

Universidade Federal de Santa Catarina
Programa de Pós-Graduação em Física

**O Método das Coordenadas Geradoras Aplicado ao
Tunelamento Multidimensional**

Dissertação

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Física

da Universidade Federal de Santa Catarina

para obtenção do grau de

MESTRE EM FÍSICA

Maurizio Ruzzi

Florianópolis, Janeiro 1997

O Método das Coordenadas Geradoras Aplicado ao Tunelamento Multidimensional

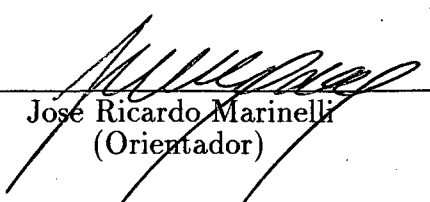
Maurizio Ruzzi

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

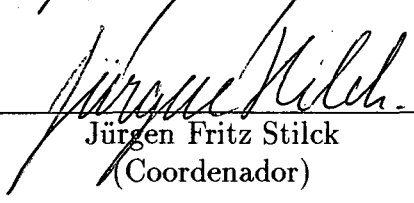
MESTRE EM FÍSICA

especialidade Física Nuclear e aprovada em sua forma final pelo Programa de

Pós-Graduação.

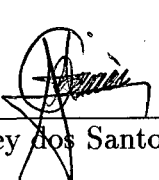


Jose Ricardo Marinelli
(Orientador)



Jürgen Fritz Stilck
(Coordenador)


Banca examinadora



Sidney dos Santos Avancini



Marilena Matiko Watanabe de Moraes



Marcus E. Benghi Pinto

ÍNDICE

Agradecimentos	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
1 Introdução	1
1.1 Considerações Gerais	1
1.2 Considerações Particulares	3
2 Descrição de um Problema Típico	6
3 Método das Coordenadas Geradoras	10
4 Aplicação do Formalismo ao Problema Proposto	15
4.1 Escolha das Coordenadas Geradoras	15
4.2 Aplicação do Formalismo	19
5 Análise do Hamiltoniano Efetivo e Considerações Iniciais Sobre a Escolha do Parâmetro Ω	22

5.1	Primeiras Observações	22
5.2	As Quantidades Coletivas	24
5.2.1	Massa Efetiva	24
5.2.2	Potencial Efetivo	25
5.3	Escolha inicial de Ω	30
6	Resultados e Considerações Sobre o Subespaço Efetivo	33
6.1	Tratamento do Hamiltoniano Unidimensional	33
6.2	Nova Discussão Sobre a Frequência Geradora	34
7	Conclusões	43
7.1	Conexões com Outros Métodos Encontrados na Literatura	43
7.2	Considerações Finais	45
A	Estados Coerentes	49
	Referências Bibliográficas	54

Agradecimentos

Ao Prof. José Ricardo Marinelli.

Ao Prof. Jürgen Fritz Stilck.

Ao Prof. Wagner Figueiredo.

E especialmente ao Prof. Frederico Firmo de Souza Cruz.

Resumo

A partir do formalismo do método das coordenadas geradoras (MCG) realizamos a análise de modelos, em princípio multidimensionais, encontrados em física molecular e nuclear. Em última instância o que se faz é um estudo da aplicabilidade do próprio MCG em um problema quântico típico e uma tentativa de desenvolvimento desta. Contrastam-se os resultados obtidos com simulações numéricas exatas e outros resultados obtidos na literatura, onde observa-se um bom desempenho do método. É obtido um relativo sucesso na escolha *a priori* dos parâmetros ‘livres’ da teoria, e apresentam-se várias alternativas para a busca de melhores critérios para esta escolha.

Abstract

Using the generator coordinate method (GCM) we analyze some models, that are in principle multidimensional, and in current use in nuclear and molecular physics. More precisely a study of the applicability of the GCM itself and an effort to develop the referred applicability is done. The obtained results, within those models, are compared to exact numerical simulations and other results found in the literature, and a good matching is achieved. Also a relative success on choosing the 'free' parameters of the theory, based on physical grounds, is obtained. Some alternatives for further developments on this purpose are presented and discussed.

CAPÍTULO 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

Tunelamento em barreiras multidimensionais é um problema extremamente amplo, presente em inúmeras áreas da física, e, o mais importante, possível de ser abordado sob pontos de vista teóricos diversos, o que contribui na compreensão mais geral da dinâmica dos problemas de muitos corpos.

É claro que é sempre possível abordar-se esta espécie de problemas de maneiras puramente fenomenológicas ou numéricas, mas ao mesmo tempo em que estas técnicas são extremamente eficazes na descrição do problema em questão, elas pouco ou nada contribuem para a compreensão da física neles envolvida.

Por outro lado, qualquer tentativa de abordagem analítica deparar-se-á com enormes dificuldades. Em vista disto, os resultados obtidos através de uma abordagem analítica que procure explicitamente atenuar seu grau de complexidade, abstendo-se de aproximações excessivamente restritivas, devem aproximar-se da solução exata e prover informações úteis sobre a física do problema em questão.

Uma maneira de tentarmos diminuir as dificuldades em torno de um problema de muitos corpos é tentarmos restringir o número de graus de liberdade envolvidos, ou seja, procurarmos os graus de liberdade relevantes para o problema em questão. Este é basicamente o ponto de vista do Método das Coordenadas Geradoras (MCG), embasamento formal deste trabalho.

Podemos encontrar esforços neste sentido em métodos semi-clássicos baseados em integrais de trajetória, à medida que estes procuram uma trajetória ótima de tunelamento [1] (ou uma família delas, a serem promediadas), ou em métodos puramente quantum-mecânicos, como canais acoplados [2], e seguindo a mesma linha deste, o método do conjunto de bases [3], que identificam à sua maneira um Hamiltoniano efetivo, além é claro de uma série de outros trabalhos que abordam esta classe de problemas. Finalmente, um tanto fora do contexto dos trabalhos acima, citamos a abordagem de inspiração semi-clássica mais “direta” de Brink *et al* [4], onde, em última instância, é feita uma particularização da aproximação de WKB num problema de dois graus de liberdade, que obtêm resultados particularmente semelhantes, em determinados limites, aos aqui obtidos .

Destacamos finalmente que a identificação efetuada pelo MCG dos graus de liberdade relevantes pode ser feita, a princípio, tendo-se em vista aspectos do problema

em questão que se considerem mais importantes (como no caso, o tunelamento), e portanto a solução a obter-se pode priorizar o referido aspecto.

1.2 Considerações Particulares

Especificamente trataremos problemas definidos por uma hipersuperfície de energia formada pelo acoplamento de graus de liberdade adicionais a um grau de liberdade dito de *reação*. Este grau de liberdade encontra-se sob a ação de um potencial típico de dissociação, estando portanto a este associada uma coordenada identificada como de "reação". Formalmente, portanto, este é um problema de caráter multidimensional, e não propriamente um problema de muitos corpos¹.

Supondo-se que exista uma transformação canônica na qual seja possível obterem-se novos graus de liberdade tais que o correspondente ao grau de liberdade de reação original está desacoplado dos demais, estando nele contidas todas as informações relevantes a dissociação, estaremos supondo então a existência de um grau de liberdade de reação efetivo, que define um *subespaço* efetivo², sendo exatamente este grau de liberdade que o MCG procurará identificar no problema em questão. Esta identificação se materializará sob a forma de um Hamiltoniano efetivo, que claramente deve depender do acoplamento entre os graus de liberdade originais. Talvez seja oportuno estendermos este raciocínio um pouco além das transformações canônicas usuais, visto que não necessariamente estarão associados

¹O que, obviamente, não impede que o que será apresentado aqui seja usado em problemas de muitos corpos usuais.

²Que seria identificado como um subespaço *coletivo* em um problema de muitos corpos.

a este subespaço efetivo operadores canônicos de posição e momento que sejam diagonais, ou que tenham uma relação mais direta, com respeito aos respectivos graus de liberdade originais.

Com este quadro em mente, é razoável esperar que o Hamiltoniano efetivo possua uma forma analítica semelhante ao Hamiltoniano de reação original, visto que o caráter efetivo identificado pode ser visto como uma incorporação, pelo Hamiltoniano de reação, dos efeitos do acoplamento aos graus de liberdade adicionais³.

Portanto, como já dissemos, o grau de liberdade que estaremos identificando será exatamente o grau de liberdade *efetivo* de reação, onde estão contidas todas as informações da dissociação, de uma maneira intuitivamente análoga a uma transformação canônica que separa, num problema bidimensional por exemplo, as coordenadas de centro de massa e de distância relativa, e as grandezas que dependem apenas de uma e de outra, respectivamente.

Sendo assim, considerando que Hamiltonianos unidimensionais razoáveis podem ser facilmente tratados, vemos que se realmente pudermos obter um Hamiltoniano efetivo que descreva bem o problema (ou seja, se identificarmos bem o subespaço efetivo, como ficará mais claro adiante) estaremos, no mínimo com respeito aos aspectos que priorizarmos no problema (no caso o tunelamento), resolvendo o problema de uma maneira analítica muito próxima da exata. De fato, a única não analiticidade possível advém da escolha deste subespaço efetivo, que pode não ser correta. Com efeito, visto que o formalismo do MCG já está totalmente firmado e desenvolvido, pode ser dito que este trabalho em última instância

³Isto, é claro, para valores de acoplamento razoáveis que não descaracterizem a hipersuperfície de energia original.

se propõe a testar a aplicabilidade do MCG, ou seja, verificar se é possível identificarmos o subespaço efetivo de maneira correta, *a priori*, preferencialmente. Além disto, é claro, ressalta-se a intenção de, a partir do que será tratado especificamente aqui, procurarmos definir uma linha de ação geral para a abordagem de problemas multidimensionais *via* MCG.

Problemas de dissociação molecular são muito comumente descritos por Hamiltonianos como o que será apresentado no capítulo 2, muitas vezes obtidos através de métodos *ab initio*. A interpretação física é muito simples nestes casos, simplesmente o grau de liberdade de dissociação esta associado ao átomo (ou parte da molécula) capaz de dissociar-se, sendo claro que este grau de liberdade deve estar acoplado às demais vibrações de toda a estrutura molecular. O Hamiltoniano por nós apresentado é particularmente útil em casos onde um átomo leve se dissocia de uma estrutura molecular estável. Uma discussão de propósito semelhante, mais detalhada, porém voltada à isomerização é encontrada em [5].

Também encontram-se na literatura descrições de fissão espontânea, como por exemplo do ^{234}U , onde o uso de Hamiltonianos do tipo 2.1 é razoável. Para tanto, supõe-se o acoplamento de diferentes vibrações superficiais, dentro de uma descrição sob a fenomenologia do modelo da gota líquida. A adaptação não é direta como no caso molecular. Um bom exemplo disto pode ser visto na referência [4] e referências lá citadas.

