Universidade de São Paulo
Pró-Reitoria de Graduação
Curso de Ciências Moleculares

Relatório de Ciclo Avançado

Iniciação à pesquisa IV - CCM0428

$1^o$ semestre de 2008

# **Propagação Semiclássica de Pacotes de Onda**

Renato Mendes Coutinho
*renato@cecm.usp.br*
Turma 14

*Orientador:* Marcus A.M. de Aguiar
*aguiar@ifi.unicamp.br*
(19) 3521-5466
Departamento de Física da Matéria Condensada
Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp

# 1 Introdução

Nos últimos 20 anos o estudo do limite clássico de sistemas quânticos ganhou grande ímpeto, não só na sua forma teórica mas também experimental. Métodos da velha mecânica quântica, desenvolvidos por Bohr e Sommerfeld, foram revividos e aperfeiçoados a partir da década de 70 com o intuito de compreender o comportamento desses sistemas no limite semiclássico. Um marco histórico nesse estudo foi o aparecimento da famosa Fórmula do Traço de Gutzwiller [4], que cobria uma lacuna teórica apontada por Einstein em 1917 [5], sobre a quantização de sistemas não-integráveis. Essa fórmula semiclássica, baseada na teoria desenvolvida previamente por Balian e Bloch [6], tornava possível o conhecimento aproximado do espectro de energias do sistema quântico a partir das órbitas periódicas do sistema clássico correspondente, o que tornou finalmente possível um estudo sistemático do limite semiclássico de sistemas caóticos.

Uma das maneiras mais intuitivas de se estudar a transição da teoria quântica para a clássica é através do formalismo de integrais de trajetória de Feynman [1, 2], que apresenta uma conexão direta entre essas teorias e permite obter aproximações semiclássicas diretamente.

# 2 Integrais de Trajetória

A equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle \tag{2.1}$$

pode ser integrada formalmente para hamiltonianas independentes do tempo, resultando em

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle \equiv \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle. \tag{2.2}$$

O propagador de Feynman é definido como o elemento de matriz de $U(t)$, chamado de operador de evolução temporal, entre dois estados quaisquer de posição:

$$K(x, x_0, t) = \langle x|\hat{U}(t)|x_0\rangle. \tag{2.3}$$

O conhecimento de $K(x, x_0, t)$ permite propagar qualquer estado inicial através da relação

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 K(x, x_0, t)\Psi(x_0). \tag{2.4}$$

A amplitude de transição entre dois estados quaisquer de um sistema pode ser expressa como uma soma sobre todas as maneira possíveis de levar o sistema do estado inicial ao final.

Por exemplo, dado que uma partícula encontra-se na posição $a$ no instante $t = 0$, a probabilidade de encontrá-la em $b$ no instante $t > 0$ é o módulo quadrado da amplitude

$$K(b, a) = \int_a^b exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right)\mathcal{D}x(t) \tag{2.5}$$

onde a integral à direita representa a soma sobre todos os caminhos possíveis que conectam o ponto $a$ e o ponto $b$. Cada um desses caminhos contribui para a amplitude de transição com o peso $e^{iS[x(t)]/\hbar}$ onde $S[x(t)] = \int L(x, \dot{x}, t)dt$ é a ação calculada sobre o caminho $x(t)$ e $L(x, \dot{x}, t)$ é a Lagrangeana do sistema.

A construção dessa integral de caminhos para o propagador prossegue da seguinte forma: divide-se o tempo de propagação em $N$ intervalos pequenos de tamanho $\epsilon$ de forma que $N\epsilon = t$. Considera-se depois o limite em que $\epsilon \rightarrow 0$. O operador de evolução temporal é então escrito como o produto de N fatores do tipo $e^{iS[x_k,x_{k-1}]/\hbar}$ vezes uma constante de normalização, dependente apenas de $\epsilon$:

$$K(b,a) = \lim_{N\rightarrow\infty} \int \cdots \int \left\{ exp \left( \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N-1} S[x_k, x_{k-1}] \right) \right\} \prod_{k=1}^{N-1} \left( \frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{1/2} dx_k \tag{2.6}$$

Pode-se mostrar que a expressão acima vale também para Hamiltonianas dependentes do tempo, desde que tome-se cuidado com o ordenamento temporal dos termos na integral.

No limite em que as ações típicas são muito maiores do que a constante de Planck, pequenas variações no caminho causam grandes oscilações da fase da exponencial. Nesse limite, a soma das várias contribuições comporta-se a como uma soma de números aleatórios de módulo um, que tende a se anular. A soma não se anula apenas se houver um caminho especial de tal forma que caminhos vizinhos tenham todos aproximadamente a mesma ação, isto é, onde $\delta S = 0$. Nesse caso as contribuições são todas aproximadamente iguais, isto é, ficam "em fase", e a integral é finita. Evidentemente $\delta S = 0$ é a expressão do princípio variacional de Hamilton e o caminho especial nada mais é que o caminho clássico, e assim recuperamos a mecânica clássica.

