

**Universidade Federal de Santa Catarina  
Programa de Pós-Graduação em Físico-Química**

**TUNELAMENTO NA SUPERFÍCIE DE  
ENERGIA BIDIMENSIONAL  
DE UM MODELO DE MUITOS CORPOS**

**Dissertação**

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Físico-Química  
da Universidade Federal de Santa Catarina  
para obtenção do grau de  
**MESTRE EM CIÊNCIAS**

**ADALBERTO LUIZ COMIN**

**UFSC**

Florianópolis, agosto de 1991

**TUNELAMENTO NA SUPERFÍCIE DE  
ENERGIA BIDIMENSIONAL  
DE UM MODELO DE MUITOS CORPOS**

**ADALBERTO LUIZ COMIN**

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de  
**MESTRE EM CIÊNCIAS**  
especialidade Físico-Química e aprovada em sua forma final pelo Programa  
de Pós-Graduação



Prof. Frederico Fermo de Souza Cruz - Orientador

Prof. Ademir Neves - Coordenador do Curso


Banca Examinadora



Prof. Frederico Fermo de Souza Cruz - Presidente



Prof. José Ricardo Marinelli



Prof. Wagner Figueiredo

**Para Sandra e Luiz Fernando  
com Amor**

## Agradecimentos

Ao Professor e amigo Frederico Firino de Souza Cruz (Fred), pela orientação, dedicação e paciência.

A Sandra, pelo apoio e compreensão.

Aos meus pais, Gentil e Jovita, pelo incentivo e colaboração.

Ao Ivanor e a Neli, que acompanharam este trabalho de perto.

Ao amigo e conselheiro, Prof. Wagner Figueiredo (grande figura).

Aos meus irmãos, Juci, Lu e Adri.

Aos amigos que, de uma forma ou de outra, caminharam comigo ao longo do curso.

Aos agentes financeiros, CAPE S e CNPQ.

## ÍNDICE

Capítulo I	
I Introdução.....	1
Capítulo II	
II Teorias de Campo Médio.....	5
II.1 - Teoria de Hartree Fock Dependente do Tempo.....	5
II.2 - Trajetórias Coletivas.....	9
Capítulo III	
III O Método e as Bases.....	15
III.1 - O Método.....	16
III.2 - Base de Gaussianas Localizadas.....	20
Capítulo IV	
IV A Hamiltoniana Efetiva de Tunelamento.....	27
IV.1 - O Modelo.....	27
IV.2 - A Hamiltoniana Efetiva de Tunelamento.....	31
Capítulo V	
V Resultados e Conclusões.....	40
Apêndices	
A.....	49
A.1 - Fatores de Frank-Condon.....	49
A.2 - O Oscilador Deslocado e os Elementos de Matriz.....	50
B.....	53
B.1 - Número de Níveis.....	53
B.2 - Localização das Gaussianas.....	56
B.3 - Elementos de Matriz.....	57
Referências Bibliográficas.....	59

## Resumo

Tunelamento em superfícies de energia multidimensionais é um problema interessante e desafiador em várias áreas da física. Em física nuclear o tratamento microscópico de fissão leva a superfícies multidimensionais, das quais deve-se extrair a trajetória de tunelamento. Teorias como Hartree Fock Dependente do Tempo Adiabática e Hartree Fock com Vínculo(Constrained Hartree Fock) devem nos dar meios para obter a trajetória de fissão. Entretanto estas prescrições não são únicas, e deste modo, podem gerar diferentes potenciais e inércias para o processo. Temos ainda o problema de que a trajetória não define um grau de liberdade exatamente desacoplado, e a influência dos outros graus de liberdade não é levada em conta para cálculos unidimensionais. Neste trabalho, nós investigamos a aplicabilidade do método de bases gaussianas não ortogonais (Makri e Miller[13]), para tratar o grau de liberdade de tunelamento acoplado a  $N$  osciladores harmônicos iguais. O método é aplicado para um modelo de muitos corpos, proposto recentemente por Arve e seus colaboradores[10]. Nossos resultados são comparados com os seguintes métodos: Hartree Fock com Vínculo, Hartree-Fock Dependente do Tempo(em tempo imaginário), Movimentos Coletivos de Grande Amplitude e os resultados exatos.

## Abstract

Tunnelling in a multidimensional energy surfaces is still a challenging and interesting problem in several areas of physics. In nuclear physics the microscopic treatment of fission leads to multidimensional surfaces from which is necessary to extract the tunnelling path. Theories like Adiabatic Time Dependent Hartree Fock and Constrained Hartree Fock could give us means to obtain the fission paths. Nevertheless, those prescriptions are not unique and they could generate different potentials and inertias for the process. Furthermore the path does not define an exactly decoupled degree of freedom and the influence of the other degrees are not take into account on one dimensional calculations. In this work we investigate the applicability of the non-orthogonal gaussian basis method, proposed elsewhere(Makri e Miller[13]), to treat the tunnelling degree of freedom coupled to N equal harmonic oscillators. The method is applied to a many body model recently proposed by Arve , Bertsch, Puddu and Negele[10]. Our results are compared with the following methods: exact solutions, Constrained Hartree Fock, Imaginary Time and Large Amplitude Collective Motion.

## Cap. I - Introdução

Tunelamento em sistemas de muitos corpos é um problema interessante e desafiador em vários campos de conhecimento.

O termo tunelamento[6,9], deve ser entendido como uma modificação na configuração do sistema, ocasionada pela possibilidade de transições entre estados separados por uma região proibida classicamente(região de barreira).

Em química, por exemplo, sabe-se que esse efeito tem grande influência em processos que envolvem a transferência de partículas leves(prótons e átomos de hidrogênio),[1,2].Em muitos casos, é possível utilizar esse efeito como uma "correção quântica"[1], em tratamentos convencionais(i. é, tratamentos clássicos), da cinética de reações químicas.

Outro exemplo, agora em física nuclear, onde esse efeito é dominante, é o fenômeno de fissão nuclear espontânea[6].

Como é bem conhecido[1,2 e 9], os estados estacionários, de sistemas que apresentam essas barreiras, que possuem energia abaixo da barreira aparecem em pares degenerados. A possibilidade de tunelamento através da barreira quebra essa degenerescência, e os estados são separados em um estado simétrico e um estado antissimétrico(com energia mais alta). A resolução do problema de tunelamento consiste em obter a separação de energia("splitting"), desses pares, já que esta quantidade está



diretamente relacionada: - com a probabilidade de ocorrência de uma determinada reação(no caso químico); e com a meia vida do núcleo pai(no caso de fissão espontânea).

A resolução do problema consiste em duas etapas distintas. A primeira, que é comum às várias teorias, consiste em obter uma parametrização para os diversos graus de liberdade do sistema de interesse. Como ilustração, vamos citar dois exemplos:

i - Isomerização da molécula do Malonaldeído[2],(ver fig.[I-1]

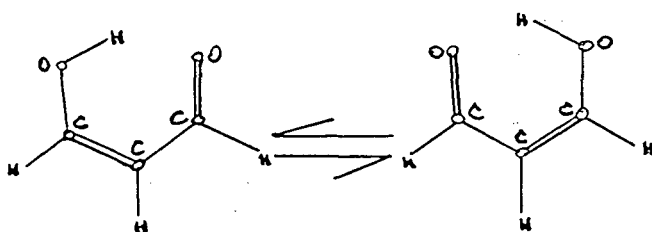


Fig.[I-1] - Esquema 1 da ref.[2]. Molécula de Malonaldeído.

Neste caso, o espectro é resolvido, de algum modo, e os estados são parametrizados através das distâncias entre os constituintes da molécula(ver fig.[I-2]), obtendo-se assim uma superfície multidimensional(em termos dos parâmetros). Pode-se observar nesta figura que alguns parâmetros são mais significativamente modificados durante o processo de isomerização.

ii - Fissão Nuclear. No caso nuclear, pode-se parametrizar os vários graus de liberdade em termos de um conjunto de parâmetros de deformação. Por exemplo, as

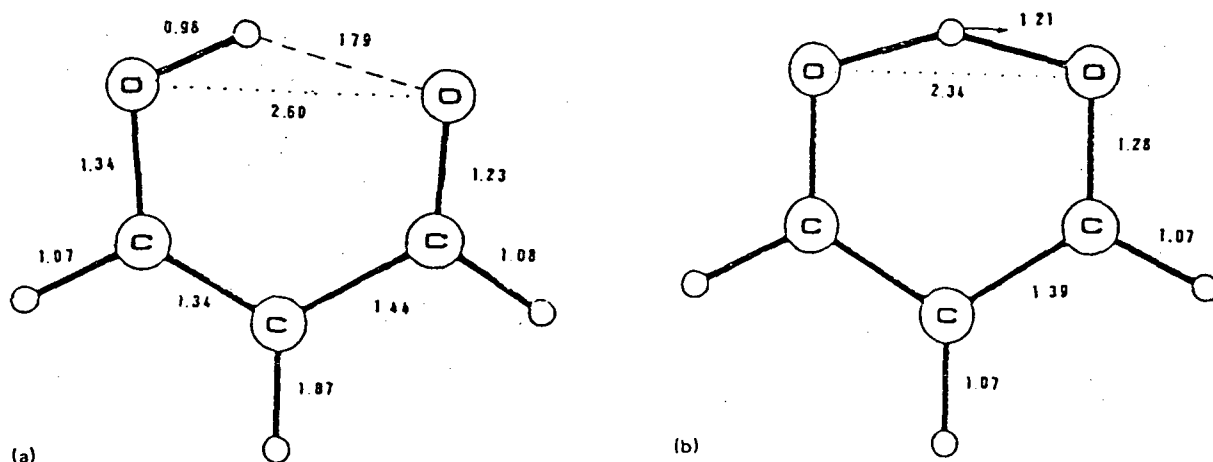


Fig.[I-2] - Geometria dos estados estacionários e transiente (a e b respectivamente), para a transferência intermolecular de proton na molécula de Malonaldeído. Figs. [I-a] e [I-b] da ref.[2].

várias multipolaridades associadas a forma do núcleo. A descrição realística do processo de fissão exige, ao menos três parâmetros[6],(ver a fig.[I-3]):

- um parâmetro  $c$ , que descreve a distância entre os fragmentos em formação(coordenada de alongação), associada ao momento de quadrupolo;

- um parâmetro  $h$ , que descreve a formação do pescoço entre os fragmentos(coordenada de pescoço);

- um parâmetro  $a_s$ , que mede a assimetria das massas( no caso de fissão assimétrica), (coordenada de fragmentação), o que também nos leva a uma superfície multidimensional de energia.

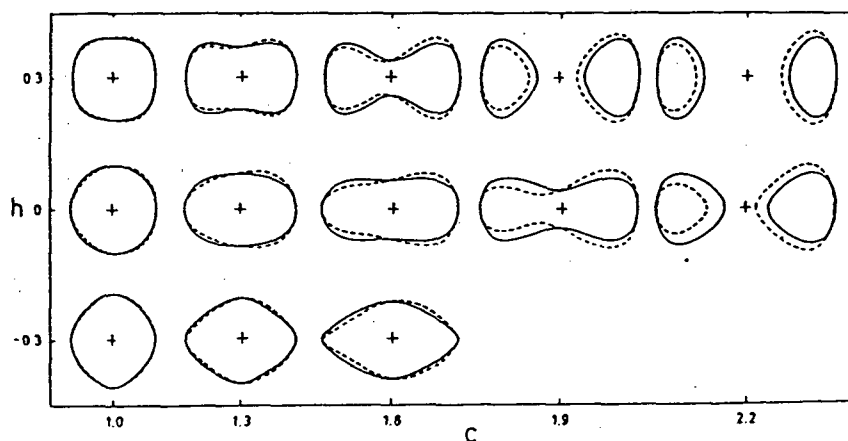


Fig.[I-3] - Algumas formas, em uma parametrização apropriada  $(c,h)$ . As linhas sólidas mostram as formas simétricas e as linhas pontilhadas mostram formas onde o parâmetro de assimetria é diferente de zero.Fig.[I-14] da ref.[6].

A segunda etapa consiste no tratamento dinâmico na região proibida.

Muitos métodos vem sendo desenvolvidos e estudados para tratar, microscopicamente, a dinâmica na região proibida, porém a maioria destes métodos estão restritos a tratamentos unidimensionais(via teorias de campo médio autoconsistente(Hartree Fock Dependente do Tempo Adiabática(HFDTA), ou Hartree Fock com Vínculo(HFV)).

Estas teorias desprezam os efeitos dos acoplamentos com os outros graus de liberdade(não coletivos),[8]. Isto, porque os tratamentos de tunelamento baseados em teorias autoconsistentes(de campo médio), buscam extrair da superfície de energia do sistema, uma trajetória de tunelamento.

A extração da trajetória, desta forma, depende da imposição de critérios físicos. Estes critérios são implementados, nas várias teorias, fazendo-se prescrições para a dinâmica local do sistema.

No capítulo II, estas teorias para a extração de trajetórias coletivas serão apresentadas. Como vamos observar, estas teorias trazem diferentes prescrições para a obtenção da trajetória coletiva e só fornecem uma solução única para a trajetória de tunelamento, quando o grau de liberdade coletivo for exatamente desacoplado.

Estes acoplamentos com os outros graus de liberdade modificam as probabilidades de tunelamento, já que uma consequência direta destes acoplamentos é a criação de uma hamiltoniana efetiva(i. é, os acoplamentos modificam tanto a massa como a barreira de potencial, modificando assim a probabilidade de tunelamento[1]).

Recentemente um modelo foi proposto[10], para estudar estas teorias para movimentos coletivos de grande amplitude. O modelo consiste de um grau de liberdade coletivo(associado a fissão), acoplado a um conjunto de osciladores harmônicos não acoplados( que representam, de algum modo, os graus de liberdade não coletivos). Motivados por esta discussão e pelo trabalho de Makri e Miller[13], vamos estudar um método diferente de atacar o problema.

Este método, que consiste em obter uma hamiltoniana efetiva para o sistema, onde os acoplamentos são levados em conta explicitamente( e, deste modo, estaríamos resolvendo o problema de tunelamento multidimensional), será apresentado no capítulo III. Aí também apresentamos a base de gaussianas localizadas(BGL)[14,15], que utilizamos para a diagonalização da hamiltoniana efetiva.

A apresentação do modelo e a solução do problema, que consiste em obter a separação de energia(quebra de degenerescência devido ao tunelamento da barreira), utilizando a metodologia apresentada no capítulo III, é apresentada no capítulo IV.

Para finalizar, no capítulo V, apresentamos nossos resultados, e comparamos com os exatos, HFV e tempo imaginário[10], e aqueles obtidos via trajetória de Vale[11], e tecemos alguns comentários e conclusões.