CAPÍTULO 2

Descrição de um Problema Típico

Introduzamos então um Hamiltoniano largamente utilizado em física molecular, na descrição de fenômenos de dissociação, e também na modelagem de alguns exemplos de fissão nuclear¹.

$$H(s, q_i) = H_{re}(s) + \sum_{i=1}^n \mathcal{H}_{osc}(q_i) - \sum_{i=1}^n c_i q_i s \quad (2.1)$$

com

$$H_{re}(s) = \frac{p_s^2}{2m_s} + V(s) \quad (2.2)$$

$$V(s) = \frac{1}{2}a_0s^2 - \frac{1}{3}b_0s^3 \quad (2.3)$$

e

$$\mathcal{H}_{osc}^i(q_i) = \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2q_i^2 \quad (2.4)$$

¹Ver Introdução, Considerações Particulares.

O potencial $V(s)$ presente em H_{re} representa os primeiros termos de uma expansão em série de potenciais unidimensionais com forma geral semelhante à da figura 2.1:

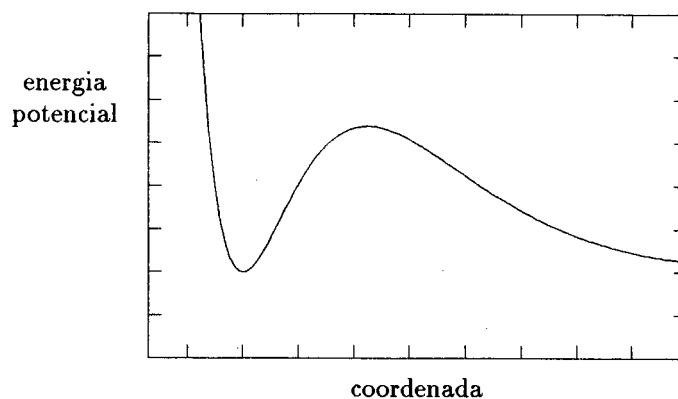


Fig 2.1 Forma típica de um potencial de dissociação

ficando evidenciada uma barreira de altura V_0 , sendo possível verificar que as informações relevantes ao tunelamento estão contidas principalmente na própria barreira e na região anterior a esta (o poço), de maneira à forma do potencial na região posterior à barreira não ser relevante (ou seja, os primeiros termos de uma expansão em série de Taylor do potencial são os mais importantes). Portanto, a aproximação de nosso potencial de reação tem a forma:

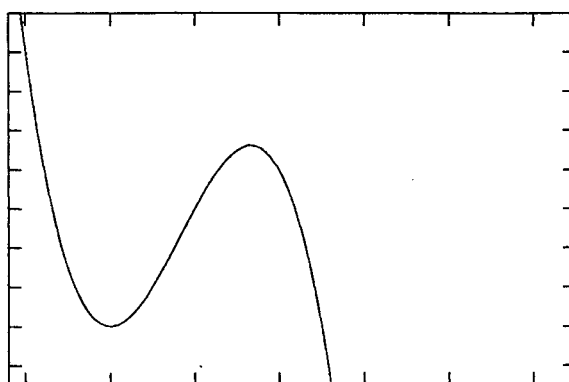


Fig 2.2 Forma do potencial de dissociação utilizado neste trabalho, com termos de até terceira ordem

Por ser esta prática quase onipresente na literatura nos é conveniente também adotá-la, para efeitos de comparação, ainda considerando-se que nossos resultados serão contrastados com resultados numéricos exatos obtidos também com este critério. Porém destacamos que, neste sentido, o MCG possui uma ótima aplicabilidade, isto é, não seriam encontradas maiores dificuldades para efetuarem-se os cálculos necessários correspondentes à abordagem de potenciais mais realistas, ou seja, que tendam a zero no infinito (portanto de forma analítica um pouco mais complicada, não apenas um polinômio simples), como o mostrado na figura 2.2.

Graus de liberdade secundários, como por exemplo efeitos de vibração de estrutura molecular e efeitos de temperatura, são descritos pelo acoplamento ao conjunto de osciladores harmônicos, eq. 2.4, que identificaremos como *banho* de osciladores. Na linguagem do Método das Coordenadas Geradoras, estes são chamados graus de liberdade *intrínsecos*.

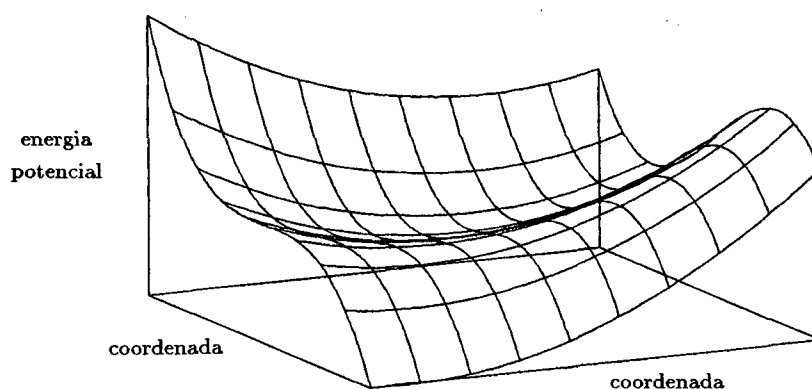


Fig 2.3 Superfície de energia usual para acoplamento a apenas um oscilador

É possível, sem necessariamente perder-se a generalidade, restringir-se a

um o número destes graus de liberdade, obtendo-se uma superfície de energia como mostra a figura 2.3. Esta restrição, que a princípio talvez pareça excessiva, pode ser amplamente justificada, como segue:

Primeiramente, mesmo este modelo simplificado ainda possui significação fenomenológica, isto é, é capaz de descrever razoavelmente bem certos sistemas físicos em particular², sendo, de qualquer forma, um problema físico ainda não resolvido de maneira analítica direta, o que já constitui motivação suficiente para abordá-lo.

Em segundo lugar, certas distribuições de osciladores nos graus de liberdade intrínsecos (entenda-se distribuições de frequências) sempre poderão ser bem descritas por um único oscilador efetivo³.

Finalmente, no tocante ao MCG em particular, a generalização para n graus de liberdade é factível em muitos casos. Ademais, e talvez o mais importante, as previsões obtidas nesta particularização contribuem enormemente na compreensão da natureza dos efeitos causados pelo acoplamento. E, como já ressaltado na introdução, este trabalho se preocupa em verificar e desenvolver a aplicabilidade do MCG, e portanto uma análise mais detalhada desta que podemos chamar uma primeira aproximação de um problema multidimensional mostra-se extremamente importante para o referido desenvolvimento da aplicabilidade do método das coordenadas geradoras.

²Brink *et al* [4] utilizam este modelo para análise da fissão do Urânio 234

³Em outras palavras, sempre haverá uma transformação de coordenadas capaz de transferir o acoplamento para apenas um oscilador, sem que apareçam termos que acoplem os momentos canonicamente conjugados.

CAPÍTULO 3

Método das Coordenadas Geradoras

O Método das Coordenadas Geradoras (MCG) em sua forma original foi introduzido por Griffin, Hill e Wheeler [6] com o objetivo de reduzir drasticamente o número de graus de liberdade de um problema físico. Aqui nos prenderemos a desenvolvimentos do MCG no sentido de analisar a dinâmica de graus de liberdade coletivos [7][8][9].

Da maneira como foi introduzido, o MCG propõe um *ansatz* da forma:

$$|\Psi\rangle = \int g(\alpha)|\alpha\rangle d\alpha \quad (3.1)$$

Onde a única incógnita da equação acima é a função peso $g(\alpha)$, também chamada função geradora. Os estados $|\alpha\rangle$, estados geradores, formam uma base escolhida de acordo a argumentos intuitivos, devendo conter os estados coletivos relevantes para a dinâmica do problema.

As coordenadas geradoras propriamente ditas são os rótulos $\{\alpha\}$ dos bem definidos estados geradores, função dos graus de liberdade originais do problema. O rótulo

α desempenha agora o papel de uma única nova ‘coordenada’, que restringe a apenas um o número de graus de liberdade do problema. O mesmo poderia ter sido feito para um número maior de coordenadas geradoras, tendo-se então n rótulos e n coordenadas geradoras¹. Além disto, lembramos que o estado gerado por um *ansatz* da forma[6]:

$$|\Psi\rangle = \int g(\alpha)S(A, B, C, D...; \alpha) |\alpha\rangle d\alpha \quad (3.2)$$

com os A, B, \dots correspondendo ao conjunto de operadores definidos no espaço de Hilbert do problema, é a solução analítica do problema para uma escolha adequada da função S dos operadores $\{A\}$, e da coordenada geradora. A equação 3.2 reduz-se a equação 3.1 se fizermos $S=1^2$. Pode-se dizer então, a princípio, que o MCG é claramente uma aproximação limitada pela validade da escolha de $S=1$. Porém, basta observarmos que uma família de estados geradores é definida por um operador $\theta(x_1, x_2, \dots, x_n, \alpha)$ agindo num estado de referência e aplicação do operador $S(A, B, \dots; \alpha)$ presente na equação 3.2 simplesmente mudará a prescrição da construção dos estados geradores. Portanto a equação 3.1 se torna, para todos os propósitos, exata. Poderia-se então contra-argumentar que o resultado da operação:

$$S(X_1, X_2, \dots, X_n; \alpha) |\alpha\rangle \quad (3.3)$$

não é necessariamente um estado bem descrito por um único parâmetro, ou que estes estados não definam bem um subespaço fechado do espaço de Hilbert. Quanto ao subespaço gerado por estes estados, vários resultados que justificam o seu uso podem ser encontrados na

¹Claro que se n for igual ao número de graus de liberdade originais não estaremos fazendo restrição alguma quanto a dimensionalidade do problema, e poderíamos, a princípio resolver o problema exatamente de maneira direta.

²Existem outras escolhas razoáveis a serem feitas. [6]

literatura [7][8][10].

Obviamente que a escolha correta do estado gerador torna-se então um problema tão complicado quanto a solução usual do problema, porém esperamos que seja possível identificar intuitivamente um estado coletivo que se aproxime bastante do estado correpondente à solução completamente analítica do problema.