# 3 Propagador semiclássico de Hamiltonianas quadráticas

Uma grande vantagem do emprego do formalismo de Feynman reside na possibilidade de obter o propagador semiclássico a partir da trajetória clássica do sistema. Isso é feito trocando de variáveis para $y(t) = x(t) - \bar{x}(t)$, onde $\bar{x}(t)$ é a trajetória clássica. Se a Lagrangeana (e portanto também a Hamiltoniana) $L$ for quadrática nas posições e velocidades - ou seja, for da forma

$$L(t, x, \dot{x}) = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \tag{3.1}$$

então a ação $S[x(t)]$ fica:

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = S[\bar{x}] + \int_{t_a}^{t_b} \left[ a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2 \right] dt \tag{3.2}$$

e agora, como $S[\bar{x}(t)]$ é a ação clássica $S_{cl}[b,a]$, e portanto não varia com o caminho, e $y(t)$ vale $0$ em ambos os extremos, temos:

$$K(b,a) = exp\left( \frac{i}{\hbar} S_{cl}[b,a] \right) \int_0^0 exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[ a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2 \right] dt \right\} \mathcal{D}y(t) \tag{3.3}$$

e a integral à direita é uma função $F(t_a, t_b)$, independente das condições de contorno $a$ e $b$. Note-se ainda que esse resultado é exato, mesmo para Lagrangeanas dependentes do tempo.

# 4 Propagador do Oscilador Harmônico

Agora podemos usar a fórmula semiclássica para calcular o propagador de Feynman do oscilador harmônico, de Hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}mw^2x^2 \tag{4.1}$$

A ação clássica ao longo de uma trajetória com $x(t_a) = x_a$ e $x(t_b) = x_b$ é dada por

$$S(x_b, T, x_a) = \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b\right] \tag{4.2}$$

onde $T = t_b - t_a$. Para calcularmos o pré-fator $F(t_a, t_b)$, consideramos em primeiro lugar que o oscilador harmônico é um sistema autônomo, ou seja, a Lagrangeana não depende explicitamente do tempo, e portanto $F(t_a, t_b)$ deve depender apenas da diferença $t_b - t_a$. Então trocamos de variáveis, expandindo o caminho $y(t)$ em série de Fourier, e calculamos a ação para cada "harmônico", e finalmente calculamos o produtório resultante, chegando a:

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}\right)^{1/2} \tag{4.3}$$

e portanto o propagador do oscilador harmônico é:

$$K(x_b, T, x_a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos(\omega T) - 2x_a x_b\right]\right\} \tag{4.4}$$

# 5 Pacotes de onda gaussianos

Pacotes de onda gaussianos são funções de onda dadas por uma distribuição gaussiana:

$$\Psi(x) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-ax^2 + \frac{ipx}{\hbar}\right) \tag{5.1}$$

A importância de seu estudo neste contexto provém do fato de que um pacote gaussiano de largura $a = m\omega/2\hbar$ constitui um *estado coerente* do oscilador harmônico - ou seja, é um estado de incerteza mínima. Quando propagado, o pacote mantém sua forma, com a mesma largura - apenas oscila como um todo.

Podemos ver isso tomando o propagador (4.4) e calculando a densidade de probabilidade num instante posterior $t$, usando a (2.4):

$$\begin{aligned}
|\Psi(x,t)|^2 &= \left|\int dx_0 K(x, x_0)\Psi(x_0)\right|^2 \\
&= \left|\frac{m\omega}{\sin(\omega t)}\right| \sqrt{\frac{a}{2\pi\left[a^2 + \left(\frac{m\omega}{2\hbar\tan(\omega t)}\right)^2\right]}} \exp\left\{-\frac{a}{2\hbar^2}\left[a^2 + \left(\frac{m\omega}{2\hbar\tan(\omega t)}\right)^2\right]^{-1}\left(-\frac{m\omega}{\sin(\omega t)}x + p\right)^2\right\} \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - \frac{\sin(\omega t)}{m\omega}\,p\right)^2\right]
\end{aligned}$$

e o resultado é novamente uma gaussiana de largura $m\omega/\hbar$ cujo centro oscila exatamente como um oscilador clássico.