## II

## II - Teorias de Campo Médio

Este capítulo é destinado ao estudo das teorias de campo médio e das várias prescrições utilizadas para a obtenção de hamiltonianas coletivas. (Obs.: quando estas hamiltonianas possuem um único grau de liberdade, são chamadas trajetórias coletivas)

## 2.1 - Teoria de Hartree Fock Dependente do Tempo (HFDT)

Nesta teoria [6-8], as equações de HFDT podem ser geradas do princípio de mínima ação quântico,

$$\int \langle \Phi(t) | \hat{H} - i \partial_t | \Phi(t) \rangle dt = 0, \quad (\text{II-1})$$

( $\hbar=1$ ), onde  $\hat{H}$  é uma hamiltoniana genérica de muitos corpos

$$H = \sum_i T_i + \sum_{ij} V_{ij},$$

( $V_{ij}$  é uma interação genérica de dois corpos), e os estados variacionais  $|\Phi(t)\rangle$  são determinantes de Slater. É possível obter uma parametrização biunívoca para os

determinantes de Slater (i.é, pontos no espaço de parâmetros  $\longrightarrow$  determinantes de Slater), de tal modo que estes parâmetros estarão associados aos modos de excitação do sistema (graus de liberdade). Vamos então supor que exista uma parametrização tal que os determinantes de Slater possam ser escritos como

$$|\phi(t)\rangle \equiv |\phi(\vec{q}, \vec{p})\rangle, \quad (\text{II-2})$$

onde

$$\vec{q} = q^1, q^2, \dots, q^N \quad ; \quad \vec{p} = p_1, p_2, \dots, p_N,$$

e cada par  $(q^i, p_i)$  está associado a um modo de excitação do sistema.

Substituindo (II-2) em (II-1), obtemos

$$\delta \langle \phi(\vec{q}, \vec{p}) | \hat{H} + \sum_c \dot{p}_c \hat{Q}^c(\vec{p}, \vec{q}) - \sum_c q^c \hat{P}_c(\vec{p}, \vec{q}) | \phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle = 0, \quad (\text{II-3.a})$$

onde

$$\hat{Q}^c | \phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle = -i \frac{d}{dp_c} | \phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-3.b})$$

e

$$\hat{P}_c | \phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle = i \frac{d}{dq^c} | \phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-3.c})$$

são geradores infinitesimais no espaço de parâmetros.

Vamos agora efetuar a variação na eq.(II-3.a)

$$\frac{d}{dq^i} \rightarrow \frac{d\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p})}{dq^i} = -\dot{p}_i \frac{d}{dq^i} \langle \hat{Q}^i \rangle + \dot{q}^i \frac{d}{dq^i} \langle \hat{P}_i \rangle, \quad (\text{II-4.a})$$

$$\frac{d}{dp_i} \rightarrow \frac{d\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p})}{dp_i} = -\dot{p}_i \frac{d}{dp_i} \langle \hat{Q}^i \rangle + \dot{q}^i \frac{d}{dp_i} \langle \hat{P}_i \rangle, \quad (\text{II-4.b})$$

onde

$$\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) = \langle \Phi(\vec{q}, \vec{p}) | \hat{H} | \Phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle,$$

agora

$$dq^i \langle \hat{Q}^i \rangle = -i \langle \Phi(\vec{p}, \vec{q}) | \vec{\partial}_{q^i} \vec{\partial}_{p_i} - \vec{\partial}_{p_i} \vec{\partial}_{q^i} | \Phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-5.a})$$

$$dq^i \langle \hat{P}_i \rangle = i \langle \Phi(\vec{q}, \vec{p}) | \vec{\partial}_{q^i} \vec{\partial}_{q^i} - \vec{\partial}_{q^i} \vec{\partial}_{q^i} | \Phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-5.b})$$

$$dp_i \langle \hat{Q}^i \rangle = -i \langle \Phi(\vec{q}, \vec{p}) | \vec{\partial}_{p_i} \vec{\partial}_{p_i} - \vec{\partial}_{p_i} \vec{\partial}_{p_i} | \Phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-5.c})$$

$$dp_i \langle \hat{P}_i \rangle = i \langle \Phi(\vec{q}, \vec{p}) | \vec{\partial}_{p_i} \vec{\partial}_{q^i} - \vec{\partial}_{q^i} \vec{\partial}_{p_i} | \Phi(\vec{q}, \vec{p}) \rangle, \quad (\text{II-5.d})$$

onde

$$\partial_{q^i} = \frac{d}{dq^i} \quad ; \quad \partial_{p_i} = \frac{d}{dp_i}.$$

As equações (II-5) podem ser escritas como (ver as eqs. (II-3.b) e (II-3.c))

$$d q^i \langle \hat{Q}^i \rangle = -i \langle \Phi | [\hat{P}_i, \hat{Q}^i] | \Phi \rangle, \quad (\text{II-6.a})$$

$$d p^i \langle \hat{P}_i \rangle = -i \langle \Phi | [\hat{Q}^i, \hat{P}_i] | \Phi \rangle, \quad (\text{II-6.b})$$

$$d p^i \langle \hat{Q}^i \rangle = i \langle \Phi | [\hat{P}_i, \hat{P}_i] | \Phi \rangle, \quad (\text{II-6.c})$$

$$d p^i \langle \hat{P}_i \rangle = i \langle \Phi | [\hat{P}_i, \hat{Q}^i] | \Phi \rangle. \quad (\text{II-6.d})$$

Os geradores  $\hat{Q}$  e  $\hat{P}$  podem ser construídos de tal forma que obedecem às seguintes regras de comutação (ver ref. 8):

$$\langle \Phi | [\hat{Q}^i, \hat{P}_j] | \Phi \rangle = i \delta_j^i, \quad (\text{II-7.a})$$

$$\langle \Phi | [\hat{Q}^i, \hat{Q}^j] | \Phi \rangle = 0, \quad \forall i, j, \quad (\text{II-7.b})$$

$$\langle \Phi | [\hat{P}_i, \hat{P}_j] | \Phi \rangle = 0, \quad \forall i, j. \quad (\text{II-7.c})$$

(Obs.: É importante observar que as regras de comutação (II-7) são obedecidas se o espaço de fases possui a estrutura simplética (i.é, uma estrutura de espaço de fases clássico (ver caps. 3 e 4 da ref. [8]).

Deste modo, as equações de movimento são



$$\dot{p}_c = - \frac{\partial \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p})}{\partial q^c}, \quad (\text{II-8.a})$$

$$\dot{q}^c = \frac{\partial \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p})}{\partial p_c}, \quad (\text{II-8.b})$$

i.é, quando as equações de HFDT são escritas em termos dos parâmetros (para determinantes de Slater parametrizados apropriadamente), elas são equações de Hamilton.

Devemos observar também que a equação variacional (II-3.a), tem a forma de uma equação variacional com vínculo. Entretanto devemos enfatizar que se a parametrização dos determinantes de Slater for completa(i.é,cada grau de liberdade está associado a um par( $q^i$ ,  $p_i$ )), esta equação não possui aproximações.

Na medida em que não fizemos hipóteses restritivas(e o teorema de Thoulees garante a estrutura simplética[7,8]), a fora a de que nos restringimos a dinâmica de um corpo, as equações de HFDT nos dão, a princípio, a dinâmica de todos os graus de liberdade.

Se estivermos interessados em um particular grau de liberdade (o coletivo associado a fissão, por exemplo), deve-se impor critérios que permitam a extração deste grau de liberdade. Apesar de que muitas vezes é possível(impondo critérios físicos), extrair, por meio de transformações de coordenadas(transformações canônicas), o par ( $q^c, p_c$ ), associado ao modo coletivo, não se pode garantir, a princípio, que o sistema uma vez inicializado com posição e momento coletivos, evolua sempre no plano de fase( $q^c, p_c$ ), já que a dinâmica, governada pela hamiltoniana clássica pode, através dos acoplamentos, lançar o sistema para fora do plano ( $q^c, p_c$ ). Em outras palavras, a coordenada(ou trajetória), coletiva  $q^c$  não é, obrigatoriamente, solução das equações de HFDT.

Deste modo, deve-se partir para esquemas que permitam obter a trajetória coletiva, e tratar os acoplamentos posteriormente, ao menos de forma aproximada\*.

Na literatura, sugeriu-se três prescrições para a obtenção de trajetórias coletivas (de forma auto-consistente), para hamiltonianas  $H(q,p)$  quadráticas nos momentos.

## 2.2 - Trajetórias Coletivas

As teorias para trajetórias coletivas buscam extrair um modo maximalmente desacoplado que possua características coletivas. As condições de desacoplamento podem ser derivadas a partir da análise local da hamiltoniana, até segunda ordem nos momentos e coordenadas.

Se

$$\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{2} B^{ab}(\vec{q}) p_a p_b + V(\vec{q}), \quad (\text{II-9})$$

(com soma nos índices repetidos), a expansão em torno de um ponto  $\vec{q}_0$  (genérico), e um momento  $\vec{p}=0$ , até segunda ordem, nos dá

$$\mathcal{H}_{\text{local}}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{2} B^{ab}(\vec{q}_0) p_a p_b + (q^a - q_0^a) \frac{\partial V(\vec{q}_0)}{\partial q^a} + \frac{1}{2} (q^a - q_0^a) V_{a,b}(\vec{q}_0) (q^b - q_0^b) + \mathcal{O}(\vec{q}^3) \quad (\text{II-10})$$

( $V_{a,b}$  é a derivada segunda covariante do potencial).

Agora, pode-se fazer prescrições, a fim de obter uma dinâmica desacoplada localmente (i.é, na vizinhança do ponto  $\vec{q}_0$ ).

\* O Potencial  $V(q)$  é uma superfície multidimensional de energia sobre a qual se procura uma trajetória que descreva da melhor forma possível o modo coletivo (Ver fig (IV-3)).

Vamos primeiro tomar a hamiltoniana local em primeira ordem nas coordenadas

$$H_{\text{local}}(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{1}{2} B^{\alpha\beta}(\vec{q}_0) p_\alpha p_\beta + (q^\alpha - q_0^\alpha) \partial_{q^\alpha} V(\vec{q}_0), \quad (\text{II-11})$$

onde

$$\partial_{q^\alpha} = \frac{\partial}{\partial q^\alpha},$$

e prescrever:

i)- o tensor de massa

$$B^{\alpha c}(\vec{q}_0) = 0; \quad (\alpha \neq c),$$

(onde  $c$  é o índice associado ao modo coletivo);

ii)- o gradiente do potencial  $(\partial_{q^\alpha} V)$  é tal que

$$\partial_{q^\alpha} V(\vec{q}_0) = 0; \quad (\alpha \neq c).$$

Isto é, o tensor de massa  $\hat{B}$  não acopla o grau de liberdade coletivo com os restantes e a força  $(\partial_{q^\alpha} V)$ , só tem componentes na direção da coordenada coletiva.

Isto gera a seguinte equação para coordenadas coletivas

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial X^0} = \frac{M^{\frac{1}{2}}}{F} B^{\alpha\beta} \partial_{q^\alpha} V(\vec{q}_0), \quad (\text{II-12})$$

$M$  é definido por

$$B^{\alpha\beta} M_{\beta\gamma} = \delta_{\gamma}^{\alpha}, \quad (\text{II-13})$$

( $M_{\beta\gamma}$  é o tensor de massa inverso de  $B^{\alpha\beta}$ ),  $F$  é o módulo do gradiente

$$F = [B^{\alpha\beta} \partial q^{\alpha} V(\vec{q}_0) \partial q^{\beta} V(\vec{q}_0)], \quad (\text{II-14})$$

e  $X^0(q)$  descreve a curva cujo vetor tangente é paralelo ao gradiente do potencial e corresponde, em cada ponto, a um dos eixos coordenados locais. Esta trajetória é denotada Linha de Força. A coletividade é, neste caso, definida por condições iniciais, e toma-se por hipótese, que o gradiente(força), que usualmente leva a um ponto de mínimo, é sempre tangente a trajetória. Num processo de fissão com energia acima da barreira, por exemplo, leva do ponto de sela ao ponto de mínimo

Na segunda prescrição para trajetória, toma-se uma extensão para pontos fora de equilíbrio da teoria de RPA(Random Phase Approximation). No contexto da Física Nuclear, os modos de RPA estão associados às excitações harmônicas do sistema na vizinhança de um ponto de equilíbrio(estado de Hartree-Fock). Os modos de RPA são, neste contexto, os modos normais, que no formalismo apresentado são obtidos pela resolução da hamiltoniana quadrática na vizinhança do ponto de equilíbrio. O grau de liberdade coletivo é, usualmente, associado ao modo de frequência mais baixa. A extensão desta teoria para pontos fora do equilíbrio pode então ser efetuada, obrigando-se o sistema a evoluir sempre na direção do modo de frequência mais baixa, o que leva a seguinte equação para a trajetória

$$\sum_{\beta\gamma} B^{\alpha\beta} V_{\beta\gamma} \frac{\partial q^{\gamma}}{\partial t} = \Omega \frac{\partial q^{\alpha}}{\partial t}, \quad (\text{II-15})$$

onde  $\partial q^{\alpha} / \partial S$  é uma componente do vetor tangente a curva e  $\Omega$  é o autovalor associado à frequência mais baixa. Esta curva (trajetória), é denotada Linha de Modos Normais.

Uma análise das duas trajetórias anteriores em conjunto com a hamiltoniana local nos leva à terceira trajetória. Nesta, a junção das duas hipóteses nos leva a um desacoplamento maximal, isto é, a hipótese de que a força é paralela ao modo local de frequência mais baixa e leva a um grau de liberdade desacoplado. Esta trajetória corresponde a um vale numa superfície multidimensional e tem como equação (esta denotada Linha de Vale),

$$B^{\alpha\gamma} X_{\gamma} V_{\alpha j \beta} B^{\beta\epsilon} \partial q^{\epsilon} V(\vec{q}^0) = 0. \quad (\text{II-16})$$

Pode-se mostrar que, se houver um modo coletivo exatamente desacoplado [8], estas teorias coincidem (isto é, são equivalentes).

Esta última trajetória foi investigada no modelo de Arve e seus colaboradores [10], por Bulgac e seus colaboradores [11] (os resultados são apresentados no cap. V).

Visto que em cálculos realísticos, é muitas vezes proibitiva a utilização de teorias para trajetórias obtidas de forma autoconsistente, procura-se obter trajetórias coletivas de equações de Hartree-Fock com Vínculo (HFV), e, já que é do nosso interesse (ver cap. V), vamos dar uma breve descrição desta teoria. Com este intuito, vamos tomar uma hamiltoniana genérica do tipo

$$\hat{H} = T_c + V_{c j}. \quad (\text{II-17})$$

Para obter uma equação de trajetória, vamos propor uma função de onda do tipo

$$|\psi\rangle = |\Phi(\hat{q})\rangle, \quad (\text{II-18})$$

$|\Phi(\hat{q})\rangle$  é um determinante de Slater).

Nesta teoria a hamiltoniana de partícula única(s.p.), é obtida tomando o valor esperado da hamiltoniana(eq.(II-17)), em (II-18) e variando  $|\Phi(\hat{q})\rangle$ .

