1)} a_{s+1,s}^{(s+1)} A_{s+1,s+1}^{(s+2,r)}}{1 - a_{s+1,s+1}^{(s+1)} A_{s+1,s+1}^{(s+2,r)} \exp[2ik_{s+1}d_{s+1}]} \exp[2ik_{s+1}d_{s+1}] \\ A_{s,s}^{(s+1,r)} &= a_{r,r}^{(r)} + \frac{a_{r,r-1}^{(r)} a_{r-1,r}^{(r)} A_{r-1,r-1}^{(r-1,s+1)}}{1 - a_{r-1,r-1}^{(r)} A_{r-1,r-1}^{(r-1,s+1)} \exp[2ik_{r-1}d_{r-1}]} \exp[2ik_{r-1}d_{r-1}], \end{aligned} \quad (2.36)$$

com $A_{r,r}^{(r+1,r)} = A_{s,s}^{(s,s+1)} = 0$ e ($0 \leq s \leq r-2$, $2 \leq r \leq n$)

$$\begin{aligned} A_{s,r}^{(s+1,r)} &= \frac{a_{s,s+1}^{(s+1)} A_{s+1,r}^{(s+2,r)}}{1 - a_{s+1,s+1}^{(s+1)} A_{s+1,s+1}^{(s+2,r)} \exp[2ik_{s+1}d_{s+1}]} \exp[2ik_{s+1}d_{s+1}] \\ A_{r,s}^{(r,s+1)} &= \frac{a_{r,r-1}^{(r)} A_{r-1,s}^{(r-1,s+1)}}{1 - a_{r-1,r-1}^{(r)} A_{r-1,r-1}^{(r-1,s+1)} \exp[2ik_{r-1}d_{r-1}]} \exp[2ik_{r-1}d_{r-1}], \end{aligned} \quad (2.37)$$

com $A_{r-1,r}^{(r,r)} = a_{r-1,r}^{(r)}$ e $A_{s+1,s}^{(s+1,s+1)} = a_{s+1,s}^{(s+1)}$.

Para o caso de x_a e x_b pertencendo a mesma região ($l = j$), temos

$$\begin{aligned} G_{j,j}^{(n)}(x_b, x_a; E) &= \frac{m}{i\hbar^2 k_j} \frac{1}{1 - A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,n)} \exp[2ik_j d_j]} \\ &\times \left\{ \exp[ik_j(x_b - x_a)] + A_{j,j}^{(j+1,n)} \exp[ik_j(2x_{j+1} - x_a - x_b)] \right. \\ &+ A_{j,j}^{(j,1)} \exp[ik_j(x_a + x_b - 2x_j)] \\ &\left. + A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,n)} \exp[ik_j(x_a - x_b + 2d_j)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Aqui devemos notar que considerando cada bloco, estamos de fato calculando as suas amplitudes quânticas. Então, temos os casos interessantes de reflexão total ($l = j = 0$) e a transmissão total ($l = 0, j = n$)

$$\begin{aligned} G_{0,0}^{(n)}(x_b, x_a; E) &= \frac{m}{i\hbar^2 k_0} \left\{ \exp[ik_0(x_b - x_a)] + A_{0,0}^{(1,n)} \exp[-ik_0(x_a + x_b)] \right\} \\ G_{0,n}^{(n)}(x_b, x_a; E) &= \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_0 k_n}} A_{0,n}^{(1,n)} \exp[ik_n(x_b + x_n) - ik_0 x_a]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

$A_{0,0}^{(1,n)}$ e $A_{0,n}^{(1,n)}$ são, respectivamente, as amplitudes de reflexão e transmissão total para uma onda vindo da direita.

O traço da função de Green, dado por

$$g_{tr}(E) = \int G(x, x; E) dx, \quad (2.40)$$

é muito útil na análise do espectro de energia de um sistema quântico [8, 52]. Como exemplo vamos considerar uma série de barreiras tipo PCP confinadas em uma caixa infinita, neste caso temos $u_0 = u_n = \infty$ em (2.15). A partir de (2.38) temos que para esse caso (2.40) resulta em

$$\begin{aligned} g_{tr}^{(n)}(E) = & \frac{m}{i\hbar^2} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{d_j}{k_j} + \frac{m}{i\hbar^2} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{d_j}{k_j} \left(\frac{2A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,n)} \exp[2ik_j d_j]}{1 - A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,n)}} \right) \\ & + \frac{m}{i\hbar^2} \sum_{j=1}^{n-1} \left(\frac{A_{j,j}^{(j,1)} + A_{j,j}^{(j+1,n)}}{1 - A_{j,j}^{(j,1)} A_{j,j}^{(j+1,n)} \exp[2ik_j d_j]} \right) \frac{\sin[k_j d_j] \exp[ik_j d_j]}{k_j}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Na equação acima as somas representam, respectivamente, as contribuições de todas as órbitas de comprimento zero, órbitas periódicas, ou seja caminhos deixando x_a para a direita (esquerda) e chegando em $x_b = x_a$ pela esquerda (direita) e órbitas não periódicas, isto é caminhos deixando o ponto x_a para a direita (esquerda) e chegando no ponto $x_b = x_a$ direita (esquerda).

Para exemplificar a aplicação da função de Green semiclássica generalizada para PCP, vamos aplicá-la para o poço duplo infinito assimétrico (*pdia*), ou seja (2.15) com $n = 4$ e $u_0 = u_4 = \infty$. Por conveniência, somente consideramos os casos que x_a está na mesma região x_b . Das equações (2.38) e (2.36)-(2.37), obtemos

$$\begin{aligned} G_{j,j}^{(pdia)} = & \frac{m}{i\hbar^2 k_j} \frac{1}{1 - R_+^{(j)} R_-^{(j)}} \left(\exp[-ik_j x_a] + R_-^{(j)} \exp[ik_j x_a] \right) \\ & \times \left(\exp[ik_j x_b] + R_+^{(j)} \exp[-ik_j x_a] \right), \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde $R_+^{(j)} = \mathcal{R}_+^{(j)} \exp[2ik_j x_{j+1}]$, $R_-^{(j)} = \mathcal{R}_-^{(j)} \exp[-2ik_j x_j]$, $\mathcal{R}_-^{(1)} = \mathcal{R}_+^{(3)} = -1$, $\mathcal{R}_+^{(2)} =$

$\mathcal{R}_{2,3}, \mathcal{R}_-^{(2)} = \mathcal{R}_{2,1}$ e

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_+^{(1)} &= \mathcal{R}_{1,2}^{(bar)} + \frac{[\mathcal{T}_{1,2}^{(bar)}]^2 \mathcal{R}_{1,2}}{1 - \mathcal{R}_{1,2}^{(bar)} \mathcal{R}_{1,3}} \\ \mathcal{R}_-^{(3)} &= \mathcal{R}_{3,2}^{(bar)} + \frac{[\mathcal{T}_{3,2}^{(bar)}]^2 \mathcal{R}_{3,1}}{1 - \mathcal{R}_{1,2}^{(bar)} \mathcal{R}_{1,3}} \\ \mathcal{R}_{r,s} &= \mathcal{R}_{r,s}^{(bar)} - \frac{[\mathcal{T}_{r,s}^{(bar)}]^2}{1 - \mathcal{R}_{r,s}^{(bar)}}.\end{aligned}\quad (2.43)$$

onde $\mathcal{R}_{r,s}^{(bar)}$ e $\mathcal{T}_{r,s}^{(bar)}$ são os coeficientes de reflexão e transmissão para a barreira.

O traço da função de Green é facilmente derivado de (2.41) e dos coeficientes R acima. Vamos calculá-la para uma barreira quadrada localizada no centro de uma poço quadrado infinito, ou seja, $k_1 = k_3$, $d_1 = d_3$, $\mathcal{R}_+^{(3)} = \mathcal{R}_-^{(1)} = \mathcal{R}^{(1)}$ e $\mathcal{R}_+^{(2)} = \mathcal{R}_+^{(2)} = \mathcal{R}^{(2)}$. Então, escrevendo $g^{(pdia)} = g_0^{(pdia)} + g_{op}^{(pdia)} + g_{onp}^{(pdia)}$ temos

$$\begin{aligned}g_0^{(pdia)} &= \frac{m}{i\hbar^2} \left(\frac{2d_1}{k_1} + \frac{d_2}{k_2} \right) \\ g_{op}^{(pdia)} &= \frac{2m}{i\hbar^2} \left[\frac{d_2}{k_2} \left(\frac{[\mathcal{R}^{(2)}]^2 \exp[2ik_2d_2]}{1 - [\mathcal{R}^{(2)}]^2 \exp[2ik_2d_2]} \right) - 2 \frac{d_1}{k_1} \left(\frac{\mathcal{R}^{(1)} \exp[2ik_1d_1]}{1 - \mathcal{R}^{(1)} \exp[2ik_1d_1]} \right) \right] \\ g_{onp}^{(pdia)} &= \frac{2m}{i\hbar^2} \left[\frac{1}{k_1^2} \left(\frac{\mathcal{R}^{(1)} - 1}{1 + \mathcal{R}^{(1)} \exp[2ik_1d_1]} \right) \sin[k_1d_1] \exp[ik_1d_1] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{k_2^2} \left(\frac{\mathcal{R}^{(2)}}{1 - [\mathcal{R}^{(2)}]^2 \exp[2ik_2d_2]} \right) \sin[k_2d_2] \exp[ik_2d_2] \right],\end{aligned}\quad (2.44)$$

onde $g_0^{(pdia)}$ é a contribuição das órbitas periódicas de comprimento zero, $g_{op}^{(pdia)}$ é a contribuição das órbitas periódicas de comprimento não nulo e $g_{onp}^{(pdia)}$ a contribuição das órbitas não-periódicas. Comparando a equação acima com a fórmula do traço na ref. [48] é observado que apesar de ambas estarem relacionadas com órbitas periódicas, a fórmula do traço não fornece as amplitudes quânticas corretas que aparecem em (2.44). Se $u_2 = 0$, um caixa infinita de comprimento $L = 2d_1 + d_2$, (2.44), fornece: $g_0^{(box)} = k_1 L / (2iE)$, $g_{op}^{(box)} = (k_1 L)(\cot k_1 L + i) / (2E)$ e $g_{onp}^{(box)} = -1 / (2E)$, os quais são resultados exatos.

2.6 Funções de Green assintóticas

Para potenciais segmentados, isto é, para potenciais escritos como a soma de potenciais individuais que não apresentam uma região de sobreposição, podemos obter a função de Green exata [18]. A pergunta natural que surge é, então, se uma função de Green generalizada, ou seja, uma fórmula do tipo (2.7) pode ser estendida para outras situações. MGE da Luz e colaboradores [19] mostraram que na verdade, isto pode ser feito para potenciais unidimensionais genéricos $V(x) = \sum_j V^{(j)}(x)$ que possuam a propriedade de que $V^{(j)}(|x| \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, qualquer que seja j , ou seja, cada $V^{(j)}$ se anula assintoticamente. Neste caso porém, (2.7) é uma aproximação, pois para obtê-la: (1) utiliza-se a função de Green assintótica, (2) considera-se que um potencial $V^{(j)}$ na região entre os seus pontos de retorno clássico não “sente” os outros potenciais $V^{(i)}$'s, ou seja, a região de sobreposição dos potenciais não é muito grande, de tal forma que possamos utilizar os coeficientes de transmissão e reflexão $\mathcal{T}^{(j)}$ e $\mathcal{R}^{(j)}$ individuais. Apesar destas considerações, como os autores discutem em [19] os resultados são muito bons e se mostram melhores que o semiclássico usual quando utilizados para calcular espalhamento.

Aqui faremos um breve sumário de como obter uma expressão do tipo (2.7) para os $V(x)$ acima (para uma discussão detalhada ver [19]). Considere um simples $V(x)$ que decai assintoticamente para $|x| \rightarrow \infty$. Suas funções de onda de espalhamento *assintóticas* $\psi_k^{(\pm)}(x)$ são ondas planas chegando da esquerda (+) e da direita (-), dadas por

$$\psi_k^{(\pm)}(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp[\pm ikx] + \mathcal{R}^{(\pm)}(k) \exp[\mp ikx], & x \rightarrow \mp\infty \\ \mathcal{T}(k) \exp[\pm ikx], & x \rightarrow \pm\infty. \end{cases} \quad (2.45)$$

As funções de Green assintóticas são obtidas inserindo-se (2.45) em (2.1) e supondo-se novamente $G^{e.l.} = 0$.

Aqui precisamos fazer algumas considerações com relação aos pólos dos coeficientes quânticos \mathcal{T} e \mathcal{R} na metade superior do plano complexo, pois para a resolução de

(2.1) usamos integração no plano complexo sendo o contorno um semi-círculo tomado justamente nesta região. Para V não-negativo em todo o espaço, isto é, barreiras, os pólos: (i) estão ausentes quando V tem suporte compacto ou decaimento do tipo Gaussiano; (ii) existem quando V decai exponencialmente, neste caso os pólos aparecem a uma distância finita do eixo real [43]. Resolvendo as integrais a contribuição destes pólos fornece termos na forma $C \exp[-c(|x_f| + |x_i|)]$, com C limitado e $c > 0$. No limite assintótico de $|x| \rightarrow \infty$ eles decaem exponencialmente e portanto podem ser desconsiderados. Assim, finalmente temos [19]

$$G_{\pm\mp}(x_f, x_i; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \mathcal{T}(k) \exp[ik|x_f - x_i|], \quad (2.46)$$

e

$$G_{\mp\mp}(x_f, x_i; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \left\{ \exp[ik|x_f - x_i|] + \mathcal{R}^{(\pm)}(k) \exp[\mp ik(x_f + x_i)] \right\} \quad (2.47)$$

As expressões acima são aplicáveis a potenciais que no limite assintótico tendem a zero pelo menos exponencialmente [19]. Para potenciais com decaimento mais lento, apesar de existirem estudos sobre seus espectros contínuos [53], não existe resultados gerais, até onde sabemos, considerando a estrutura dos pólos de suas amplitudes quânticas. Então, não podemos em princípio garantir que as equações (2.46) e (2.47) sejam também válidas para estes tipos de problemas. Entretanto, lembramos que o ponto principal da obtenção de (2.46) e (2.47) é ter todas as contribuições dos pólos de \mathcal{R} e \mathcal{T} anulando-se exponencialmente quando $|x| \rightarrow \infty$. Assim, as funções de Green (2.46) e (2.47) são válidas para qualquer V em que isto seja o caso.

Para calcular a função de Green generalizada para o caso mais geral de $V = \sum_j V^{(j)}$, os autores em [19] mostraram que é mais apropriado escrever (2.46) e (2.47) como

$$\begin{aligned} G_{\mp\mp}(x_f, x_i; k) &= \frac{m}{i\hbar^2 k} \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k(x_f, x_i)\right] \right. \\ &\quad \left. + R^{\pm}(k) \exp\left[\mp \frac{i}{\hbar} (S_k(x_f, x_0) + S_k(x_i, x_0))\right] \right\}, \\ G_{\pm\mp}(x_f, x_i; k) &= \frac{m}{i\hbar} T^{\pm}(k) \exp\left[\mp \frac{i}{\hbar} (S_k(x_f, x_0^{\pm}) + S_k(x_i, x_0^{\mp}))\right]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Em (2.48), S_k é a ação clássica, x_0 's são apenas os pontos de referência (escolhido de acordo com a conveniência, ver próximo capítulo) e R e T são as amplitudes semiclássicas generalizadas e estão relacionados com os coeficientes quânticos \mathcal{R} e \mathcal{T} por fases dependentes da energia, ver seção 3.2.

De posse das funções de Green acima, o procedimento então é inteiramente análogo ao discutido na seção 2.3, ou seja, usar recursivamente a expansão em série (2.6) e assim ir adicionando potencial a potencial para obtermos a fórmula final, que é então finalmente escrita como

$$G_{\text{gen}} = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{ce} W_{ce} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{ce}(x_f, x_i; E) \right]. \quad (2.49)$$

Em um ce , entretanto, a partícula nunca entra na região classicamente proibida, a partícula tunela ou é refletida por estas regiões. Os pesos W_{ce} são construídos como segue: cada vez que a partícula bate num ponto de retorno clássico associado a $V^{(j)}$, esta pode ser refletida ou transmitida pelo potencial. No primeiro caso, W_{ce} ganha um fator $R^{(j)}$ e no segundo, ganha um fator $T^{(j)}$. O peso total W_{ce} é então o produto de todas as amplitudes parciais para aquele ce particular.

Este resultado é bastante geral e foi usado com grande sucesso no estudo de espalhamento em cadeias unidimensionais [19]. Entretanto, tal procedimento também pode ser usado na análise de sistemas ligados. No restante da presente monografia iremos discutir como isto pode ser feito e apresentar aplicações a diversos problemas, principalmente na análise de poços quânticos (simples e duplos).

Capítulo 3

Funções de Green semiclássicas generalizadas para sistemas ligados e quase-estados

3.1 Poços quânticos

A idéia principal dos capítulos anteriores é a obtenção da função de Green de espalhamento para um potencial geral V , escrevendo V como soma de potenciais individuais $V^{(j)}$, onde cada $V^{(j)}$ se anula assintoticamente. A idéia aqui é que podemos fazer este mesmo tipo de composição para construir potenciais que permitem estados ligados. Desta forma um poço simples pode ser escrito como a soma de dois potenciais degraus: o degrau da esquerda e o degrau da direita, fig. 3.1 (a). De forma análoga, um poço duplo é uma soma de três potenciais: o potencial da esquerda, o potencial da direita e uma barreira simples entre eles, fig. 3.1 (b).