# 6 Oscilador Harmônico duplo com campo magnético constante

A Hamiltoniana para um sistema que consiste de uma partícula de massa $m$ e carga $e$, restrita a mover-se no plano $xy$, onde é sujeita a um oscilador harmônico duplo ao longo dos eixos $x$ e $y$, e a qual aplicamos um campo magnético constante de magnitude $B_0$ na direção $z$, é:

$$H = \frac{1}{2m}(p_x + eB_0 y/2)^2 + \frac{1}{2m}(p_y - eB_0 x/2)^2 + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 \tag{6.1}$$

Podemos, por meio de uma transformação canônica, diagonalizar essa Hamiltoniana de modo a torná-la equivalente a um oscilador harmônico duplo, porém com freqüências diferentes. Sendo $z = (x, y, p_x, p_y)^T$ as coordenadas originais, e $Z = (X, Y, P_x, P_y)^T$ as novas coordenadas, podemos escrever:

$$\begin{aligned} P_x &= ap_x + by & \qquad X &= cp_y + dx \\ P_y &= \alpha p_y + \beta x & \qquad Y &= \gamma p_y + \delta y \end{aligned}$$

ou, escrevendo em forma matricial, $Z = Mz$, onde

$$M = \begin{pmatrix} d & 0 & 0 & c \\ 0 & \delta & \gamma & 0 \\ 0 & b & a & 0 \\ \beta & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

A condição para que a transformação definida por $M$ seja canônica é que $MJM^T = J$, onde $J$ é a matriz antisimétrica

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dessa condição obtemos que

$$\begin{aligned} d\gamma &= c\delta & \qquad da - bc &= 1 \\ b\alpha &= a\beta & \qquad \delta\alpha - \beta\gamma &= 1 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Podemos escrever $z$ como $z = M^{-1}Z$, mas

$$MJM^T = J \Leftrightarrow J^T MJM^T = 1 \Leftrightarrow J^T MJ = (M^T)^{-1} \Leftrightarrow M^{-1} = J^T M^T J$$

ou seja, $z = (J^T M^T J)Z$. Agora, queremos que a Hamiltoniana seja diagonal nas novas variáveis, o que leva, igualando a zero os termos diagonais, a

$$\begin{aligned} &\frac{1}{m}(d + eB_0 c/2)(eB_0\alpha/2 + \beta) + m\omega_y^2 \alpha c = 0 \\ &\frac{1}{m}(\delta - eB_0\gamma/2)(eB_0 a/2 - b) - m\omega_x^2 a\gamma = 0 \end{aligned} \tag{6.3}$$

e a Hamiltoniana fica

$$H = \frac{P_x^2}{2m}\left[(d+eB_0c/2)^2 + m\omega_y^2c^2\right] + \frac{m}{2}X^2\left[a^2w_x^2 + \frac{1}{m^2}(eB_0a/2-b)^2\right]$$
$$+ \frac{P_y^2}{2m}\left[(\delta - eB_0\gamma/2)^2 + m\omega_x^2\gamma^2\right] + \frac{m}{2}Y^2\left[\alpha^2w_y^2 + \frac{1}{m^2}(eB_0\alpha/2+\beta)^2\right]$$
$$\equiv \frac{P_x^2}{2m}\Gamma_1 + \frac{mX^2}{2}\Gamma_2 + \frac{P_y^2}{2m}\Gamma_3 + \frac{mY^2}{2}\Gamma_4$$

e as novas freqüências são, pelas equações de Hamilton,

$$\Omega_x^2 = \Gamma_1\Gamma_2, \qquad \Omega_y^2 = \Gamma_3\Gamma_4 \tag{6.4}$$

Resolvendo as equações 6.2 e 6.3, a 6.4 fica:

$$\Omega_{x/y}^2 = \frac{1}{2}(\omega_x^2+\omega_y^2+\omega_c^2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\omega_x^2+\omega_y^2+\omega_c^2)^2 - 4\omega_x^2\omega_y^2} \tag{6.5}$$

onde $\omega_c = eB_0/m$ é a *freqüência de ciclotron* do oscilador. Esse resultado pode ainda ser escrito na forma

$$\Omega_{x/y} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\omega_c^2+\omega_+^2} \pm \sqrt{\omega_c^2+\omega_-^2}\right) \tag{6.6}$$

com $\omega_+ = \omega_x + \omega_y$ e $\omega_- = \omega_x - \omega_y$.

# 7 Oscilador Harmônico com freqüência dependente do tempo

Para calcularmos o propagador do oscilador harmônico com freqüência dependente do tempo, precisaremos calcular a trajetória desse sistema classicamente, para condições de contorno dadas.