A equação de trajetória é obtida pela variação da hamiltoniana de s.p. vinculada(via multiplicadores de Lagrange), a operadores coletivos( $\hat{Q}_c$ ). Deste modo, os estados variacionais podem ser parametrizados através de um ou mais operadores coletivos. Por exemplo o momento de quadrupolo(associado à deformação), e o momento de hexadecapolo(associado a formação do pescoço), no processo de fissão. Assim, tratando a deformação como coordenada coletiva, pode-se obter estados de menor energia associados a cada valor da deformação, através de um cálculo variacional com vínculo

$$\delta \langle \Phi(x) | \hat{H} - \lambda \hat{Q} | \Phi(x) \rangle, \quad (\text{II-19})$$

onde o operador de quadrupolo  $\hat{Q}$ , fixa a deformação

$$x = \langle \Phi(x) | \hat{Q} | \Phi(x) \rangle. \quad (\text{II-20})$$

Estes estados então, permitem a obtenção do potencial coletivo

$$V(x) = \langle \Phi(x) | \hat{H} | \Phi(x) \rangle. \quad (\text{II-21})$$

Para se construir a hamiltoniana coletiva é necessário obter a energia cinética associada a este modo. Para tal pode-se obter a massa através da aproximação "Cranking"(ver cap.11 da ref.[7]). Então o operador de energia cinética é definido como

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{d}{dx} \frac{1}{M(x)} \frac{d}{dx} \right\}, \quad (\text{II-22})$$

onde

$$M(x) = \left[ 2 \langle \phi(x) | \frac{d}{dx} \frac{1}{(H_{op} - E)} \frac{d}{dx} | \phi(x) \rangle \right]. \quad (\text{II-23})$$

Portanto, nesta abordagem também precisamos impor critérios físicos(vínculos), para a obtenção da trajetória coletiva.

Assim, estas trajetórias coletivas podem gerar, sobre a superfície multidimensional de energia, diferentes caminhos, para o sistema evoluir de um mínimo a outro. Portanto o potencial (coletivo), associado a cada trajetória será diferente, e estamos obrigados a escolha de um particular. Esta escolha implica em um potencial cuja altura e largura(da barreira), não são necessariamente as reais. Além deste, temos ainda o problema de que os acoplamentos com os outros graus de liberdade, que são desprezados nestas teorias, influenciam a probabilidade de tunelamento, o que poderia ser traduzido como uma modificação na barreira, ou seja, a criação de um potencial efetivo.

Visto que estas trajetórias coletivas podem gerar diferentes potenciais e massas coletivas, elas podem gerar diferentes probabilidades de tunelamento, o que pode ser visto no cálculo desta probabilidade pelo método W.K.B.[1]. Nesta teoria o "splitting" é determinado por

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\pi} \exp \left\{ - \int p dq \right\}, \quad (\text{II-24})$$

onde

$$p = [2M(q)(E - V(q))]^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{II-25})$$

e  $\omega$  é a frequência angular clássica na região permitida.

A exponencial aparecendo na equação(II-24), é usualmente denotada como Penetrabilidade da Barreira na aproximação W.K.B.[1].

A menos que se tenha uma trajetória coletiva ótima, todas as trajetórias podem ser consideradas como uma primeira aproximação, e somente quando se tem um modo coletivo exatamente desacoplado os potenciais obtidos correspondem às barreiras dinâmicas. Estas barreiras dinâmicas levam em conta os acoplamentos com os outros graus de liberdade durante o processo de tunelamento. Por vezes elas podem ser simuladas por potenciais e massas efetivas.



## III

## Cap. III - O Método e as Bases

A idéia presente na maioria das teorias para movimentos coletivos (fissão por exemplo), é a de que o sistema evolui ao longo de uma calha ou vale (trajetória coletiva), sobre a superfície multidimensional de energia (Na fig. [IV-3], pode-se observar claramente um vale sobre a superfície bidimensional  $V(q,x)$ ), sendo que as coordenadas ortogonais ao fundo da calha estariam associadas aos outros graus de liberdade. Como vimos no capítulo anterior, as várias teorias fornecem, separadamente, trajetórias coletivas diferentes, cada uma desprezando, de algum modo, os acoplamentos com os graus de liberdade não coletivos.

Estes graus de liberdade ortogonais (não coletivos), podem (como discutimos no capítulo anterior), gerar potenciais efetivos que modificam as probabilidades de tunelamento. Por outro lado, eles podem ser tratados, ao menos na vizinhança da trajetória coletiva, como osciladores harmônicos ortogonais (não acoplados). Isto nos permitiria descrever a dinâmica como

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \left[ \frac{1}{2m_{\alpha}} p_{\alpha}^2 + \frac{c_{\alpha}}{2} q_{\alpha}^2 \right] + \frac{1}{2M(x)} \Pi^2 + V(x) + \sum_{\alpha} q_{\alpha} K(x), \quad (\text{III-1})$$

onde  $(q_{\alpha}, p_{\alpha})$ , estão associados aos modos ortogonais mencionados acima,  $(\Pi, X)$  ao modo coletivo e o último termo envolve o acoplamento dos diversos graus de liberdade com o grau coletivo.

A presença dos acoplamentos implica que tratamentos do tipo W.K.B., onde apenas a hamiltoniana coletiva

$$H_{col} = \frac{1}{2M(x)} \pi^2 + V(x), \quad (\text{III-2})$$

é levada em conta, desprezam termos que não necessariamente são desprezíveis. Em outras palavras, trajetórias coletivas para modos não exatamente desacoplados não fornecem rigorosamente uma resposta única para o problema de tunelamento multimensional.

Deste modo a presença dos acoplamentos afeta a probabilidade de tunelamento, o que poderia ser simulado através de uma hamiltoniana efetiva

$$H_{ef} = \frac{1}{2M_{ef}} \pi^2 + V_{ef}(x). \quad (\text{III-3})$$

Neste trabalho vamos empregar um método, sugerido por Makri e Miller[13], para investigar as diferenças nas probabilidades de tunelamento entre este método e alguns que utilizando equações para trajetórias analisam tunelamento em uma dimensão.

A seguir descrevemos o método.

### III.1 - O Método

A essência do método proposto por Makri e Miller[13], é formular uma prescrição para somar os efeitos dos modos ortogonais à trajetória, de forma a obter uma hamiltoniana efetiva. Com este fim, eles propõe um "ansatz" para a função de onda do tipo

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle, \quad (\text{III-4.a})$$

$$|\varphi_{\alpha}^i\rangle = \prod_{\alpha} |\varphi_{i\alpha}^i\rangle, \quad (\text{III-4.b})$$

onde  $(\Phi_i)$  depende apenas da coordenada coletiva e  $(\varphi_{i\alpha}^i)$  é uma função de onda de um oscilador harmônico deslocado, obtida como segue.

Com o auxílio das funções de onda  $(\Phi_i)$ , pode-se obter a seguinte hamiltoniana, restrita às coordenadas ortogonais (ver eq. (III-1))

$$H(q_{\alpha}) = \frac{1}{2m_{\alpha}} p_{\alpha}^2 + \frac{c_{\alpha}}{2} q_{\alpha}^2 + \langle \Phi_i | K(x) | \Phi_i \rangle q_{\alpha} + \langle \Phi_i | H_{col} | \Phi_i \rangle, \quad (\text{III-5})$$

$H(q) = \sum_{\alpha} H(q_{\alpha})$ , que é claramente a hamiltoniana de um oscilador harmônico deslocado, cujas funções de onda são dadas por

$$\varphi_{i\alpha}^i(q_{\alpha} - K^i) = e^{-\frac{1}{2}(q_{\alpha} - K^i)^2} H_{i\alpha}(q_{\alpha} - K^i), \quad (\text{III-6})$$

e

$$K^i = \langle \Phi_i | K(x) | \Phi_i \rangle. \quad (\text{III-7})$$

Obviamente, a função de onda  $(\varphi_{i\alpha}^i)$  depende do particular estado  $(\Phi_i)$  escolhido.

Daí a origem do supra índice em  $(\varphi_{i\alpha}^i)$ .

Deste modo, a base para o sistema total será

$$\Psi_{i\alpha}(x, \vec{q}) = \Phi_i(x) \prod_{\alpha} \varphi_{i\alpha}^i(q_{\alpha} - K^i), \quad (\text{III-8})$$

e os elementos de matriz para a hamiltoniana (eq. (III-1)), nesta base, serão dados por (por enquanto a base  $(\Phi_i)$  é genérica),

$$H_{\alpha, \alpha}^{c, j} = \left( \frac{\pi}{\alpha} \langle \phi_{\alpha}^c | \phi_{\alpha}^j \rangle \right) \left\{ H_{c0l}^{c, j} + \sum_{\alpha} \langle \phi_i | \phi_j \rangle \left( \omega_{\alpha} + \frac{1}{2} + \frac{\kappa^c \kappa^j}{2} \right) \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} (\kappa^c + \kappa^j) \kappa^j + \sum_{\alpha} \frac{(\kappa^c + \kappa^j)}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\omega_{\alpha}} \frac{\langle \phi_{\alpha}^c | \phi_{\alpha}^j \rangle}{\langle \phi_{\alpha}^c | \phi_{\alpha}^c \rangle} + \sqrt{\omega_{\alpha}} \frac{\langle \phi_{\alpha}^c | \phi_{\alpha}^j \rangle}{\langle \phi_{\alpha}^c | \phi_{\alpha}^c \rangle} \right] \right\}, \quad (\text{III-9})$$

onde

$$H_{c0l}^{c, j} = \langle \phi_i | H_{c0l} | \phi_j \rangle, \quad (\text{III-10.a})$$

$$\kappa^{c, j} = \langle \phi_i | \kappa(x) | \phi_j \rangle, \quad (\text{III-10.b})$$

e

$$\kappa^c = \kappa^j \delta_{c, j}, \quad (\text{III-11})$$

(ver apêndice A-2).

Já que o ansatz para a função de onda é geral, a equação (III-9) não possui aproximações. Por outro lado, esta também não fornece nenhuma simplificação, porque para resolver o problema, precisaríamos diagonalizar esta matriz inteira.

A proposta de Makri e Miller[13], é então, tomar como hamiltoniana efetiva do sistema (na aproximação de ordem zero), a parte da equação (III-9), que é diagonal nos números quânticos dos osciladores, i.é.

$$H_{\alpha, \alpha}^{c, j} = H_{c0l, \alpha}^{c, j} \delta_{\alpha, \alpha}, \quad (\text{III-12})$$

e para a matriz hamiltoniana efetiva, temos então

$$H_{\alpha}^{ij} = F_{\alpha}^{ij} \{ H_{\alpha}^{ij} + [\sum_{\alpha} (\omega_{\alpha} + \frac{1}{2}) + \frac{\kappa^i \kappa^j}{2}] \langle \phi_i | \phi_j \rangle - \frac{1}{2} (\kappa^i + \kappa^j) \kappa^{ij} \}, \quad (\text{III-13})$$

Os coeficientes ( $F_{\alpha}^{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ ), que aparecem na equação (III-13) são denominados fatores de Frank-Condon (FC), cuja forma é (ver apêndice A-I)

$$F_{\alpha}^{ij} = \pi \sum_{R, d=0}^{\omega_{\alpha}} (-2)^{\omega_{\alpha}-d} \frac{(\Delta_{ij}^R)^{2(\omega_{\alpha}-d)}}{d! [\omega_{\alpha}-d!]^2} \exp[-(\Delta_{ij}^R)^2] \quad (\text{III-14})$$

onde

$$\Delta_{ij}^R = \frac{1}{2} (\kappa_{\alpha}^i - \kappa_{\alpha}^j),$$

e, obviamente, carregam uma grande contribuição dos acoplamentos.

Aqui devemos enfatizar que os acoplamentos entre os graus de liberdade já estão sendo levados em conta no próprio ansatz. Neste sentido ele difere da forma usual e a escolha da base ( $\phi_i$ ) torna-se crucial.

Com o objetivo de compreender melhor esta prescrição, vamos separar a matriz (III-13) em suas partes diagonal (na base ( $\phi_i$ )),

$$H_{\alpha}^{ii} = H_{\alpha}^{ii} + \sum_{\alpha} (\omega_{\alpha} + \frac{1}{2}) - (\frac{\kappa^i}{2})^2, \quad (\text{III-15})$$

e não diagonal

$$H_{\alpha}^{ij} = F_{\alpha}^{ij} \{ H_{\alpha}^{ij} + [\sum_{\alpha} (\omega_{\alpha} + \frac{1}{2}) + \frac{\kappa^i \kappa^j}{2}] \langle \phi_i | \phi_j \rangle - \frac{1}{2} (\kappa^i + \kappa^j) \kappa^{ij} \}. \quad (\text{III-16})$$

Aqui, poderíamos ficar tentados a escolher a base  $(\phi_i)$  para ser aquela que diagonaliza a hamiltoniana coletiva. Neste caso, teríamos

$$H_{\vec{\alpha}}^{ii} = H_{e0l}^{ii} + \sum_{\alpha} (\omega_{\alpha} + \frac{1}{2}) - \frac{K_i^2}{2}, \quad (\text{III-17.a})$$

e

$$H_{\vec{\alpha}}^{i+j} = F_{\vec{\alpha}}^{ij} \left[ -\frac{1}{2} (\kappa^i + \kappa^j) K^{ij} \right], \quad (\text{III-17.b})$$

e podemos observar claramente que uma escolha deste tipo despreza algum efeito dos acoplamentos. Ainda devemos lembrar que uma escolha deste tipo nos limita a sistemas cujos termos de acoplamento possuam elementos diagonais na base coletiva (i.é,  $K_{ij} \neq 0$ ), o que não necessariamente é verdadeiro para qualquer sistema. No caso de o acoplamento não possuir termos diagonais, precisamos incluir, perturbativamente, termos de ordem superior[13], (isto é, deveríamos considerar as transições para estados  $n' \neq n$  dos osciladores).

Deste modo a escolha da base  $(\phi_i)$  é guiada, não como usualmente para ser aquela dos estados coletivos, mas sim para preservar os efeitos dos acoplamentos na hamiltoniana efetiva, já na aproximação de ordem zero.

A sugestão de Makri e Miller[13], é usar uma base não ortogonal localizada (Base de Gaussianas Reais Localizadas), que apresentaremos na próxima seção.

Como em qualquer esquema aproximativo, este também apresenta uma perda de generalidade, e este talvez seja o aspecto mais dramático desta aproximação. Podemos observar que a hamiltoniana efetiva eq.(III-13), depende das funções  $(\phi_i)$  via os parâmetros  $K_j$ , e deste modo, uma modificação nestas funções implica em uma mudança no sistema efetivo. Isto é, uma transformação linear na base  $(\phi_i)$

$$\Phi_i = \sum_j \chi_j U_{ij}, \quad (\text{III-18})$$

não leva a uma transformação unitária da hamiltoniana efetiva eq.(III-13), i.é,

$$H_{\alpha}^{ij} \neq \sum_{Rm} U_{im}^{\dagger} H_{\alpha}^{mR} U_{Rj}. \quad (\text{III-19})$$

Esta perda de unitariedade para a hamiltoniana efetiva implica que seus autovalores dependem da particular escolha da base. Por outro lado, é possível recuperar esta importante propriedade, retornando para o sistema total(i.é, para matriz completa do sistema), desde que a base (  $\Phi_i$  ) seja completa.

Concluindo, o procedimento acima descrito nos fornece uma hamiltoniana efetiva que leva em conta, explicitamente, os efeitos dos acoplamentos. Devemos ressaltar que a teoria de Makri e Miller permite um tratamento em todas as ordens, e a aproximação de ordem zero é um caso particular, onde incorpora-se mais acoplamentos do que no tratamento susal.

A seguir vamos estudar a Base de Gaussianas Localizadas(BGL).