De acordo com os capítulos anteriores a função de Green semiclássica generalizada

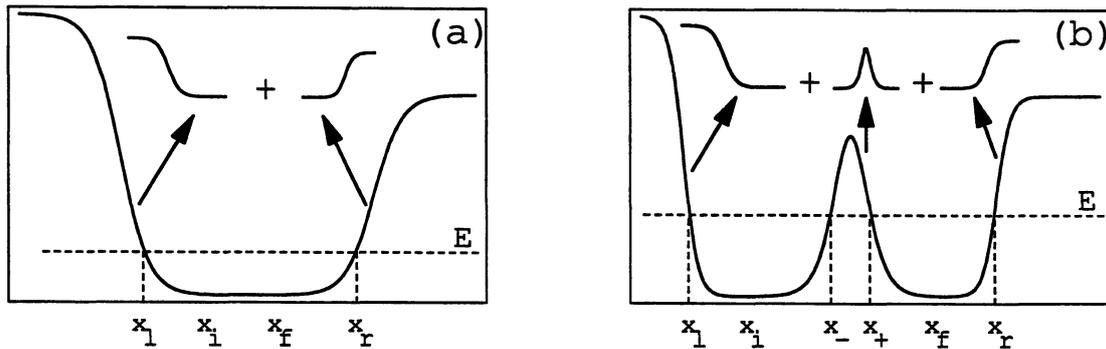


Figura 3.1: (a) Um poço simples é escrito como a soma de dois potenciais, (b) Um poço duplo é escrito como a soma e três potenciais. x_l e x_r são os pontos de retorno à esquerda e à direita do potencial, respectivamente

é, então, dada por

$$G_{\text{gen}} = \frac{m}{i\hbar^2 k} \sum_{\text{ce}} W_{\text{ce}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{\text{ce}}(x_f, x_i; E) \right]. \quad (3.1)$$

Aqui, ce é entendido como ‘caminho de espalhamento’ com S_{ce} e W_{ce} sendo sua ação clássica e amplitude correspondente. Para uma dada energia E vamos assumir que os pontos x_i e x_f estão na região classicamente permitida. As amplitudes W_{ce} são construídas seguindo-se as idéias já expostas nas seções anteriores. Então, cada vez que a partícula bate num ponto de retorno clássico (quando $E = V$) associado ao potencial em questão, ganha uma amplitude R se for refletida e T se for transmitida pelo potencial. A amplitude total W é, então, o produto de todas as amplitudes parciais para este ce particular.

Todas as amplitudes R e T que são necessárias para construir os W 's estão relacionados aos coeficientes quânticos de reflexão e transmissão usuais \mathcal{R} e \mathcal{T} dos potenciais individuais que compõe o poço, através de fases dependentes da energia. Estas fases são obtidas através da comparação direta entre a função de Green assintótica com a função de Green semiclássica generalizada. Os superescritos (+) e (−) são utilizados para denotar as amplitudes de uma onda plana vindo da esquerda e da direita, respectivamente. Para uma dada energia chamaremos x_0 o ponto de

retorno clássico, que é o ponto onde $E = V$, ver fig. 3.2(a). Se $E > V$ para qualquer x , não existe o ponto de retorno clássico, porém quanticamente a partícula “sente um ponto de retorno” do potencial. Assim, para os cálculos, é utilizado o valor de x para o qual o potencial individual é máximo, ver fig. 3.2(b). A ação clássica de uma partícula indo de x_a até x_b é representada por $S^{(\pm)} = \pm \hbar k \int_{x_a}^{x_b} dx \sqrt{1 - V(x)/E}$, onde os sinais \pm são para levar em conta o sentido do movimento. Para todos os casos temos ($E = (\hbar k)^2/(2m)$). Para o caso R , considerando os potenciais individuais na fig. 3.1 (a) e (b), com x_0 representando o ponto de retorno clássico apropriado (fig. 3.2) correspondente temos [19]

$$R^{(\pm)} = \mathcal{R}^{\pm} \exp [ik|x_f + x_i| - \frac{i}{\hbar} S^{(\pm)}(x_0, x_i) - \frac{i}{\hbar} S^{(\pm)}(x_f, x_0)], \quad (3.2)$$

e para T , considerando uma barreira como aquela entre os potenciais na fig. 3.1 (b), podemos escrever

$$T^{(\pm)} = \mathcal{T} \exp [ik|x_f - x_i| - \frac{i}{\hbar} S^{(\pm)}(x_{\mp}, x_i) - \frac{i}{\hbar} S^{(\pm)}(x_f, x_{\pm})] \quad (3.3)$$

Então, nas equações, acima o limite assintótico de $x_i \rightarrow \mp\infty$, $x_f \rightarrow \mp\infty$ (caso de reflexão) e $x_i \rightarrow \pm\infty$, $x_f \rightarrow \mp\infty$ (caso de transmissão) para os S 's deve ser tomado explicitamente. Com isto os termos em x_i e x_f se cancelam e finalmente temos as relações entre as amplitudes semiclássicas e os coeficientes quânticos

$$\begin{aligned} R &= \mathcal{R} \exp [-i\varphi_R(E)] \\ T &= \mathcal{T} \exp [-i\varphi_T(E)]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

As fases $\varphi_R(E)$ e $\varphi_T(E)$ são dependentes da energia pois os pontos de retorno dependem da energia da partícula.

Para se obter a função de Green para um poço de potencial seguimos os mesmos passos das seções 2.4 e 2.5 . Para o potencial simples, a soma é feita sobre todos os caminhos de espalhamento, os quais são trajetórias onde a partícula deixa x_i , sofre múltiplas reflexões entre as paredes do poço e finalmente chega a x_f (ambos x_i e x_f estão dentro do poço). Uma partícula inicialmente em x_i pode chegar até o ponto

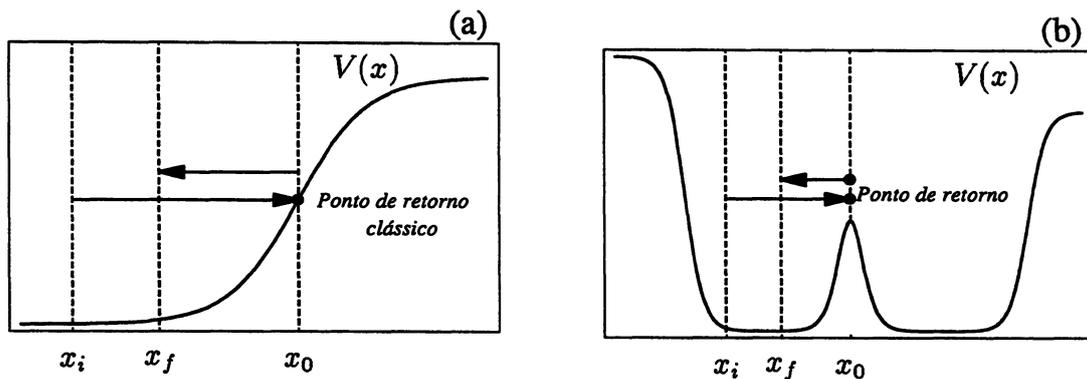


Figura 3.2: Pontos de retorno clássico para potenciais (a) quando $E < V(x)$ (b) quando $E > V(x)$.

x_f indo diretamente para à direita ou indo para à esquerda, sendo refletida pelo potencial em x_l e então indo para à direita e chegando a x_f . Na verdade, existe um grupo infinito de possíveis caminhos para uma partícula sair de x_l , vamos chamá-lo de P_l . Outra possibilidade é inicialmente em x_i , ir para à direita, ser refletida pelo potencial em x_r e alcançar x_f pela direita. Novamente, existe um grupo infinito de possíveis caminhos para uma partícula sair de x_r , e vamos chamá-lo de P_r , ver fig 3.3.

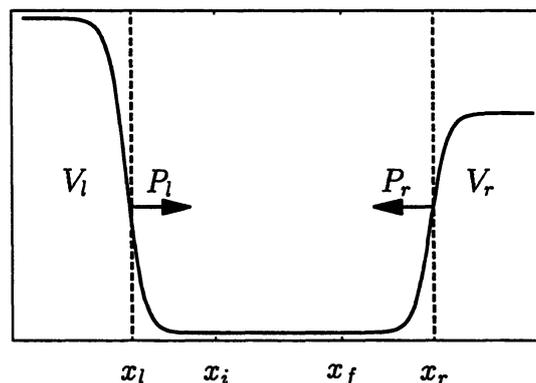


Figura 3.3: Grupos de caminhos para o poço simples. V_l e V_r são respectivamente os potenciais da esquerda e direita, utilizados para construir o poço simples.

Como a função de Green é a soma de todos os possíveis caminhos clássicos onde

a partícula sai de x_i e chega a x_f , devemos somar todos eles

$$G_{\text{gen}}^{ps}(x_f, x_i, k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} g_{ps}, \quad (3.5)$$

$$g_{ps} = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_i)\right] + \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_r, x_i)\right] R_r P_r + \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_l, x_i)\right] R_l P_l, \quad (3.6)$$

com

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{e} \quad S_k^{ps}(x_2, x_1) = \hbar k \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{1 - \frac{V^{ps}(x)}{E}}. \quad (3.7)$$

Nas equações acima $S_{-k}^{ps}(x_l, x_i)$ é a ação para uma partícula se deslocando do ponto x_i até x_l no sentido da direita para à esquerda.

Agora, P_l é composto de um caminho direto alcançando x_f pela esquerda e outro que é reflexão em x_r seguida por um dos caminhos do grupo P_r ,

$$P_l = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_l)\right] + \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_r, x_l)\right] R_r P_r. \quad (3.8)$$

Da mesma forma,

$$P_r = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)\right] + \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_l, x_r)\right] R_l P_l. \quad (3.9)$$

Substituindo a eq. (3.8) em (3.9) e a eq. (3.9) em (3.8), temos

$$P_l = \frac{1}{f_{ps}} \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_l)\right] + R_r \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_r, x_l)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)\right] \right\}, \quad (3.10)$$

$$P_r = \frac{1}{f_{ps}} \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)\right] + R_l \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_r, x_l)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_l)\right] \right\}, \quad (3.11)$$

onde

$$f_{ps} = 1 - R_r R_l \exp\left[\frac{i}{\hbar} 2S_k(x_r, x_l)\right] \quad (3.12)$$

e foi utilizada a propriedade $\exp\left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_1, x_2)\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_2, x_1)\right]$. Então, substi-

tuindo as equações (3.10) e (3.11) para P_l e P_r na equação (3.6), temos

$$\begin{aligned}
 g_{ps} = & \frac{1}{f_{ps}} \left\{ \underbrace{\exp \left[\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_i) \right]}_A \right. \\
 & + \underbrace{R_r \exp \left[\frac{i}{\hbar} [S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right]}_B \\
 & + \underbrace{R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} [S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) + S_k^{ps}(x_f, x_l)] \right]}_C \\
 & \left. + \underbrace{R_r R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} [S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) + S_k^{ps}(x_r, x_l) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right]}_D \right\}. \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Podemos ainda fazer algumas modificações na equação (3.13), escrevendo as ações clássicas em termos de x_r .

Termo A(Ver fig. 3.4 (a) e (b))

$$S_k^{ps}(x_f, x_i) = S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)$$

Termo B Não é necessário fazer nenhuma mudança neste termo.

Termo C(Ver fig. 3.4 (c) e (d))

$$\begin{aligned}
 S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) + S_k^{ps}(x_f, x_l) &= S_k^{ps}(x_i, x_l) + S_k^{ps}(x_f, x_l) \\
 &= S_k^{ps}(x_r, x_l) - S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_k^{ps}(x_r, x_l) - S_k^{ps}(x_r, x_f) \\
 &= -S_k^{ps}(x_r, x_i) - S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) + S_k^{ps}(x_r, x_l) + S_k^{ps}(x_r, x_l)
 \end{aligned}$$

Termo D(Ver fig. 3.4 (e) e (f))

$$\begin{aligned}
 & S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) + S_k^{ps}(x_r, x_l) \\
 &= S_k^{ps}(x_i, x_l) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) + S_k^{ps}(x_r, x_l) \\
 &= S_k^{ps}(x_r, x_l) - S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) + S_k^{ps}(x_r, x_l) \\
 &= -S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) + 2S_k^{ps}(x_r, x_l).
 \end{aligned}$$

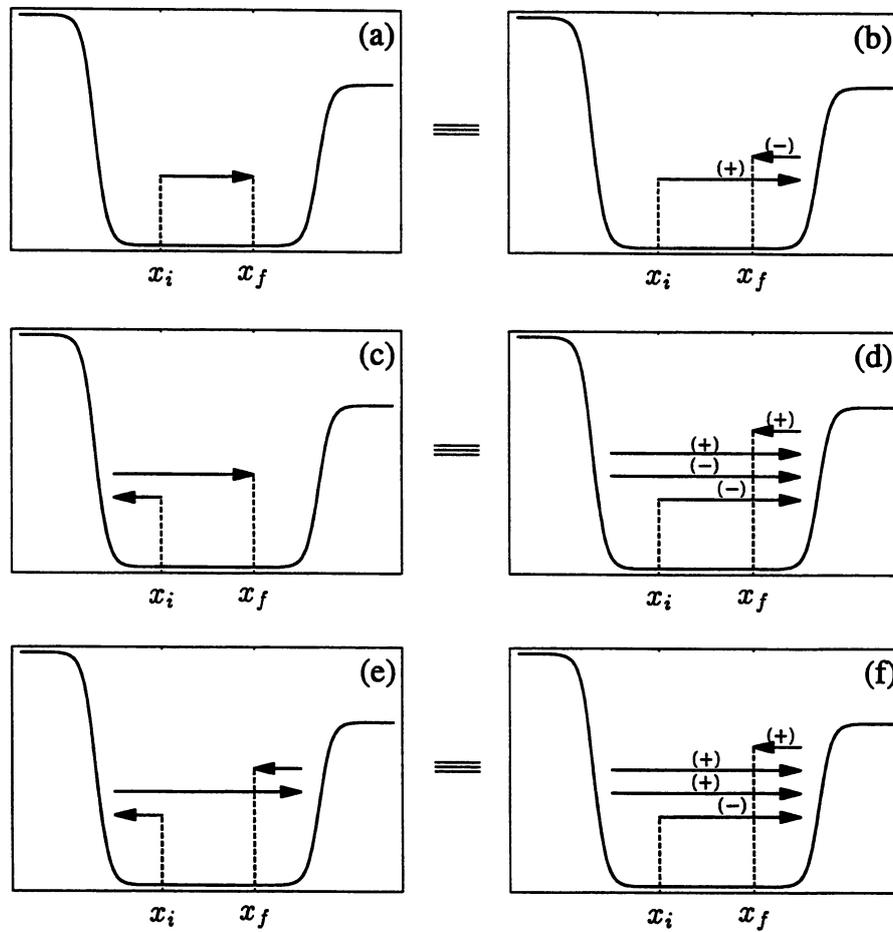


Figura 3.4: (a) e (b) relação entre as ações clássicas para o Termo A, (c) e (d) relação entre as ações clássicas para o Termo C, (e) e (f) relação entre as ações clássicas para o Termo D. Os sinais (+) e (-) indicam se o termo é somado ou subtraído, respectivamente.

Utilizando estas relações na equação (3.13), podemos escrever g_{ps} como,

$$\begin{aligned}
g_{ps} = & \frac{\exp [2iS_k^{ps}(x_r, x_l)/\hbar]}{f_{ps}} \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} [-2iS_k^{ps}(x_r, x_l) + S_k^{ps}(x_r, x_i) - S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right] \right. \\
& + R_r \exp \left[\frac{i}{\hbar} [-2S_k^{ps}(x_r, x_l) + S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right] \\
& + R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} [-S_{-k}^{ps}(x_r, x_l) - S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right] \\
& \left. + R_r R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} [-S_k^{ps}(x_r, x_i) + S_{-k}^{ps}(x_f, x_r)] \right] \right\}. \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Substituindo esta equação na equação (3.5) e fatorando-a, podemos finalmente escrever a função de Green para o poço simples como

$$\begin{aligned}
G_{\text{gen}}^{ps}(x_f, x_i; k) = & \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{1}{f_{ps}} \exp [2iS_k^{ps}(x_r, x_l)/\hbar] \\
& \times \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_f, x_r) \right] + R_r \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_r) \right] \right) \\
& \times \left(\exp \left[\frac{i}{\hbar} [-2iS_k^{ps}(x_r, x_l) + S_k^{ps}(x_r, x_i)] \right] \right. \\
& \left. + R_l \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_r, x_i) \right] \right). \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Usando o mesmo procedimento acima, mas agora escrevendo as ações clássicas em termos de x_l , podemos também escrever a função de Green como

$$\begin{aligned}
G_{\text{gen}}^{ps}(x_f, x_i; k) = & \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{1}{f_{ps}} \exp [2iS_k^{ps}(x_r, x_l)/\hbar] \\
& \times \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) \right] + R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{-k}^{ps}(x_l, x_i) \right] \right) \\
& \times \left(\exp \left[\frac{i}{\hbar} [-2iS_k^{ps}(x_r, x_l) + S_k^{ps}(x_f, x_l)] \right] \right. \\
& \left. + R_r \exp \left[-\frac{i}{\hbar} S_k^{ps}(x_f, x_l) \right] \right). \quad (3.16)
\end{aligned}$$

As equações (3.15) e (3.16) são formas equivalentes da função de Green para poço simples. Na primeira, as ações clássicas são escritas em termos do ponto x_r e na segunda em termos de x_l .

Para o poço duplo seguimos o mesmo procedimento, mas agora além das reflexões sofridas nas paredes do potencial da esquerda e da direita existe a possibilidade de

reflexão e transmissão na barreira interna. Cada vez que a partícula é refletida no potencial da esquerda ganha um coeficiente R_l e na direita R_r . Para o caso de reflexão na barreira interna, devemos considerar ou R^+ ou R^- como contribuição para W_{ce} , dependendo se a direção de incidência da partícula é pela esquerda ou direita. Aqui somente iremos considerar barreiras simétricas, então $R^+ = R^- = R$, mas para uma barreira assimétrica o método pode ser utilizado da mesma forma. Se a partícula for transmitida pela barreira a contribuição para W_{ce} é T . Quatro exemplos esquemáticos de tais caminhos de espalhamento são representados na fig 3.5 (a)-(d).