## 7.1 Problema clássico

A Lagrangeana para o oscilador harmônico com freqüência dependente do tempo é dada por

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \omega^2(t)x^2 \tag{7.1}$$

que resulta na equação diferencial

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2(t)\right]x(t) = 0 \tag{7.2}$$

com condições de contorno $x(t_1) = x_1$ e $x(t_2) = x_2$. Usando o *ansatz*

$$x(t) = f(t)[A\cos g(t) + B\sin g(t)]$$

vem

$$(A\cos g + B\sin g)(\ddot{f} + \omega^2 f - f\dot{g}^2) + (-A\sin g + B\cos g)(2\dot{f}\dot{g} + f\ddot{g}) = 0$$

Sendo $f_1,\ g_1$ e $f_2,\ g_2$ os valores de $f(t)$ e $g(t)$ correspondentes a $x(t)$ em $t_1$ e $t_2$, podemos calcular as constantes $A$ e $B$ em função desses, obtendo a trajetória do sistema:

$$x(t) = \frac{f(t)}{\sin(g_2 - g_1)} \left( \frac{x_1}{f_1} \sin(g_2 - g) - \frac{x_2}{f_2} \sin(g_1 - g) \right), \tag{7.3}$$

válida desde que $g_2 - g_1 \neq n\pi$. A ação é dada então por:

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t)\, dt = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 - \omega(t)^2 x^2 \\ &= \frac{m}{2} (x\dot{x})|_{t_1}^{t_2} - \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} x(t) \left[ \frac{d^2}{dt^2} + \omega^2(t) \right] x(t)\, dt \\ &= \frac{m}{2} (x_2 \dot{x}_2 - x_1 \dot{x}_1) \end{aligned} \tag{7.4}$$

Agora temos que expressar $S_{cl}$ em termos apenas de $x_1$ e $x_2$. Isso pode ser feito tomando a derivada de (7.3) e substituindo $t_1$ e $t_2$ para encontrar as velocidades terminais:

$$\dot{x} = \frac{1}{\sin(g_2 - g_1)} \left[ \frac{\dot{f} x_1}{f_1} \sin(g_2 - g) - \frac{\dot{f} x_2}{f_2} \sin(g_2 - g) - \frac{f \dot{g} x_1}{f_1} \cos(g_2 - g) + \frac{f \dot{g} x_2}{f_2} \cos(g_1 - g) \right]$$

e daí

$$x_2 \dot{x}_2 - x_1 \dot{x}_1 = \frac{\dot{f}_2 x_2^2}{f_2} - \frac{\dot{f}_1 x_1^2}{f_2} + (\dot{g}_2 x_2^2 + \dot{g}_1 x_1^2) \cot(g_2 - g_1) - \left( \frac{f_2 \dot{g}_2}{f_1} + \frac{f_1 \dot{g}_1}{f_2} \right) \frac{x_1 x_2}{\sin(g_2 - g_1)}$$

De (7.3) devemos ter também que

$$2\dot{f}\dot{g} + f\ddot{g} = 0 \Rightarrow f^2 \dot{g} = 0 \Rightarrow \dot{g} = \frac{C^2}{f^2}$$

e portanto, substituindo na anterior, obtemos finalmente a ação

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \left[ \frac{\dot{f}_2 x_2^2}{f_2} - \frac{\dot{f}_1 x_1^2}{f_1} + (\dot{g}_2 x_2^2 + \dot{g}_1 x_1^2) \cot(g_2 - g_1) \right] \tag{7.5}$$

## 7.2 Cálculo do propagador quadrático

Consideramos aqui a seguinte Lagrangeana quadrática:

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2} W(t) x^2 \tag{7.6}$$

O propagador será dado, de acordo com o resultado da seção 1.2, por

$$K(x_f, x_i) = exp \left( \frac{i}{\hbar} S_{cl}[x(t_f), x(t_i)] \right) \int_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0} exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left[ \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 - W(t) x^2 \right] dt \right\} \mathcal{D}x(t)$$

Podemos integrar por partes a ação, usando que $x(t_i) = x(t_f) = 0$:

$$S[x(t)] = -\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} dt \left[x\frac{d^2x}{dt^2} + Wx^2\right]$$
$$= -\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} dt \left[x\left(\frac{d^2}{dt^2} + W\right)x\right] \tag{7.7}$$

Daqui vemos que estamos lidando com uma integral gaussiana generalizada para $W$ dependente do tempo. Para calculá-la, devemos diagonalizar o operador hermiteano

$$\frac{d^2}{dt^2} + W(t).$$

Para tanto, vamos primeiramente usar uma transformação de variáveis que deve tornar a ação quadrática na de uma partícula livre.