### III.2 - Base de Gaussianas Localizadas(BGL)

Em 1985, I.P. Hamilton e J.C. Light[14], motivados no trabalho de M.J. Davis e E.J. Heller[15]( este trabalho traz uma proposta de utilização de Bases de Gaussianas Complexas, cujas localizações sobre as trajetórias clássicas do espaço de fases está fundamentada em argumentos semiclássicos), propuseram a utilização de Bases de Gaussianas Reais Localizadas(BGL), também sobre argumentos semiclássicos, para resolver problemas variacionais(ou de campo médio autoconsistente), de estados vibracionais.

Nesta seção vamos apresentar a proposta dos autores e discutir alguns aspectos desta base.

Porém, antes de apresentar a BGL, vamos discutir algumas implicações de se utilizar bases não ortogonais.

Vamos supor que desejamos diagonalizar um operador hermitiano  $\hat{H}$  (qualquer), em uma base não ortogonal. Neste caso o problema de autovalores difere da forma usual, i.é,

$$\hat{H}\hat{U} = \hat{S}\hat{U}\hat{E}, \quad (\text{III-20})$$

(onde  $\hat{U}$  e  $\hat{E}$  são as matrizes de autovetores e autovalores de  $\hat{H}$ , respectivamente, e  $\hat{S}$  é a matriz "overlap"), e deste modo somos obrigados a diagonalizar a matriz "overlap" primeiro. Agora, se  $\hat{T}$  é a matriz que diagonaliza  $\hat{S}$  ( $\hat{T}^* \hat{T} = \hat{T} \hat{T}^* = \hat{1}$ ), então

$$\hat{S}_d = \hat{T}^* \hat{S} \hat{T}, \quad (\text{III-21})$$

e podemos escrever a equação (III-20) como

$$\hat{H} \hat{T}^* \hat{U} = \hat{S}_d \hat{T}^* \hat{U} \hat{E}, \quad (\text{III-22})$$

( $\hat{H} = \hat{T}^* \hat{H} \hat{T}$ ). Decompondo  $\hat{S}_d = \hat{\tilde{S}}_d^{\dagger} \hat{\tilde{S}}_d$ , o problema de autovalores será então

$$\hat{\tilde{H}} \hat{V} = \hat{V} \hat{E}, \quad (\text{III-23.a})$$

onde

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{S}_d^{-\frac{1}{2}} \hat{H} \hat{S}_d^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{III-23.b})$$



e

$$\hat{V} = \hat{S}_d^{\dagger} \hat{T}^{\dagger} \hat{U}, \quad (\text{III-23.c})$$

e a matriz dos autovetores pode ser obtida invertendo a equação matricial (III-23.c)

$$\hat{U} = \hat{T} \hat{S}_d \hat{V}. \quad (\text{III-24})$$

Portanto, a diagonalização do operador  $\hat{H}$  (qualquer), exige a inversão da matriz dos autovalores do "overlap", e precisamos garantir (ao menos numericamente), a independência linear da base. De outro modo ficamos impedidos de inverter esta matriz (já que a dependência linear implica no aparecimento de autovalores de  $\hat{S}$  nulos).

Para eliminar este problema, a escolha da base (  $\phi_i$  ) deve ser cuidadosa.

A sugestão de Hamilton-Light[14], é

$$\phi_i(x) = \left( \frac{2 A_i}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[ -A_i (x - x_i)^2 \right], \quad (\text{III-26})$$

onde os parâmetros  $A_i$  e  $x_i$  (larguras e centros das gaussianas, respectivamente), devem ser escolhidas seguindo critérios que satisfaçam a física do problema e busquem manter a base de tal forma que ela admita uma representação completa e linearmente independente através das operações descritas acima.

Visando problemas gerais, eles propõe que:

1- os centros das gaussianas estejam dispostos de tal forma que descrevam as autofunções verdadeiras (com seus nodos), de forma suave;

2- a independência linear da base seja garantida por um ajuste das larguras  $A_j$  que seja compatível com o espaçamento.

Vejamos a proposta para espaçamento semiclassico.

Vamos supor que desejamos descrever  $n$  estados ligados de um sistema, utilizando a BGL (eq.(III-26)). Então a função de onda para um determinado estado ( $n$ ), possui ( $n-1$ ) nodos espaçados, semiclassicamente, de tal modo que a ação semiclassica, entre dois nodos é dada por

$$B^i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx, \quad (\text{III-27})$$

onde  $p(x)$  é o momento clássico de uma partícula com energia  $E_n$  em  $x$ . Já que a função de onda deve ser uma combinação linear de gaussianas, precisamos no mínimo, uma função centrada entre dois nodos. Deste modo podemos localizar, semiclassicamente os nodos e então distribuir as funções da base entre os nodos. Se for necessário incluir outras funções para aumentar a precisão dos resultados (i.é, melhorar a descrição do sistema), estas podem ser incluídas também semiclassicamente (ver abaixo).

Vamos então definir a quantidade  $R_L$  ( $\hbar=1$ ),

$$R_L = \frac{1}{\pi} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p(x) dx + \frac{1}{2}, \quad (\text{III-28})$$

onde  $R_L$  é o número de níveis para uma dada energia  $E$  (ver apêndice B.1), e  $x_{\min}$  e  $x_{\max}$  são os pontos de retorno clássicos. Então para o caso  $E=E_n$ ;  $R_L=n+1$ , e os centros das gaussianas podem ser definidos como os  $x_j$  que satisfazem

$$\int_{x_{\min}}^{x_j} p(x) dx = \frac{\pi}{4}, \quad (\text{III-29.a})$$

e

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx = \pi, \quad (\text{III-29.b})$$

ou, para o caso mais geral, onde o número de funções é maior que o número de níveis ( $M > n$ ),

$$\int_{x_{\min}}^{x_L} p(x) dx = \frac{\pi}{4} [(2R_L - 1) / (2M - 1)], \quad (\text{III-30.a})$$

e

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx = \pi [(2R_L - 1) / (2M - 1)], \quad (\text{III-30.b})$$

(ver apêndice B.2)

A referência [14] também traz a proposta de utilização de uma BGL com centros  $x_i$  distribuídos igualmente entre os pontos de retorno clássicos, i.é,

$$x_L = x_{\min} + \Delta x, \quad (\text{III-31.a})$$

e

$$x_i = x_L + (i-1) \Delta x, \quad (\text{III-31.b})$$

onde

$$\Delta x = (x_{\max} - x_{\min}) / (m+1),$$

e  $m$  é o número de funções que desejamos utilizar.

Agora para completar a especificação da base, ainda precisamos escolher as larguras  $A_i$ . Assim se desejamos uma boa base(localizada), para descrever  $n$  estados ligados de um sistema, esta deve ser capaz de fornecer funções de onda suaves(em outras palavras, já que vamos localizar o pacote, os elementos de matriz da Energia Cinética não devem ser muito grandes), e portanto os  $A_i$  devem ser pequenos(ver apêndice B.3). Por outro lado, como vimos acima, a base deve ser, ao menos aproximadamente, linearmente independente. Deste modo os  $A_i$  não devem ser muito pequenos.

Assim devemos escolher as larguras  $A_i$  de tal modo a obter um balanço entre os elementos de matriz de Energia Cinética( $A_i$  pequeno), e uma razoável independência linear da base( $A_i$  grande).

A proposta da ref.[14], é escalonar as larguras  $A_i$  através do número  $m$  de funções que serão utilizadas mais um parâmetro livre " $c$ "(que serve para otimizar alguma medida de energia e/ou controlar a independência linear da base),

$$A_L = c^2 / (x_2 - x_1)^2, \quad (\text{III-32.a})$$

$$A_M = c^2 / (x_M - x_{M-1})^2, \quad (\text{III-32.b})$$

$$A_i = 4c^2 / (x_{i+1} - x_{i-1})^2. \quad (\text{III-32.c})$$

Podemos observar que estas definições para as larguras também vão fornecer uma distribuição semiclassical das funções da base via os centros  $x_i$ .

Como já mencionamos no início desta seção, a solução de problemas de autovalores em bases não diagonais exige a diagonalização do "overlap" e a inversão da matriz dos seus autovalores, e deste modo precisamos a garantia de independência linear da base.

Para discutir esta importante propriedade, vamos tomar uma BGL com centros  $x_i$  igualmente espaçados (ver eqs. (III-31) e (III-32)), i.é,

$$\phi_i(x) = \left[ \frac{c^2}{\sqrt{2}\pi} (\omega+1)^2 \right]^{\frac{1}{4}} \exp \left[ -\frac{c^2}{\sqrt{2}} (\omega+1)^2 (x-x_i)^2 \right], \quad (\text{III-33})$$

onde ( $V=x_{\max}-x_{\min}$ ). Assim o overlap será

$$S_{ij}^{(\omega)} = \frac{2c}{V} (\omega+1) \pi^{\frac{1}{2}} \int dx e^{-\frac{c^2}{\sqrt{2}} (\omega+1)^2 [(x-x_i)^2 + (x-x_j)^2]} \quad (\text{III-34})$$

A equação (III-34) pode ser escrita como

$$S_{ij}^{(\omega)} = \alpha \left\{ \frac{\omega}{\sqrt{\pi}} \int dx e^{-\beta u^2 \left[ x - (x_i+x_j)/2 \right]^2} \int e^{-\gamma u^2 (x_i-x_j)^2} \right\} \quad (\text{III-35})$$

onde

$$\alpha = \frac{2c}{V} \pi \quad ; \quad \beta = \frac{2c^2}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \gamma = \frac{c^2}{2\sqrt{2}} \quad (\text{III-36.a})$$

e

$$u = \omega + \frac{1}{2}. \quad (\text{III-36.b})$$

Agora no limite onde o número  $n$  de funções tende a infinito ( $n \rightarrow \infty$ ), as exponenciais que aparecem na integral da eq. (III-35), podem ser consideradas como uma sequência delta [16], centradas em  $(x_i + x_j)/2$ , i. é,

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \left[ \frac{u}{\sqrt{\pi}} \int dx e^{-u^2 [\sqrt{B}(x - (x_i + x_j)/2)]^2} \delta(x - (x_i + x_j)/2) \right] \quad (\text{III-37})$$

Deste modo, para  $n$  finito teremos

$$S_{ij}^{(u)} = F(|i-j|, c^2), \quad (\text{III-38})$$

mas a medida que  $n$  cresce o overlap aproxima-se do overlap de funções delta isoladas, centradas sobre  $(x_i + x_j)/2$

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \langle \phi_i | \phi_j \rangle u \exp[-c^2(i-j)^2] \delta(x - (x_i + x_j)/2). \quad (\text{III-39})$$

Deste modo o overlap  $S_{ij}$  tende a zero exponencialmente com  $|i-j|$ . Agora devemos lembrar que apesar de que os elementos de matriz  $S_{ij}$  não dependem de  $n$ , os autovalores de  $S$  dependem, já que a sua dimensão é  $n \times n$ . Porém, como vimos, para esta base, podemos aumentar o número de funções e as definições para os centros e larguras garantem autovalores de  $S$  diferentes de zero (i.é,  $S$  continua positiva definida, para um dado  $c$  fixo).

Portanto a BGL parece ser completa, ao menos na região de interesse (i.é, sobre os números racionais  $x_j$ ), e não formalmente supercompleta. Hamilton-Light[14], ainda sustentam que os argumentos acima se aplicariam para qualquer domínio de  $x$  e qualquer distribuição dos  $x_j$ , desde que

$$\lim_{u \rightarrow \infty} |x_i - x_{i+1}| \rightarrow 0, \quad (\text{III-40})$$

porém achamos que estas questões merecem uma investigação mais cuidadosa.

No entanto, para propósitos práticos a BGL é bem comportada[13,14,15 e cap. V deste trabalho]

A seguir vamos aplicar esta prescrição para o Modelo de Arve[10].

## IV

## Cap. IV - A Hamiltoniana Efetiva de Tunelamento

Em 1987 Arve e seus colaboradores[10], propuseram um Modelo a fim de comparar várias prescrições utilizadas(ver cap. V), para estudar tunelamento em sistemas de muitos corpos.

Neste capítulo vamos apresentar este Modelo e a obtenção da Hamiltoniana Efetiva com a aplicação da proposta apresentada no capítulo III.

## IV-1 - O Modelo

Um modelo, para ser utilizado na comparação de teorias diferentes, deve ser simples o suficiente para que se possa encontrar sua solução exata. Além disso, para permitir uma representação de tunelamento, deve simular mínimos isolados por regiões de barreira. Para preencher estes requisitos, os autores propuseram[10], um modelo cuja hamiltoniana, que governa a dinâmica de N partículas distinguíveis, cada uma possuindo uma coordenada contínua  $q_i$  (que simula a dependência dos estados de s.p. sobre a posição), mais uma coordenada intrínseca(de spin), é dada por

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (q_i^2 + p_i^2) + K \sum_{i,j=1}^N q_i G_T(i,j) + \lambda \sum_{i,j=1}^N \sigma_x(i) G_X(i,j) , \quad (IV-1)$$



Os primeiros dois termos à direita da equação (IV-1), representam a hamiltoniana de Hartree (uma parte de oscilador de um corpo, mais uma parte de dois corpos que acopla a coordenada  $q$  ao spin). O último termo, é a interação residual, incluída para quebrar a simetria dos estados de Hartree.

Este modelo é uma generalização do modelo de Lipkin[12], estendido para incluir uma dependência contínua sobre a posição.

Para compreender um pouco melhor o modelo (eq. IV-1), vamos denotar  $M$  o valor médio do spin total na direção  $z$  ( $\sum_i \sigma_i^z$ ). Deste modo sem interação residual,  $M$  é um bom número quântico, e a hamiltoniana de Hartree será dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \left( \frac{1}{2} (q_i^2 + p_i^2) + KM q_i \right). \quad (\text{IV-2})$$

A equação (IV-2) é a hamiltoniana para  $N$  osciladores harmônicos deslocados, não acoplados. Portanto, os estados de s.p. serão

$$\phi_i^{\nu} (Q_i) = \langle \nu | H_i | \nu \rangle e^{-\frac{1}{2} (q_i + KM)^2}, \quad (\text{IV-3})$$

isto é, para um dado  $M$ , os estados de s.p. serão estados produtos das funções de oscilador deslocado. A energia para estes estados é dada por

$$\begin{aligned} \prod_i \langle M, \nu_i | H | M, \nu_i \rangle &= \prod_i \langle \nu_i | \sum_j \frac{1}{2} (p_j^2 + q_j^2) | \nu_i \rangle - K^2 M^2 / 2 \\ &= \sum_i \nu_i + \frac{N}{2} - \frac{1}{2} N K^2 M^2 \end{aligned} \quad (\text{IV-4})$$

onde

$$Q_j = q_j + KM. \quad (\text{IV-5})$$

Deste modo, o estado de menor energia, para um dado  $M$ , será dado pelo estado fundamental dos osciladores ( $\nu_i = 0$ ), e teremos

$$\Pi_i \langle M, \nu_i = 0 | H | M, \nu_i = 0 \rangle = \frac{N}{2} - \frac{1}{2} NK^2 M^2. \quad (\text{IV-6})$$

Podemos observar, na eq.(IV-6), que a energia é mínima quando  $|M|$  possui seu valor máximo, e que ela cresce a medida que o  $|M|$  diminui. Isto é, a ocupação de spin providencia a barreira desejada(ver fig. IV.1).