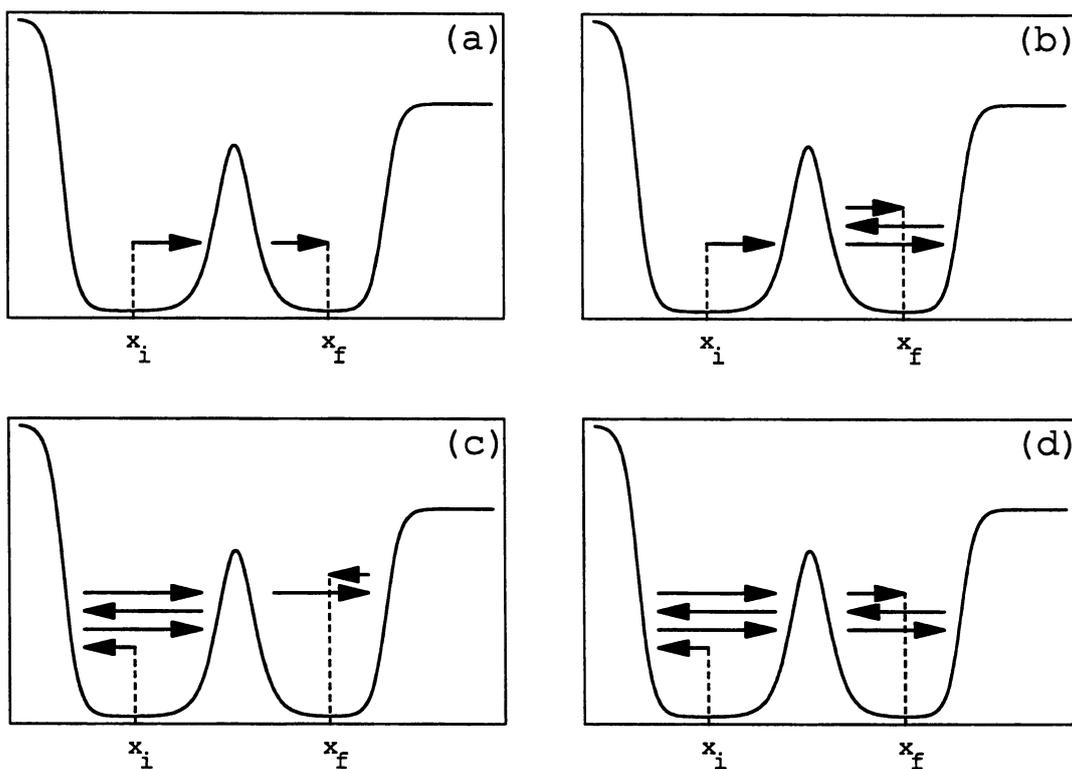


Figura 3.5: Quatro exemplos esquemáticos de W_{ce} para um poço duplo.

A função de Green semiclássica é calculada como segue. Uma partícula inicialmente em x_i pode ir para à direita ou para à esquerda. No primeiro caso, ela pode ser refletida e ganhar um fator R ou pode tunelar e ganhar um fator T . No segundo caso, a partícula somente pode ser refletida pelo potencial e ganhar um fator R_l ,

desta forma

$$G_{\text{gen}}^{pd}(x_f, x_i, k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} g_{pd}, \quad (3.17)$$

com g_{pd} dado por (ver fig. 3.6)

$$g_{pd} = (\exp[\frac{i}{\hbar} S_k(x_-, x_i)] + R_l \exp[\frac{i}{\hbar} (S_{-k}(x_l, x_i) + S_k(x_-, x_l))]) (R P_- + T P_+), \quad (3.18)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{e} \quad S_k(x_2, x_1) = \hbar k \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{1 - \frac{V_{pd}(x)}{E}}. \quad (3.19)$$

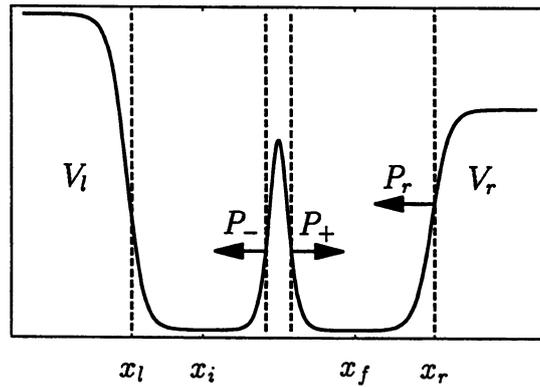


Figura 3.6: Grupos de ce para o poço duplo. x_l e x_r são os pontos de retorno à esquerda e direita à respectivamente e V_l e V_r são os potenciais que juntamente com a barreira são utilizados para a construção do poço duplo.

Onde os termos P_- e P_+ são dados por

$$P_- = \frac{1}{f_l} \exp[\frac{2i}{\hbar} S_k(x_-, x_l)] R_l T P_+, \quad (3.20)$$

onde $f_l = 1 - R_l R \exp[\frac{2i}{\hbar} S_k(x_+, x_l)]$,

$$P_+ = \exp[\frac{2i}{\hbar} S_k(x_f, x_+)] + \exp[\frac{i}{\hbar} S_k(x_r, x_+)] R_r P_r, \quad (3.21)$$

e

$$P_r = \exp[\frac{i}{\hbar} S_{-k}(x_f, x_r)] + \exp[\frac{i}{\hbar} S_k(x_r, x_+)] (R P_+ + T P_-). \quad (3.22)$$

Usando as equações (3.20)-(3.22) encontramos a forma de P_+ ,

$$P_+ = \frac{1}{f f_r} (\exp[\frac{i}{\hbar} S_k(x_f, x_+)] + R_r \exp[\frac{i}{\hbar} (S_k(x_r, x_+) + (S_k(x_f, x)))]), \quad (3.23)$$

onde $f_r = 1 - R_r R \exp \left[\frac{2i}{\hbar} S_k(x_f, x_+) \right]$ e

$$f = 1 - \frac{T^2 R_r R_l}{f_r f_l} \exp \left[\frac{2i}{\hbar} (S_k(x_-, x_l) + S_k(x_f, x_+)) \right].$$

Agora, notando que $(RP_+ + TP_-) = TP_+/f_l$ e substituindo os resultados acima em 3.17, obtemos a função de Green semiclássica para o potencial duplo,

$$\begin{aligned} G_{\text{gen}}^{pd}(x_f, x_i; k) &= \frac{mT}{i\hbar^2 k} \frac{1}{f_{pd}} \\ &\times \left(\exp \left[\frac{i}{\hbar} S_k(x_-, x_i) \right] + R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_k(x_-, x_l) + S_{-k}(x_l, x_i)) \right] \right) \\ &\times \left(\exp \left[\frac{i}{\hbar} S_k(x_f, x_+) \right] + R_r \exp \left[\frac{i}{\hbar} (S_k(x_r, x_+) + S_{-k}(x_f, x_r)) \right] \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

com

$$f_{pd} = f f_r f_l = f_r f_l - T^2 R_r R_l \exp \left[\frac{2i}{\hbar} (S_k(x_-, x_l) + S_k(x_r, x_+)) \right]. \quad (3.25)$$

O mesmo procedimento pode ser utilizado para potenciais mais complicados, por exemplo, para super-redes, os quais podem ser entendidos como um poço simples com um grande número de barreiras dentro dele. Obviamente, existe uma grande proliferação das diferentes classes de ce para tais sistemas. Entretanto, como foi visto na seção 2.5 para PCP, existe um método simples para fazer a soma destes possíveis caminhos exatamente e assim os cálculos podem ser efetuados de forma fechada obtendo-se a função de Green para o sistema.

3.2 Os autovalores de energia

Os autovalores de energia de um sistema podem ser obtidos através dos pólos de sua respectiva função de Green. Das equações (3.15) e (3.24) vemos que os pólos são obtidos das raízes de $f_{ps} = 0$ para o poço simples e $f_{pd} = 0$ para o poço duplo.

Com a finalidade de testar nosso método calculamos os autovalores de sistemas ligados utilizando os potenciais degraus de Woods-Saxon $V_{\pm}^{WS}(x; c; \alpha) = V_0/(1 + \exp[-\alpha(x \pm c)])$ e a barreira de Rosen-Morse $V^{RM} = W_0/\cosh^2[\beta x]$ para construí-los. Com estes elementos construímos os seguintes poços

$$\begin{aligned} V^{ps} &= V_+^{WS}(x; a; \alpha_l) + \gamma V_-^{WS}(x; b; \alpha_r), \\ V^{pd} &= V^{ps} + V^{RM}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

As amplitudes quânticas para os potenciais de Woods-Saxon, R_{\pm}^{WS} e para o a barreira de Rosen-Morse, R^{RM} e T^{RM} , como vimos estão relacionadas aos coeficientes quânticos através de fases. Os coeficientes quânticos para estes potenciais são dados por [19, 54, 55] ($s = (-1 + \sqrt{1 - 8mW_0/(\beta\hbar)^2})/2$, $E = \hbar^2 k^2/2m$)

$$\mathcal{R}^{RM} = \frac{\Gamma(-ik/\beta - s)\Gamma(-ik/\beta + s + 1)\Gamma(-ik/\beta)}{\Gamma(-s)\Gamma(s + 1)\Gamma(-ik/\beta)}, \quad (3.27)$$

$$\mathcal{T}^{RM} = \frac{k}{i\beta} \frac{\Gamma(-ik/\beta - s)\Gamma(-ik/\beta + s + 1)}{\Gamma(-ik/\beta + 1)\Gamma(-ik/\beta + 1)}, \quad (3.28)$$

para o potencial de Rosen-Morse e ($\kappa = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$)

$$\mathcal{R}^{WS} = \frac{\Gamma(2ik/\alpha)\Gamma(-i(k + \kappa)/\alpha)\Gamma(1 - i(k + \kappa)/\alpha)}{\Gamma(-2ik/\alpha)\Gamma(i(k + \kappa)/\alpha)\Gamma(1 + i(k - \kappa)/\alpha)}, \quad (3.29)$$

para o potencial de Woods-Saxon. Analisando-se as ações clássicas e tomando-se o limite assintótico como descrito na seção 3.1, as fases são obtidas e dadas por ($\varepsilon = W_0/E$, $\epsilon = V_0/E$) [19]

$$\varphi^{RM} = \frac{k}{\beta} \{(\sqrt{\varepsilon} - 1) \ln[|\varepsilon - 1|] - 2\sqrt{\varepsilon} \ln[\sqrt{\varepsilon} + 1]\}, \quad (3.30)$$

$$\varphi^{WS} = \frac{2k}{\alpha} \{(\sqrt{1 - \epsilon} - 1) \ln[\epsilon] - \sqrt{1 - \epsilon} \ln[\epsilon - 2(1 + \sqrt{1 - \epsilon})] + 2 \ln[2]\}. \quad (3.31)$$

Então, finalmente obtemos

$$\begin{aligned} R^{RM} &= \mathcal{R}^{RM} \exp[-i\varphi^{RM}] \\ T^{RM} &= \mathcal{T}^{RM} \exp[-i\varphi^{RM}] \\ R_{\pm}^{WS} &= \mathcal{R}^{WS} \exp[-i\varphi^{WS}] \end{aligned} \quad (3.32)$$

Para a construção da função de Green semiclássica generalizada utilizamos os coeficientes R^{RM} , T^{RM} em f^{ps} e R^{RM} , T^{RM} e R_{\pm}^{WS} em f^{pd} .

Para comparar com os autovalores analíticos obtidos dos pólos das funções de Green, calculamos numericamente os autovalores para estes mesmos poços quânticos utilizando o método de Noumerov [apêndice C]. Este método pode ser aplicado para qualquer potencial unidimensional [56, 57]. Para os cálculos utilizamos unidades atômicas, $\hbar = 1$ e $2m = 1$. Os cálculos foram realizados para os poços quânticos que estão mostrados nas figuras 3.7 à 3.12 e os resultados estão nas tabelas 3.1 à 3.6. As linhas tracejadas nas figuras representam valores numéricos dos níveis quânticos mostrados nas tabelas. Para calcular as ações clássicas que aparecem em f^{ps} e f^{pd} , podemos utilizar as expressões analíticas em [19] ou integrar numericamente. Seguimos o segundo método por ser rápido e bastante simples.

Como podemos ver, os resultados obtidos com nosso método semiclássico generalizado estão apresentando uma concordância muito boa quando comparados aos autovalores obtidos numericamente, mostrando uma grande acurácia do método. Como discutido em [19], se os potenciais individuais que formam o sistema estiverem muito próximos um dos outros o uso de suas amplitudes quânticas para construir a função de Green generalizada pode não fornecer resultados muito bons. Na figura 3.10 mostramos um exemplo onde existe uma grande superposição dos potenciais da esquerda e da direita que compõe o poço simples. A linha tracejada é referente ao gráfico do potencial da esquerda sozinho. Da tabela 3.4 vemos que mesmo nesse caso o erro para os autovalores é menor que 0.5%, o que mostra a robustez do método.

Outro ponto importante é que técnicas numéricas como o Noumerov requerem integração dentro das regiões classicamente proibidas. Para autovalores perto do topo do poço, a integração deve ser estendida profundamente nestas regiões se desejamos manter uma dada precisão numérica. Isto deixa os cálculos mais demorados e precisamos adaptar o intervalo de integração (ver apêndice C) de acordo com cada

autovalor considerado. Experimentamos este tipo de problema para obter o autovalor mais alto para o poço mostrado na figura 3.9, o qual está muito próximo da borda $\gamma V_0 = 0.028$ do potencial degrau da direita. Foi necessário utilizar um intervalo de integração muito grande dentro da região classicamente proibida para garantirmos a precisão numérica. Por outro lado, o nosso método semiclássico generalizado não apresentou nenhuma dificuldade para o cálculo deste autovalor, pois fornece todos os autoestados com o mesmo grau de precisão sem precisarmos no preocupar em que intervalo de energia os autoestados estão.

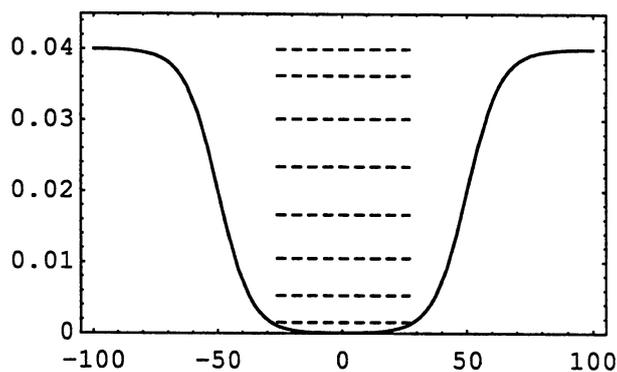


Figura 3.7: $c_l = c_r = 50$, $\alpha = 0.15$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.00150456	0.00150464	0.00531717
0.00528784	0.00528786	0.00037823
0.01050917	0.01050918	0.00009515
0.01667766	0.01667766	0.00000000
0.02338294	0.02338294	0.00000000
0.03014811	0.03014811	0.00000000
0.03623996	0.03623996	0.00000000
0.03995042	0.03993635	0.03521865
0.0399436	0.039944	0.00100100

Tabela 3.1: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.7 em unidades atômicas

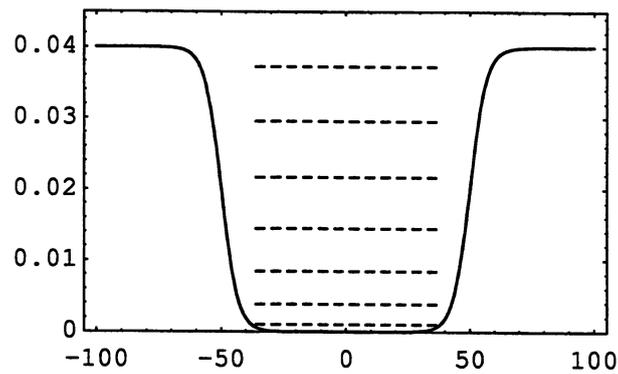


Figura 3.8: $c_l = c_r = 50$, $\alpha = 0.3$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.00098255	0.00098255	0.00000000
0.00385552	0.00385552	0.00000000
0.00843030	0.00843030	0.00000000
0.01445880	0.01445880	0.00000000
0.02163861	0.02163861	0.00000000
0.02953379	0.02953379	0.00000000
0.03721154	0.03721154	0.00000000

Tabela 3.2: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.8 em unidades atômicas

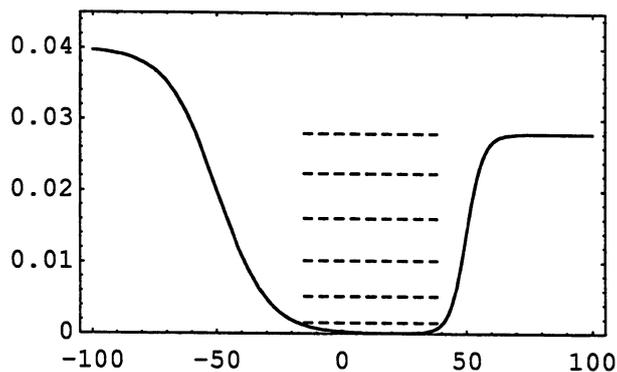


Figura 3.9: $c_l = c_r = 50$ $\alpha_l = 0.1$, $\alpha_r = 0.3$ $V_0 = 0.04$, $\gamma = 0.7$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.00150959	0.00150942	0.01126134
0.00516995	0.00516985	0.00193425
0.01017936	0.01017934	0.00019648
0.01606319	0.01606318	0.00006225
0.02235325	0.02235326	0.00004474
0.02797069	0.02797014	0.00196634

Tabela 3.3: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.9 em unidades atômicas

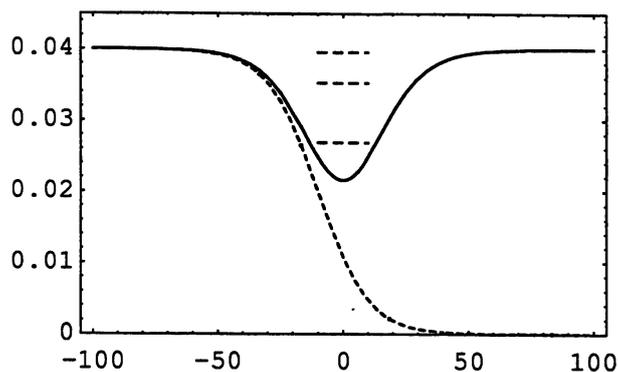


Figura 3.10: $c_l = c_r = 10$, $\alpha = 0.1$, $V_0 = 0.04$, $\gamma = 1.0$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.02670993	0.02682786	0.44150615
0.03518302	0.03524278	0.16984043
0.03956491	0.03955708	0.01978774

Tabela 3.4: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.10 em unidades atômicas

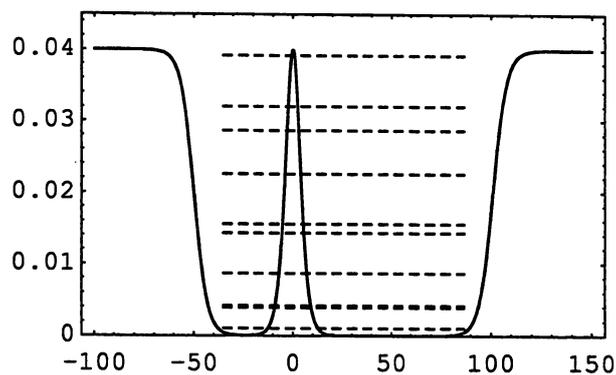


Figura 3.11: $c_l = 50$, $c_r = 101$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.2$, $V_0 = 0.04$, $w = 1$, $\gamma = 1.0$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.00099911	0.00099911	0.00000000
0.00386143	0.00386143	0.00000000
0.00416368	0.00416369	0.00024017
0.00865882	0.00865882	0.00000000
0.01425565	0.01425570	0.00035074
0.01551761	0.01551761	0.00000000
0.02253780	0.02253780	0.00000000
0.02863433	0.02863433	0.00000000
0.03203045	0.03203045	0.00000000
0.03920422	0.03920422	0.00000000

Tabela 3.5: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.11 em unidades atômicas

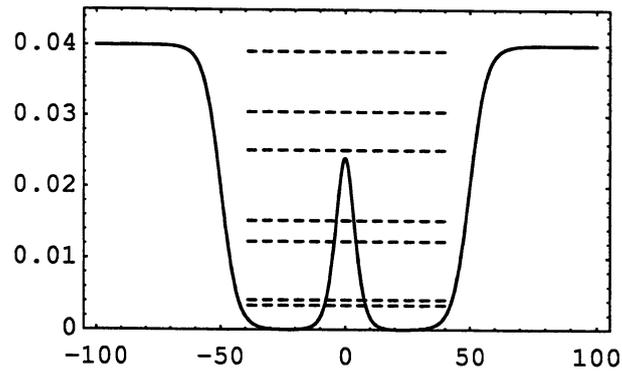


Figura 3.12: $c_l = c_r = 50$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.2$, $V_0 = 0.04$, $w = 0.6$, $\gamma = 1.0$

Numérico	Analítico	Erro (%)
0.00338435	0.00338436	0.00029548
0.00413574	0.00413575	0.00024179
0.01228692	0.01228692	0.00000000
0.01523671	0.01523671	0.00000000
0.02511372	0.02511372	0.00000000
0.03057469	0.03057469	0.00000000
0.03912227	0.03912227	0.00000000

Tabela 3.6: Autovalores de energia para o potencial da figura 3.12 em unidades atômicas

3.3 Um índice de Maslov generalizado

Nesta seção mostraremos porque os nossos resultados são tão melhores que os métodos semiclássicos usuais. Assim iremos reescrever nossos resultados de tal forma que possam ser comparados às fórmulas semiclássicas presentes na literatura.