Seja $f(t)$ uma solução arbitrária de

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + W(t)\right] f(t) = 0, \tag{7.8}$$

com a restrição que, no ponto inicial $t_i$, $f(t_i) \neq 0$. Com ela, podemos construir a seguinte transformação linear, que leva o caminho $x(t)$ no caminho $y(t)$:

$$x(t) = f(t)\int_{t_i}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)} ds. \tag{7.9}$$

Diferenciando esta, temos

$$\dot{x}(t) = \dot{f}(t)\int_{t_i}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)} ds + \dot{y}(t) \tag{7.10}$$

de modo que a transformação inversa de (7.9) é

$$y(t) = x(t) - \int_{t_i}^{t} \frac{\dot{f}(s)}{f(s)} x(s) ds, \tag{7.11}$$

e agora vemos que $y(t)$ satisfaz a condição de contorno $y(t_i) = 0$. Diferenciando novamente, temos

$$\ddot{x}(t) = \ddot{f}(t)\int_{t_i}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)} ds + \dot{f}(t)\frac{\dot{y}(t)}{f(t)} + \ddot{y}(t)$$

obtendo

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + W(t)\right] x(t) = \left[\frac{d^2}{dt^2} + W(t)\right] f(t)\int_{t_i}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)} ds + \dot{f}(t)\frac{\dot{y}(t)}{f(t)} + \ddot{y}(t) \tag{7.12}$$

Chegamos então a

$$S[x(t)] = -\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} x(t)\frac{d^2}{dt^2} + W(t)x(t)\, dt$$
$$= -\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} f(t)\int_{t_i}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)}\, ds \left[\dot{f}(t)\frac{\dot{y}(t)}{f(t)} + \ddot{y}(t)\right]\, dt$$
$$= -\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} F(t)\dot{f}(t)\dot{y}(t) + F(t)f(t)\ddot{y}(t)\, dt,$$

onde $F(t) = \int_{t_1}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)}\, ds$. Integrando o segundo termo acima por partes resulta em

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= -\frac{m}{2}\left\{\int_{t_i}^{t_f} \left(F\dot{f}\dot{y} - \dot{F}f\dot{y} - F\dot{f}\dot{y}\right) dt + Ff\dot{y}|_{t_i}^{t_f}\right\} \\ &= \frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} \dot{y}(t)^2\, dt - \frac{m}{2}\left[x(t)\dot{y}(t)\right]|_{t_i}^{t_f} \\ &= \frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} \dot{y}(t)^2\, dt, \end{aligned}$$

que é a ação a partícula livre. Resta ainda analisar as condições de contorno para $y(t)$. Em $t_i$ já temos que $y(t_i) = 0$. Para $t_f$, devemos ter que

$$y(t_f) = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\dot{y}(s)}{f(s)}\, ds = 0$$

Para fazer uso dessa condição de contorno, vamos nos valer de uma representação da função $\delta$,

$$\delta(x(t_f)) = \frac{1}{2\pi}\int exp[-i\alpha x(t_f)]\, d\alpha,$$

que permite escrever a integral de caminho como

$$\begin{aligned} &\int_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0} \mathcal{D}x(t)\, exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} S[x(t)]dt\right\} \\ &\quad = \frac{1}{2\pi}\int_{x(t_i)=0}^{x(t_f) qualquer} \mathcal{D}x(t)\ \int_{-\infty}^{+\infty} exp[-i\alpha x(t_f)]\, d\alpha\, exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right\} \\ &\quad = \frac{1}{2\pi}\int_{x(t_i)=0}^{x(t_f) qualquer} \mathcal{D}y(t)\ \left|\frac{\delta x}{\delta y}\right| \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\, exp\left[-i\alpha f(t_f)\int_{t_i}^{t_f} ds\, \frac{\dot{y}(s)}{f(s)}\right] \\ &\quad \times exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_f} dt\, \dot{y}^2(t)\right] \end{aligned}$$

A generalização de dimensão infinita da Jacobiana é independente de $y(t)$, porque a transformação (7.11) é linear em $y$. Reescrevendo a expressão acima usando

$$\gamma(t) = y(t) - \frac{\hbar\alpha}{m} f(t_f)\int_{t_i}^{t} \frac{ds}{f(s)}$$

chegamos a

$$\frac{1}{2\pi}\left|\frac{\delta x}{\delta y}\right| \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\, exp\left[\frac{i\hbar}{2m}\alpha^2 f^2(t_f)\int_{t_i}^{t_f} \frac{dt}{f^2(t)}\right] \int_{\gamma(t_i)=0}^{\gamma(t_f)\, qq} \mathcal{D}\gamma(t)\, exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, \dot{\gamma}^2(t)\right]$$