Tomando então a eq. 3.1 como ponto de partida, lembramos que a função $g(\alpha)$ pode ser determinada por meio de um princípio variacional:

$$\delta \left(\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = 0 \quad (3.4)$$

E a variação com respeito a $g(\alpha)$ leva à equação integral de Griffin-Hill-Wheeler:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \{ \langle \alpha | H | \alpha' \rangle - E \langle \alpha | \alpha' \rangle \} g(\alpha') d\alpha' = 0 \quad (3.5)$$

Pode-se mostrar [7][8] que ao *ansatz* de GHW é sempre possível relacionar um projetor no espaço de Hilbert de muitos corpos, e portanto estamos, com o formalismo de Coordenadas Geradoras, restringindo nosso problema ao subespaço definido por este projetor, o subespaço efetivo. Assim, identificaremos como Hamiltoniano *efetivo* do problema a projeção do Hamiltoniano de muitos corpos neste subespaço. A discussão feita a seguir pode ser encontrada em mais detalhes nas referências [7][8][9][10].

O referido projetor é obtido a partir da diagonalização do *overlap kernel* $\langle \alpha | \alpha' \rangle$ de acordo à seguinte prescrição [7]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \alpha | \alpha' \rangle u_k(\alpha') d\alpha' = 2\pi \lambda_k u_k(\alpha) \quad (3.6)$$

onde $u_k(\alpha)$ e λ_k são respectivamente suas autofunções e autovalores. Define-se então a representação dos momentos no espaço efetivo (e com isto também as posições canonicamente

conjugadas):

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int d\alpha \frac{u_k(\alpha)|\alpha\rangle}{\sqrt{\lambda(k)}} \quad (3.7)$$

e o Hamiltoniano efetivo é então identificado como a projeção da Hamiltoniano total no espaço efetivo S,

$$H_{ef} = \hat{S}^\dagger H \hat{S} \quad (3.8)$$

dada pelo projetor \hat{S} :

$$\hat{S} = \int dk |k\rangle \langle k| \quad (3.9)$$

O Hamiltoniano efetivo também pode ser escrito como função dos operadores coletivos de momento e posição.

$$H_{ef} = \hat{S} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^m} : \tilde{P}^m \tilde{H}^m(\tilde{Q}) : \right\} \hat{S}^\dagger \quad (3.10)$$

onde:

$$: \tilde{P}^m \tilde{H}^m(\tilde{Q}) : := \{ \tilde{P}, \{ \tilde{P} \dots \{ \tilde{P}, \tilde{H}^m(\tilde{Q}) \} \dots \} \} \quad m \text{ vezes}$$

onde:

$$H^{(m)}(x) = \int d\xi \frac{(-i\xi)^m}{m!} \left(x + \frac{\xi}{2} \left| H \right| x - \frac{\xi}{2} \right) \quad (3.11)$$

$$H^{(m)}(x) = \int d\xi \frac{(-i)^m}{m!} \left(x + \frac{\xi}{2} \left| \underbrace{[\tilde{Q}, [\tilde{Q}, \dots [H, \tilde{Q}] \dots]}_{m \text{ comutadores}} \right| x - \frac{\xi}{2} \right) \quad (3.12)$$

e $\{\tilde{P}, \tilde{Q}\}$ são operadores canônicos coletivos tais que:

$$\tilde{P} |k\rangle = k |k\rangle \quad (3.13)$$

$$\tilde{Q} |k\rangle = -i\partial/\partial k |k\rangle \quad (3.14)$$

$$\tilde{Q} |x\rangle = x |x\rangle \quad (3.15)$$

Definimos então a representação das posições canonicamente conjugadas aos momentos efetivos como a transformada de Fourier:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp ikx |k\rangle \quad (3.16)$$

Tomando-se uma expansão até 2^o ordem nos momentos efetivos tem-se:

$$H_{ef} = \frac{1}{4} \left\{ \tilde{P}, \left\{ \tilde{P}, \frac{1}{2M_{ef}(\tilde{Q})} \right\} \right\} + V_{ef}(\tilde{Q}) \quad (3.17)$$

Um *potencial* e uma *massa efetiva* ficam assim bem definidos,

$$V_{ef} = H^{(0)}(\tilde{Q}) \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{2M_{ef}} = H^{(2)}(\tilde{Q}) \quad (3.19)$$

Finalmente então podemos obter uma expressão para as quantidades coletivas diretamente em função das coordenadas geradoras rotuladas por $\{\alpha\}$.

$$H^{(m)}(x) = \int dk_0 \frac{e^{ik_0 x}}{m!} \frac{d^m}{dk^m} \frac{1}{2\pi} \int \frac{d\alpha d\alpha' u_{k_0}^* \left(\frac{\alpha + \alpha'}{2} \right) (\alpha | H | \alpha') u_k^* (\alpha - \alpha')}{[\lambda \left(k + \frac{k_0}{2} \right) \lambda \left(k - \frac{k_0}{2} \right)]^{\frac{1}{2}}} \Bigg|_{k=0} \quad (3.20)$$

CAPÍTULO 4

Aplicação do Formalismo ao Problema Proposto

4.1 Escolha das Coordenadas Geradoras

Abordemos então o problema proposto no capítulo 2 a partir do ponto de vista do MCG, valendo-nos do que foi exposto no capítulo anterior, efetivando o cálculo do Hamiltoniano efetivo.

Conforme o já exposto, o primeiro passo para o cálculo do Hamiltoniano efetivo é a escolha das coordenadas geradoras. Esta escolha deve ser feita a partir de considerações físicas intuitivas sobre o problema, e, como já foi visto, na arbitrariedade desta escolha reside quase todo o caráter aproximativo do método.

Para guiar-nos na escolha dos estados geradores basearemos-nos em critérios variacionais, a seguir:

Supondo-se como estado variacional para nosso problema genérico um estado da forma:

$$|\psi, \beta\rangle = |\psi\rangle \otimes |\beta\rangle \quad (4.1)$$

sendo $|\psi\rangle$ um estado variacional ainda não especificado associado ao grau de liberdade $\{s\}$ de reação, vinculado de alguma maneira a $|\beta\rangle$, um estado coerente¹ de frequência associada ω_q , referente ao grau de liberdade intrínseco. A escolha do estado coerente como solução para o grau de liberdade do banho de osciladores já seria, por si só, bastante razoável[4], afinal podemos ver que os termos do Hamiltoniano, eqs. 2.1 e 2.4:

$$\frac{1}{2}k_o q^2 - csq ; \quad k_o = m\omega_q^2$$

podem ser rearranjados se completarmos os quadrados:

$$\frac{1}{2}k_o \left(q - \frac{cs}{k_o}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{c^2}{k_o} s^2$$

e portanto, em certos limites² pode-se considerar uma função de onda de oscilador deslocado, um estado coerente, como uma boa solução para o grau de liberdade intrínseco do problema. Brink *et al* [4] discutem os limites de validade desta suposição e constroem uma solução geral do problema a partir de um estado coerente cuja magnitude (em outras palavras, quão deslocado é o oscilador harmônico) é função da coordenada de reação.

Seguindo-se na abordagem variacional do problema, minimizar-se-ia o estado tentativa em relação aos parâmetros convenientes, sendo um destes parâmetros a própria

¹Ver apêndice A.

²Se for razoável a aproximação que s não se afasta muito de seu valor médio.

magnitude β de nosso estado coerente, como também a frequência associada a este. Emergiriam destes cálculos relações *que vinculariam β aos outros parâmetros relevantes do problema.*

Com isto em mente, calculemos então o valor esperado:

$$\langle \alpha, \beta | H | \alpha, \beta \rangle = \langle \alpha, \beta | H_{re}(s) + H_{osc}(q) - csq | \alpha, \beta \rangle \quad (4.2)$$

com $|\alpha, \beta\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ e $|\alpha\rangle$ sendo um estado coerente de frequência associada Ω , associado ao grau de liberdade de reação, para diretamente obtermos:

$$\langle \alpha, \beta | H | \alpha, \beta \rangle = h(\alpha) + \hbar\omega_q |\beta|^2 - \frac{c_1}{2}(\alpha^* + \alpha)(\beta^* + \beta) \quad (4.3)$$

com

$$h(\alpha) = \langle \alpha, \beta | H_{re}(s) | \alpha, \beta \rangle$$

$$h(\alpha) = \langle \alpha | H_{re}(s) | \alpha \rangle \otimes \langle \beta | \beta \rangle$$

$$h(\alpha) = \langle \alpha | H_{re}(s) | \alpha \rangle \quad (4.4)$$

onde $c_1 = \frac{c\hbar}{\sqrt{m_s m_q \Omega \omega_q}}$ e $\omega_s = \sqrt{\frac{a_0}{m_s}}$. Os índices s e q relacionam as massas e as frequências (definidas pela curvatura no fundo do poço) respectivamente aos graus de liberdade $\{s\}$ de reação e $\{q\}$ do banho de oscilador.

Minimizemos agora este *bracket* em relação a β e β^* , o que nos leva as relações:

$$\hbar\omega_q \beta^* - c_1(\alpha + \alpha^*) = 0 \quad (4.5)$$

$$\hbar\omega_q \beta - c_1(\alpha + \alpha^*) = 0 \quad (4.6)$$

que implicam em β ser real, e, assumindo-se α também real obtem-se a relação de vínculo:

$$\beta = \frac{c_1}{\hbar\omega_q} \alpha \quad (4.7)$$

Portanto nosso estado original $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ pode ser escrito como:

$$|\alpha, \beta\rangle \equiv |\alpha, \beta(\alpha)\rangle$$

$$|\alpha, \beta(\alpha)\rangle \equiv |\alpha\rangle \quad (4.8)$$

onde, por este ser um estado a princípio descrito por dois parâmetros, adotaremos a notação de *round ket* $| \)$, normalmente adotada para estados coletivos.

Se ainda minimizarmos o estado variacional $|\alpha\rangle$ com relação ao próprio rótulo α teríamos com certeza uma boa aproximação para o estado fundamental do problema, principalmente para pequenos acoplamentos. Portanto, construir uma solução geral para o problema a partir de toda esta família de estados, que forma uma base supercompleta [11], parece ser uma boa prescrição para a construção dos estados geradores, principalmente se levarmos em conta que este conjunto de estados geradores possui uma *função de superposição gaussiana*[7][8], o que facilita razoavelmente a execução dos cálculos apresentados no capítulo anterior, que serão levados a termo na próxima seção. Lembramos que até este ponto nada mais fizemos que escolher o *subespaço* onde será construída a solução do problema, e não fizemos nenhuma suposição sobre a forma funcional da mesma.