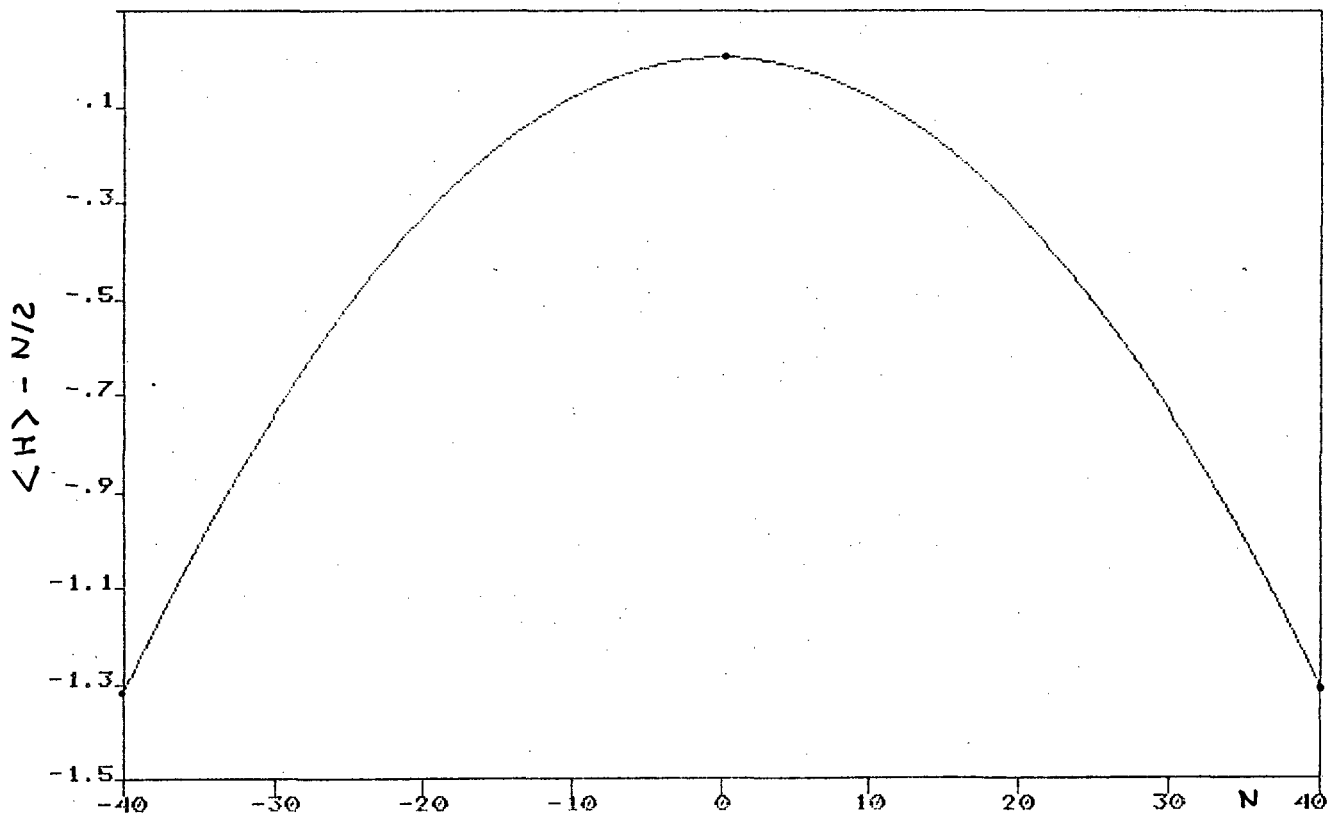


Fig.[IV-1] - Barreira devido a ocupação de spin.

Uma simplificação final pode ser obtida, notando que o movimento interno é desacoplado (somente o centro de massa é acoplado ao spin total), e introduzindo novas variáveis

$$q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i q_i, \quad (\text{IV-7.a})$$

$$p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i p_i, \quad (\text{IV-7.b})$$

e

$$S_j = \frac{1}{2} \sum_i G_j(i), \quad (j = x, y, z), \quad (\text{IV-7.c})$$

obtemos

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) - \sum_{i \neq j} \frac{1}{2}(p_i p_j + q_i q_j) + 2K\sqrt{N} q S_z + 4\lambda S_x^2. \quad (\text{IV-8})$$

Desprezando o segundo termo da equação (IV-8), temos

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + 2K\sqrt{N} q S_z + 4\lambda S_x^2. \quad (\text{IV-9})$$

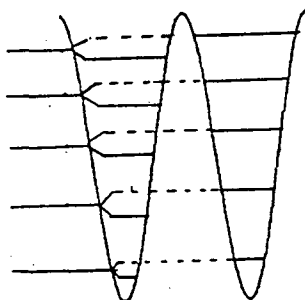
Obs.: Neste trabalho vamos considerar  $N=2J+1$ , onde  $J$  é o valor do momento angular total para a banda de estados que inclui o estado fundamental.

A solução exata foi obtida pelos autores da ref.[10] (Obs.: Os resultados obtidos por Arve para as energias de excitação e respectivos "splittings", conjuntamente com

alguns comentários, são apresentados no cap. V), diagonalizando numericamente a hamiltoniana eq. (IV-9), na base natural da hamiltoniana sem interação residual,

$$|M, \nu\rangle = \langle \psi | (q + \kappa M) | M \rangle, \quad (\text{IV-10})$$

( $\langle \psi$  são os autoestados do oscilador deslocado), e os parâmetros apropriados para tunelamento nuclear em fissão espontânea (ver abaixo). Os autores da ref. [10], encontraram cinco níveis abaixo da barreira (Na fig. IV.2 podemos observar um diagrama esquemático (sem escala), para os cinco níveis abaixo da barreira).



(Fig. IV-2) - Diagrama esquemático (sem escala), dos cinco níveis abaixo da barreira e dos "splittings" de tunelamento

Os parâmetros são escolhidos como segue.

N é escolhido para ter a ordem de grandeza do número de níveis cruzados (num tratamento de HFV), abaixo da barreira ( $\sim 50$ ) [4,6]. Além disso, existem três escalas de energia na hamiltoniana (eq. (IV-9)). A primeira, associada ao movimento de s.p. da hamiltoniana (parte de oscilador), fixa a escala de energia. No problema de fissão espontânea, a frequência de s.p. é identificada com a vibração de quadrupolo gigante ( $\sim 10-15$  Mev). As outras escalas são obtidas para fixar a altura da barreira. Em fissão espontânea ela é da ordem de cinco Mev, e portanto a barreira deve ter uma altura de  $1/2$

Olhando para os elementos diagonais da hamiltoniana (eq. (IV-9)), na base natural (eq. (IV-10)),

$$\langle M, \nu | H | M, \nu \rangle = \nu + \frac{N}{2} - \frac{1}{2} N K^2 M^2 + \lambda N + \frac{\lambda}{2} (N^2 - M^2) \quad (\text{IV-11})$$

observamos que tanto  $\lambda$  quanto  $K$  afetam a altura da barreira. Assim  $K$  é escolhido para fixar a altura da barreira, e  $\lambda$  para simular a energia de um "gap pairing" ( $\sim 2$  Mev), para configurações adjacentes (i.e.,  $M \rightarrow M \pm 2$ ). Assim,  $\lambda$  é escolhido para possuir um valor tal que os elementos não diagonais da interação residual possuam uma ordem de alguns décimos no meio da barreira ( $M = |M^{\max}|/2$ ). Os parâmetros propostos são

$$N = 40 \quad ; \quad K = 6,403 \times 10^{-3} \quad ; \quad \lambda = -5,0 \times 10^{-4} \quad (\text{IV-12})$$

O sinal de  $\lambda$  é escolhido para simular uma interação residual atrativa (já que a interação pairing tende a baixar a energia).

Obs.: É importante frisar que a interação residual  $\lambda \delta_{\lambda}^L$  simula a energia do "gap pairing" e não a interação pairing.

A Seguir vamos aplicar a prescrição do capítulo anterior para o Modelo de Negele.

## IV-2 - A Hamiltoniana Efetiva de Tunelamento

Vamos agora aplicar a metodologia apresentada no Cap. III, para obter uma hamiltoniana efetiva para o modelo apresentado na seção anterior.

Com este fim, vamos tomar uma parametrização[8], tal que os operadores de "spin" serão dados por

$$S_z \rightarrow -\mathcal{R}(1 - \pi^2/\mathcal{R}^2)^{\frac{1}{2}} \cos x, \quad (\text{IV-13.a})$$

$$S_x \rightarrow \mathcal{R}(1 - \pi^2/\mathcal{R}^2)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen} x, \quad (\text{IV-13.b})$$

onde

$$\mathcal{R} = J + \frac{1}{2} ; \quad \mathcal{R} = \frac{N}{2} .$$

Então a hamiltoniana clássica será dada por (eqs. (IV-9) e (IV-13)),

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) - 2\kappa\sqrt{N}q(\mathcal{R}^2 - \pi^2)^{\frac{1}{2}} \cos x + 4\lambda(\mathcal{R}^2 - \pi^2)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen}^2 x . \quad (\text{IV-14})$$

Considerando a aproximação para baixos momentos (ver apêndice A da ref.[8] e a ref.[7]), obtemos

$$\mathcal{H}_{\text{em}} = \frac{1}{2}p^2 + \mathcal{B}(q, x) \frac{\pi^2}{2} + V(q, x) \quad (\text{IV-15})$$

onde

$$\mathcal{B}(q, x) = (2\kappa/\sqrt{N})q \cos x - 4\lambda \operatorname{sen}^2 x \quad (\text{IV-16})$$

e

$$V(q, x) = \frac{1}{2} q^2 - KN^{3/2} q \cos x + \lambda N^2 \operatorname{sen}^2 x. \quad (\text{IV-17})$$

Na fig. (IV.3), podemos ver um contorno da energia potencial  $V(q, x)$ .

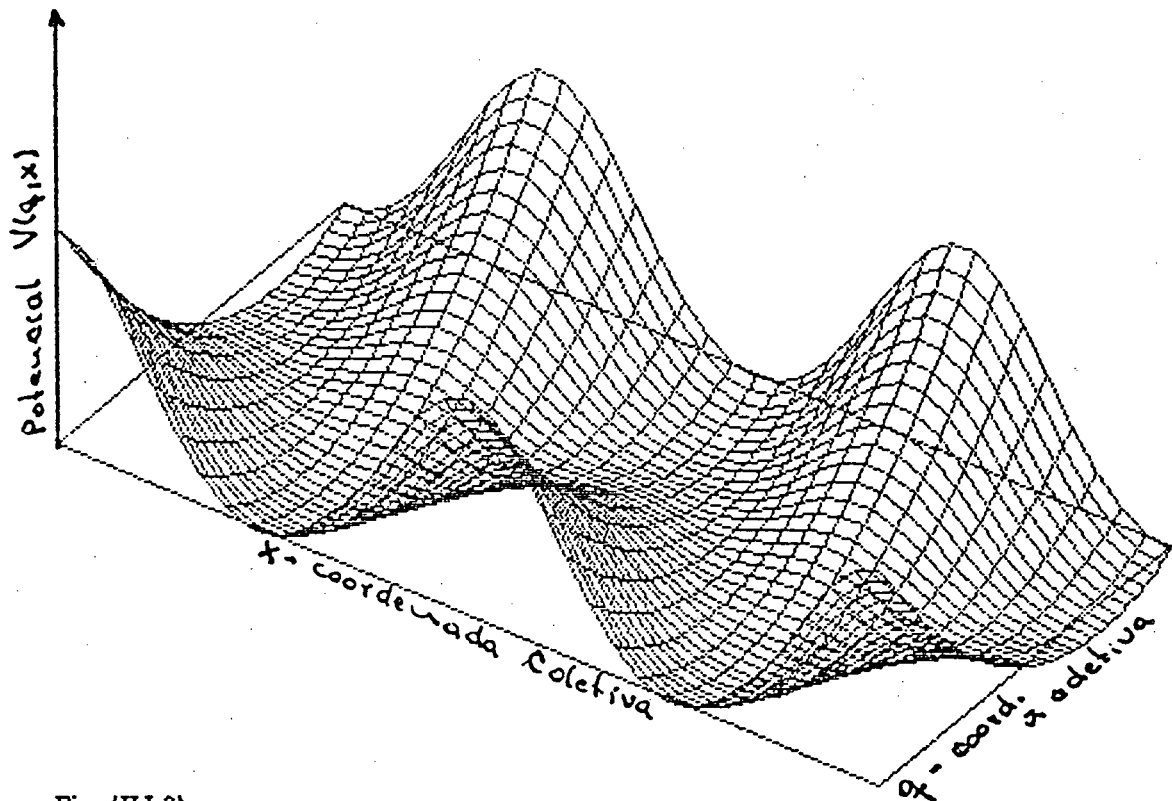


Fig. (IV-3) - Contorno da energia potencial  $V(q, x)$  (sem escala).

Analizando o potencial  $V(q, x)$ , nós encontramos que  $V$  é mínimo para

$$x = n\pi ; \quad q = \pm N^{3/2} K, \quad (\text{IV-18})$$

onde

$$V_{\min} = -\frac{K^2 N^3}{2}, \quad (\text{IV-19})$$

e possui pontos de sela em

$$x = (2u+1)\frac{\pi}{2} \quad ; \quad q=0, \quad (\text{IV-20})$$

onde

$$V_0 = \lambda N^2. \quad (\text{IV-21})$$

A altura da barreira(h), é então

$$h = \lambda N^2 + \frac{\kappa^2 N^3}{2}, \quad (\text{IV-22})$$

que é idêntica à definição para a altura efetiva da barreira dada na ref.[10].

Para prosseguir com nosso objetivo, vamos reescrever a hamiltoniana (eq.(IV-15), na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \left[ \frac{2\kappa}{\sqrt{N}} \pi^2 - \kappa N^{\lambda/2} \right] \cos x q, \quad (\text{IV-23.a})$$

onde

$$\mathcal{H}_0 = \lambda N^2 \sin^2 x - 4\lambda \sin^2 x \pi^2. \quad (\text{IV-23.b})$$

Agora, utilizando o método apresentado no cap. III, obtemos a hamiltoniana efetiva, na aproximação de ordem zero, como

$$H_{\text{eff}}^{ij} = F_{ij}^{\text{eff}} \left[ H_0^{ij} + \left( u + \frac{1}{2} + \frac{c_i c_j}{2} \right) \langle c_{ij} \rangle - \frac{1}{2} (c_i + c_j) c_{ij} \right], \quad (\text{IV-24})$$



onde

$$H_0^{ij} \equiv \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle, \quad (\text{IV-25.a})$$

$$C_{ij} \equiv \langle i | \hat{C}(x) | j \rangle, \quad (\text{IV-25.b})$$

$$C_i = C_{ij} \delta_{ij}, \quad (\text{IV-25.c})$$

e (ver ap. A.1),

$$\hat{C}(x) = \frac{\kappa}{2\sqrt{N}} \left\{ \hat{\pi}, \left\{ \hat{\pi}, \cos \hat{x} \right\} \right\} - \kappa N^{3/2} \cos \hat{x}, \quad (\text{IV-26})$$

$$\hat{H}_0 = \lambda N^2 \operatorname{sen}^2 \hat{x} - \lambda \left\{ \hat{\pi}, \left\{ \hat{\pi}, \operatorname{sen}^2 \hat{x} \right\} \right\}, \quad (\text{IV-27})$$

$$F_{ij}^{\nu} = \sum_{\alpha=0}^{\nu} (-1)^{\nu-\alpha} \frac{\Delta_{ij}^{2(\nu-\alpha)} \nu!}{\alpha! [(\nu-\alpha)!]^2} \exp[-(\Delta_{ij})^2], \quad (\text{IV-28})$$

onde

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} (C_i + C_j).$$

Já que a energia do oscilador fixa a unidade de energia, e é bem maior que as outras escalas envolvidas, podemos considerar (como uma boa aproximação), que o

oscilador permanece no estado fundamental deslocado da posição de equilíbrio (ver também o resultado exato no cap. V).