E aqui podemos fazer a integral em $\alpha$, e a integral de trajetória é apenas a da partícula livre para qualquer tempo final $t_f$, sendo portanto igual a $1$. Da integral de trajetória original resta apenas

$$\left|\frac{\delta x}{\delta y}\right| \left[m \Big/ 2\pi i\hbar f^2(t_f)\int_{t_i}^{t_f} \frac{dt}{f^2(t)}\right]^{1/2}$$

Podemos agora calcular a Jacobiana usando a transformação (7.11), obtendo:

$$\left|\frac{\delta x}{\delta y}\right| = \left|\frac{\delta y}{\delta x}\right|^{-1} = \left[\frac{f(t_f)}{f(t_i)}\right]^{1/2}$$

e portanto, finalmente chegamos à fórmula para a integral de trajetória:

$$\int_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0} exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} S[x(t)]dt\right\}\mathcal{D}x(t) = \left[m\Big/2\pi i\hbar f(t_f)f(t_i)\int_{t_i}^{t_f}\frac{dt}{f^2(t)}\right]^{1/2} \tag{7.13}$$

## 7.3 Aproximação em $1^a$ ordem

Agora vamos calcular um exemplo assumindo uma forma específica para $\omega(t)$, inserindo uma perturbação periódica na frequência,

$$\omega(t) = \omega\left[1 + \epsilon\cos(\Omega t)\right]$$

Partindo da equação diferencial:

$$\ddot{x} + \omega^2[1 + \epsilon\cos(\Omega t)]^2 = 0 \tag{7.14}$$

com condições de contorno

$$\begin{aligned} x(0) &= x_a \\ x(T) &= x_b \end{aligned}$$

aproximamos até $1^a$ ordem e supomos uma solução (aproximada) da forma $x_0 + \epsilon\, y$, obtendo

$$\begin{aligned} &\ddot{x}_0 + \omega^2 x_0 = 0 \\ &\ddot{y} + \omega^2 y + 2\omega^2 x_0\cos(\Omega t) = 0 \end{aligned}$$

As condições de contorno devem valer para todo $\epsilon$, logo valem em particular para $\epsilon = 0$, portanto $x_0$ obedece

$$\begin{aligned} x_0(0) &= x_a \\ x_0(T) &= x_b \end{aligned}$$

e $y$ obedece

$$y(0) = y(T) = 0$$

A solução para $x_0$ é

$$x_0(t) = \left(\frac{x_b}{\sin(\omega t)} - \frac{x_a}{\tan(\omega t)}\right)\sin(\omega t) + x_a\cos(\omega t) \tag{7.15}$$

e a de $y$ é dada por:

$$\begin{aligned} y(t) = \frac{2\omega^2}{(\Omega^2 - 4\omega^2)\sin(\omega T)}\left[x_a\cos(\omega T) - x_b\cos(\Omega T) + \frac{2\omega\sin(\Omega T)}{\Omega}\left(\frac{x_b}{\tan(\omega T)} - \frac{x_a}{\sin(\omega T)}\right)\right]\sin(\omega t) \\ -\frac{2\omega^2 x_a}{\Omega^2 - 4\omega^2}\cos(\omega t) + \left(\frac{x_b}{\sin(\omega t)} - \frac{x_a}{\tan(\omega t)}\right)\left[\frac{\omega^2}{\Omega^2 + 2\omega\Omega}\sin\big((\omega+\Omega)t\big) + \frac{\omega^2}{\Omega^2 - 2\omega\Omega}\sin\big((\omega-\Omega)t\big)\right] + \\ + x_a\left[\frac{\omega^2}{\Omega^2 + 2\omega\Omega}\cos\big((\omega+\Omega)t\big) + \frac{\omega^2}{\Omega^2 - 2\omega\Omega}\cos\big((\omega-\Omega)t\big)\right] \end{aligned} \tag{7.16}$$

Integrando a Lagrangeana dada pela expressão

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2\left[1+\cos^2(\Omega t)\right]x^2 \tag{7.17}$$

e integrando para encontrar a ação, resulta, tomando apenas os termos até $1^a$ ordem, em

$$\begin{aligned} S(x_a,x_b,T) \;=\; & \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos(\omega T)-2x_ax_b\right]+ \\ & \epsilon\,\frac{m\omega^2}{2\Omega\sin^2(\omega T)(\Omega^2-4\omega^2)}\Big\{4\omega\, x_a^2\big[\omega\sin(\Omega T)-\Omega\cos(\omega T)\sin(\omega T)\big] \\ & +x_ax_b\big[-8\omega^2\cos(\omega T)\sin(\Omega T)+4\omega\Omega\sin(\omega T)(\cos(\Omega T)+1)\big] \\ & +x_b^2\big[\big((\cos(2\omega T)-1)\Omega^2+4\omega^2\big)\sin(\Omega T)-4\omega\Omega\cos(\omega T)\sin(\omega T)\cos(\Omega T)\big]\Big\} \end{aligned} \tag{7.18}$$