4.2 Aplicação do Formalismo

Tendo em vista o já exposto, é possível efetuar-se os cálculos para a obtenção do Hamiltoniano efetivo, utilizando-se a eq. 3.20, seguindo-se a escolha feita na seção anterior para as coordenadas geradoras. Sumarizemos então os resultados obtidos:

Nosso conjunto de estados geradores apresenta uma função de superposição gaussiana da forma³:

$$(\alpha|\alpha') = \exp\left[-\frac{1}{2}(1+\bar{c})(\alpha-\alpha')^2\right] \quad (4.9)$$

onde

$$\bar{c} = \left(\frac{c_1}{\hbar\omega_q}\right)^2$$

que deve ser diagonalizado⁴, de acordo com a eq. 3.5:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\alpha|\alpha')u_k(\alpha')d\alpha' = 2\pi\lambda_k u_k(\alpha)$$

para obtermos as autofunções:

$$u_k(\alpha) = e^{ik\alpha} \quad (4.10)$$

e os autovalores:

$$2\pi\lambda_k = \sqrt{\frac{2\pi}{1+\bar{c}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{k^2}{(1+\bar{c})}\right] \quad (4.11)$$

³Ver apêndice A.

⁴Através de transformadas de Fourier:

$$\int f(\alpha-\alpha')e^{ik\alpha'}d\alpha' = e^{ik\alpha} \int f(\alpha-\alpha')e^{ik(\alpha'-\alpha)}d(\alpha'-\alpha) = e^{ik\alpha} \hat{f}(k)$$

a partir dos quais construímos os estados $|k\rangle$, definidos na eq. 3.6:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int d\alpha \frac{u_k(\alpha)|\alpha\rangle}{\sqrt{\lambda_k}}$$

que, em 3.9, definem o projetor $\int dk |k\rangle\langle k|$.

A partir da equação 3.20 e da expansão para o Hamiltoniano efetivo podemos então obter finalmente a massa e o potencial efetivo, visto que o termo de primeira ordem e os termos correspondentes a $m > 3$ anulam-se exatamente, sendo que para a massa efetiva obtém-se:

$$m_{ef} = m_s \frac{\left[1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2\right]^2}{1 + \left(\frac{\omega_q}{\Omega}\right)^2 \left(\frac{c}{k_o}\right)^2} \quad (4.12)$$

e para o potencial efetivo

$$V_{ef} = \frac{1}{2} a_o \left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right) x^2 - \frac{1}{3} b_o x^3 - \frac{3 \hbar \omega_q b_o}{4 m \Omega^2} \frac{\left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2} x \quad (4.13)$$

define-se então uma frequência efetiva:

$$\omega_{ef} = \sqrt{\frac{a_o \left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right)}{m_{ef}}}$$

$$\omega_{ef} = \omega_s \frac{\sqrt{\left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right) \left(1 + \left(\frac{\omega_q}{\Omega}\right)^2 \left(\frac{c}{k_o}\right)^2\right)}}{1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2} \quad (4.14)$$

e uma quantidade s_{ef}

$$s_{ef} = \sqrt{\frac{\hbar}{m_{ef} \omega_{ef}}} \quad (4.15)$$

afim de adimensionalizarmos nosso Hamiltoniano segundo a prescrição

$$x = s_{ef} x' \quad p = \frac{\hbar}{s_{ef}} p'$$

e obtermos finalmente:

$$H_{ef} = \hbar\omega_{ef} \left[\frac{1}{2}x'^2 + \frac{1}{2}p'^2 - \frac{1}{3} \frac{s_{ef}}{x_o} \frac{1}{\left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right)} x'^3 - \frac{3}{4} \frac{s_{ef}}{x_o} \frac{\omega_{ef}}{\Omega} \frac{1}{\left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right)} \frac{\left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2} x' \right] \quad (4.16)$$

onde $x_o = \frac{a_o}{b_o}$ é o ponto de máximo da barreira não perturbada.

Portanto, formalmente, nossa intenção inicial de reduzir o número de graus de liberdade acessíveis ao sistema identificando um grau de liberdade *efetivo* já foi praticamente alcançada, afinal obtivemos um Hamiltoniano efetivo unidimensional, no qual podemos verificar diretamente que o limite

$$\lim_{c \rightarrow 0} H_{ef} = H_{re} \quad (4.17)$$

é válido para qualquer valor do parâmetro Ω , a frequência associada aos estados geradores, ainda não fixado. A procura de critérios para a escolha deste parâmetro será discutida com especial atenção no capítulo subsequente, feita em conjunto com uma análise do Hamiltoniano efetivo obtido.

CAPÍTULO 5

Análise do Hamiltoniano Efetivo e Considerações Iniciais Sobre a Escolha do Parâmetro Ω

5.1 Primeiras Observações

No final do capítulo anterior obtivemos uma expressão analítica para o que identificamos como o Hamiltoniano *efetivo* de reação, expresso em função de variáveis dinâmicas coletivas, onde supomos estarem contidas todas as informações relevantes ao problema de dissociação.

Notamos ainda que, formalmente, este Hamiltoniano é a projeção do Hamiltoniano de muitos corpos num subespaço do espaço de Hilbert que identificamos como

subespaço efetivo, e portanto o sucesso de nossa tentativa depende fortemente da identificação correta deste subespaço.

Da mesma forma destacamos que o *set* de coordenadas geradoras forma a base, não ortogonal, na qual o sistema é descrito quando da efetivação do cálculo do Hamiltoniano efetivo, e portanto uma escolha conveniente desta base desempenha papel fundamental no processo.

Convém notar que a escolha do conjunto de estados geradores (a base não ortogonal) define completamente o subespaço efetivo através do *overlap kernel* definido em 3.5, e portanto as propriedades deste subespaço dependem unicamente desta escolha, que foi feita e justificada genericamente no capítulo anterior. Lá foram apresentados argumentos em favor do uso de um conjunto de estados coerentes, associados a uma frequência Ω ainda não fixada.

Este Hamiltoniano efetivo, conforme o apresentamos, é composto por dois termos distintos, um potencial e uma massa efetiva, correspondentes aos termos de ordem zero e de segunda ordem na expressão 3.20. O potencial efetivo carrega os efeitos do acoplamento sob a forma de uma modificação na barreira original a ser transposta pelo ente físico. Na massa efetiva o que há é uma correção ao termo cinético, uma estimativa da inércia do sistema no grau de liberdade de tunelamento. Obviamente estas quantidades dependem da intensidade do acoplamento e das magnitudes associadas aos graus de liberdade intrínsecos, porém o que destacamos é a dependência explícita na chamada *frequência geradora* Ω , o parâmetro ainda não fixado respectivo à escolha das coordenadas geradoras. É

claro que, definindo-se este parâmetro *a posteriori* ter-se-á condições de obter ótimos resultados numéricos, desde que a escolha de estados coerentes genéricos como estado gerador seja ao menos razoável, porém esta não é nossa intenção. O que procuraremos serão argumentos físicos que induzam a fixação *a priori* deste parâmetro, de maneira a termos uma teoria construída sem ajuste de parâmetros livres.

5.2 As Quantidades Coletivas

Voltemos então nossa atenção para as quantidades que obtivemos no capítulo anterior, e discutamo-las brevemente em separado.

5.2.1 Massa Efetiva

Conforme o capítulo anterior, foi obtida uma massa efetiva com a forma:

$$m_{ef} = m_s \frac{\left[1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_0}\right)^2\right]^2}{1 + \left(\frac{\omega_q}{\Omega}\right)^2 \left(\frac{c}{k_0}\right)^2}$$

como já destacado função da frequência geradora Ω e da constante de acoplamento c , cujo comportamento pode ser visto na figura 5.1, onde podemos observar a variação desta quantidade com c para diferentes valores de Ω , percebendo-se facilmente o caráter basicamente crescente apresentado, salvo para valores próximos de $c = 0$, na região onde se faça valer a condição:

$$\frac{\omega_q}{\Omega} > 2$$

O que pode-se notar da figura 5.1 (ou de um cálculo simples de maximização) é que para o valor $\frac{\omega_q}{\Omega} = 1$ é verificada a maior variação da massa efetiva com o acoplamento c . Isto é, sabemos de antemão que se escolhermos $\Omega = \omega_q$ estaremos maximizando os efeitos do acoplamento sobre a inércia do sistema.

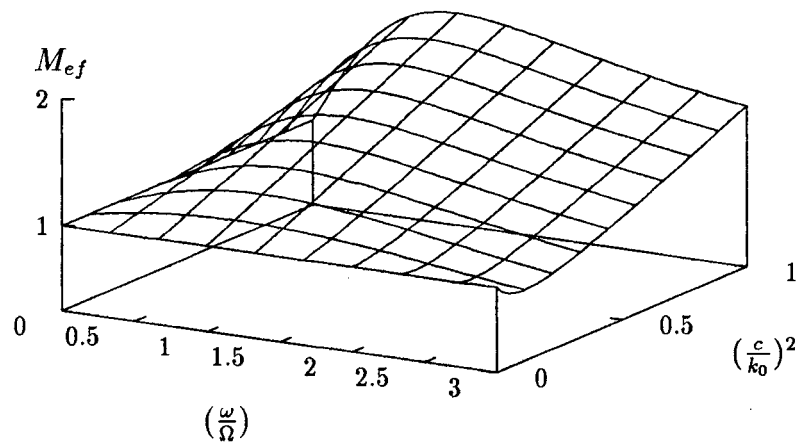


Fig 5.1 Variação da massa efetiva normalizada com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para diferentes valores da razão $\frac{\omega_q}{\Omega}$. Note-se a declividade positiva máxima para $\frac{\omega_q}{\Omega} = 1$ e a pequena região a partir de $\frac{\omega_q}{\Omega} > 2$ onde a massa efetiva decresce com o acoplamento.

5.2.2 Potencial Efetivo

Conforme a expressão 4.15, obtivemos um potencial efetivo com a forma:

$$V_{ef} = \frac{1}{2}a_o \left(1 - \frac{c^2}{a_o k_o}\right) x^2 - \frac{1}{3}b_o x^3 - \frac{3 \hbar \omega_q b_o}{4 m \Omega^2} \frac{\left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{1 + \frac{\omega_q}{\Omega} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2} x \quad (5.1)$$

que, a exemplo da massa efetiva, é função da intensidade do acoplamento c e da frequência geradora Ω .

Podemos então perceber que no potencial efetivo surge, além de uma correção ao termo harmônico, um termo linear.

Quanto a correção ao termo quadrático, é notável o fato desta não depender da frequência geradora Ω , de onde podemos intuir uma certa “generalidade” neste termo. De fato, se observarmos com um pouco de atenção nosso problema inicial e lembrarmos da discussão feita quando da escolha das coordenadas geradoras, no início do capítulo anterior, vemos que ao completarmos os quadrados nos termos do Hamiltoniano:

$$\frac{1}{2}k_o q^2 - csq$$

para obtermos:

$$\frac{1}{2}k_o \left(q - \frac{c}{k_o} s \right)^2$$

deverá surgir uma correção ao termo quadrático em s :

$$-\frac{1}{2} \frac{c^2}{k_o} s^2$$

que é exatamente o termo em discussão. Esta exata correção também é prevista ou discutida por vários autores [3][4]. Efetivamente, seu efeito imediato atenua a barreira, visto que esta depende diretamente da intensidade do termo harmônico, o que conseqüentemente contribui para o aumento da probabilidade de tunelamento.