No poço simples para obter os autovalores de energia, devemos fazer a equação (3.12) igual a zero. Assim:

$$\begin{aligned} R_r R_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} 2S_k(x_r, x_l) \right] &= 1, \\ \mathcal{R}_r \mathcal{R}_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} 2S_k^{ps}(x_r, x_l) - i\varphi_l - i\varphi_r \right] &= 1. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para estados ligados, as energias da partícula são sempre menores que a altura máxima dos potenciais degraus e assim os coeficientes de reflexão do degrau têm a propriedade $|\mathcal{R}|^2 = 1$. Desta forma, podemos escrever os coeficientes na forma, $\mathcal{R}_l = e^{-i\phi_l(E)/\hbar}$ e $\mathcal{R}_r = e^{-i\phi_r(E)/\hbar}$. Então, da equação acima:

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} (2S_k^{ps}(x_r, x_l) - \mu(E)) \right] = 1, \quad (3.34)$$

a qual pode ser escrita na forma:

$$\oint p^{ps}(x) dx = 2n\pi\hbar + \mu(E)\hbar \quad (3.35)$$

com $\mu(E) = \phi_r(E) + \phi_l(E) + \varphi_r(E) + \varphi_l(E)$. Quando esta equação é comparada à condição de quantização WKB usual (apêndice C equação (A.44)), a diferença está no termo $\mu(E)$ dependente da energia, o qual pode ser entendido como um índice de Maslov generalizado. Note que no apêndice C, o índice de Maslov assume apenas os valores 2 ou 4, dependendo se o potencial é finito ou infinito, respectivamente. Isto explica porque nossos resultados são melhores do que aqueles da aproximação WKB usual. A idéia de um índice de Maslov não-inteiro já havia sido proposto na literatura [4–6], mas aqui nosso método fornece uma forma simples e direta de construir tais índices.

Para o potencial duplo, os autovalores de energia são obtidos igualando a equação (3.25) a zero. Isto é:

$$\begin{aligned} & \left(1 - R_r R \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_-, x_l)\right]\right) \left(1 - R_l R \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_r, x_+)\right]\right) \\ & - T^2 R_r R_l \exp\left[\frac{2i}{\hbar} (S_k^{pd}(x_-, x_l) + S_k^{pd}(x_r, x_+))\right] = 0. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Lembrando que $R = \mathcal{R} \exp[-i\varphi(E)]$ e $T = \mathcal{T} \exp[-i\varphi(E)]$ (ver seção 3.2) e sendo os coeficientes quânticos números complexos, podemos escrever $\mathcal{R} = r \exp[-i\phi(E)]$ e $\mathcal{T} = t \exp[-i\phi_t(E)]$, onde r e t são números reais. A equação acima pode então ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \left(1 - r \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_-, x_l) - i(\varphi_l(E) + \phi_l(E) + \varphi(E) + \phi(E))\right]\right) \\ & \times \left(1 - r \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_r, x_+) - i(\varphi_r(E) + \phi_r(E) + \varphi(E) + \phi(E))\right]\right) \\ & - t^2 \exp\left[\frac{2i}{\hbar} (S_k^{pd}(x_-, x_l) + S_k^{pd}(x_r, x_+)) \right. \\ & \left. - i(\varphi_r(E) + \phi_r(E) + \varphi_l(E) + \phi_l(E) + 2\varphi(E) + 2\phi_t(E))\right] = 0. \end{aligned} \quad (3.37)$$

No apêndice D, mostramos que para alguns potenciais, podemos escrever a fase para o coeficiente de transmissão como função da fase do coeficiente de reflexão, $\phi_t(E) = \phi(E) + \Delta(E)$, com $\Delta(E) = \pm\pi/2$. Então podemos reescrever (3.37) na forma

$$\begin{aligned} & \left(1 - r \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_-, x_l) - i\mu_r(E)\right]\right) \\ & \times \left(1 - r \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_r, x_+) - i\mu_l(E)\right]\right) \\ & - t^2 \exp\left[\frac{2i}{\hbar} (S_k^{pd}(x_-, x_l) + S_k^{pd}(x_r, x_+)) \right. \\ & \left. - i(\mu_r(E) + \mu_l(E) + 2\Delta(E))\right] = 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

com $\mu_l = \varphi_l + \phi_l + \varphi + \phi$ e $\mu_r = \varphi_r + \phi_r + \varphi + \phi$. Em (3.38) podemos constatar a contribuição de três órbitas fundamentais: uma delas confinadas no lado esquerdo, outra no lado direito e uma terceira que cobre o poço duplo com um todo, fig. 3.13.

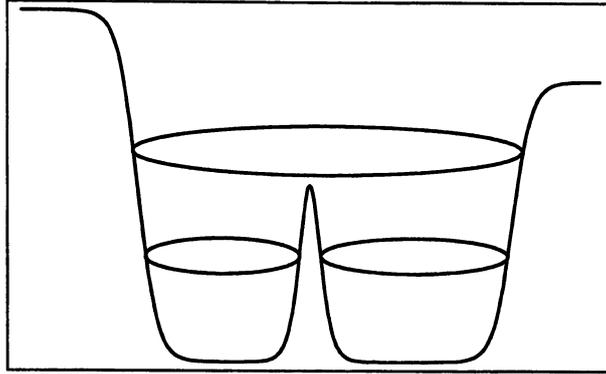


Figura 3.13: Órbitas para o poço duplo de potencial

Fazendo o produto em (3.38), usando a relação $r^2 + t^2 = 1$ e também usando $\exp[\pm 2i\Delta] = -1$, então $(\tilde{S}_r = 2S_k^{pd}(x_r, x_+)/\hbar - \mu_r$ e $\tilde{S}_l = 2S_k^{pd}(x_-, x_l)/\hbar - \mu_l$)

$$1 + \exp[i\tilde{S}_l + i\tilde{S}_r] - r \left(\exp[i\tilde{S}_l] + \exp[i\tilde{S}_r] \right) = 0. \quad (3.39)$$

Como vimos na seção anterior, a equação acima fornece resultados muito precisos para os autovalores dos poços duplos.

Para comparar nosso resultado com o resultado WKB, precisamos escrever a equação (3.38) em uma forma mais apropriada. Neste sentido, vamos reescrever a equação (3.38) para o caso do poço duplo simétrico. Neste caso $\mu_l = \mu_r = \mu$ e $S_k^{pd}(x_-, x_l) = S_k^{pd}(x_r, x_+) = S_k^{pd}$, assim

$$\left(1 - r \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd} - i\mu(E)\right] \right)^2 + t^2 \exp\left[\frac{4i}{\hbar} S_k^{pd}\right] = 0, \quad (3.40)$$

que podemos fatorar em

$$\left(1 - (r - it) \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd} - i\mu(E)\right] \right) \left(1 - (r + it) \exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd} - i\mu(E)\right] \right) = 0, \quad (3.41)$$

ou ainda ($\chi = \arctan[t/r]$)

$$\exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd} - i\mu(E)\right] = (r \pm it) = \exp[\pm i\chi] \quad (3.42)$$

onde foi utilizada a relação $r^2 + t^2 = 1$. Utilizando $S_k^{pd} = \int_{x_+}^{x_r} p^{pd}(x)dx$, encontramos a condição de quantização para um poço duplo simétrico ($n = 0, 1, 2, \dots$)

$$\frac{2}{\hbar} \int_{x_+}^{x_r} p^{pd}(x)dx = 2n\pi + \mu(E) \pm \chi(E). \quad (3.43)$$

O regime da aproximação WKB é para $t \ll 1$, então para t pequeno, $r^2 = 1 - t^2 \rightarrow r = \sqrt{1 - t^2} \approx 1$, $\chi = t$. Semiclassicamente, o coeficiente de transmissão é dado por [58] $t^2 = |\mathcal{T}|^2 = \exp[-(2/\hbar) \int_{x_-}^{x_+} |p^{pd}(x)|dx]$ e a equação acima fica

$$\frac{2}{\hbar} \int_{x_+}^{x_r} p^{pd}(x)dx = 2n\pi + \mu(E) \pm \exp[-(1/\hbar) \int_{x_-}^{x_+} |p^{pd}(x)|dx], \quad (3.44)$$

a qual concorda com a fórmula WKB usual [55, 58] para os autovalores de um poço duplo simétrico a menos de um índice de Maslov $\mu(E)$ dependente da energia.

3.4 O desdobramento de energia para poços duplos

Nosso método também fornece resultados para o “splitting” de energia de um poço duplo devido ao fenômeno de tunelamento. Seja E_0 um autovalor de energia de um dos poços individuais isolados do poço duplo, por exemplo o da direita. Esta energia é obtida através da regra de quantização:

$$\exp\left[\frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(x_r, x_+; E_0) - i\mu(E_0)\right] = 1.$$

Pela equação (3.42), devido ao efeito de tunelamento, teremos duas energias E_{\pm} correspondentes aos sinais \pm desta equação, as quais são energias acima e abaixo de E_0 . O “splitting” de energia é $\Delta E = \Delta E_+ - \Delta E_-$, onde $\Delta E_{\pm} = E_{\pm} - E_0$. Para t pequeno, as energias E_{\pm} não diferem muito de E_0 , então podemos expandir a equação (3.42) em torno de E_0 ($\tilde{S}(E) = \frac{2i}{\hbar} S_k^{pd}(E) - i\mu(E)$, $E_{\pm} = E$ e $f' \equiv df/dx$)

$$\begin{aligned} \tilde{S}(E) &= \tilde{S}(E_0) + \tilde{S}'(E_0)(E - E_0) + \dots \\ \chi(E) &= \chi(E_0) + \chi'(E_0)(E - E_0) + \dots \end{aligned} \quad (3.45)$$

Substituindo esta expansão na equação (3.42), temos:

$$\tilde{S}(E_0) - 2n\pi \pm \chi(E_0) + (S'(E_0) \mp \chi'(E_0))(E - E_0) = 0, \quad (3.46)$$

assim,

$$\Delta E_{\pm} = \frac{\pm \chi(E_0)}{(\tilde{S}'(E_0) \mp \chi'(E_0))}. \quad (3.47)$$

Subtraindo as expressões (+) e (-), encontramos

$$\Delta E = \frac{2\chi(E_0)[\frac{2}{\hbar}S^{pd'}(x_r, x_+)(E_0) - \mu'(E_0)]}{[\frac{2}{\hbar}S^{pd'}(x_r, x_+)(E_0) - \mu'(E_0)]^2 - \chi'^2(E_0)}. \quad (3.48)$$

Para t pequeno, $\chi \approx t$ e podemos desprezar o termo t'^2 comparado com $(\frac{2}{\hbar}S^{pd'} - \mu')$, com isso, da equação acima temos

$$\Delta E = \frac{2t(E_0)}{[\frac{2}{\hbar}S^{pd'}(E_0) - \mu'(E_0)]}.$$

Precisamos calcular a derivada da ação

$$S^{pd'}(E_0) = \frac{d}{dE} \int_{x_+}^{x_r} p^{pd} dx \Big|_{E_0} = m \int_{x_+}^{x_r} \frac{dx}{p^{pd}(x)} \Big|_{E_0} \quad (3.49)$$

Definindo a integral acima como

$$\int_{x_+}^{x_r} \frac{dx}{p^{pd}(x)} = \frac{\pi}{m\omega} \quad (3.50)$$

onde ω é a frequência de oscilação para uma órbita clássica nos poços. Usando a expressão semiclássica para t , finalmente obtemos:

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{\pi - \hbar\omega\mu'(E_0)/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} |p^{pd}(x)| dx \right] \quad (3.51)$$

Esta expressão concorda com a fórmula semiclássica usual para o “splitting” de energia em um poço duplo simétrico [59], no caso em que possamos considerar $\mu'(E_0) = 0$. A resposta WKB melhorada para “splitting” de energia do estado fundamental de um poço duplo é dado por [60]

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{e\pi}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} |p^{pd}(x)| dx \right], \quad (3.52)$$

onde temos o fator $\frac{1}{\sqrt{e\pi}}$ ao invés do usual $\frac{1}{\pi}$ [55], e e é o número de Euler. Este novo fator ($\frac{1}{\sqrt{e\pi}}$), que é uma correção ao WKB usual, é obtido utilizando para o estado fundamental do poço duplo o estado fundamental de um oscilador harmônico e em [55] este é obtido através das fórmulas de conexão WKB. Novamente, nosso método se mostra melhor que outros métodos semiclássicos, fornecendo uma fórmula analítica para o “splitting” de energia sem a necessidade de nenhuma aproximação para a função de onda do sistema.

Para o poço duplo assimétrico consideramos o deslocamento “shift” que a energia dos poços isolados (por exemplo o poço da esquerda) sofre devido ao tunelamento que surge quando juntamos os dois poços para formar o poço duplo. Vamos definir as energias não perturbadas dos poços da esquerda e da direita, respectivamente como E_l^0 e E_r^0 , obtidos das regras de quantização:

$$\begin{aligned}\exp [i\tilde{S}_l(E_l^0)] &= 1, \\ \exp [i\tilde{S}_r(E_r^0)] &= 1.\end{aligned}\quad (3.53)$$

com $\tilde{S}_l = \frac{2i}{\hbar} S_l^{pd} - i\mu_l$ e $\tilde{S}_r = \frac{2i}{\hbar} S_r^{pd} - i\mu_r$. Seja $\Delta E_l = E_l - E_l^0$ onde E_l , a energia do poço duplo originada pela perturbação devido ao tunelamento. Vamos reescrever a equação (3.39) na forma:

$$r - \frac{1 + \exp [i\tilde{S}_l + i\tilde{S}_r]}{(\exp [i\tilde{S}_l] + \exp [i\tilde{S}_r])} = 0. \quad (3.54)$$

Para ΔE_l pequeno, podemos expandir a equação acima em torno de E_l^0 , obtendo:

$$\begin{aligned}\left[r - \frac{1 + \exp [i(\tilde{S}_l + \tilde{S}_r)]}{\exp [i\tilde{S}_l] + \exp [i\tilde{S}_r]} \right] \Big|_{E_l^0} + \left[r' - \frac{i(\tilde{S}_l + \tilde{S}_r) \exp [i(\tilde{S}_l + \tilde{S}_r)]}{\exp [i\tilde{S}_l] + \exp [i\tilde{S}_r]} \right. \\ \left. \frac{i(1 + \exp [i(\tilde{S}_l + \tilde{S}_r)])(\tilde{S}_l' \exp [i\tilde{S}_l] + \tilde{S}_r' \exp [i\tilde{S}_r])}{(\exp [i\tilde{S}_l] + \exp [i\tilde{S}_r])^2} \right] \Delta E_l \Big|_{E_l^0} = 0.\end{aligned}\quad (3.55)$$

Usando a primeira das equações na (3.53), temos:

$$(r - 1) \Big|_{E_l^0} + \left(r' + \frac{i\tilde{S}_l'(1 - \exp [i\tilde{S}_r])}{1 + \exp [i\tilde{S}_r]} \right) \Big|_{E_l^0} \Delta E_l = 0, \quad (3.56)$$

resolvendo para ΔE_l

$$\Delta E_l = \frac{(1-r)(1 - \exp[i\tilde{S}_r])}{r'(1 + \exp[i\tilde{S}_r]) + i\tilde{S}'_r(1 - \exp[i\tilde{S}_r])} \Big|_{E_l^0}. \quad (3.57)$$

Agora, vamos supor que os poços da direita e da esquerda não são muito diferentes, de tal forma que $\Delta E = E_l^0 - E_r^0$ seja um número pequeno. Desta forma, podemos expandir $\tilde{S}_r(E_l^0)$ nas vizinhanças de E_r^0 , até a primeira ordem

$$\tilde{S}_r(E_l^0) = \tilde{S}_r(E_r^0) + \tilde{S}'_r(E_r^0)(E_l^0 - E_r^0), \quad (3.58)$$

e usando a segunda relação da equação (3.53), notamos que:

$$\begin{aligned} \exp[i\tilde{S}_r(E_l^0)] &= \exp[i\tilde{S}_r(E_r^0) + i\tilde{S}'_r(E_r^0)(E_l^0 - E_r^0)] \\ &= \exp[i\tilde{S}'_r(E_r^0)(E_l^0 - E_r^0)] \\ &= 1 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)(E_l^0 - E_r^0). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Substituindo este resultado na equação (3.57) encontramos $\Delta E = E_l^0 - E_r^0$

$$\Delta E_l = \frac{(1-r(E_l^0))(2 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E)}{r'(E_r^0)(2 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E) + \tilde{S}'_l(E_l^0)\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E}, \quad (3.60)$$

com $\Delta E = E_l^0 - E_r^0$. Usando as relações:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{1-t^2} \approx 1 - \frac{1}{2}t^2 + \dots \\ r' &= \frac{d}{dE}\sqrt{1-t^2} = \frac{-t't}{\sqrt{1-t^2}} \approx -t't, \end{aligned} \quad (3.61)$$

a equação (3.60) fica:

$$\Delta E_l = \frac{(t^2(E_l^0)/2)(2 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E)}{-t'(E_r^0)t(E_r^0)(2 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E) + \tilde{S}'_l(E_l^0)\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E}. \quad (3.62)$$

Para t pequeno, ΔE em 3.62 é pequeno e podemos desprezar os termos $(t^2(E_l^0)/2)(i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E)$ e $-t'(E_r^0)t(E_r^0)(2 + i\tilde{S}'_r(E_r^0)\Delta E)$. Utilizando a relação semiclássica para o t , finalmente podemos escrever o desdobramento de energia para um poço duplo assimétrico

$$\Delta E_l = \frac{\exp[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} |p^{pd}(x)| dx]}{[\frac{2}{\hbar} S^{pd'}(E_l^0) - \mu'_l(E_l^0)][\frac{2}{\hbar} S^{pd'}(E_r^0) - \mu'_l(E_r^0)]}. \quad (3.63)$$

Esta expressão concorda com o resultado semiclássico usual [59], se o índice de Maslov for independente da energia.