Podemos obter o propagador usando a expressão ([9]):

$$K(x_b,x_a) = \sqrt{-\frac{1}{2\pi i\hbar}\,\frac{\partial^2 S}{\partial x_a\partial x_b}}\;\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right) \tag{7.19}$$

onde $-\partial^2 S/\partial x_a\partial x_b$, o chamado determinante de Van Vleck, vale:

$$-\frac{\partial^2 S}{\partial x_a\partial x_b} \;=\; \frac{m\omega}{\sin(\omega T)}+\epsilon\,\frac{2m\omega^3}{\Omega(\Omega^2\,-\,4\omega^2)\sin^2(\omega T)}\Big[2\omega\sin(\Omega T)\cos(\omega T)-\Omega\sin(\omega T)(1+\cos(\Omega T))\Big] \tag{7.20}$$

# 8 Propagação de pacotes de onda gaussianos

Usando o propagador calculado até $1^a$ ordem na seção anterior, podemos computar a função de onda de um pacote gaussiano sob a ação dessa Hamiltoniana, fazendo uso da (2.4). Obtemos então

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|\sqrt{\frac{B}{\pi}}\exp\left[-B\left(Ax+p\right)^2\right] \tag{8.1}$$

onde $A$ e $B$ são dados por

$$\begin{aligned} A &= \frac{m\omega}{\sin(\omega t)}+\;\epsilon\,\frac{2m\omega^3}{\Omega(\Omega^2\,-\,4\omega^2)\sin^2(\omega t)}\Big[2\omega\sin(\Omega t)\cos(\omega t)-\Omega\sin(\omega t)(1+\cos(\Omega t))\Big] \\ B &= \frac{a}{2\hbar^2}\left[a^2+\left(\frac{m\omega}{2\hbar\tan(\omega t)}+2m\omega^3\epsilon\,\frac{\omega\sin(\Omega t)-\Omega\cos(\omega t)\sin(\omega t)}{\hbar\Omega\sin^2(\omega t)(\Omega^2-4\omega^2)}\right)^2\right]^{-1} \end{aligned}$$

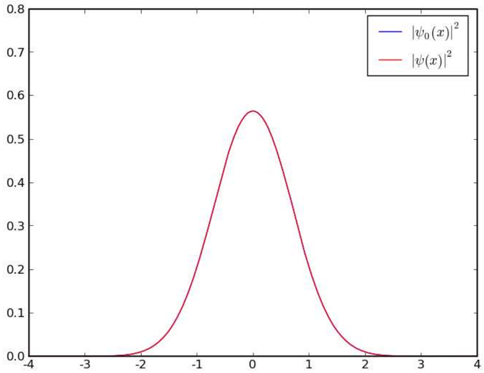
Expressamos $A$ como $A = A_0+\epsilon A_1$, e aproximando

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{A_0+\epsilon A_1} \approxeq \frac{1}{A_0}\left(1-\epsilon\,\frac{A_1}{A_0}\right)$$

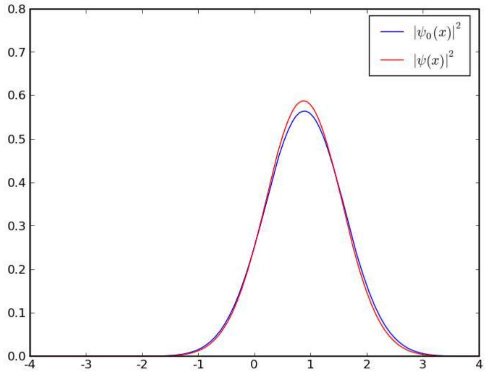
reescrevemos a (8.1) como

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|\sqrt{\frac{B}{\pi}}\exp\left\{-BA^2\left[x+\frac{p}{A_0}\left(1-\epsilon\,\frac{A_1}{A_0}\right)\right]^2\right\} \tag{8.2}$$

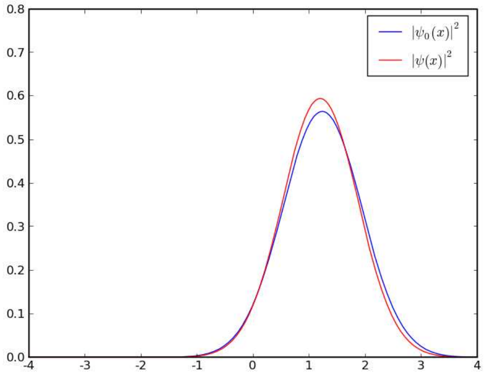
Usando essa expressão, podemos olhar como se comporta o pacote para um dado conjunto de parâmetros específico, como vemos na figura 1.