Também percebemos que o termo quadrático efetivo será negativo ou nulo se

$$c^2 \geq a_o k_o$$

o que destruiria completamente a barreira efetiva. Este é um resultado razoável, afinal um acoplamento muito intenso, como já ressaltado, descaracteriza de fato a forma da superfície

de energia original, sendo que neste caso não se espera de maneira alguma que o sistema se comporte como um sistema de penetração, ou seja, que o Hamiltoniano efetivo seja também um Hamiltoniano típico de problemas de dissociação.

Já o termo de correção linear, como a massa efetiva, depende explicitamente da frequência geradora Ω . Recordamos primeiramente que o efeito imediato de sua inclusão é a alteração da posição de mínimo do potencial, porém este efeito aqui não é relevante, pois não identificamos nenhuma grandeza física associada ao valor absoluto da coordenada efetiva. O que aqui é relevante é seu efeito direto sobre a forma da barreira, que naturalmente será diferente para diferentes valores da razão $\frac{\omega_q}{\Omega}$. Nas figuras 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5 plotamos tridimensionalmente o potencial efetivo em função do quadrado da razão entre o acoplamento e a constante de oscilador k_o , para diferentes valores da razão $\frac{\omega_q}{\Omega}$. Para facilitar a visualização dos efeitos do acoplamento, as figuras foram construídas escolhendo-se o intervalo de variação da intensidade de acoplamento de maneira a razão $(\frac{c}{k_o})^2$ ocorrer entre 0 e 1.5, enquanto os maiores valores razoáveis para esta quantidade são da ordem de 0.5.

As figuras 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5, mostram claramente que, com o aumento da razão $\frac{\omega_q}{\Omega}$ intensifica-se a sensibilidade do potencial efetivo ao acoplamento e, a partir de certos valores, a barreira efetiva é completamente atenuada mesmo para acoplamentos de intensidades modestas. Portanto, surge já o primeiro aspecto restritivo quanto a escolha da frequência geradora Ω .

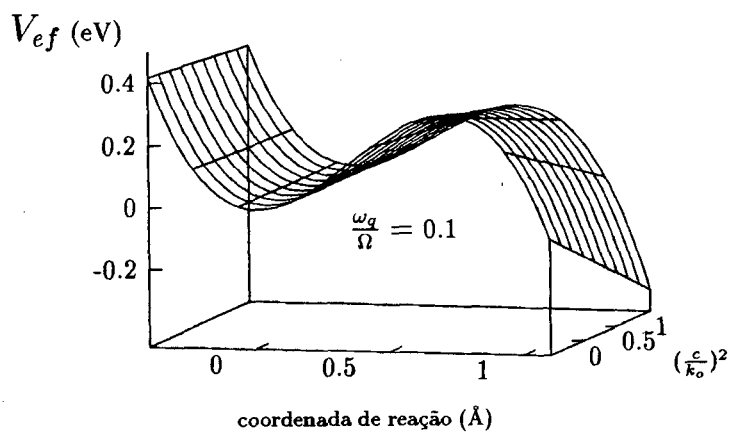


Fig 5.2 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da razão $\frac{\omega_g}{\Omega} = 0.1$. Destacamos que, para esta escolha em particular, os efeitos visualizados devem-se quase que totalmente a correção quadrática ao potencial efetivo.

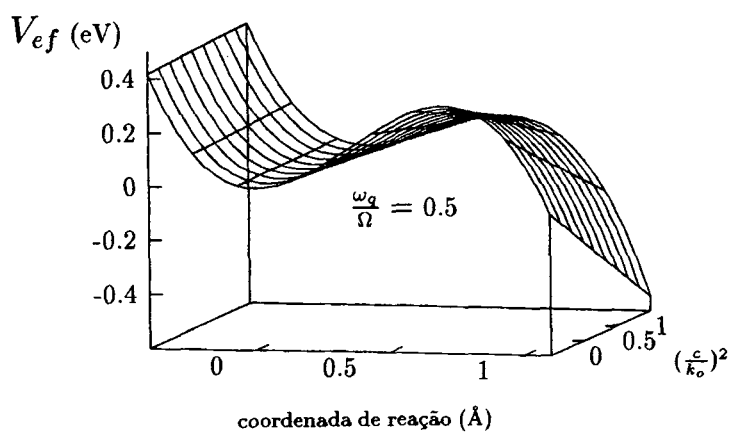


Fig 5.3 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da razão $\frac{\omega_g}{\Omega} = 0.5$

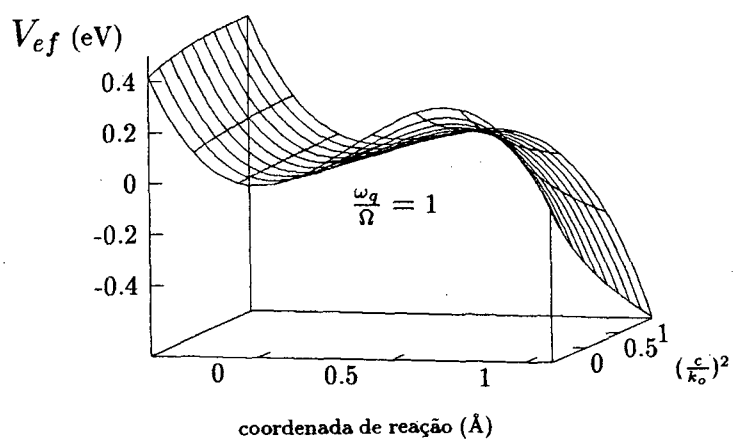


Fig 5.4 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da razão $\frac{\omega_q}{\Omega} = 1$

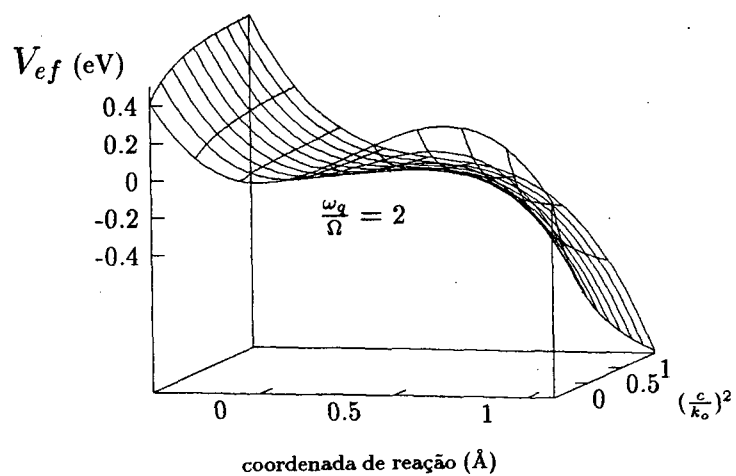


Fig 5.5 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da razão $\frac{\omega_q}{\Omega} = 2$

5.3 Escolha inicial de Ω

O aspecto restritivo levantado na secção precedente pode ser justificado com o auxílio intuitivo do conceito de integrais de trajetória. Tem-se, para acoplamentos não muito intensos, isto é, para valores pequenos da razão $(\frac{c}{k_0})^2$, superfícies de energia com a forma como a mostrada na figura 5.6, onde é simples identificarmos diferentes *trajetórias de tunelamento* que não se desviem excessivamente da direção parametrizada pela coordenada de reação (a direção $q = 0$), trajetórias estas que sentiriam um potencial muito semelhante ao potencial de reação original. Portanto, seria difícil esperar que um ente físico, tendo estas trajetórias como as de principal peso estatístico, sentisse um potencial efetivo onde não houvesse a presença da barreira.

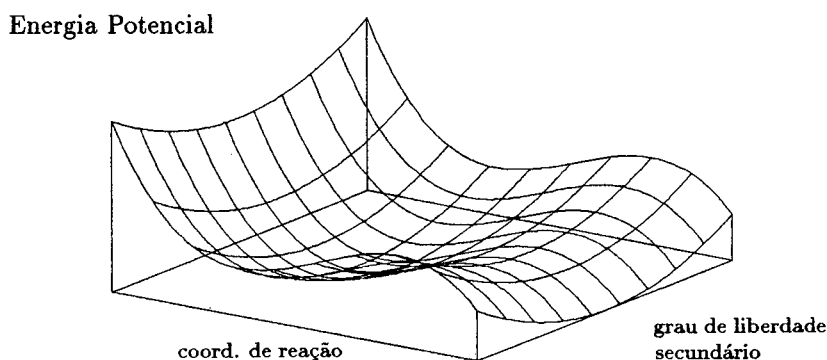


Fig 5.6 Esboço de uma superfície de energia típica para valores pequenos do acoplamento c

Assim, fica explícito que se escolhermos uma frequência geradora muito pequena (ou seja, uma grande razão $\frac{\omega q}{\Omega}$), obteremos um potencial efetivo sem significação

física, ficando explícita a importância da escolha correta da frequência geradora. Este é exatamente o ponto a que nos referíamos em capítulos anteriores quando foi ressaltado que se definíssemos este parâmetro *a posteriori* poderíamos otimizar nossos resultados quantitativos, ou seja, o que escolheríamos *a posteriori* seria exatamente o melhor Hamiltoniano efetivo. Sendo assim, poderíamos acabar aqui nossa discussão, escolhendo o parâmetro Ω tal que reproduzíssemos o melhor quanto possível resultados numéricos exatos para a taxa de transmissão, por exemplo. Porém, repetimos que procuraremos definir a frequência geradora a partir de argumentos físicos, que possam sempre defini-la *a priori*. Ora, isto é exatamente o que estava sendo feito na discussão precedente, obviamente num caráter meramente qualitativo, que apenas restringia, de maneira não muito precisa, a região de frequências a ser escolhida. De fato, ainda não nos é possível encontrar um argumento extremamente claro para a escolha deste parâmetro, e portanto, afim de mantermos a linha de ação proposta, escolheremos a frequência geradora *a partir apenas das quantidades físicas envolvidas*, ou seja, das frequências originais associadas ao problema.

Temos portanto, a princípio, três escolhas diferentes: a frequência do fundo do poço do potencial de reação; a definida pela curvatura no topo da barreira do potencial de reação; a frequência do grau de liberdade secundário, ou seja, a frequência do *banho*. Porém, uma característica peculiar a potenciais cúbicos, como o usado aqui, é o fato de sua curvatura ter o mesmo módulo em ambos os extremos, ou seja, a frequência do fundo do poço e a do topo da barreira são iguais, o que nos deixa reduzidos a escolher entre dois valores. Mas podemos analisar estas duas possíveis escolhas sob a luz da nossa discussão qualitativa feita há pouco, observando que a frequência do fundo poço (que talvez pareça a

princípio a escolha mais razoável) está justamente dentro do intervalo de frequências que já descartamos, por apresentar, como mostra a figura 5.7, um comportamento não físico para valores modestos do acoplamento. Sendo assim, descartamos esta possibilidade.