3.5 Aplicação da função de Green generalizada para o estudo de quase-estados

Em física atômica, molecular, nuclear e de partículas [45, 61], encontramos com frequência situações onde observamos picos muito pronunciados na amplitude do coeficiente de transmissão de uma onda espalhada por um potencial. Isto ocorre devido ao fato do potencial suportar estados quase-ligados. Vamos aplicar a função de Green semiclássica para estudar tais problemas. Inicialmente, faremos breve discussão do

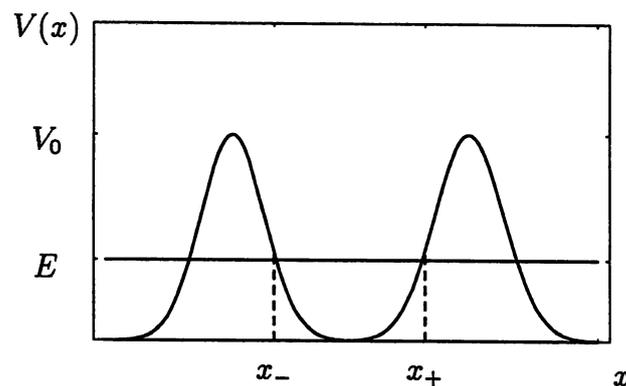


Figura 3.14: Exemplo de barreira que suporta quase-estados

que são estados quase-ligados. Para exemplificar, consideramos o potencial mostrado na fig. 3.14. Vamos considerar a função de onda do sistema, que inicialmente é uma onda plana incidente da esquerda com energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, então a função de onda de espalhamento é dada por

$$\psi_k(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp[+ikx] + \mathcal{R}^{(+)}(k) \exp[-ikx], & x \rightarrow -\infty \\ \mathcal{T}(k) \exp[+ikx], & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.64)$$

Supondo que a altura dos potenciais à esquerda e à direita fossem infinitas, então seria possível uma partícula permanecer confinada na região entre x_- e x_+ , ou seja, o sistema teria estados ligados, com energia E bem definida. Estes são estados ligados genuínos no sentido de que são autoestados do Hamiltoniano: são *estados*

estacionários com um tempo de vida infinito. O princípio da incerteza de Heisenberg diz que $\Delta E \Delta t \approx \hbar$, então se a energia possui incerteza nula o tempo de vida do estado deve ser infinito [61].

Na situação de uma barreira finita (fig. 3.14), a partícula pode ficar confinada, mas não necessariamente. Uma partícula inicialmente entre x_- e x_+ tem uma probabilidade de escapar desta região, mesmo se $E < V_0$, devido ao tunelamento quântico. Entretanto, para algumas energias particulares chamadas de *quase-energias* a partícula pode ficar aprisionada por um longo tempo. O valor dessas energias e o tempo característico de aprisionamento depende da forma do potencial. Voltando à discussão do espalhamento de uma onda plana, a situação torna-se muito interessante quando a energia da partícula incidente for próxima à energia de um quase-estado

$$E_{\text{incidente}} \approx E_{\text{quase-estado}}. \quad (3.65)$$

Neste intervalo de energia, o módulo quadrado do coeficiente de transmissão exhibe picos e a energia do máximo do pico é a própria energia do quase-estado. A largura desses quase-estados representada pela letra Γ [45], e é definida através da largura da meia altura do pico do coeficiente de transmissão, como mostrado na fig. 3.15.

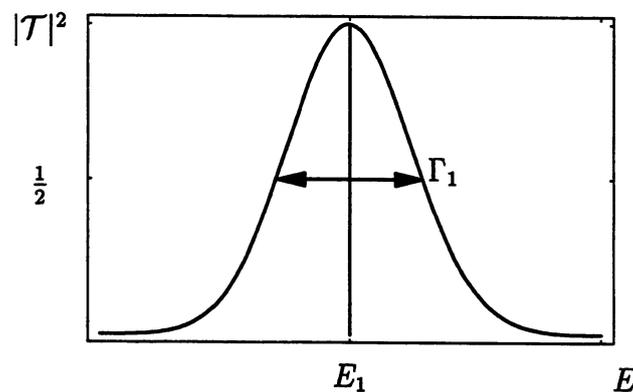


Figura 3.15: Exemplo de como calcular a energia do quase-estado E_1 e sua largura Γ_1

Vamos agora considerar o caso onde um dos lados do potencial é infinito, fig 3.16.

Neste caso, o sistema também pode possuir quase-estados, pois uma partícula confinada neste potencial pode tunelar através da barreira da direita. A função de onda de espalhamento de uma onda incidente pela direita é agora dada por:

$$\psi_k(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \{ \exp[-ikx] + \mathcal{R}(k) \exp[ikx] \}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (3.66)$$

Por analogia com o caso anterior, poderíamos fazer um gráfico do módulo do co-

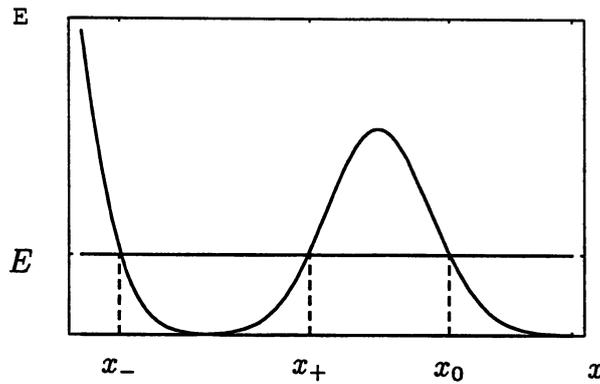


Figura 3.16: Potencial com o lado esquerdo infinito

eficiente de reflexão $|\mathcal{R}|^2$ como função da energia para identificar os quase-estados. O problema é que o potencial à esquerda é infinito, o que leva o coeficiente de reflexão a ter o valor $|\mathcal{R}|^2 = 1$ para todos os valores de energia. Logo não podemos tirar informação dos quase-estados de um potencial desta forma. Propomos, então, um método usando a função de Green generalizada para obter informações sobre os quase-estados para este tipo de potencial.

Para simplificar os cálculos, vamos considerar o caso de uma barreira quadrada finita com uma parede infinita em $x = 0$, como mostrado na figura 3.17. A função de Green é facilmente obtida utilizando-se os passos da seção 2.5. Sendo \mathcal{R} e \mathcal{T} os coeficientes de reflexão e transmissão da barreira quadrada e \mathcal{R}_∞ o coeficiente de reflexão da parede infinita, os possíveis caminhos fornecem:

$$G_{\text{gen}}^p(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} (\mathcal{T} \exp[ik(x_i - x_f - d)] + \mathcal{T} \mathcal{R}_\infty \exp[ik(x_i - x_f - d)] P_D), \quad (3.67)$$

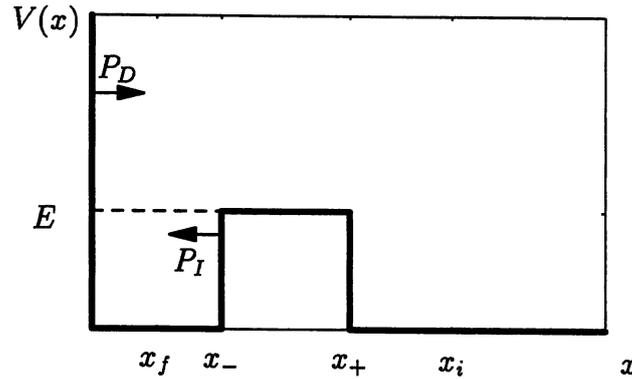


Figura 3.17: Barreira finita com uma parede infinita e os grupos de caminhos possíveis para a construção da função de Green.

com

$$P_D = \begin{cases} \exp [ikx_f] \\ \mathcal{R} \exp [ikL] P_I \end{cases} \quad P_I = \begin{cases} \exp [ikx_f] \\ \mathcal{R}_\infty \exp [ikL] P_D \end{cases}, \quad (3.68)$$

sendo o grupo de caminhos possíveis para uma partícula deixar os pontos $x = 0$ e $x = x_-$, respectivamente. Das equações acima, escrevendo P_D e P_I na sua forma equivalente (ver seção 2.4) e resolvendo o sistema de equações, temos:

$$P_D = \frac{1}{f_p} (\exp [ikx_f] + \mathcal{R} \exp [2ikL] \exp [-ikx_f]), \quad (3.69)$$

com $f_p = 1 - \mathcal{R}\mathcal{R}_\infty \exp [2ikL]$. Então, substituindo P_D em (3.67) e simplificando finalmente encontramos a função de Green

$$G_{\text{gen}}^p(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{T}{f_p} \exp [ik(x_i - d)] (\exp [-ikx_f] + \mathcal{R}_\infty \exp [ikx_f]). \quad (3.70)$$

Para a barreira infinita, temos $\mathcal{R}_\infty = -1$ então ($f_p' = 1 + \mathcal{R} \exp [2ikL]$)

$$G_{\text{gen}}^p(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} \frac{T}{f_p'} \exp [ik(x_i - d)] (\exp [-ikx_f] - \exp [ikx_f]), \quad (3.71)$$

ou

$$G_{\text{gen}}^p(x_f, x_i; k) = \frac{2m}{i^2 \hbar^2 k} \frac{T}{f_p'} \exp [ik(x_i - d)] \sin [kx_f]. \quad (3.72)$$

A função de Green $G_{\text{gen}}^p(x_f, x_i; k)$ para um sistema quântico pode ser interpretada como a amplitude de probabilidade de uma partícula sair de um ponto x_i e chegar

ao ponto x_f [62] com energia E fixa. Então, na equação (3.72), podemos interpretar amplitude $\mathcal{A} = \frac{T}{f_p}$ como sendo a amplitude de probabilidade para que uma partícula saia do ponto x_i e chegue ao ponto x_f com energia E . Se o potencial suportar um quase-estado, uma onda incidente com energia E próxima desta energia, terá uma probabilidade muito grande de tunelar, entrando na região de confinamento. Desta forma, num gráfico de $\mathcal{A}^2 = |\frac{T}{f_p}|^2$ como função de E , teremos picos cada vez que a energia E for próxima de $E_{\text{quase-estado}}$, ver fig. 3.18. Com isto, podemos então, tirar a informação das energias dos quase-estados e suas respectivas larguras. Aqui um detalhe: técnico, a amplitude $\mathcal{A}^2 = |\frac{T}{f_p}|^2$ não está normalizada, mas isto não acarreta nenhum problema, uma vez que, estamos somente interessados na energia e na largura do quase-estado.

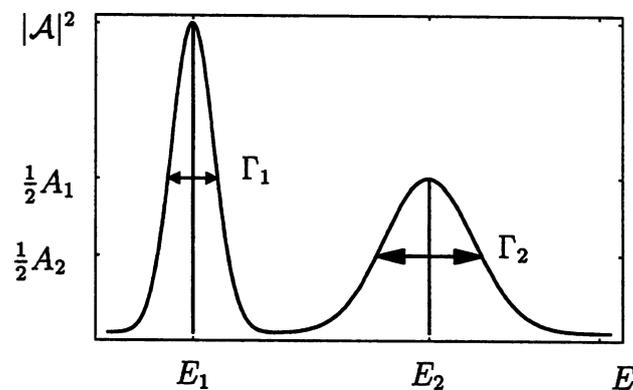


Figura 3.18: Comportamento típico para um potencial que possui dois quase-estados. A_1 e A_2 são as alturas dos picos 1 e 2, respectivamente.

Para exemplificar, calculamos a probabilidade de reflexão e transmissão para uma barreira retangular com os parâmetros $V_0 = 0.01$, $d = (x_+ - x_-) = 12$, $\hbar = 2m = 1$ e $x_- = 120.6$, fig. 3.19(a), bem como o comportamento de $|\mathcal{A}|^2$, fig. 3.19(b). Fica nítido, então, a presença dos quase-estados no gráfico de $|\mathcal{A}|^2$ como função de energia.

Podemos generalizar nossos resultados para quaisquer barreiras como mostradas na fig. 3.16. Para isso utilizamos o raciocínio similar àquele aplicado para determinar

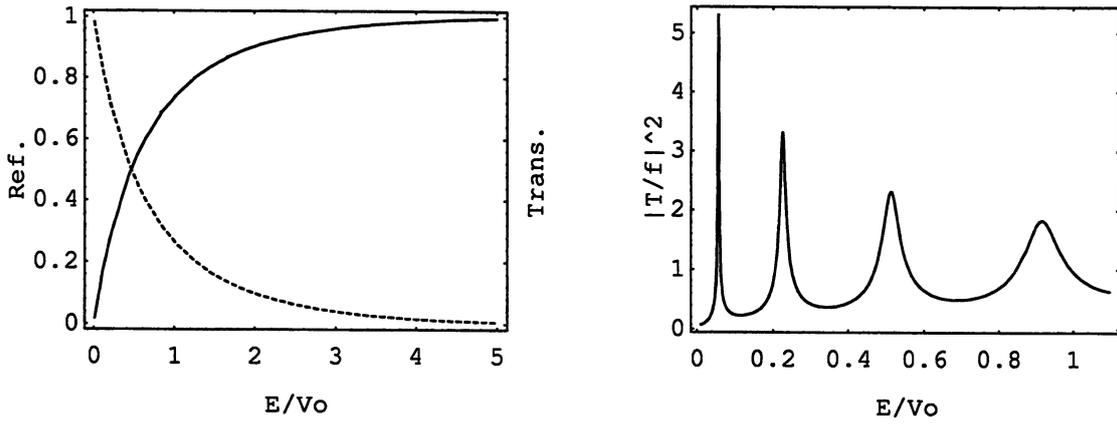


Figura 3.19: (a) Variação dos coeficientes de transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para o potencial da figura 3.17, (b) Comportamento da amplitude $|\mathcal{A}|^2 = |\frac{T}{f}|^2$ como função da energia.

os autoestados de poços quânticos. Assim escrevemos a amplitude \mathcal{A} como

$$|\mathcal{A}|^2 = \left| \frac{T}{f} \right|^2, \quad (3.73)$$

onde T é a amplitude generalizada de transmissão da barreira associada ao coeficiente de transmissão através de uma fase dependente da energia e

$$f = 1 - RR_\infty \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_-, x_+; E) \right], \quad (3.74)$$

onde $S(x_-, x_+; E)$ a é ação clássica, R a amplitude semiclássica generalizada para coeficiente de reflexão da barreira e R_∞ a amplitude semiclássica generalizada da parede infinita. Como $|R_\infty|^2=1$, podemos escrever $R_\infty = \exp[-i\phi(E)]$, e assim:

$$f = 1 - R \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_-, x_+; E) - \phi(E) \right]. \quad (3.75)$$

Conclusão

Neste trabalho, utilizamos uma função de Green semiclássica generalizada G_{gen} , a qual é uma extensão da função de Green semiclássica de Van Vleck-Gutzwiller. Nossa G_{gen} é também dada por uma soma sobre trajetórias clássicas, mas que leva em conta, efeitos quânticos locais, através de coeficientes de transmissão e reflexão dos potenciais individuais usados para construir o potencial total $V(x)$ do sistema.

De tal fórmula, obtemos a função de Green exata para potenciais constantes por partes (PCP), o que generaliza vários resultados já descritos na literatura [44, 48]. Como exemplo, obtivemos o traço de G_{gen} para uma barreira retangular localizada no centro de um poço infinito. Este caso é ilustrativo, quando comparado à fórmula do traço semiclássico, pois mostra que a fórmula semiclássica usual, não fornece as amplitudes quânticas corretas para tais tipos de sistemas.

Também aplicamos o método para sistemas ligados, ou mais especificamente para poços simples e duplos, obtendo suas funções de Green. Através dos pólos das G_{gen} 's, obtivemos fórmulas analíticas para os autovalores de energia destes problemas. Os cálculos mostraram ótima concordância com os resultados numéricos, mesmo quando os potenciais estão muito próximos uns dos outros, situação onde, à princípio, o método não deveria ser tão bom.

Nossos resultados são melhores que os da aproximação semiclássica usual, devido ao aparecimento em nossas expressões, por exemplo, para o “splitting” de energia

no poços simétricos e “shift” de energia para poços assimétricos (que são análogas às fórmulas semiclássicas), de índices de Maslov que são dependentes da energia. De fato, nosso método fornece uma forma construtiva para obter se os índices de Maslov não-inteiros, que já haviam sido propostos na literatura [4–6], mas que aqui são obtidos de uma forma sistemática e que podem ser facilmente estendidos para situações mais complicadas que as discutidas em [4–6].