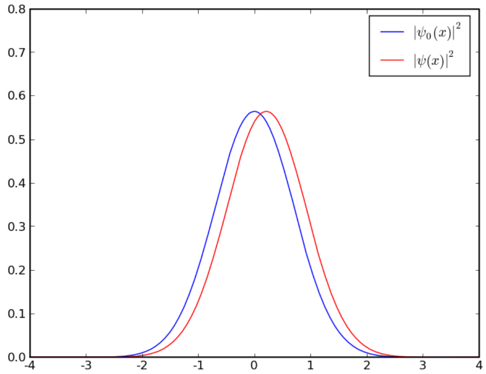

(a) $t = 0.00$



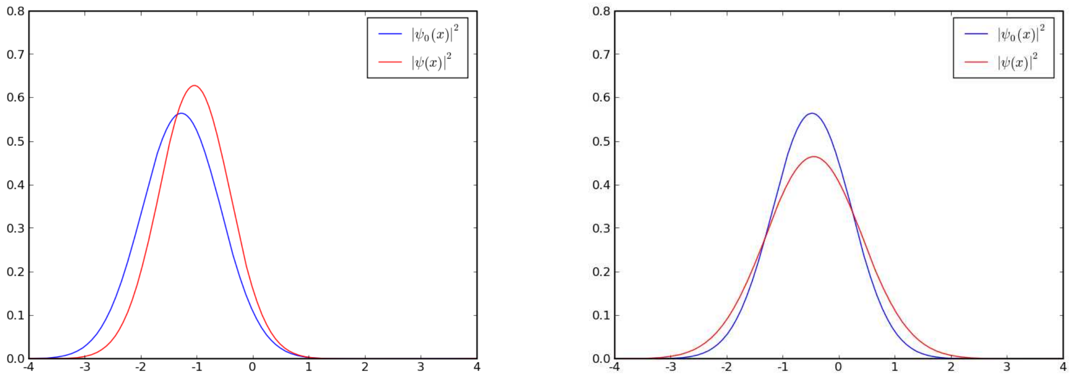

(b) $t = 0.75$




(c) $t = 1.25$




(d) $t = 3.14$




(e) $t = 4.90$ (f) $t = 5.90$

Figura 1: Densidade de probabilidade de um pacote de ondas gaussiano de largura $m\omega/2\hbar$ propagado sob a hamiltoniana do oscilador harmônico ($\Psi_0(x)$) e do oscilador harmônico de frequência dependente do tempo ($\Psi(x)$), em vários instantes de tempo. Os parâmetros usados foram $m = 1.0$, $\omega = 1.0$, $\Omega = \pi/2$, $p = 1.3$ e $\epsilon = 0.1$, com $\hbar = 1$.

# Referências

[1] Feynman, R.P., **Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics**, Rev. Mod. Phys., **20**, 367 (1948).

[2] Feynman, R.P., Hibbs, A.R. **Quantum Mechanics and Path Integrals**, 1965, Ed. McGraw-Hill;

[3] Nussenzveig, H.M., **Integrais de Trajetória**, *Primeira Escola de Verão Jorge Andre Swieca*, SBF, p. 127-173, 1983;

[4] Gutzwiller, M.C. 1967 J. Math. Phys. **8** 1979; 1969 J. Math. Phys. **10** 1004; 1970 J. Math. Phys. **11** 1791; 1971 J. Math. Phys. **12** 343;

[5] Rev. Brasil. de Ensino de Física, **Einstein e a teoria de caos quântico**, 27 (2005) 102; idem, **Sobre o teorema quântico de Sommerfeld e Epstein** pag. 103.

[6] Balian,R. e Bloch,C., *Ann. Phys.* **60**, 401 (1970); *Ann. Phys.* **64**, 271 (1971); *Ann. Phys.* **69**, 76 (1972); *Ann. Phys.* 85, 514 (1974).

[7] Baranger, M., de Aguiar, M.A.M., Keck, F., Korsch, H.J., e Schellas, B., **Semiclassical approximations in phase space with coherent states**, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 34 (2005) 7227.

[8] de Aguiar, M.A.M., Baranger, M. Jaubert, L., Parisio, F. e Ribeiro, A.D., **Semiclassical propagation of wavepackets with complex and real trajectories**, *J. Phys. A: Math. Gen.* 38 (2005) 4645;

[9] Dittrich,W., Reuter,M. **Classical and Quantum dynamics: from classical paths to path integrals**, 1992, Ed. Springer-Verlag.