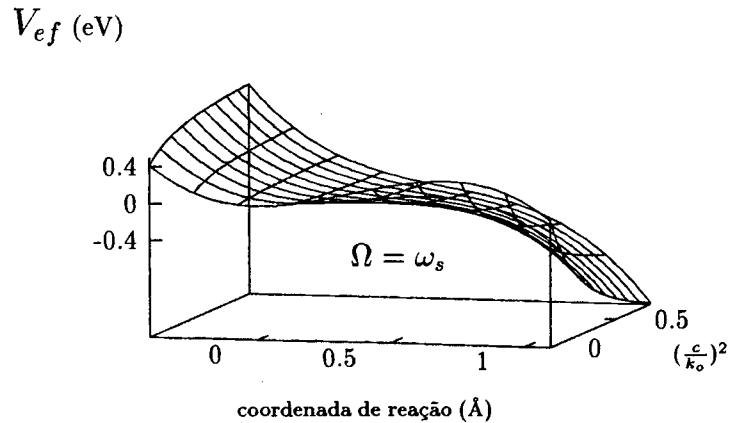


Fig 5.7 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da razão $\frac{\omega}{\Omega}$ tal que $\Omega = \omega_s$. Note-se o menor intervalo de acoplamento utilizado, ficando ainda assim evidente a atenuação excessiva da barreira.

Resta-nos, portanto, como último parâmetro físico apenas a frequência do banho de oscilador, para a qual não temos restrição aparente. Será esta, portanto, nossa escolha inicial, e num próximo passo comparar-se-ão então os resultados assim obtidos com os encontrados em alguns dos trabalhos já citados e também com resultados numéricos exatos.

CAPÍTULO 6

Resultados e Considerações Sobre o Subespaço Efetivo

6.1 Tratamento do Hamiltoniano Unidimensional

Até aqui temos nos referido à redução a apenas um grau de liberdade efetivo, a partir do problema multidimensional original, como, para efeitos práticos, a solução exata do problema¹. Justifica-se este fato considerando-se que Hamiltonianos unidimensionais razoáveis (dentre os quais o Hamiltoniano de reação original, e, por consequência, também o Hamiltoniano efetivo), podem ser diagonalizados numa base conveniente (no caso, de oscilador) com precisão, teoricamente, arbitrária².

¹Se a escolha do subespaço efetivo for correta.

²Basta lembrarmos que a diagonalização numa dada base, desde que completa e ortonormal, é completamente equivalente a resolução da equação de Schrödinger, e portanto nossa precisão é limitada apenas pelo critério exclusivamente técnico referente à capacidade computacional.

Muito embora a diagonalização resolva completamente o problema, podemos nos valer da aproximação de WKB, que prevê uma taxa de transmissão com a forma:

$$T = 2\pi\omega \exp \left[- \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{V(x) - E} \right] \quad (6.1)$$

onde x é adimensionalizado segundo a prescrição feita em 4.16 e tanto $V(x)$ como E estão em unidades de $\hbar\omega_{ef}$. x_1 e x_2 são os pontos de retorno clássicos.

Num problema como o que abordamos, podemos estar interessados basicamente em duas quantidades, o espectro de energia e a taxa de transmissão, a última relacionada diretamente à probabilidade de tunelamento. Os autovalores obtemos diretamente da diagonalização, sendo claro o interesse prático da diferença entre os níveis, pois mesmo desconhecendo-se o espectro dos graus de liberdade secundários, é possível, conhecendo-se a separação entre os níveis coletivos, excitar-se justamente o grau de liberdade de tunelamento, por este estar desacoplado dos demais. A taxa de transmissão calcularemos utilizando, na expressão 6.1, os autovalores de energia acima citados.

6.2 Nova Discussão Sobre a Frequência Geradora

Obtido então, em capítulos anteriores, um Hamiltoniano unidimensional efetivo, dependente do acoplamento entre os graus de liberdade originais e da frequência geradora Ω , podemos tratá-lo utilizando o maquinário citado na secção precedente e verificarmos se nossos resultados são consistentes, ressaltando-se que já fizemos uma escolha inicial para o parâmetro 'livre' Ω . Usamos o adjetivo "inicial" pois nada nos garante que o subespaço

efetivo seja o mesmo para diferentes valores de acoplamento, ou seja, para Hamiltonianos essencialmente diferentes³.

Comparemos então nossos resultados, obtidos com nossa escolha inicial para a frequência geradora Ω , com resultados numéricos exatos gerados por Miller [1] para a taxa de transmissão. Primeiro, apresentamos o espectro obtido com nossa escolha inicial para a frequência geradora Ω :

$\left(\frac{c}{k_0}\right)^2$	E_1	E_2
0.00	0.48908	1.42200
0.01	0.48820	1.41512
0.02	0.48728	1.41619
0.03	0.48634	1.41329
0.04	0.48537	1.41037
0.05	0.48436	1.40767
0.10	0.47899	1.39300
0.15	0.47308	1.37810
0.20	0.46672	1.36304
0.25	0.45997	1.34782
0.30	0.45290	1.33118
0.35	0.44500	1.31534
0.40	0.43816	1.29934
0.45	0.43017	1.28309

Tab 6.1 Autovalores do primeiro e segundo estados ligados, respectivamente E_1 e E_2 , para diferentes valores do acoplamento c , expresso pela razão $\left(\frac{c}{k_0}\right)^2$, em unidades de $\hbar\omega_{ef}$, obtidos fazendo-se $\Omega = \omega_q$.

onde utilizamos, para os parâmetros envolvidos, os seguintes valores numéricos, típicos de problemas de dissociação[1]:

$$\omega_q = 5,67 \times 10^{13} s^{-1}; \quad \omega_s = 1,915 \times 10^{14} s^{-1};$$

³De fato, é claro que em última instância o subespaço efetivo depende do acoplamento, porém inicialmente esperamos que esta dependência seja suave, e que possamos utilizar o subespaço efetivo das regiões vizinhas de $c = 0$, para descrever todo o intervalo de intensidades de acoplamento.

$$m = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}; \quad b_0 = 8,626 \times 10^{11} \text{ J/m}^3$$

A partir disto, podemos comparar a taxa de transmissão calculada para diferentes valores do acoplamento diretamente com os resultados numéricos de Miller[1], na figura a seguir:

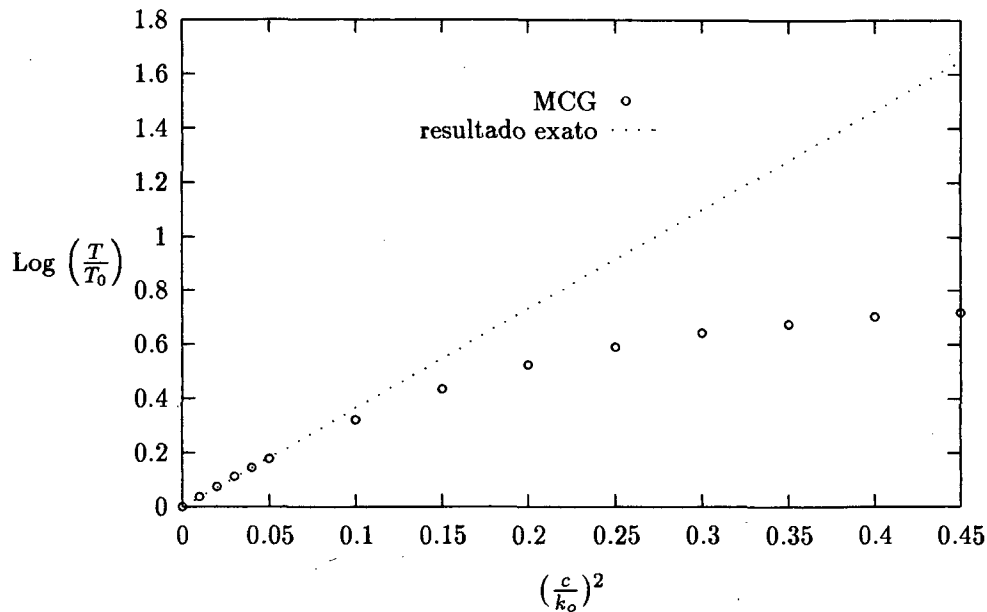


Fig 6.1 Resultados da taxa de transmissão obtidos para diferentes valores do acoplamento, normalizados pelo valor da mesma para $c = 0$, T_0 , em contraposição a um resultado numérico exato, normalizado da mesma forma.

Da figura 6.1 podemos notar que, para valores pequenos de acoplamento⁴, os resultados obtidos reproduzem os exatos, porém à medida que o acoplamento aumenta de intensidade, tais resultados perdem sua validade. Assim, somos forçados a abandonar nossa aproximação e adotar, *para diferentes acoplamentos, diferentes subespaços efetivos*. Portanto, se quisermos descrever um intervalo maior de intensidades de acoplamento, teremos que procurar novamente um argumento físico para a escolha agora dos *subespaços efetivos, dependentes do acoplamento*.

⁴Não tão pequenos, afinal neste intervalo observa-se um aumento de até duas vezes da taxa de transmissão.

Procuramos então uma frequência geradora que dependa do acoplamento, e admitiremos que esta dependência seja da forma:

$$\Omega = \Omega \left(\frac{c^2}{k_o} \right) \quad (6.2)$$

e que satisfaça:

$$\Omega(0) = \omega_q \quad (6.3)$$

Uma maneira de procurarmos por esta função é partirmos do fato que, como partimos da frequência do banho para acoplamentos próximos de zero, procuraremos definir uma frequência *corrigida* do banho, para acoplamentos diferentes de zero. Com certeza a primeira e mais natural correção que podemos supor é a que emerge da análise, já feita mais de uma vez anteriormente, feita ao completarmos os quadrados, porém agora na variável q , nos termos do Hamiltoniano original (eq. 2.1):

$$\frac{1}{2} a_o s^2 - csq$$

para obtermos:

$$\frac{1}{2} a_o \left(s - \frac{c}{a_o} q \right)^2$$

decorrendo daí uma correção ao termo quadrático em q :

$$-\frac{1}{2} \frac{c^2}{a_o} q^2$$

e teremos um termo de oscilador *corrigido* da forma:

$$\frac{1}{2} k_o \left(1 - \frac{k_o}{a_o} \left(\frac{c}{k_o} \right)^2 \right) q^2$$

a partir do qual podemos supor uma frequência:

$$\Omega \left(\frac{c}{k_o} \right) = \Omega_1 = \omega_q \sqrt{1 - \frac{k_o}{a_o} \left(\frac{c}{k_o} \right)^2} \quad (6.4)$$

como frequência geradora do sistema, que obedece nossas suposições 6.2 e 6.3.