Como proposta de possíveis continuações do presente trabalho, utilizando-se funções de Green semiclássicas generalizadas, citamos as seguintes: (i) estudo de transporte em sistemas unidimensionais (1D) em estado sólido tais como em super-redes e em pontos quânticos (“quantum dots”). Podem ser usadas no estudo da localização de Anderson em redes unidimensionais desordenadas, bem como no estudo de espalhamento em sistemas que possuem caos quântico tipo “wave chaos” [63]; (ii) para a dedução da fórmula do “splitting” de energia, baseado em alguns exemplos, assumimos que podíamos escrever os coeficientes de transmissão e reflexão como $\mathcal{T} = t \exp[-i\phi_t(E)]$ e $\mathcal{R} = r \exp[-i\phi(E)]$, onde existe uma relação entre as fases $\phi_t(E)$ e $\phi(E)$ dada por $\phi_t(E) = \phi(E) + \Delta(E)$ com $\Delta = \pm \frac{\pi}{2}$. Temos como proposta para trabalho futuro, demonstrar analiticamente que isto é válido para qualquer tipo de potencial; (iii) o método semiclássico generalizado mostrou-se útil para o estudo de quase-estados, na determinação tanto das quase-energias como de suas larguras. Propusemos também uma forma de tentar relacionar a largura desses quase-estados com o “shift” de energia em poços duplos assimétricos. Pretendemos concluir tal estudo brevemente.

Finalmente, mencionamos que um desafio muito interessante é tentar estender a presente idéia para problemas em duas dimensões, mas que possuem canais 1D. Estes canais seriam regiões onde o potencial $V(x, y)$ desse origem a corredores unidimensionais preferenciais e que, portanto, poderiam ser tratados como uma cadeia 1D, assim nossa função de Green semiclássica generalizada poderia ser usada para calcular transporte ao longo destes corredores.

Apêndice A

O método WKB

O método da aproximação WKB é discutido em muitos livros textos [64] e neste apêndice será apresentado em maiores detalhes.

A.1 Princípio da Correspondência

Do princípio da correspondência de Bohr, esperamos uma transição gradual da mecânica quântica para a mecânica clássica no limite $\hbar \rightarrow 0$, o que corresponde a números quânticos elevados. Equivalentemente, podemos dizer que neste domínio clássico, o comprimento de onda de Broglie é pequeno comparado às distâncias características do problema. Como o comprimento de onda de Broglie varia somente em virtude da variação do potencial, esta última condição pode ser incorporada no critério que o comprimento de onda quântico não varie apreciavelmente na distância de um comprimento de onda. Uma variação no comprimento de onda numa distância δx é

$$\delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\delta x.$$

Em um comprimento de onda ($\delta x = \lambda$)

$$\delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\lambda.$$

No domínio clássico, $\delta\lambda \ll \lambda$. Isto fornece o critério

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1. \quad (\text{A.1})$$

Em termos do momento p encontramos

$$\left(\frac{h}{\lambda} \right)^2 = p^2 = 2m[E - V],$$

$$\frac{d(\lambda^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} \frac{d(p^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} \left(-2m \frac{dV}{dx} \right),$$

ou

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{mh}{p^3} \frac{dV}{dx}.$$

Desta forma, a condição (A.1) para o comportamento perto do domínio clássico torna-se

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{mh}{p^3} \frac{dV}{dx} \right| \ll 1. \quad (\text{A.2})$$

A.2 A expansão WKB

A equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (\text{A.3})$$

Para um potencial que varie lentamente com \mathbf{x} , ou seja, que respeite a condição (A.2), esperamos que a função de onda seja parecida com a de uma partícula sobre ação de um potencial constante

$$\psi(\mathbf{x}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = Ae^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}.$$

Isto nos leva a procurar soluções da equação de Schrödinger na forma:

$$\psi(x) = \psi_0 e^{iS(x)/\hbar}, \quad (\text{A.4})$$

onde $S(\mathbf{x})$ é uma função qualquer. Substituindo na equação de Schrödinger, temos

$$[\nabla S(\mathbf{x})]^2 - i\hbar \nabla^2 S(\mathbf{x}) = 2m[E - V(\mathbf{x})]. \quad (\text{A.5})$$

Por simplicidade vamos considerar aqui, somente o caso unidimensional, então a equação acima toma a forma ($p^2 = 2m[E - V(x)]$),

$$-i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = p^2. \quad (\text{A.6})$$

Como estamos interessados nas soluções da equação de Schrödinger no regime semi-clássico, $\hbar \rightarrow 0$, vamos expandir $S(x)$ em série

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \frac{\hbar^2}{2} S_2(x) + \dots \quad (\text{A.7})$$

Substituindo esta expansão em (A.6) temos

$$\begin{aligned} 0 = & \left[\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 - p^2 \right] + 2\hbar \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \right) \\ & + \hbar^2 \left[\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_2}{\partial x} + \left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2 - i \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \right] + \mathcal{O}^3(\hbar). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Igualando à zero

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 &= p^2, \\ \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} &= \frac{i}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_2}{\partial x} + \left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2 &= i \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Integrando a primeira destas equações encontramos:

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^x p(x) dx, \quad (\text{A.10})$$

ou, em termos do número de onda $k = p/\hbar$

$$S_0 = \pm \hbar \int_{x_0}^x k(x) dx. \quad (\text{A.11})$$

Substituindo este resultado na segunda equação em (A.9) e integrando

$$S_1 = \frac{i}{2} \ln \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right) = \frac{i}{2} \ln p, \quad (\text{A.12})$$

ou, equivalentemente

$$e^{iS_1} = \frac{1}{\sqrt{p}}. \quad (\text{A.13})$$

Substituindo as equações (A.10) e (A.12) na equação (A.4) encontramos a função de onda na forma

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} e^{(i/\hbar) \int p dx} + \frac{B}{\sqrt{p}} e^{-(i/\hbar) \int p dx}. \quad (\text{A.14})$$

Nas regiões classicamente proibidas, onde $E < V$, p é um número imaginário puro de tal forma que os expoentes são reais. A função de onda nestas regiões pode ser escrita

$$\psi(x) = \frac{A'}{\sqrt{|p|}} e^{-(1/\hbar) \int p dx} + \frac{B'}{\sqrt{|p|}} e^{(1/\hbar) \int p dx}. \quad (\text{A.15})$$

A.3 Aplicação para Estados Ligados

Sejam $x = x_l$ e $x = x_r$ ($x_l < x_r$) pontos de retorno clássico (tal que $V(x_l) = V(x_r) = E$). Vamos admitir que a curva de energia potencial é tal que $V(x) < E$ para $x_r < x < x_l$, ver fig. A.1. Para $x \ll x_l$ a função de onda é do tipo dado em (A.15) com $A' = 0$

$$\psi_I(x) = \frac{B'}{\sqrt{|p|}} \exp \left[(1/\hbar) \int_{x_l}^x p dx \right], \quad (\text{A.16})$$

e para $x \gg x_r$ com $B' = 0$

$$\psi_{III}(x) = \frac{A'}{\sqrt{|p|}} \exp \left[-(1/\hbar) \int_{x_l}^x p dx \right]. \quad (\text{A.17})$$

Na região classicamente permitida ($x_l < x < x_r$), a função de onda é oscilatória

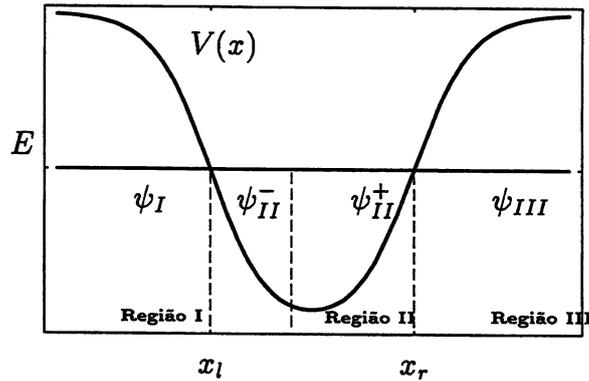


Figura A.1: Domínios relevantes para a aproximação WKB para estados ligados

e real, então precisamos de uma combinação linear real para a função onda WKB (A.14). Vamos escrever como

$$\psi_{II}^- = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x p \, dx + \delta \right] \quad x > x_l, \quad (\text{A.18})$$

$$\psi_{II}^+ = \frac{D}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} p \, dx + \delta \right] \quad x < x_r, \quad (\text{A.19})$$

onde δ é uma fase. As constantes A' , B' , C , D e δ são determinadas fazendo comparação das funções de onda nos pontos de retorno clássico. Porém, como as funções de onda WKB não são válidas para os pontos de retorno, pois nestes pontos a condição (A.2) é violada, isso deve ser feito da seguinte forma: a equação de Schrödinger é resolvida exatamente ao redor dos pontos de retorno utilizando potenciais que mimetizem aproximadamente o comportamento do potencial $V(x)$ nessa região. A forma assintótica dessas soluções exatas são utilizadas para igualar ψ_I com ψ_{II}^- e ψ_{II}^+ com ψ_{III} . Neste sentido, vamos aproximar $V(x)$ por um potencial linear em x ao redor de x_l

$$V(x) = V_l(x) = E - F_l(x - x_l), \quad (\text{A.20})$$

e de forma similar ao redor de x_r

$$V(x) = V_r(x) = E + F_r(x - x_r), \quad (\text{A.21})$$

onde F_l e F_r são os valores absolutos das inclinações de $V(x)$ nos pontos x_l e x_r , respectivamente (ver fig. A.2). A equação de Schrödinger é escrita

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mF_l}{\hbar^2}(x - x_l)\psi = 0 \quad x \text{ perto de } x_l \text{ e} \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2mF_r}{\hbar^2}(x - x_r)\psi = 0 \quad x \text{ perto de } x_r. \quad (\text{A.23})$$

Podemos simplificar as equações acima através de uma mudança de variável

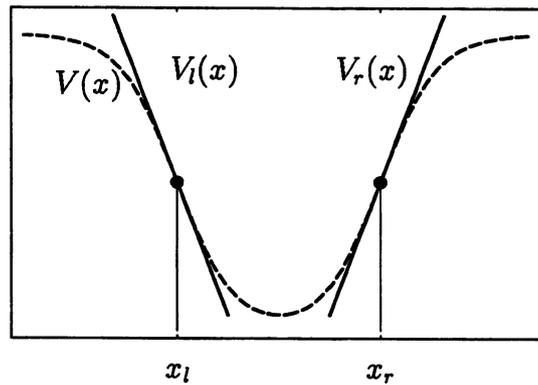


Figura A.2: Potenciais lineares aproximados $V_l(x)$ e $V_r(x)$ válidos nas vizinhanças dos pontos de retorno x_l e x_r , respectivamente.

$$\xi = - \left(\frac{2mF_l}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_l) \quad (\text{A.24})$$

em (A.22) e

$$\xi = \left(\frac{2mF_r}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_r) \quad (\text{A.25})$$

em (A.23). Ambas equações reduzem para a mesma equação,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi\psi = 0. \quad (\text{A.26})$$

As soluções desta equação são chamadas *funções de Airy* e são denotadas por $Ai(\xi)$ e $Bi(\xi)$. As funções de onda devem aproximar-se de zero para $x \ll x_l$ e

$x \gg x_r$. Estas regiões correspondem a valores elevados de $|\xi|$. Para estes valores de ξ a forma assintótica das funções de $Ai(\xi)$ são

$$Ai(\xi) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\xi^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right] \quad \xi > 0, \quad (\text{A.27})$$

$$Ai(\xi) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\xi)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \quad \xi < 0. \quad (\text{A.28})$$

Da equação (A.24), $\xi < 0$ para $x > x_l$ e $\xi > 0$ para $x < x_l$ e da equação (A.25), $\xi < 0$ para $x < x_r$ e $\xi > 0$ para $x > x_r$ (ver fig. A.3). Assim, a solução (A.27) é válida para $x > x_r$ e $x < x_l$ e a solução (A.28) para $x_l < x < x_r$. Nas vizinhanças

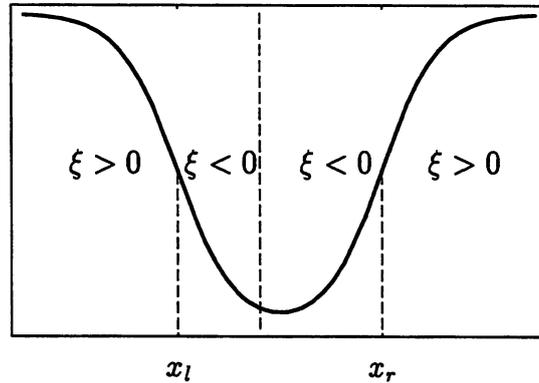


Figura A.3: Comportamento de ξ nos domínios

de x_l , de (A.20), temos

$$p = \sqrt{2m(E - V_l)} \simeq \sqrt{2mF_l(x - x_l)}, \quad (\text{A.29})$$

e a integral sobre p para $x < x_l$ é

$$\begin{aligned} \int_x^{x_l} p \, dx &= \int_{(x-x_l)}^0 p \, d(x - x_l) = -\sqrt{2mF_l} \int_0^q \sqrt{q} \, dq \\ &= -\frac{2}{3} \sqrt{2mF_l} (x - x_l)^{3/2} \\ &= -\frac{2}{3} \xi^{3/2}, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

e para $x > x_l$

$$\begin{aligned} \int_{x_l}^x p \, dx &= \frac{2}{3} \xi^{3/2} \\ &= \frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} \quad \xi < 0. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

As funções de onda WKB ψ_I e ψ_{II}^- , quando escritas em termos de ξ , ficam

$$\psi_I = \frac{B'}{\xi^{1/4}} \exp \left[-\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right], \quad (\text{A.32})$$

$$\psi_{II}^- = \frac{C}{(-\xi)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} + \delta \right], \quad (\text{A.33})$$

comparando com as funções de Airy, vemos que $\delta = \frac{\pi}{4}$. Assim as funções de onda WKB são dadas por

$$\psi_I(x) = \frac{B'}{\sqrt{|p|}} \exp \left[(1/\hbar) \int_{x_l}^x p \, dx \right] \quad (\text{A.34})$$

$$\psi_{II}^- = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x p \, dx + \frac{\pi}{4} \right] \quad (\text{A.35})$$

$$\psi_{II}^+ = \frac{D}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_r} p \, dx + \frac{\pi}{4} \right] \quad (\text{A.36})$$

$$\psi_{III}(x) = \frac{A'}{\sqrt{|p|}} \exp \left[-(1/\hbar) \int_{x_l}^x p \, dx \right]. \quad (\text{A.37})$$

Para que as expressões (A.35) e (A.36) sejam a mesma na região $x_l < x < x_r$, a soma das fases dos senos deve ser um múltiplo integral de π

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} p \, dx + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \quad (\text{A.38})$$

com $C = (-1)^n D$. Conseqüentemente

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} p \, dx = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad (\text{A.39})$$

ou

$$2 \int_{x_l}^{x_r} p \, dx = (n + \frac{1}{2})2\pi\hbar, \quad (\text{A.40})$$

que pode ser reescrita na forma

$$\oint p \, dx = 2n\pi\hbar + \pi\hbar, \quad (\text{A.41})$$

onde $\oint p \, dx = 2 \int_{x_l}^{x_r} p \, dx$ é a integral sobre o período completo do movimento semiclássico. Esta condição determina os estados estacionários de uma partícula no regime semiclássico. A equação (A.41) corresponde à regra de quantização de Bohr-Sommerfeld da antiga teoria quântica.

Um valor diferente da fase δ é obtido se o potencial for infinito em $x = x_l$. A condição de contorno para a função de onda em $x = x_l$ é então $\psi_I = 0$ e a fase δ deve ser zero na função de onda WKB, tal que

$$\psi_I = 0 \quad \text{para } x < x_l \quad (\text{A.42})$$

$$\psi_{II}^- = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^x p \, dx \right] \quad \text{para } x > x_l$$

o que nos leva à equação:

$$\oint p \, dx = 2n\pi\hbar + 2\pi\hbar, \quad (\text{A.43})$$

Essas duas equações podem ser agrupadas numa mesma equação,

$$\oint p \, dx = 2n\pi\hbar + \frac{\mu}{2}\pi\hbar, \quad (\text{A.44})$$

onde μ é o índice de Maslov total correspondendo a duas reflexões em um período de oscilação ($\mu = 2$ para um potencial finito e $\mu = 4$ para um potencial infinito) [5].

Apêndice B

Integração Numérica da Equação de Schrödinger

Este apêndice descreve o método de Noumerov para a integração da equação de Schrödinger independente do tempo e é baseada em [56, 57].

B.1 O Método Noumerov

A equação de Schrödinger em uma dimensão é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{B.1})$$

que pode ser reescrita na forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = f(x)\psi(x), \quad (\text{B.2})$$

onde

$$f(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]. \quad (\text{B.3})$$

Aqui, $V(x)$ é a função da energia potencial, m a massa da partícula e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π . Assumimos que o potencial $V(x)$ suporta um ou mais

estados ligados. As funções de onda aceitáveis para os estados ligados devem ser contínuas, possuir sua primeira derivada contínua e satisfazerem as condições de contorno

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0. \quad (\text{B.4})$$

Se a equação (B.1) for a equação de Schrödinger radial, então a força centrífuga deve estar incluída em $V(x)$ e a condição de contorno em $-\infty$ é trocada por

$$\psi(0) = 0. \quad (\text{B.5})$$

As soluções para os estados ligados da equação (B.1) têm propriedades bem conhecidas [45]. Nenhum dos níveis de energia do espectro discreto são degenerados e se os autovalores forem arranjados em ordem crescente de energia, a função de onda ψ_n correspondente ao autovalor E_n tem n nós.

Do ponto de vista matemático, (B.1) é uma equação diferencial linear, de segunda ordem. O método para resolver esta equação numericamente é o método de Noumerov.