Neste caso teremos

$$H_0^{ij} = F_{ij}^0 \left[ H_S^{ij} + \frac{1}{2} (1 + C_i C_j) \langle c | j \rangle - \frac{1}{2} (C_i + C_j) C_{ij} \right]. \quad (\text{IV-29})$$

Utilizando agora, como base para o sistema efetivo, a BGL apresentada na seção 2 do cap. III

$$\varphi_i(x) = \left( \frac{\alpha_i}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[ -\frac{\alpha_i}{2} (x - x_i)^2 \right], \quad (\text{IV-30})$$

obtemos para os elementos de matriz (ver ref. [12]),

$$\langle c | j \rangle = \left( \frac{\alpha_i \alpha_j}{\gamma_{ij}} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[ -\gamma_{ij} \delta_{ij}^2 \right] \quad (\text{IV-31})$$

$$C_{ij} = \frac{\kappa}{\sqrt{N}} \left[ \left( \frac{\alpha_i + \alpha_j}{2} \right) - \frac{\alpha_i \alpha_j}{2} \delta_{ij}^2 - N^2 - \frac{(\alpha_i - \alpha_j)^2}{4} \left( \frac{1}{\alpha_i} - \frac{1}{2\gamma_{ij}} \right) \right] e^{-\frac{1}{4\delta_{ij}}} \cos(\delta_{ij})$$

$$- \left[ (\alpha_i - \alpha_j) \frac{\delta_{ij}^2}{\gamma_{ij}} \right] e^{-\frac{1}{4\delta_{ij}}} \operatorname{sen}(\delta_{ij}) \} \langle c | j \rangle, \quad (\text{IV-32})$$

$$H_S^{ij} = \lambda \left\{ (\alpha_i - \alpha_j)^2 \frac{1}{2\gamma_{ij}} \left[ 1 - \frac{\gamma_{ij} - 2}{2\gamma_{ij}} \cos(2\delta_{ij}) \right] e^{-\frac{1}{\delta_{ij}}} \right.$$

$$+ 4(\alpha_i - \alpha_j)(\alpha_i \alpha_j)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij}^2 \left[ \frac{1}{2\gamma_{ij}} \operatorname{sen}(2\delta_{ij}) \right] e^{-\frac{1}{\delta_{ij}}} \left. \right\}$$

$$+ \left[ \frac{\alpha_i + \alpha_j}{2} - 4\alpha_i \alpha_j \delta_{ij}^2 - N^2 \right] \frac{1}{2} \left( \cos(2\delta_{ij}) e^{-\frac{1}{\delta_{ij}}} - 1 \right) \} \langle c | j \rangle, \quad (\text{IV-33})$$

onde

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} (d_i + d_j), \quad (\text{IV-34.a})$$

e

$$\beta_{ij} = \frac{(d_i d_j)^{\frac{1}{2}}}{d_i + d_j} (x_i - x_j). \quad (\text{IV-34.b})$$

Para diagonalizar a hamiltoniana efetiva (eq.(IV-29)), precisamos ainda especificar os pontos  $x_i$  (localização das gaussianas). Com este fim, vamos tomar a parte diagonal da hamiltoniana efetiva (eq. (IV-29)),

$$H_{col} = B_{col}(x) \pi^2 + V_{col}(x), \quad (\text{IV-35})$$

onde

$$B_{col}(x) = \frac{4\hbar}{N^2} \left[ \frac{k^2 N^3}{2\hbar} - \text{sen}^2 x \right], \quad (\text{IV-36})$$

e

$$V_{col}(x) = \lambda N^2 - \hbar \cos^2 x. \quad (\text{IV-37})$$

com  $\hbar$  definido pela equação(IV-22).

Na figura(IV.4), podemos ver a forma da parte diagonal do potencial efetivo.

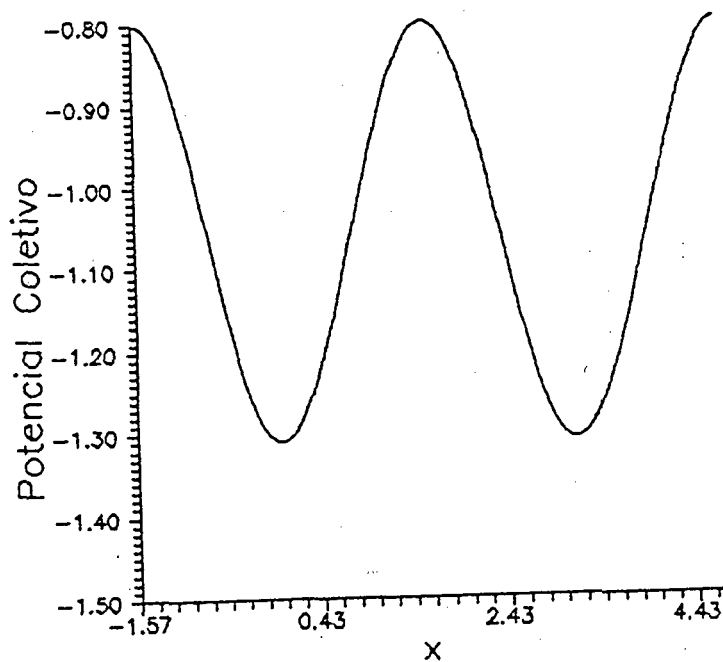


Fig.(IV-4) Parte diagonal do potencial efetivo(eq.(IV-37))

Analisando o potencial(eq.(IV-37), obtivemos

$$V_{\min} = -\frac{K^2 N^3}{2} \quad ; \quad x = 4\pi \quad , \quad (\text{IV-38.a})$$

e

$$V_0 = \lambda N^2 \quad ; \quad x = (2n+1)\pi/2. \quad (\text{IV-38.b})$$

Deste modo, a altura da barreira  $h_c$ , é igual a altura da barreira para a superfície multidimensional.

A fim de obter  $V_s = 0$ , vamos adicionar a constante  $\lambda N^2$  na  $H_{col}$  (eq.(IV-35)).

Assim

$$V'_{col}(x) = V(x) - \lambda N^2,$$

então

$$V'_{col}(x) = -h \cos^2 x.$$

(IV-39)

Deste modo, para uma energia  $E=0$ , o momento será

$$\pi(x) = \frac{N}{2} \left( \frac{\kappa^2 N^2}{2h} - \operatorname{sen}^2 x \right)^{-\frac{1}{2}} \cos x,$$

(IV-40)

e para o primeiro poço (ver fig. IV.4),  $x_{\min} = -\frac{\pi}{2}$  e  $x_{\max} = \frac{\pi}{2}$ . Assim, para a quantidade  $R_L$ , definida no cap. III, teremos

$$R_L = \frac{1}{\pi} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \pi(x) dx + \frac{1}{2}.$$

(IV-41)

A integral do momento (eq.(IV-41)), é

$$\int \pi(x) dx = \frac{N}{2} \operatorname{arccsen} \left\{ \left[ \frac{2h}{\kappa^2 N^2} \right]^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen} x \right\},$$

(IV-42)

o que dá para  $R_L$ ,

$$R_L = 9,0L.$$

(IV-43)

Deste modo, temos, na aproximação semiclássica, nove níveis em cada poço.

A localização semiclássica para nove gaussianas no primeiro poço ( as gaussianas para o outro poço são definidas por reflexão ), fornecidas pelas eqs.(III-29), está dada na tabela [IV-1.]

Os resultados obtidos para as energias e respectivos "splittings" para ambos (espaçamento semiclássico e espaçamento igual), para bases com um número variado de elementos, conjuntamente com alguns comentários e conclusões estão dados no cap. V.

i	$x_i$ (rad)	i	$x_i$ (rad)
1	-1,25	6	0,26
2	-0,82	7	0,51
3	-0,51	8	0,82
4	-0,25	9	1,24
5	0,02		

Tabela [IV-1] - Localização Semiclássica p/ o primeiro poço ( $R_L=9$ )

## V

## Cap. V - Resultados e Conclusões

Vimos nos capítulos anteriores, várias prescrições utilizadas para a obtenção de hamiltonianas coletivas, e discutimos que elas podem levar a potenciais e massas diferentes, que por sua vez dão respostas diferentes para o problema de tunelamento. Desta forma, vamos apresentar e comparar os resultados obtidos por algumas destas prescrições, mais precisamente HFV[10], e Linha de Vale[11], com os resultados obtidos sem negligenciar os acoplamentos entre o grau coletivo( de fissão), e os outros graus de liberdade[cap.IV].

Nós diagonalizamos a matriz hamiltoniana efetiva(eq.(IV-29), para vários conjuntos base(para espaçamento semiclássico e espaçamento igual), com números diferentes de elementos da base. Os resultados se mantêm aproximadamente constantes, mas a medida que o numero de funções cresce muito, os resultados começam a apresentar problemas devido a dependência linear da base(isto é, os autovalores da matriz "overlap" tornam-se muito pequenos). Na tabela[V-3], podemos observar o menor autovalor da matriz "overlap"(  $S_{ij}$  ) para vários conjuntos base. O número N de funções e o parâmetro livre "c"(para ambos, espaçamento semiclássico e espaçamento igual) foram escolhidos fitando o primeiro estado excitado fornecido pelo resultado exato[10].

Nas tabelas [V-1] e [V-2], nós apresentamos nossos resultados e aqueles obtidos por Arve e seus colaboradores[10], utilizando um cálculo de HFV(para duas escolhas do operador de vínculo :  $\langle \tau \rangle$  e  $\langle \sigma \tau \rangle$ ), e Hartree-Fock Dependente do Tempo(em tempo

imaginário), e por Bulgac e seus colaboradores[11] com a Linha de Vale, para as energias de excitação a partir do estado fundamental, e respectivos splittings.

Os resultados exatos foram obtidos por Arve[10], para  $n \leq 4$  ( $n$  é o número quântico do oscilador), e os resultados obtidos para  $n=0$  e  $n=4$  são virtualmente idênticos (as diferenças sendo da ordem de  $10^{-2}$ ). Deste modo, a aproximação que consideramos (isto é, de que o oscilador permanece no estado fundamental deslocado), é razoável.

Os resultados obtidos para espaçamento igual são melhores do que aqueles obtidos para espaçamento semiclássico, porém achamos que esta questão merece uma investigação mais cuidadosa.

Também podemos observar na tabela[V-2] que a escolha de trajetórias nos fornece splittings bastante diferentes, e como já mencionamos, estas diferenças estão associadas as diferentes massas e potenciais coletivos que afetam de maneira diferente as probabilidades de tunelamento.

Exato		B.G.I.E.- N=36	
En. de excitação	"Splitting"	En. de excitação	"Splitting"
g.s.	13,00	g.s.	12,25
0,154	8,96	0,154	8,01
0,289	5,92	0,288	4,95
0,403	3,51	0,397	2,77
0,489	1,92	0,485	1,73

Tab. [V-1] Energias de excitação média e respectivos "splittings" (o valor dos "splittings" são dados por

$$\text{onde } \Delta E_i = E_i^2 - E_1^2$$

-B.G.I.E. Base de Gaussianas Igualmente espaçadas

$-\log \Delta E$



HFV( $\alpha$ )	HFV( $S_2$ )	B.G.S.E.	B.G.I.E.	HFDTI	HFDTA
Splitting	Splitting	N=18	N=36	Splitting	Splitting
		Splitting	Splitting		
19,5	15,3	7,42	12,25	13,00	12,89
14,5	10,0	5,06	8,01	8,57	8,89
8,3	6,5	4,54	4,95	5,39	5,87
4,6	3,9	3,47	2,77	2,85	3,51
2,2	2,1	3,42	1,73	1,00	1,92

Tab.[V-2] - Splitting dos estado fundamental(g.s.) e dos 4 primeiros estados excitados.

B.G.I.E.- Espaçamento Igual

B.G.S.E.-Espaçamento Semiclássico

	E.I.			E.S.	
	N=24	N=36	N=48	N=18	N=36
c	1,39	1,83	0,53	1,53	0,95
$k_s$	$2,8 \times 10^{-1}$	$6,3 \times 10^{-1}$	$3,1 \times 10^{-7}$	$4,0 \times 10^{-1}$	$9,1 \times 10^{-4}$

Fig[V-3] - c - parâmetro livre

$k_s$  - menor autovalor da matriz "overlap"

E.I. espaçamento Igual

E.S. espaçamento Semiclássico

Vamos agora apresentar os potenciais e massas coletivas, obtidas por estas prescrições.

No caso de HFV, Arve e seus colaboradores[10], obtiveram hamiltonianas coletivas para dois vínculos diferentes. Primeiro, vinculando a coordenada contínua  $z$ , obtiveram o potencial coletivo

$$V_{\langle z \rangle}^A = \lambda N^2 (L + \lambda / NK^2) \cos^2 \theta, \quad (V-1)$$

com mínimos em  $\theta = n\pi$  e sela em  $\theta = (2n+1)\frac{\pi}{2}$ , e uma barreira

$$h_{\langle z \rangle}^A = \lambda N^2 (L + \lambda / NK^2). \quad (V-2)$$

Para a Massa, utilizando a equação (II-22), encontraram

$$M_{\langle z \rangle}^A = K^2 N^3 - \left[ \frac{\partial^2 \lambda^3}{NK^4} \cos^2 \theta \right]^{-1}. \quad (V-3)$$

Quando utilizaram como vínculo o operador  $\langle \sigma_z \rangle$ , obtiveram para o potencial coletivo

$$V_{\langle \sigma_z \rangle}^A = -\frac{K^2 N^3}{2} + \frac{N}{2} h_{\langle \sigma_z \rangle}^A \cos^2 \theta, \quad (V-4)$$

com mínimos e sela localizados em  $\theta = n\pi$  e  $\theta = (2n+1)\frac{\pi}{2}$ , respectivamente, e uma barreira

$$h_{\langle \sigma_z \rangle}^A = \lambda N^2 + \frac{K^2 N^3}{2}. \quad (V-5)$$

Para a Massa

$$M_{\langle \sigma_z \rangle}^A = K^2 N^3 - \left[ 8\lambda \cos^2 \theta \right]^{-1}. \quad (V-5.a)$$

Para a Linha de Vale, Bulgac e seus colaboradores[11], obtiveram uma hamiltoniana coletiva igual a obtida na aproximação de Born-Oppenheimer(esta também obtida na ref.[11]), onde o potencial coletivo é dado por

$$V_{col}^B(\Theta) = 4\lambda R - (4\lambda R + 2N\kappa^2 R) \cos^2 \Theta, \quad (V-6)$$

onde

$$R = J(J+1), \quad J = \frac{N}{2}, \quad (V-7)$$

com mínimos e sela localizados de maneira idêntica às trajetórias de HFV, e uma barreira

$$h^B = (\lambda N^2 + \frac{\kappa^2 N^3}{2}) + 2\lambda N + N^2 \kappa^2, \quad (V-8)$$

e para a Massa

$$M^B = [(2\kappa^2 N + 8\lambda) \cos^2 \Theta - 8\lambda]^{-1}. \quad (V-9)$$

A fim de fazer uma comparação(apesar de que não estamos obrigados discutir estas questões nesta metodologia), vamos tomar a parte diagonal de nossa hamiltoniana efetiva(eq.(IV-29)), o que nos dá

$$H_{col}(x) = B_{col}(x) \pi^2 + V_{col}(x), \quad (V-10)$$

onde

$$B_{\text{col}}(x) = \frac{4h}{N^2} \left( \frac{K^2 N^3}{2h} - \sec^2 \theta \right), \quad (\text{V-11})$$

e

$$V_{\text{col}}(x) = \lambda N^2 - h \cos^2 x, \quad (\text{V-12})$$

com mínimos e sela localizados como acima, e uma barreira

$$h = \lambda N^2 + \frac{K^2 N^3}{2}, \quad (\text{V-13})$$

e para a Massa

$$M = \frac{N^2}{4h} \left[ \frac{K^2 N^3}{2h} - \sec^2 x \right]. \quad (\text{V-14})$$

Obs.: Aqui devemos ressaltar que na metodologia por nós utilizada, a maior contribuição dos acoplamentos aparece via os fatores de F-C, que aparecem na frente do lado direito da eq.(IV-29), e que, para os elementos diagonais, são todos iguais a um(1). Portanto, a hamiltoniana que apresentamos acima é uma aproximação para nossa hamiltoniana efetiva, onde os acoplamentos são desprezados.