A figura 6.2 mostra que os resultados gerados sob esta nova prescrição são melhores que os iniciais, e não inviabilizam a boa concordância já anteriormente obtida na vizinhança de $c = 0$, porém diferem destes muito pouco, o que nos mostra que aparentemente nossas correções apontam na direção correta, porém são ainda insuficientes.

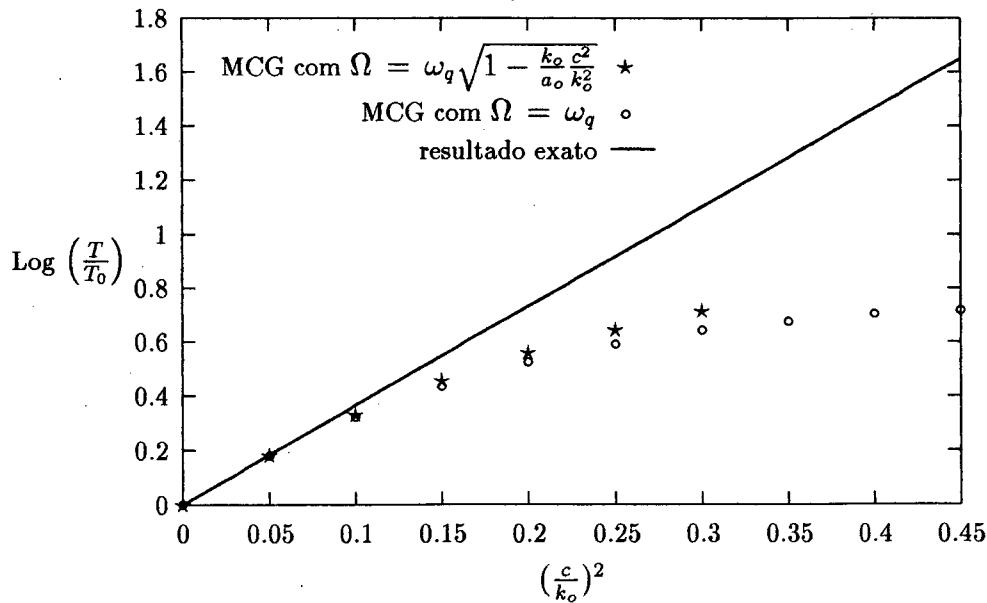


Fig 6.2 Resultados da taxa de transmissão obtidos para diferentes valores do acoplamento, normalizados pelo valor da mesma para $c = 0$, T_0 , obtidos sob duas prescrições diferentes para a frequência geradora, em contraposição a um resultado numérico exato, normalizado da mesma forma. Poderia-se esperar a pequena diferença entre estes e os resultados obtidos segundo a prescrição anterior observando-se que o coeficiente da razão $\frac{c^2}{k_o^2}$ na expressão 6.4 para a frequência geradora é muito pequeno (0.086).

Uma maneira de tentarmos buscar uma nova expressão para a frequência geradora é analisarmos nossa primeira tentativa sob o ponto de vista do próprio MCG. Assim fazendo, notamos que o termo de correção que introduzimos é o termo de correção quadrático previsto pelo MCG no potencial efetivo. Podemos portanto, corrigir a frequência geradora

introduzindo também um termo correspondente à massa efetiva. Nossa frequência geradora assume então a forma:

$$\Omega\left(\frac{c^2}{k_o^2}\right) = \omega_q \sqrt{\frac{1 - \frac{k_o}{a_o} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{M_{ef}(\Omega)/m_s}} \quad (6.5)$$

porém, desta maneira estamos definindo uma quantidade, a frequência geradora, a partir de outra, a massa efetiva, que por sua vez é função da primeira. Para contornar este problema, utilizaremos do lado direito da equação 6.5 a nossa escolha inicial $\Omega = \omega_q$, para obtermos finalmente:

$$\Omega(c^2/k_o^2) = \Omega_2 = \omega_q \sqrt{\frac{1 - \frac{k_o}{a_o} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{1 + \frac{c^2}{k_o^2}}} \quad (6.6)$$

A partir desta prescrição obtém-se os seguintes autovalores para a energia do primeiro e segundo estado ligados, como mostra a tabela 6.2 abaixo:

$\left(\frac{c}{k_o}\right)^2$	E_1	E_2
0.00	0.48908	1.42200
0.025	0.48675	1.41452
0.050	0.48408	1.40652
0.075	0.48105	1.39802
0.100	0.47767	1.38892
0.150	0.46997	1.36894
0.200	0.46029	1.34642
0.250	0.44916	1.32112
0.300	0.43632	1.29257
0.350	0.42172	1.25965
0.400	0.40529	1.21762
0.450	0.38698	1.13500

Tab 6.2 Autovalores do primeiro e segundo estados ligados, respectivamente E_1 e E_2 , para diferentes valores do acoplamento c , expresso pela razão $\left(\frac{c}{k_o}\right)^2$, em unidades de $\hbar\omega_{ef}$, obtidos utilizando-se a prescrição 6.7 para a frequência geradora.

Onde podemos observar que os autovalores apresentam uma sensibilidade maior com o acoplamento do que no caso anterior, lembrando que estes estão expressos em unidades de $\hbar\omega_{ef}$, que por sua vez também decresce com o acoplamento⁵. Poderíamos então supor que a taxa de transmissão variaria agora mais lentamente com o acoplamento, porém, de fato o que ocorre é justamente o contrário. Observando o comportamento do potencial efetivo, na figura seguir:

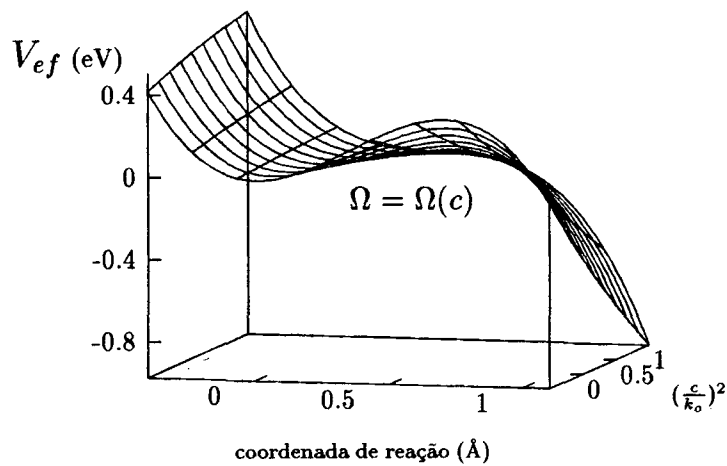


Fig 6.4 Variação do potencial efetivo com a razão $(\frac{c}{k_0})^2$ para uma escolha da frequência geradora Ω segundo a prescrição 6.6

Observa-se que a barreira atenua-se mais rapidamente com o acoplamento do que nos casos anteriores, tanto sua altura como sua largura, o que, obviamente, favorece a taxa de transmissão. Também contribuem neste sentido os efeitos da massa efetiva, que agora cresce de maneira um pouco mais moderada do que na prescrição anterior, conforme mostra a figura

⁵Pode-se notar que os autovalores expressos nestas unidades decrescem de maneira linear, e bem mais suavemente do que o fariam em unidades usuais (principalmente nas regiões de acoplamentos de intensidade baixa a moderada). Talvez, em outras situações físicas mais complicadas seja útil fazerem-se hipóteses desta ordem

a seguir.

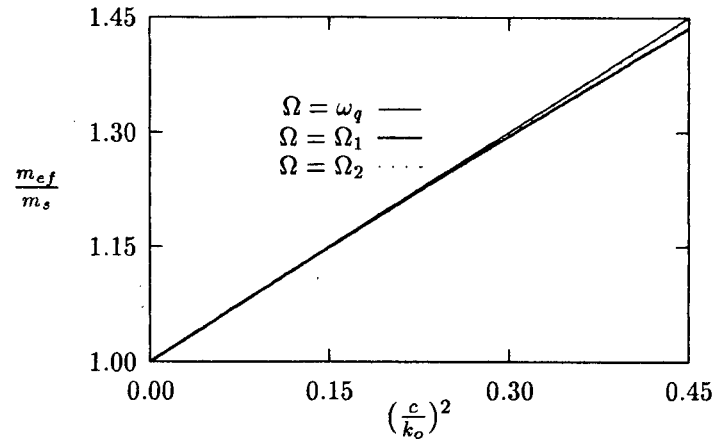


Fig 6.5 Comportamento da massa efetiva para as três prescrições de frequência geradora apresentadas até aqui. Com parâmetros da ordem dos aqui utilizados as duas primeiras prescrições tornam-se, quanto a massa efetiva, equivalentes.

Na próxima figura comparamos os resultados obtidos pelo MCG sob esta prescrição para a escolha da frequência geradora novamente com resultados numéricos exatos e com os resultados obtidos pelo método de integrais de trajetórias semi-clássicas de Makri e Miller [1], que está entre os melhores encontrados na literatura. Destaca-se que este está normalizado pelo valor *exato* da transmissão em $c = 0$, o que contribui para a concordância de seus resultados na região próxima de $c = 0$. Note-se que o MCG reproduz de maneira excelente os resultados numéricos até a região de acoplamentos em torno de 0.25 (o que corresponde a um aumento da taxa de transmissão de até 300%!), e para valores maiores obtém resultados ainda razoáveis.

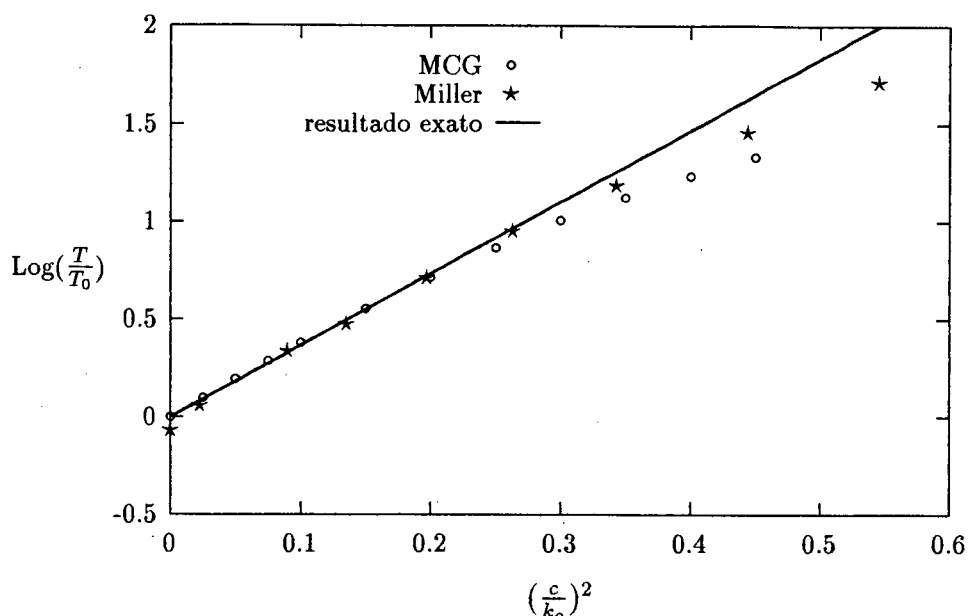


Fig 6.6 Resultados da taxa de transmissão obtidos para diferentes valores do acoplamento, normalizados pelo valor da mesma para $c = 0$, T_0 , obtidos segundo a prescrição 6.7 para a frequência geradora, em contraposição aos resultados obtidos através de trajetórias semi-clássicas e à um resultado numérico exato, normalizado da mesma forma.