Vamos expandir as funções de onda $\psi(x+h)$ e $\psi(x-h)$, onde h é um pequeno intervalo de x (não confundir com a constante de Planck), numa série de Taylor ao redor do ponto x ,

$$\psi(x+h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \psi^{(n)}, \quad (\text{B.6})$$

$$\psi(x-h) = \sum_{n=0, \text{par}}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \psi^{(n)} - \sum_{n=0, \text{impar}}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \psi^{(n)}, \quad (\text{B.7})$$

onde $\psi^{(n)}$ é a n -ésima derivada de $\psi(x)$ calculada no ponto x . Somando as equações (B.7) e (B.6)

$$\frac{1}{2}[\psi(x+h) + \psi(x-h)] = \psi + \frac{1}{2}h^2\psi^{(2)} + \frac{h^4}{4!}\psi^{(4)} + \frac{h^6}{6!}\psi^{(6)} + \dots \quad (\text{B.8})$$

e derivando esta última duas vezes, temos

$$\frac{1}{2}[\psi^{(2)}(x+h) + \psi^{(2)}(x-h)] = \psi^{(2)} + \frac{1}{2}h^2\psi^{(4)} + \frac{h^4}{4!}\psi^{(6)} + \frac{h^6}{6!}\psi^{(8)} + \dots \quad (\text{B.9})$$

Multiplicando (B.9) pelo fator $\frac{h^2}{12}$ e subtraindo o resultado de (B.8), eliminamos o termo proporcional a $\psi^{(4)}$. Assim,

$$\begin{aligned} \psi(x) + \frac{5}{12}h^2\psi^{(2)} - \frac{h^6}{480}\psi^{(6)} + \dots = \\ \frac{1}{2}[\psi(x+h) + \psi(x-h)] - \frac{h^2}{24}[\psi^{(2)}(x+h) + \psi^{(2)}(x-h)]. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Substituindo $\psi^{(2)}$ na equação acima pela expressão $f(x)\psi(x)$ a equação (B.2), e introduzindo a notação

$$T(x) = \frac{h^2}{12}f(x) = \frac{h^2}{12} \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E], \quad (\text{B.11})$$

obtemos a fórmula básica do método de Noumerov:

$$\begin{aligned} [2 + 10T(x)]\psi(x) - \frac{h^6}{240}\psi^{(6)} + \dots = \\ [1 - T(x+h)]\psi(x+h) + [1 - T(x-h)]\psi(x-h), \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

ou ignorando o termo de ordem h^6 , podemos escrever

$$[1 - T(x+h)]\psi(x+h) - [2 + 10T(x)]\psi(x) + [1 - T(x-h)]\psi(x-h) = 0. \quad (\text{B.13})$$

Se $\psi(x)$ e $\psi(x-h)$ são conhecidos, podemos encontrar $\psi(x+h)$ diretamente da equação (B.13). Os valores de $T(x)$ são conhecidos através do potencial $V(x)$.

A equação (B.13) é uma relação de recorrência de três termos e esta pode ser transformada em uma relação de dois termos mais simples de ser utilizada. Para isso, vamos definir

$$F_n = [1 - T_n]\psi_n, \quad (\text{B.14})$$

onde

$$\psi_n = \psi(x_n), \quad (\text{B.15})$$

e

$$T_n = \frac{h^2}{12}f(x_n). \quad (\text{B.16})$$

Substituindo (B.14) na equação (B.13) podemos escrever

$$F_{n+1} - U_n F_n + F_{n-1} = 0, \quad (\text{B.17})$$

onde

$$U_n = \frac{2 + 10T_n}{1 - T_n}. \quad (\text{B.18})$$

A vantagem desta transformação é que uma multiplicação a menos é necessária para cada cálculo de $\psi(x)$. Vamos definir a razão

$$R_n = F_{n+1}/F_n. \quad (\text{B.19})$$

Dividindo a equação (B.17) por F_n e utilizando a equação (B.19) obtemos uma relação de recursão de dois termos

$$R_n = U_n - \frac{1}{R_{n-1}}. \quad (\text{B.20})$$

Usando o mesmo procedimento podemos escrever uma relação de recorrência para calcular R_n a partir de R_{n+1}

$$\tilde{R}_n = U_n - \frac{1}{\tilde{R}_{n+1}} \quad (\text{B.21})$$

com

$$\tilde{R}_n = \frac{F_{n-1}}{F_n}. \quad (\text{B.22})$$

Se temos o valor de R_n e $\frac{1}{R_{n-1}}$, podemos calcular a função de onda para os pontos x_{n+1} , x_n e x_{n-1} a menos de um fator de normalização

$$\psi_{n+1} = \mathcal{N} \frac{R_n}{(1 - T_{n+1})}, \quad (\text{B.23})$$

$$\psi_{n-1} = \mathcal{N} \frac{1}{(1 - T_{n+1})R_{n-1}}. \quad (\text{B.24})$$

O valor de \mathcal{N} pode ser encontrado determinando o máximo da função de onda, assim:

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\max(\psi(x))}$$

B.2 Iteração do Método de Noumerov

Para se fazer a integração da equação de Schrödinger são utilizados os passos seguintes. A coordenada x é dividida em $N+1$ passos de intervalo igual a h , do ponto

x_0 ao ponto x_N . Os pontos x_0 e x_N são colocados nas regiões classicamente proibidas. É escolhida uma energia E inicial e a equação (B.2) é integrada numericamente através do método de Noumerov.

Isto é feito em duas etapas: 1) integração a partir de x_0 em direção a x_M ($x_M > x_0$) iterando a equação (B.20). O valor correspondente às condições $\psi(x_0) = 0$ e $\psi(x_1) \neq 0$ é $R_0 = \infty$; 2) integração a partir de x_N em direção a x_M ($x_M < x_N$) iterando a equação (B.21). O valor que corresponde a $\psi(x_N) = 0$ e $\psi(x_{N-1}) \neq 0$ é $R_N = \infty$. O ponto x_M é a coordenada x onde a relação $R_n < 0$ ocorre pela primeira vez, ou seja quando ψ troca de sinal pela primeira vez. É realizada a contagem de nós da função de onda que energia E . Se a contagem do número de nós for maior do que o número de nós da função de onda desejada, então a energia E inicial é muito alta e um novo valor da energia, menor que E inicial é escolhido; se a contagem de nós é menor do que o número de nós da função de onda desejada, então a energia é muito baixa e um novo valor de energia, maior que E inicial é escolhido.

Um procedimento de biseção pode ser utilizado para inicialmente isolar, num pequeno intervalo de energia, um único autovalor com um número de nós específicos. Podemos escolher inicialmente dois valores de energia como sendo a energia máxima e mínima, E_H e E_L de tal forma que o autovalor desejado esteja no intervalo

$$E_L < E_n < E_H. \quad (\text{B.25})$$

Então a energia E é escolhida ser igual a

$$E = \frac{1}{2}(E_L + E_H), \quad (\text{B.26})$$

a equação de Schrödinger é integrada para esta energia e os nós são contados. Se o número de nós n_E for maior que n (número de nós desejado), atribuímos $E_H = E$, se for menor atribuímos $E_L = E$. Se $n_E = n$, não é possível dizer se a energia está acima ou abaixo do autovalor E_n simplesmente pela contagem de nós. Neste caso calculamos uma correção de segunda ordem $D(E)$. Para calcular este $D(E)$

notamos das definições de R_n e \tilde{R}_n que, dadas as equações (B.19) e (B.22), a igualdade $R_M = \frac{1}{\tilde{R}_{M+1}}$ é verdadeira somente se E é um autovalor. Segue, então que a função

$$D(E) = \frac{1}{\tilde{R}_{M+1}} - R_M \quad (\text{B.27})$$

é zero quando E é um autovalor.

B.3 As Funções de Onda

Com a energia igual ao valor E_n encontrado através do método descrito na seção anterior a equação (B.20) é resolvida para os valores R_1, R_2, \dots, R_M e a equação (B.21) é resolvida para $\tilde{R}_{N-1}, \tilde{R}_{N-2}, \dots, \tilde{R}_M$. O próximo passo é calcular o valor de F_n . Como a normalização da função de onda é arbitrária, podemos fazer $F_M = 1$ sem problemas. Os valores de F_n para $n < M$ são calculados iterativamente com a equação

$$F_n = \frac{F_{n+1}}{R_n}, \quad (\text{B.28})$$

e os valores de F_n para $n > M$ são calculados iterativamente com a equação

$$F_n = \frac{F_{n-1}}{\tilde{R}_n}. \quad (\text{B.29})$$

O valor da função de onda em cada ponto pode então ser calculada usando a equação

$$\psi_n = \frac{F_n}{1 - T_n}. \quad (\text{B.30})$$

Apêndice C

Funções de Green Independentes do Tempo

Neste apêndice, funções de Green independentes do tempo para o Hamiltoniano serão definidas e suas propriedades principais serão apresentadas [52].

C.1 Formalismo

As funções de Green podem ser definidas como as soluções da equação diferencial não homogênea

$$[z - \mathcal{H}(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{C.1})$$

sujeita a certas condições de contorno para \mathbf{r} ou \mathbf{r}' . Geralmente, z é uma variável complexa com $E = \text{Re}(z)$, $\eta = \text{Im}(z)$ e $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ é o operador Hamiltoniano independente do tempo, que possui as propriedades de ser linear, Hermitiano e o conjunto de suas autofunções, associadas à equação de autovalor,

$$\mathcal{H}(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}), \quad (\text{C.2})$$

formar um conjunto completo, $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$, que satisfaz as mesmas condições de contorno de $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$. O conjunto de autofunções $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$ pode ser considerado ortonormal sem perda de generalidade

$$\int \psi_n^*(\mathbf{r})\psi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{nm}. \quad (\text{C.3})$$

O fato das autofunções formarem um conjunto completo é expresso matematicamente por:

$$\int \psi_k(\mathbf{r})\psi_k^*(\mathbf{r}')dk + \sum_n \psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{C.4})$$

onde k representa o espectro contínuo e n o espectro discreto de $\mathcal{H}(\mathbf{r})$.

Ao trabalhar com funções de Green é conveniente introduzir um espaço vetorial abstrato. A forma mais conveniente para introduzir este espaço é através da notação bra e ket de Dirac [65]. A notação é a seguinte

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_n \rangle, \quad (\text{C.5})$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathcal{H} | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{C.6})$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \langle \mathbf{r} | G(z) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{C.7})$$

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{C.8})$$

$$\int d\mathbf{r} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | = 1, \quad (\text{C.9})$$

nessa nova notação

$$(z - \mathcal{H})G(z) = 1, \quad (\text{C.10})$$

$$\mathcal{H} | \psi_n \rangle = E_n | \psi_n \rangle, \quad (\text{C.11})$$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (\text{C.12})$$

$$\int | \psi_k \rangle \langle \psi_k | dk + \sum_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | = 1. \quad (\text{C.13})$$

A vantagem de usar a notação de Dirac é que as manipulações algébricas são facilitadas e não ficamos restritos à representação de posição.

Se todos os autovalores de $z - \mathcal{H}$ são não nulos, ou seja $z \neq \{E_n\}$, então a equação (C.10) pode ser resolvida formalmente

$$G(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}}. \quad (\text{C.14})$$

Multiplicando a equação (C.14) pela equação (C.13)

$$G(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}} \left\{ \int |\psi_k\rangle\langle\psi_k| dk + \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \right\}, \quad (\text{C.15})$$

e utilizando a relação $F(\mathcal{O})|\psi_n\rangle = F(\lambda_n)|\psi_n\rangle$, onde \mathcal{O} é um operador, λ_n seu autovalor e $F(\mathcal{O})$ é uma função desse operador. Esta relação pode ser provada expandindo a função $F(\mathcal{O})$ numa série de Taylor. Então, utilizando a equação (C.11), a equação (C.15) fica

$$G(z) = \int dk \frac{|\psi_k\rangle\langle\psi_k|}{z - E_k} + \sum_n \frac{|\psi_n\rangle\langle\psi_n|}{z - E_n} \quad (\text{C.16})$$

ou na representação de posição

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \int dk \frac{\psi_k(\mathbf{r})\psi_k^*(\mathbf{r}')}{z - E_k} + \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')}{z - E_n}. \quad (\text{C.17})$$

Como \mathcal{H} é um operador Hermitiano, todos os seus autovalores $\{E_n\}$ são reais. Conseqüentemente, se $Im\{z\} \neq 0$ e $z \neq \{E_n\}$, significa que $G(z)$ é uma função analítica no plano z complexo, exceto naqueles pontos ou porções do eixo z real que correspondem aos autovalores de \mathcal{H} . Como pode ser visto da equação (C.16) ou (C.17), $G(z)$ possui pólos simples na localização dos autovalores discretos de \mathcal{H} ; o contrário também é verdade: *os pólos de $G(z)$ fornecem os autovalores do espectro discreto de \mathcal{H} .* Se $z = E$, onde E pertence ao espectro contínuo de \mathcal{H} , $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ não é bem definida desde que o integrando em (C.17) possui uma singularidade. Entretanto, pode-se tentar definir $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ aplicando-se o procedimento de limites. Em casos usuais, onde os autoestados associados com o espectro contínuo não decaem quando $r \rightarrow \infty$, os limites laterais de $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E \pm i\eta)$ quando $\eta \rightarrow 0^+$ existem, mas são diferentes. Conseqüentemente, este tipo de espectro contínuo produz uma linha de corte em $G(z)$ ao longo do eixo z real.

Para E pertencendo ao espectro contínuo podemos definir duas funções de Green

$$G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E + i\eta), \quad (\text{C.18})$$

$$G^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E - i\eta), \quad (\text{C.19})$$

com definições similares para para o operadores correspondentes, $G^{(+)}(E)$ e $G^{(-)}(z)$.

Da equação (C.17) temos

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; z^*). \quad (\text{C.20})$$

Se z é real, $z = E$ e $E \neq \{E_n\}$, segue de (C.20) que $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ é Hermitiano; em particular $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)$ é real. Por outro lado, para E pertencendo ao espectro contínuo, da equação (C.20) temos

$$G^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = [G^{(+)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E)]^*, \quad (\text{C.21})$$

a qual mostra que

$$\text{Re}[G^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)] = \text{Re}[G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)], \quad (\text{C.22})$$

$$\text{Im}[G^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)] = -\text{Im}[G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)]. \quad (\text{C.23})$$

Usando a identidade

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (\text{C.24})$$

onde P significa *valor principal de Cauchy*, juntamente com a equação (C.17) a descontinuidade

$$\bar{G}(E) \equiv G^{(+)}(E) - G^{(-)}(E), \quad (\text{C.25})$$

pode ser expressa como

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -2\pi i \int \delta(E - E_k) \psi_k(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r}') dk - 2\pi i \sum_n \delta(E - E_n) \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (\text{C.26})$$

Para o elemento de matriz da diagonal principal, de (C.17) e (C.24), podemos escrever

$$\begin{aligned} G^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) &= P \left\{ \int dk \frac{\psi_k(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r})}{z - E_k} + \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r})}{z - E_n} \right\} \\ &\mp i\pi \left\{ \int \delta(E - E_k) \psi_k(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r}) dk + \sum_n \delta(E - E_n) \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

Integrando (C.27) sobre \mathbf{r}

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{G^{(\pm)}(E)\} &= P\left\{\int dk \frac{1}{z - E_k} + \sum_n \frac{1}{z - E_n}\right\} \\ &\mp i\pi\left\{\int \delta(E - E_k)dk + \sum_n \delta(E - E_n)\right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

A quantidade $\int \delta(E - E_k)dk + \sum_n \delta(E - E_n)$ é a densidade de estados (DE) em E , $N(E)$. $N(E)dE$ fornece o número de estados no intervalo $[E, E + dE]$. A quantidade

$$\rho(\mathbf{r}; E) = \int \delta(E - E_k)\psi_k(\mathbf{r})\psi_k^*(\mathbf{r})dk + \sum_n \delta(E - E_n)\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}), \quad (\text{C.29})$$

é a densidade de estados por unidade de volume. Obviamente,

$$N(E) = \int \rho(\mathbf{r}; E)d\mathbf{r}. \quad (\text{C.30})$$

Usando as equações (C.26, C.27, C.28, C.29) podemos escrever

$$\rho(\mathbf{r}; E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)\} = -\frac{1}{2\pi i} \overline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E), \quad (\text{C.31})$$

e

$$N(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}\{G^{(\pm)}(E)\}\}. \quad (\text{C.32})$$

$G(z)$ pode ser expressa em termos da descontinuidade (C.25)

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left\{ \int \delta(E - E_k)dk \frac{\psi_k(\mathbf{r})\psi_k^*(\mathbf{r}')}{z - E_k} + \sum_n \delta(E - E_n) \frac{\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')}{z - E} \right\} \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\overline{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{z - E}, \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

onde utilizamos a equação (C.26) e a propriedade de filtragem da função delta

$$\frac{1}{z - E_n} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\delta(E - E_n)}{z - E}. \quad (\text{C.34})$$

Em particular os elementos de matriz da diagonal principal de G são

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\rho(\mathbf{r}; E)}{z - E}. \quad (\text{C.35})$$

Notamos que $\rho(\mathbf{r}; E)$ versus E pode consistir de uma soma de funções δ (correspondendo ao espectro discreto de \mathcal{H}) mais uma função contínua (correspondendo ao espectro contínuo de \mathcal{H}) como mostrado em (C.29). A equação (C.35) mostra que a DE por unidade de volume (isto é, a parte imaginária de $\mp G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)/\pi$) permite o cálculo de $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)$ (ambos $\text{Re}\{G\}$ e $\text{Im}\{G\}$ para todos os valores de $z = E + i\eta$).

C.2 Função de Green e Teoria de Perturbação

O problema de encontrar os autovalores do Hamiltoniano $H = \tilde{H} + V$ pode ser resolvido em três passos: 1) calcular a função de Green \tilde{G} correspondendo a \tilde{H} ; 2) expressar $G(z)$ como uma série perturbativa em termos de $\tilde{G}(z)$ e V , onde $G(z)$ é a função de Green associada com H ; e 3) extrair de $G(z)$ a informação sobre os autovalores e autofunções de H .

C.2.1 Expansão Perturbativa da Função de Green

Um problema muito importante e comum é o caso onde o Hamiltoniano de uma partícula H pode ser separado em uma parte não perturbada \tilde{H} e uma perturbação V , de tal forma que

$$H = \tilde{H} + V. \quad (\text{C.36})$$

É admitido que \tilde{H} é tal que seus autovalores e autofunções podem ser obtidos facilmente. A questão é determinar os autovalores e autofunções de H .

A função de Green $\tilde{G}(z)$ e $G(z)$ correspondendo a \tilde{H} e H , são respectivamente,

$$\tilde{G}(z) = \frac{1}{z - \tilde{H}} \quad e \quad (\text{C.37})$$

$$G(z) = \frac{1}{z - H}. \quad (\text{C.38})$$

Usando as equações (C.36) e (C.37) podemos reescrever a equação (C.38) da seguinte forma

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{z - \tilde{H} - V} = \frac{1}{(z - \tilde{H})\left[1 - \frac{V}{(z - \tilde{H})}\right]} \\ &= \frac{\tilde{G}(z)}{1 - \tilde{G}(z)V}. \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

Como V é considerado uma perturbação, vamos expandir o operador $\frac{1}{1-\tilde{G}(z)V}$ em uma série

$$G = \tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G}V\tilde{G} + \dots \quad (\text{C.40})$$

Note que na equação acima não podemos inverter a ordem dos operadores, pois os operadores podem não comutar.