Lembrando das definições para os operadores de spin(eqs.(IV-12)), podemos escrever a hamiltoniana efetiva(parte diagonal), como

$$H_{\text{col}} = -2NK^2 S_z^2 + 4\lambda S_x^2. \quad (\text{V-15})$$

A hamiltoniana efetiva(eq.(V-15), é idêntica àquela obtida por Bulgac[11], a menos das prescrições para os operadores de spin. Para observar melhor estas diferentes quantidades, nós plotamos na fig.[V.1] as Massas e na fig.[V-2] os Potenciais obtidos pelas prescrições mencionadas acima.

Podemos observar da fig.[V-1] as diferenças entre as Massas, e na fig.[V-2] as diferenças das barreiras, e nos reportando a tabela[V-1], observar os efeitos sobre os splittings(para as várias trajetórias).

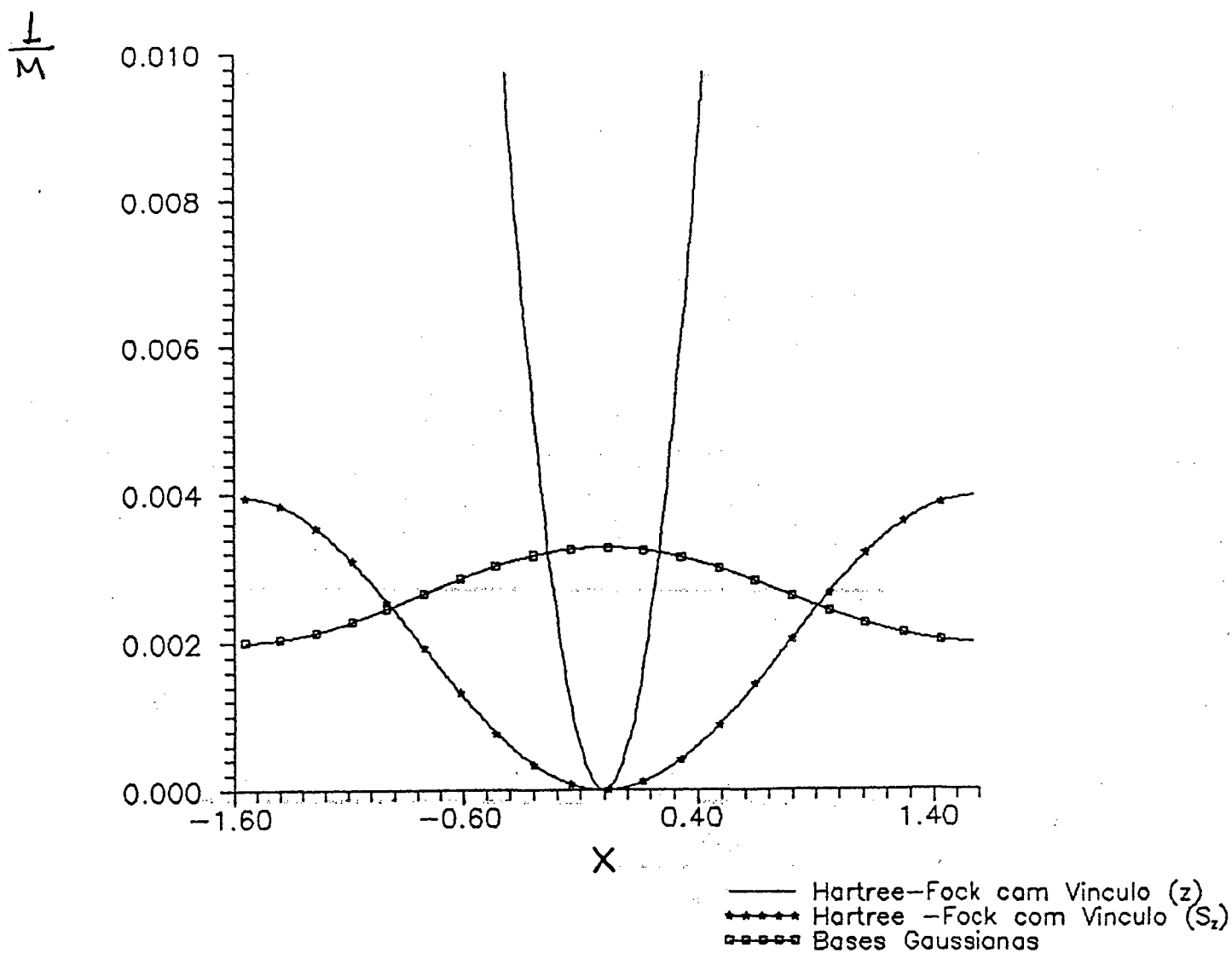


Fig.[V-1]- O inverso das Massas Coletivas

Obs.: O gráfico da Massa para a Trajetória de Vale é idêntico ao da Massa para Bases Gaussianas, por isso não aparece na fig.[V-1]

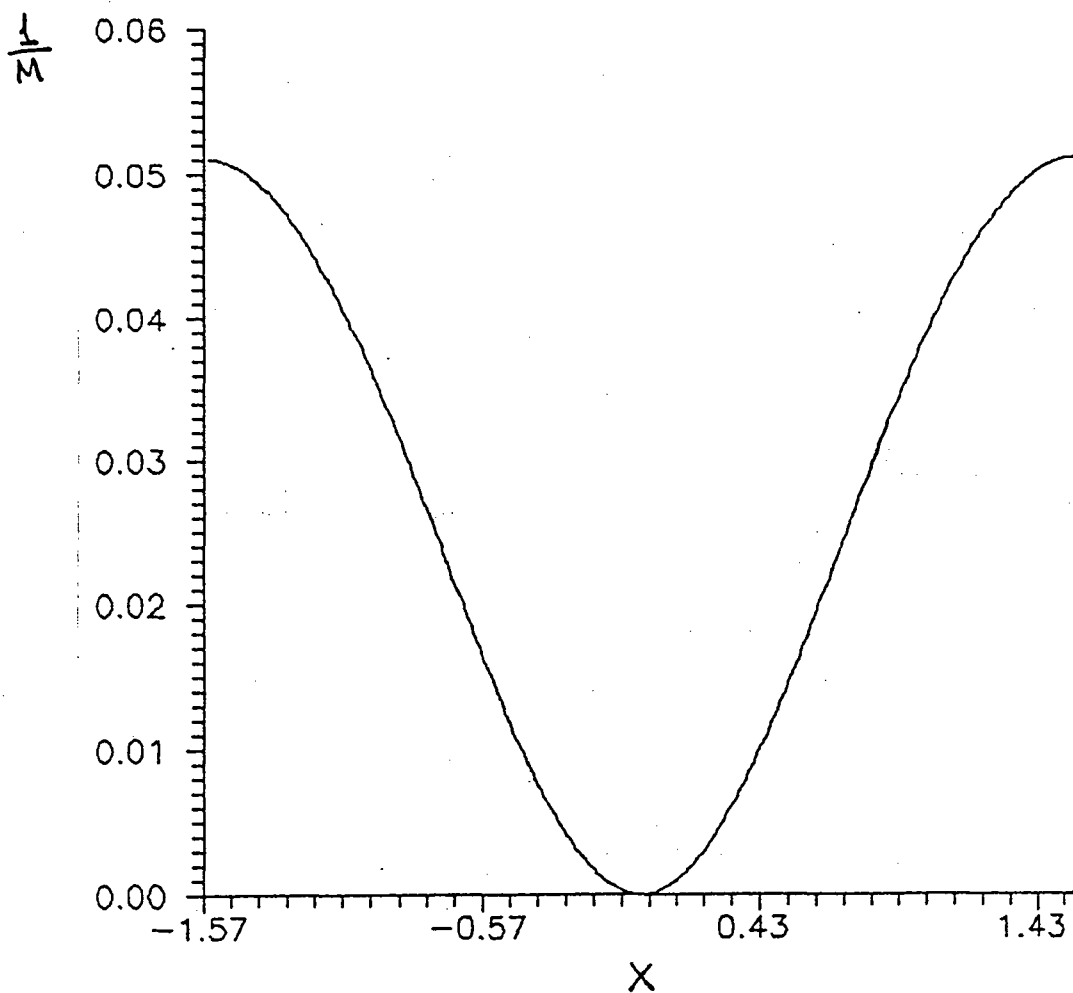


Fig.[V-1.a] - O inverso da Massa Coletiva(HFV)

Obs.: Nesta figura apresentamos o inverso da Massa para a trajetória de HFV (com  $z$  como vínculo), para mostrar que esta não é divergente, como aparece na fig.[V-1].

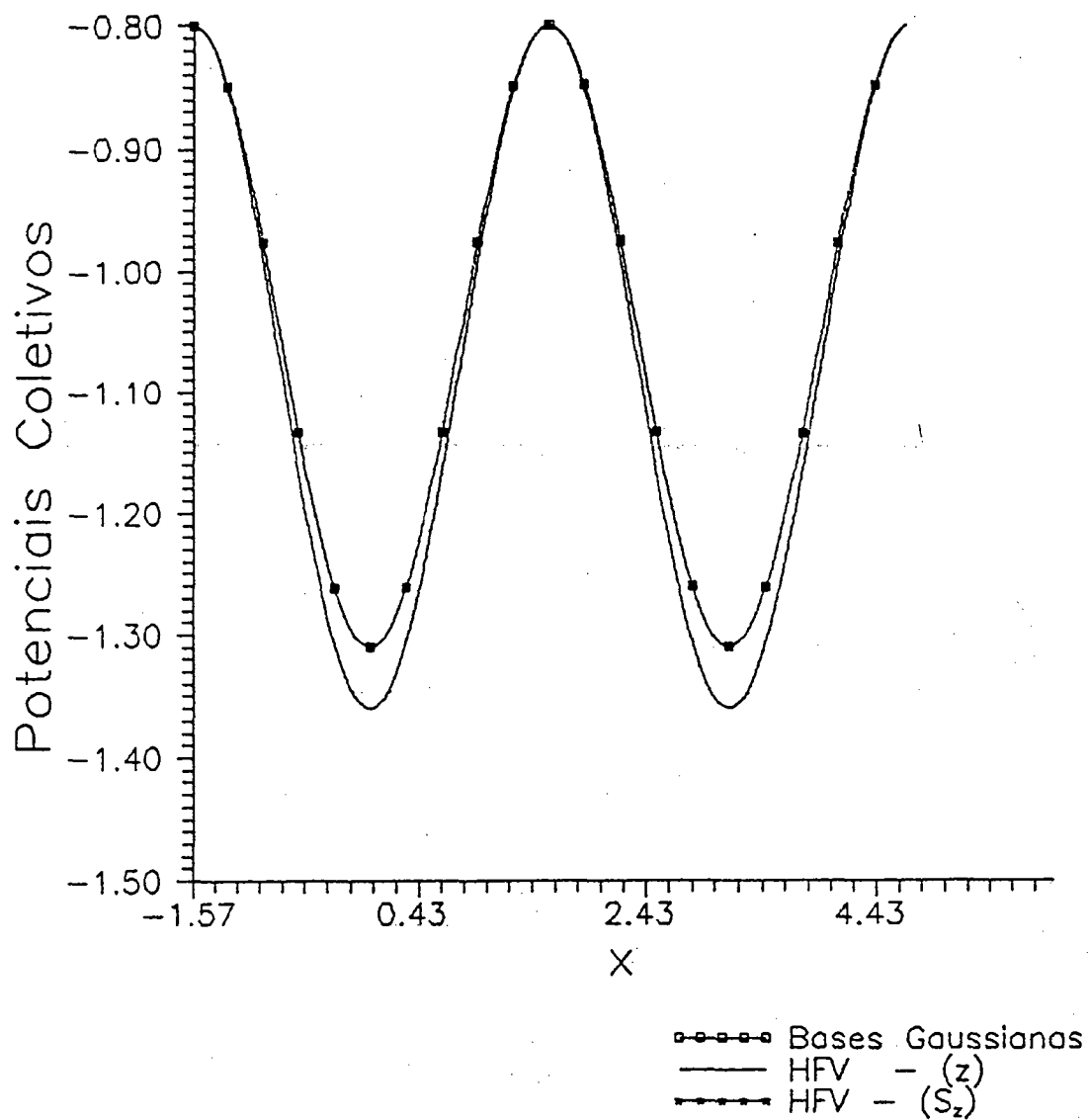


Fig.[V-2] - Potenciais Coletivos

Obs.: Os potenciais de HFV( $S_z$ ), do método de Bases Gaussianas e da Linha de Vale são idênticos.

Como vimos acima, os resultados obtidos através da metodologia por nós investigada são animadores, principalmente devido a simplicidade de sua aplicabilidade, e ao fato de que, nesta abordagem, não estamos obrigados a imposição de critérios físicos(e\ou vínculos).

Para concluir, devemos ressaltar ainda que esta metodologia leva em conta os acoplamentos com os outros graus de liberdade, ao contrário das prescrições para trajetórias, que além de exigirem a imposição de critérios físicos, tornam-se de difícil aplicabilidade para problemas realísticos



## A

## Apêndice A

## A.1 - Fatores de Frank-Condon

Estes fatores são dados por

$$F_{ij}^{\alpha} = \frac{\pi}{R} \langle \psi_{iR}^{\alpha} | \psi_{jR}^{\alpha} \rangle \quad (\text{A-1})$$

onde

$$\langle \psi_{iR}^{\alpha} | \psi_{jR}^{\alpha} \rangle = c_{iR}^2 \int dQ e^{-Q^2} H_{iR}(Q - \Delta_{ij}^R) H_{jR}(Q + \Delta_{ij}^R), \quad (\text{A-2})$$

Agora a eq.(A-2), pode ser escrita como

$$\langle \psi_{iR}^{\alpha} | \psi_{jR}^{\alpha} \rangle = e^{-\Delta_{ij}^R} c_{iR}^2 \int dQ H_{iR}(Q - \Delta_{ij}^R) H_{jR}(Q + \Delta_{ij}^R), \quad (\text{A-3})$$

onde

$$\Delta_{ij}^R = \frac{1}{2} (\kappa_i^R - \kappa_j^R), \quad (\text{A-4})$$

e

$$Q_R = q_R - \frac{1}{2} (\kappa_i^R + \kappa_j^R). \quad (\text{A-5})$$

Mas (ver a ref. [16]),

$$H_n(z-a) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-2a)^{n-m} m!}{m!(n-m)!} H_m(z). \quad (\text{A-6})$$

Agora, substituindo a eq.(A-6) na eq.(A-3), e integrando, obtemos

$$F_{ij}^{\hat{a}} = \pi \sum_{\alpha=0}^{u_n} (-z)^{u_n-\alpha} \frac{(\Delta_{ij}^R)^{2(u_n-\alpha)} u_n!}{\alpha! [(u_n-\alpha)!]^2} \exp[-(\Delta_{ij}^R)^2], \quad (\text{A-7})$$

que é a forma geral dos fatores de F-C, para o problema específico que tratamos.

## A.2 - O Oscilador Deslocado e os Elementos de Matriz

A hamiltoniana quântica (eq.(IV-23)), foi obtida requantizando a hamiltoniana clássica (eq.(IV-14)), de maneira usual, i.é,

$$\pi^2 f(x) \longrightarrow \frac{1}{4} \{ \hat{\pi}, \{ \hat{\pi}, f(\hat{x}) \} \}. \quad (\text{A-8})$$

Agora, tomando o traço, sobre as funções  $(|\Phi_i\rangle)$  da base do sistema total (eq.(III-8)), na hamiltoniana quântica (eq.IV-23)), obtemos

$$H_{eff}(q) = \langle H_0 \rangle + \sum_{\alpha} \frac{1}{2} (q_{\alpha}^2 + p_{\alpha}^2) + \sum_{\alpha} q_{\alpha} \langle \kappa(x) \rangle, \quad (\text{A-9})$$

que pode ser escrita como

$$H'_{eff}(Q) = \alpha + c + \sum \frac{1}{2} (p_\alpha^2 + Q_\alpha^2) , \quad (\text{A-10})$$

onde

$$Q_\alpha = q_\alpha + \langle \kappa(x) \rangle , \quad (\text{A-11.a})$$

e

$$\langle \kappa(x) \rangle = \langle \Phi | \kappa(x) | \Phi \rangle . \quad (\text{A-11.b})$$

A eq.(A-10) é a hamiltoniana de um oscilador harmônico deslocado, cujas funções de onda são

$$\psi_{n\alpha}(Q_\alpha) = H_{n\alpha} e^{-\frac{1}{2} Q_\alpha^2} . \quad (\text{A-12})$$

Para determinar os elementos de matriz da hamiltoniana (eq.(IV-21), na base do oscilador deslocado, nós podemos definir (do mesmo modo como se define os operadores de criação e aniquilação de quantuns para o oscilador harmônico simples), os operadores de criação e aniquilação para o oscilador deslocado que agem para a direita (i.é, sobre o estado  $|\Phi_{i\alpha}\rangle$ )

$$\vec{A}_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q_\alpha + i p_\alpha) = Q_\alpha + \kappa_j / \sqrt{2} ; \quad A^+ = (A)^+ , \quad (\text{A-13})$$

e para a esquerda (sobre o estado  $\langle \Phi_{i\alpha}^+ |$ ).

(A-14)

Deste modo a hamiltoniana pode ser escrita como

$$H = \hat{H}_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (2a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + 1) + \sum_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\alpha}^{\dagger} + a_{\alpha}) K(\hat{x}_{\alpha}), \quad (\text{A-15})$$

e os elementos de matriz, na base deslocada, serão dados por ((A-13) e (A-14)),

$$H_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_{i,2}^{\alpha} | \psi_{j,2}^{\alpha} \rangle \left\{ \langle \hat{H}_0 \rangle + \left[ \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \kappa^i \kappa^j \right] \langle c | j \rangle - \frac{1}{2} (\kappa^i + \kappa^j) \kappa^{ij} \right. \\ \left. + \sum_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}} (\kappa^i - \kappa^{ij}) \left[ \sqrt{\nu_{\alpha}} \frac{\langle \psi_{i,2}^{\alpha-1} | \psi_{j,2}^{\alpha} \rangle}{\langle \psi_{i,2}^{\alpha} | \psi_{j,2}^{\alpha} \rangle} + \sqrt{\nu_{\alpha}} \frac{\langle \psi_{i,2}^{\alpha} | \psi_{j,2}^{\alpha-1} \rangle}{\langle \psi_{i,2}^{\alpha} | \psi_{j,2}^{\alpha} \rangle} \right] \right\}, \quad (\text{A-16})$$

onde

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_{i,2}^{\alpha} | \psi_{j,2}^{\alpha} \rangle = F_{ij}^{\alpha}$$

é o fator de Frank-Condon(FC).

## B

## Apêndice B

## B.1 - Número de Níveis

Para compreender melhor as proposições apresentadas na seção III-2, vamos resolver, semiclassicamente, o problema do oscilador harmônico unidimensional. Vamos supor que precisamos determinar a energia  $E_n$  para o  $n$ -ésimo estado do sistema (oscilador), que é representado pela hamiltoniana ( $\hbar=1$ ),

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} K x^2, \quad (\text{B-1})$$

onde

$$K = m\omega^2.$$

Neste caso, o ponto de mínimo é  $x=0$ , e os pontos de retorno, Para  $E=E_n$ , são

$$x_{\min} = -x_0; \quad x_{\max} = x_0 \quad (\text{B-2.a})$$

onde

$$x_0 = \frac{2E_n}{K} \quad (\text{B-2.b})$$

A ação semiclassical é definida por[9],

$$A = \oint p(x) dx = nh. \quad (\text{B-3})$$

Fazendo a correção de ponto zero

$$A = \oint p(x) dx = (n + \frac{1}{2})h. \quad (\text{B-4})$$

A eq.(B-4), pode ainda ser escrita na forma

$$2 \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p(x) dx = (n + \frac{1}{2})h. \quad (\text{B-5})$$

Agora dividindo os dois lados da eq.(B-5), por  $2\pi$ , obtemos

$$\frac{1}{\pi} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p(x) dx = n + \frac{1}{2}; \quad (\hbar = h/2\pi \equiv \hbar), \quad (\text{B-6})$$

Vamos agora calcular a integral da eq.(B-6). Das eqs.(B-1)( $H=E_n$ ), e (B-2), temos

$$I = (2mE_n)^{\frac{1}{2}} \int_{-x_0}^{x_0} \left(1 - \frac{K}{2E_n} x^2\right)^{\frac{1}{2}} dx,$$

mas  $\frac{K}{2E_n} = x_0^{-2}$  (eq.(B-2.b)). Então

$$I = (2mE_n)^{\frac{1}{2}} \int_{-x_0}^{x_0} (1 - y^2)^{\frac{1}{2}} dy; \quad y = x/x_0.$$

Podemos efetuar uma mudança de variável

$$\psi = \sin u \theta$$

e obtemos

$$I = (2m E_n)^{\frac{1}{2}} \times_0 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta d\theta \quad (\text{B-7})$$

Agora integrando por partes, obtemos

$$I = (2m E_n)^{\frac{1}{2}} \times_0 \left[ \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta - \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta d\theta \right], \quad (\text{B-8})$$

e, da eq.(B-7)

$$I = \frac{E_n \pi}{\omega}. \quad (\text{B-9})$$

Substituindo a eq.(B-9), na eq.(B-6), obtemos

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \omega. \quad (\text{B10})$$

Portanto, se a quantidade  $R_L$  é o número de níveis para a energia  $E_n$ , ela deve ser, neste caso

$$R_L = n + \frac{1}{2} \rightarrow n = R_L - \frac{1}{2} \quad (\text{B-11})$$

Substituindo a eq.(B-11.b) na eq.(B-6), obtemos

e

$$R_L = \frac{1}{\pi} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \rho(x) dx + \frac{1}{2}, \quad (\text{B-12})$$

que é a definição dada para a quantidade  $R_L$  definida no cap. III(eq.(III-26)).

### B.1 - Localização das Gaussianas

Vamos agora discutir a localização semiclassica das gaussianas e sua relação com a quantidade  $R_L$ , definida pela eq.(B-12). Isto é, vamos supor que desejamos usar uma BGL para descrever  $m$  estados do oscilador harmônico eq.(B-1), e que vamos utilizar uma função para cada estado. Deste modo, para este caso, a quantidade  $R_L$  deve ser  $R_L = m$ . Mas  $R_L$  pode ser escrita como

$$\begin{aligned} R_L &= \frac{1}{\pi} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \rho(x) dx + \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{\pi} \left[ \int_{x_{\min}}^{x_1} \rho(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx + \dots + \int_{x_m}^{x_{\max}} \rho(x) dx \right] + \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Na hipótese de que os  $x_i$  indicam a localização das gaussianas e que as equações(III-27) fornecem esta localização, teríamos



$$R_L = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\pi}{4} + (m-1)\pi + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{1}{2} \Rightarrow R_L = m.$$

Para o caso mais geral, onde  $m > R_L$ , podemos reescalonar o fator  $\pi$  nas eqs(III-27) por

$$\pi \rightarrow \pi \left[ (2R_L - 1) / (2m - 1) \right].$$

Para entender melhor, vamos supor que  $m = R_L + j$ . Deste modo a definição para  $R_L$  deve fornecer  $R_L = m - j$ .

Da eq.(B-13) teríamos

$$R_L = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\pi}{4} (m - j - \frac{1}{2}) / (m - \frac{1}{2}) + (m-1) \pi (m - j - \frac{1}{2}) / (m - \frac{1}{2}) + \frac{\pi}{4} (m - j - \frac{1}{2}) / (m - \frac{1}{2}) \right] + \frac{1}{2},$$

Então

$$R_L = \left[ m + 1/2 - 1 \right] \frac{m - j + 1/2}{m - 1/2} + \frac{1}{2} \\ = m - j. \quad (B-13)$$

Deste modo, a localização das gaussianas está fundamentada na regra de quantização (eq.(B-5)).

### B.3 - Elementos de Matriz

Nesta seção, vamos apresentar a forma geral dos elementos de matriz para o "overlap" ( $S_{ij}$ ), e para um particular operador de energia cinética (com massa  $M$  constante) e de segunda ordem nos momentos ( $T = (1/2M) \times p^2$ ), com o fim de suplementar as discussões apresentadas no cap. III.

A forma geral dos elementos de matriz  $S_{ij}$  será

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle = \frac{(4A_i A_j)^{\frac{1}{4}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \int dx e^{-A_{ij} x^2 + 2C_{ij} x - B_{ij}} \quad (B-14)$$

onde

$$A_{ij} = A_i + A_j, \quad (B-15.a)$$

$$B_{ij} = A_i x_i^2 + A_j x_j^2, \quad (B-15.b)$$

$$C_{ij} = A_i x_i + A_j x_j. \quad (B-15.c)$$

Resolvendo a integral na eq.(B-14)[17], obtemos

$$S_{ij} = \left[ \frac{4A_i A_j}{A_{ij}^2} \right]^{\frac{1}{4}} \exp \left[ -\frac{A_i A_j}{A_{ij}} (x_i - x_j)^2 \right]. \quad (B-16)$$

Já para os elementos de matriz de energia cinética, precisamos determinar

$$T_{ij} = \frac{1}{2M} [4A_i A_j] \langle \phi_i | \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} | \phi_j \rangle \quad (B-17)$$

$$T_{ij} = \frac{1}{2M} [4A_i A_j] \left[ \frac{4A_i A_j}{\pi L} \right]^{\frac{1}{4}} \int dx e^{-A_i(x-x_i)^2} e^{-A_j(x-x_j)^2} \frac{1}{(x-x_i)(x-x_j)} \quad (B-18)$$

Resolvendo a integral na eq.(B-18)[12], obtemos

$$T_{ij} = \frac{1}{M} \left[ (A_i A_j) / A_{ij} (L - 2A_i A_j / A_{ij}) (x_i - x_j)^2 \right] S_{ij}. \quad (B-19)$$

## Referências

- [1] - Bell, R. P. *The Tunnel Effect in Chemistry*. Cambridge University Press, England, 1980.
- [2] - Bosch, E., Moreno, M., Lluch, J.M., and Bertrán, J. J. *Chem. Phys.* 93(9), 1990.
- [3] - Lipkin, H.J., *Lie Groups for Pedestrians*. N-H Publishing Company, Amsterdam, 1966.
- [4] - Bjørnholm, S. *The Double-Humped Fission Barrier*. *Rev. of Mod. Physics*, 52(4), 1980.
- [5] - Rowe, D. J., *Nuclear Collective Motion (Models and Theory)*. Methuen and Co. Ltd., 1970.
- [6] - Ring, P., Schuck, P., *The Nuclear Many Body Problem*, Springer Verlag, 1980.
- [7] - Cruz, F. F. de S., and Passos, E. J. V., *Local Analysis of Collective Path*. *Proceeding in International Conference Nuclear Structure*. Cocoyoc, México, 1988.
- [8] - Cruz, F. F. de S., *Teorias Microscópicas para Movimentos Coletivos de Grande Amplitude*. Tese de Doutorado, Não publicada, USP, São Paulo, 1986.
- [9] - Cohen-Tannouji, C., Diu, B., Laloë, *Quantum Mechanics*. Vol. 1, John Wiley & Sons. Inc., 1973.
- [10] - Arve, P., Bertsch, G. F., Negele, J. W. and puddu, G., *Model For Tunneling in Many-Particle Systems*. *Phys. Rev. C*, 36(5), 1987.
- [11] - Bulgac, A., Klein, A. and Do Dang, G. *on Decoupling a Collective Degree of Freedom From a Model for Tunneling in Many Particle Systems*. 1987.
- [12] - Lipkin, H., Meshkov, N. and Glick, A. *Nucl. Phys.*, 188(62), 1965.
- [13] - Makri, N. and Miller, W. H. *Basis Set Methods for Describing the Quantum Mechanics of a "System" Interacting with Harmonic Bath*. *J. Chem. Phys.*, 86(3), 1987.

[14] - Hamilton, I. P. and Light, J. C. J. Chem. Phys., 84(1), 1986.

[15] - Davis, M. J. and Heller, E. J. J. Chem. Phys. 71(8), 1979.

[16] - Morse, P. M. and Feshbach, H. Methods of Theoretical Physics. Mc. Grail Hill, New York, 1953.

[17] - Gradshteyn, I. S. Table of Integrals, Series and Products. New York: Acad. Press, 1980.

[18] - Razavy, M. and Pimpale, A. Physics Reports, 168(6), 1988.

[19]- Kodama, T. Fissão Nuclear. CBPF-MO-001/1981.