A equação acima pode ser reescrita na forma compacta

$$\begin{aligned} G &= \tilde{G} + \tilde{G}V(\tilde{G} + \tilde{G}V\tilde{G} + \dots) \\ &= \tilde{G} + \tilde{G}VG. \end{aligned} \quad (\text{C.41})$$

Na representação de posição, a equação (C.40) fica

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; z) &= \tilde{G}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; z) + \int d\mathbf{r}_1 \tilde{G}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_1; z)V(\mathbf{r}_1)\tilde{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_i; z) \\ &+ \iint d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_1 \tilde{G}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_2; z)V(\mathbf{r}_2)\tilde{G}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; z)V(\mathbf{r}_1)\tilde{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_i; z) + \dots \quad (\text{C.42}) \end{aligned}$$

A equação (C.42) é a expansão perturbativa da função de Green.

Apêndice D

Variação da fase Δ para os coeficientes de reflexão e transmissão para alguns potenciais

Neste apêndice mostramos que para alguns potenciais existe uma relação entre as fases dos coeficientes quânticos de reflexão e transmissão \mathcal{R} e \mathcal{T} que usamos na seção 3.3.

D.1 Exemplos

Na seção 3.3 escrevemos os coeficientes de reflexão e transmissão como

$$\begin{aligned}\mathcal{R} &= r \exp[-i\phi(E)], \\ \mathcal{T} &= t \exp[-i\phi_t(E)].\end{aligned}\tag{D.1}$$

com r e t números reais tendo a propriedade $r^2 + t^2 = 1$. Aqui, mostramos graficamente que para os potenciais delta de Dirac, barreira quadrada e Rosen-Morse, as

fases $\phi(E)$ e $\phi_t(E)$ obedecem a relação

$$\phi_t(E) = \phi(E) + \Delta(E), \quad (\text{D.2})$$

onde $\Delta(E) = \pm\pi/2$. Nas figuras temos os valores numéricos $\hbar = 2m = 1$, $\lambda = V_0 = W_0 = 1$, $d = 3$ e $\beta = 0.1$.

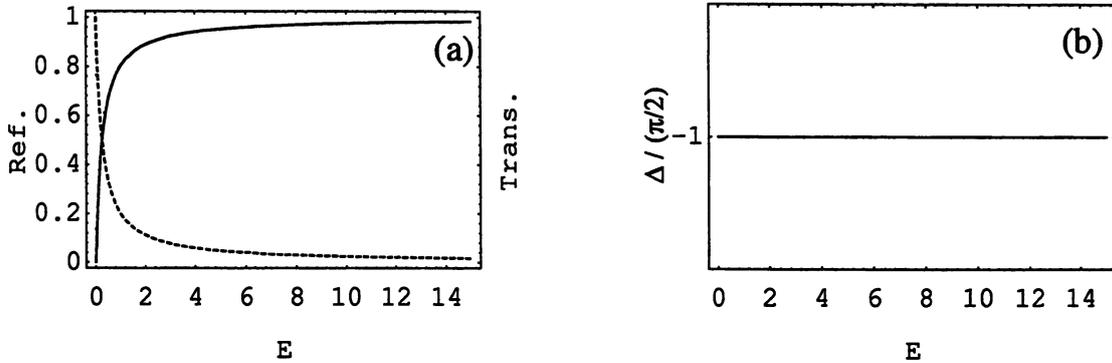


Figura D.1: (a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para uma delta de Dirac: $V(x) = \lambda\delta(x)$

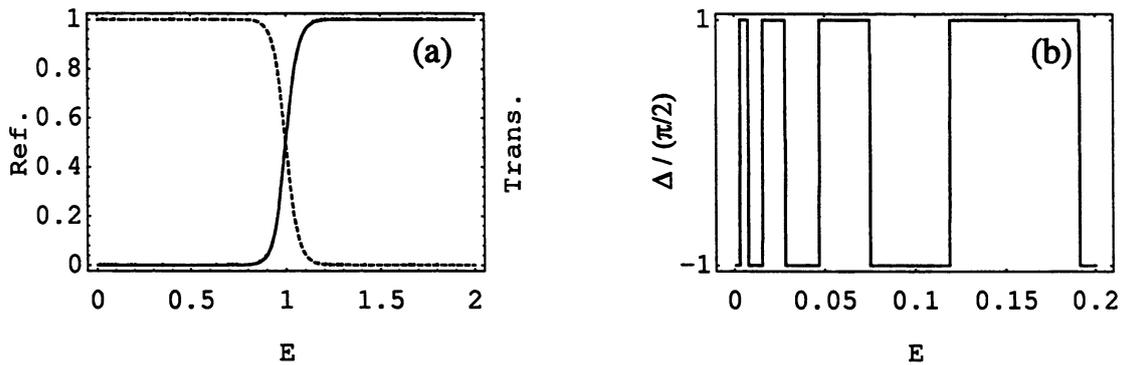


Figura D.2: (a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para a barreira quadrada: $V(x) = V_0$ se $0 < x < d$ e $V(x) = 0$ em outra situação

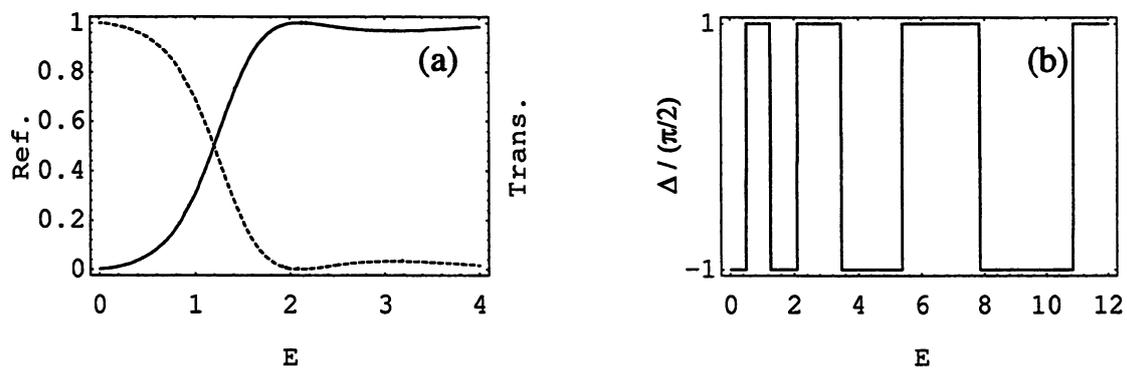


Figura D.3: (a) Variação dos coeficientes de transmissão (Trans.) e reflexão (Ref.) como função de energia (b) Variação da fase Δ para o potencial de Rosen-Morse: $V(x) = W_0 / \cosh^2 \beta x$

Apêndice E

Largura de quase-estados e desdobramento de energia

E.1 Relação entre largura de quase-estados e desdobramento de energia

Outro problema muito interessante reside na pergunta: existe alguma relação entre a largura de quase-estados e o desdobramento de energia em poços duplos? Esta questão foi levantada inicialmente por Miller em 1979 [59]. Dado um potencial $V(x)$ como na fig. 3.17, que possui quase-estados, podemos pensar em três formas diferentes, nas quais um poço duplo assimétrico pode se transformar em $V(x)$ como na fig. 3.17: fazendo $\tilde{L} \rightarrow \infty$ na fig. E.1, fazendo $W_0 \rightarrow 0$ na fig.E.2 ou fazendo $\alpha \rightarrow 0$ na fig.E.3. Assim, a pergunta levantada por Miller poderia ser respondida através da comparação do desdobramento de energia (como função dos parâmetros \tilde{L} , W_0 ou α) com Γ do potencial da fig. 3.17

Para exemplificar o procedimento, vamos analisar o caso proposto na fig. E.1.

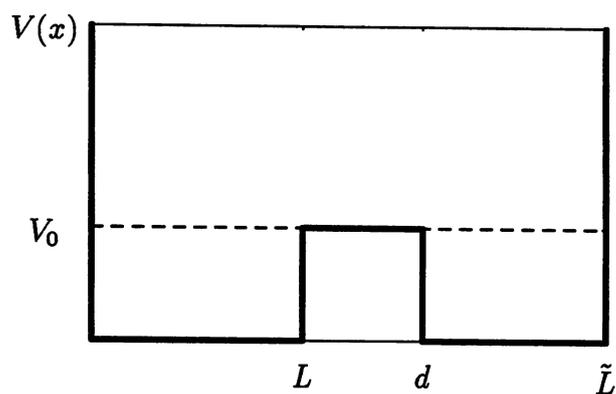


Figura E.1: No potencial acima fazendo $\tilde{L} \rightarrow \infty$ obtemos o potencial da figura 3.17.

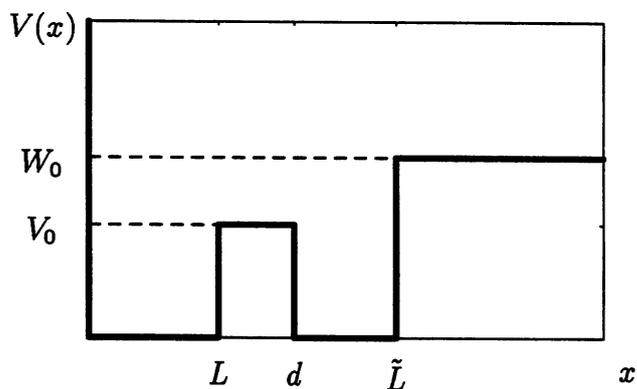


Figura E.2: No potencial acima fazendo $W_0 \rightarrow 0$ obtemos o potencial da figura 3.17

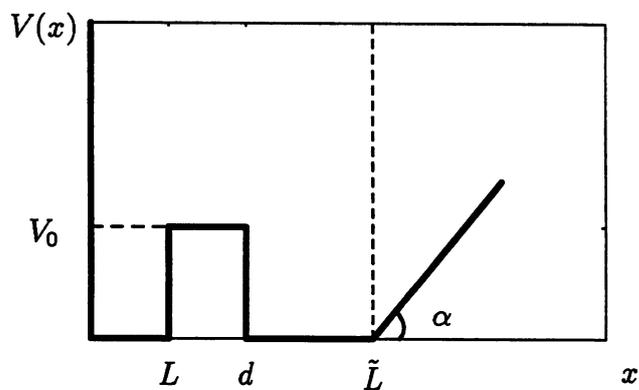


Figura E.3: No potencial acima fazendo $\alpha \rightarrow 0$ obtemos o potencial da figura 3.17

Primeiramente calculamos a energia do estado fundamental do potencial da fig. E.4, $E_{ps}(L)$, o qual sabemos ser obtido da equação transcendental, $\mu \tan[kL] = -k$, onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e $\mu = \sqrt{2m/\hbar^2(V_0 - E)}$. Também, calculamos a energia do estado fundamental do potencial da fig. E.1, $E_{pd}(\tilde{L})$. A diferença entre estas energias depende dos comprimentos L e \tilde{L} , ou seja

$$\Delta E(L, \tilde{L}) = |E_{ps}(L) - E_{pd}(\tilde{L})|. \quad (\text{E.1})$$

Dessa forma, podemos fazer $\tilde{L} \rightarrow \infty$ em $\Delta E(L, \tilde{L})$ e comparar este resultado com a largura do quase-estado associado ao potencial da fig. 3.17. Até o momento do fechamento desta monografia, não tínhamos ainda resultados definitivos sobre este estudo. Tal análise é uma das propostas de continuação do trabalho desenvolvido no Mestrado.

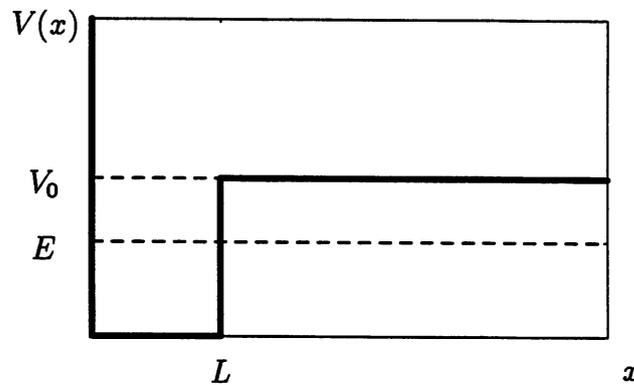


Figura E.4: Potencial para o cálculo de $E_{ps}(L)$

Bibliografia

- [1] S. Chapman and B. C. Garret Ad W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, 64:502, 1976.
- [2] W. H. Miller. *J. Chem. Phys.*, 63:996, 1975.
- [3] W. Eastes and R. A. Marcus. *J. Chem. Phys.*, 61:4301, 1974.
- [4] H. Friedrich and J. Trost. *Phys. Rev. Lett.*, 76(26):4896, 1996.
- [5] H. Friedrich and J. Trost. *Phys. Rev. A*, 54(2):1136, 1996.
- [6] H. Friedrich and J. Trost. *Phys. Rev. A*, 228:127, 1997.
- [7] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, 18:806, 1977.
- [8] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 1990.
- [9] M. Hruska, W. Y. Keung, and U. Sukhatme. *Phys. Rev. A*, 75:3345, 1997.
- [10] C. Weisbuch and B. Vinter. *Quantum Semiconductor Structures*. Academic, 1991.
- [11] V. Grecchi and A. Sacchetti. *J. Stat. Phys.*, 103:339, 2001.
- [12] O. E. Raiched and P. Vasilopoulos. *J. Phys. C*, 12:589, 2000.
- [13] L. R. Fonseca, J. L. Jimenez, and J. P. Leburton. *Phys. Rev B*, 58:9955, 1998.
- [14] C. Pisani and B. H. McKellar. *Phys. Rev. A*, 44:1061, 1991.

-
- [15] K. Takatsuka and A. Inoue. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1404, 1997.
- [16] M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, E. Vicentini, E. R. Raposo, and E. J. Heller. *Phys. Rev. A*, 44:1061, 1991.
- [17] M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, E. Vicentini, E. R. Raposo, and E. J. Heller. In R. Casalbuoni et al, editor, *Path Integrals from pev to Tev*. World Scientific, 1999. Singapore.
- [18] M. G. E. da Luz, E. J. Heller, and B. K Cheng. *J. Phys. A*, 31:2975, 1998.
- [19] M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, and M. W. Beims. *J. Phys. A*, 34:5041, 2001.
- [20] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill Book Company, 1965.
- [21] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, New York, second edition, 1980.
- [22] M. J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, editors. *Chaos & Quantum Physics: Proceedings of the Les Houches Summer School*, August 1989.
- [23] H. Kleinert. *Path Integrals in Quantum Mechanics and Polymers Physics*. World Scientific, Singapore, second edition, 1995.
- [24] J. H. Van Vleck. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 14:178, 1928.
- [25] G. Tanner and D. Wintgen. *Phys. Rev. Lett.*, 75:2928, 1995.
- [26] D. Wintgen, K. Richter, and G. Tanner. *Chaos*, 2:19, 1992.
- [27] W. T. Strunz. *J. Phys. A*, 25:3855, 1992.
- [28] W. H. Miller and T. F. George. *J. Chem. Phys.*, 56:5637, 1972.
- [29] D. W. H. McLaughlin. *J. Math. Phys.*, 13:1099, 1972.
- [30] S. C. Creagh and N. D. Whelan. *Phys. Rev. Lett.*, 77:4975, 1996.

- [31] M. W. Beims, V. Kondratovich, and J. B. Delos. *Phys. Rev. Lett.*, 81:4537, 1998.
- [32] E. B. Bogomolny and D. C. Rouben. *Europhys Lett.*, 43:111, 1998.
- [33] M. W. Beims, V. Kondratovich, and J. B. Delos. *Phys. Rev. Lett.*, 62:043401, 2000.
- [34] S. Takada and H. Nakamura. *J. Chem. Phys.*, 100:98, 1994.
- [35] A. Shudo and K. S. Ikeda. *Phys. Rev. Lett.*, 74:682, 1995.
- [36] S. C. Creagh and N. D. Whelan. *Phys. Rev. Lett.*, 82:5237, 1999.
- [37] M. F. Herman and E. Kluk. *Chem. Phys.*, 91:27, 1984.
- [38] F. Grossmann. *Phys. Rev. Lett.*, 85:903, 2000.
- [39] R. Das and S. Keshavamurthy. *Chem. Phys. Lett.*, 326:544, 2000.
- [40] M. Carioli, E. J. Heller, and K. B. Moller. *J. Chem. Phys.*, 106:8564, 1997.
- [41] W. R. Greenberg, A. Klein, and C. T. Li. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1244, 1997.
- [42] K. Chadam and P. C. Sabatier. *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*. Springer, New York, second edition, 1989.
- [43] M. S. Marinov and B. Segev. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 29:2839, 1996.
- [44] E. Vicentini. Função de green semiclássica generalizada: Aplicação a potenciais constantes por partes. Master's thesis, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 1996.
- [45] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, third edition, 1998.
- [46] M. G. Rozman, P. Reineker, and R. Tehver. *Phys. Rev. A*, 49:3310, 1994.
- [47] B. R. Holstein. *Am. J. Phys.*, 51:897, 1983.

- [48] M. de Aguiar M. A. *Phys. Rev. A*, 48(4):2567, 1993. Ver también Erratum, *Phys. Rev. A*, (51):2645, 1995.
- [49] S. M. Blinder. *Phys. Rev. A*, 37:973, 1988.
- [50] R. E. Crandall. *J. Phys. A*, 26:3627, 1993.
- [51] G. Grosche. *J. Phys. A*, 23:5205, 1990.
- [52] E. N. Economou. *Green's Functions In Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, German, second corrected and updated edition, 1983.
- [53] M. Christ and A. Kiselev. *J. Amer. Math. Soc.*, 11:771, 1998.
- [54] Z. Ahmed. *Phys. Rev. A*, 47:4761, 1993.
- [55] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Quantum Mechanics*. Pergamon, Oxford, 1981.
- [56] J. M. Blatt. *J. Comp. Phys.*, 1:382, 1967.
- [57] B. R. Johnson. *J. Chem. Phys.*, 67(9):4086, 1977.
- [58] I. I. Gol'dman and V. D. Krivchenkov. *Problems in Quantum Mechanics*. Dover, New York, 1993.
- [59] W. H. Miller. *J. Phys. Chem.*, 83:960, 1979.
- [60] A. Garg. *Am. J. Phys.*, 68(5):430, 2000.
- [61] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, USA, revised edition, 1994.
- [62] L. S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integrals*. Wiley, New York, 1981.
- [63] H. J. Stöckmann. *Quantum Chaos*. Cambridge University Press, United Kingdom, 1999.

-
- [64] R. L. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, third edition, 1997.
- [65] P. A. M. Dirac. *Quantum Mechanics*. Oxford Univ. Press, London, 4th edition, 1958.