Ainda podem ser propostas novas correções à frequência geradora afim de melhorarmos ainda mais nossos resultados, o que é perfeitamente factível⁶, porém não muito justificável nos termos usados até aqui. De qualquer maneira, o resultado apresentado acima é tão bom quanto os melhores encontrados na literatura, porém de aplicabilidade muito mais simples do que a maioria deles.

⁶Um pouco de atenção basta para notarmos que uma prescrição que diminua mais rapidamente a frequência geradora melhorará ainda mais os resultados obtidos. Uma maneira não tão artificial de fazer-se mais esta correção é substituímos a correção na constante de oscilador, $1 - c^2/k_0^2$, por uma função que decresça ainda mais rapidamente, e que tenha exatamente a quantidade $1 - c^2/k_0^2$ como a respectiva expansão em série em primeira ordem.

CAPÍTULO 7

Conclusões

7.1 Conexões com Outros Métodos Encontrados na Literatura

Uma discussão comparativa entre o método das coordenadas geradoras e o *basis set method* é apresentada em [5], um trabalho em linhas gerais semelhante a este, e conclue que, em relação ao *basis set*, o MCG tem aplicabilidade no mínimo equivalente, apresenta resultados geralmente melhores e, além disto, geralmente depende menos de dados obtidos '*a posteriori*' que aquele¹. Um fator responsável em grande parte por todos estes fatores, já levantado no trabalho citado, é que o MCG leva em conta de alguma maneira, que tentamos definir *a priori*, todos os estados de oscilador do grau de liberdade intrínseco.

¹As virtudes do *basis set*, além dos bons resultados encontrados, residem em sua abordagem extremamente direta e engenhosa de um problema mecânico quântico, o que explicita a física por trás deste, sendo portanto uma referência extremamente útil para qualquer tentativa de abordagem de problemas de mesma natureza

Destacamos aqui que exatamente o mesmo argumento pode ser levantado quando comparamos o MCG a métodos do tipo de *coupled channels*, pois imaginamos levar em conta muito mais canais acoplados do que usualmente se considera (1 ou 2), justamente por utilizarmos uma base não ortogonal na descrição de nosso problema².

Já o método de Miller [1], com o qual comparamos nossos resultados, procura uma prescrição para definir uma trajetória de tunelamento no espaço bidimensional original³, sendo que esta trajetória depende da intensidade do acoplamento analisado, concordando com nossa suposição de o subespaço efetivo ser diferente para diferentes intensidades de acoplamento.

Talvez porém o mais interessante seja a relação do MCG com o método semi-clássico de Brink *et al*, que parte de prerrogativas a princípio diferentes das aqui admitidas, constrói seu método de maneira completamente diversa à nossa, mas chega em resultados que, em certos limites, equivalem completamente aos nossos.

Basicamente o método de Brink *et al* propõe (e justifica) uma aproximação do tipo WKB para um problema bidimensional, obtendo explicitamente uma função de onda dependente de uma integral bem definida nos parâmetros do problema, mas não resolvível de maneira analítica (porém facilmente resolvível de maneira numérica e possível de ser resolvida de maneira simples em série).

No trabalho de Brink *et al*, durante o processo de obtenção da função de onda total do sistema, o problema é resolvido para valores pequenos da coordenada do grau

²Ou simplesmente por nossa base não ser uma base de oscilador usual, e portanto cada elemento de nossa base tem componentes em todo o espectro de oscilador.

³Uma possível fonte de comparação entre este método e o MCG é confrontarmos o potencial sentido pelo ente físico na trajetória parametrizada por Miller e o potencial efetivo aqui obtido.

de liberdade secundário, e a solução encontrada para a coordenada de oscilador é justamente um estado coerente, sendo que a partir desta é construída uma solução geral em que o grau de liberdade secundário é descrito por um estado coerente cuja magnitude depende da coordenada de reação, o que remete, e de certa maneira justifica, à nossa escolha das coordenadas geradoras.

Nos limites onde a frequência associada ao termo quadrático do potencial de reação é muito maior do que a frequência do banho (nos parâmetros aqui utilizados temos $\frac{\omega_q}{\omega_s} = 0.29$ e $\frac{\omega_q^2}{\omega_s} = 0.086$), Brink *et al* expandem sua solução geral em potências de $\frac{\omega_q}{\omega_s}$, e demonstram que, ao truncar esta série em primeira ordem, a solução obtida é equivalente à admissão da existência de um potencial e uma massa efetivos bem definidos na coordenada de reação. Estas quantidades são exatamente as previstas pelo MCG quando da escolha $\Omega = \omega_q$, exceto o termo linear do potencial, não previsto por Brink. Nestes limites onde ambos os métodos praticamente se equivalem (não se deve esquecer que para acoplamentos pequenos a prescrição 6.5 para a frequência geradora é muito próxima da frequência do banho), Brink *et al* utilizam, com sucesso, seu método para descrever a fissão espontânea do ^{234}U .

7.2 Considerações Finais

Analisando de uma maneira pragmática os resultados obtidos, pode-se dizer que obteve-se um relativo sucesso na análise do problema proposto através do método das coordenadas geradoras, afinal foi possível obtermos resultados que são ao menos tão bons

quanto qualquer outro encontrado na literatura, a partir de um método basicamente analítico e de razoável facilidade em sua aplicação. Considerando-se nossa proposta inicial, foi-nos possível até certo ponto estabelecermos sempre, *a priori*, a partir de argumentos razoáveis, os parâmetros ‘livres’ da teoria. Se não nos foi possível encontrar um argumento propriamente dito neste sentido, por outro lado conseguimos com razoável eficácia estender os limites de nossa escolha inicial, sendo que, de qualquer maneira, não utilizamos em nenhum ponto dados obtidos *a posteriori*.

Este trabalho tem como extensão óbvia a abordagem de problemas com mais graus de liberdade, sendo que a linha geral de ação já está traçada. Uma dificuldade que podemos já vislumbrar nestes casos será, quanto à escolha da frequência geradora inicial, como escolher entre as frequências dos graus de liberdade intrínsecos, principalmente se estas diferirem muito entre si. Talvez, neste caso, deva-se recorrer aos argumentos cinemáticos encontrados em [10].

Além disto, mesmo no âmbito bidimensional que abordamos há ainda espaço para correções. Pode-se intuir que a escolha inicial da frequência geradora como sendo igual a frequência do banho seja realmente exata apenas quando se verificar que a razão $\frac{\omega_q}{\omega_s}$ tenda a zero, sendo que nos casos não limites deve ser necessária ainda uma correção. Quanto à dependência da frequência geradora no acoplamento, uma proposta para uma nova correção já foi feita no capítulo 6. Além disto, poderíamos, ao invés de simplesmente substituímos o valor $\Omega = \omega_q$ no lado direito da equação 6.6:

$$\Omega\left(\frac{c^2}{k_o^2}\right) = \omega_q \sqrt{\frac{1 - \frac{k_o}{a_o} \left(\frac{c}{k_o}\right)^2}{m_{ef}(\Omega)/m_s}}$$

e a partir daí gerarmos numericamente um conjunto de frequências geradoras correspondente

cada um a um valor da intensidade do acoplamento calculando, num primeiro passo, a frequência geradora para um valor pequeno ϵ da razão $\frac{c^2}{k_0^2}$, utilizando-se de início $\Omega = \omega_q$ do lado direito da própria equação 6.6. Em seguida, calcularíamos a frequência geradora para uma valor 2ϵ do acoplamento utilizando do lado direito de 6.6 o valor obtido para a frequência geradora no passo inicial, ao invés da frequência do banho e teríamos assim uma frequência geradora para cada valor de acoplamento.

Apesar de nossos argumentos serem um tanto "intuitivos", parece-nos claro que os resultados obtidos sob as diferentes prescrições para a frequência geradora indicam que deve haver uma prescrição que reproduza os resultados exatos ou que se aproxime arbitrariamente destes. As correções que indicamos nestas conclusões melhoram ainda mais nossos resultados, mas não nos pareceram suficientemente justificáveis para serem incluídas aqui. A busca de melhores e mais rigorosas justificativa para a escolha da prescrição nos parece algo extremamente relevante. Imaginamos que a investigação cuidadosa de situações limite possa prover alguma informação. Num âmbito mais formal, o estudo do *overlap* entre a base dos *autokets* de posição do espaço de Hilbert relacionado ao Hamiltoniano original e os *autokets* do subespaço coletivo, se contrastado com transformações canônicas usuais e com alguns resultados obtidos por [4] será tema de futura investigação, que nos parece extremamente promissora.

Concluindo, foi-nos possível cumprir a proposta inicial levantada e ainda apontar direções possíveis para o desenvolvimento da aplicabilidade do método e para a abordagem de outros problemas relevantes. Parece-nos portanto que em breve, se prosseguido o seu desenvolvimento, o MCG poderá se assentar como um dos métodos mais eficazes e

completos para a descrição de fenômenos multidimensionais.

Apêndice A

Estados Coerentes

Os estados coerentes quase clássicos de oscilador harmônico são estados construídos de maneira que os valores esperados das quantidades dinâmicas X e P (posição e momento) reproduzam a dependência temporal das respectivas quantidades clássicas correspondentes.

Considerando um Hamiltoniano de oscilador harmônico:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (\text{A.1})$$

e seus operadores de criação e aniquilação associados:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \right) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X - i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \right) \quad (\text{A.2})$$

Se admitirmos a existência de uma família de estados definida por:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (\text{A.3})$$

notamos que a partir de:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha | X | \alpha \rangle = \langle [X, H] \rangle \quad (\text{A.4})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha | P | \alpha \rangle = \langle [P, H] \rangle \quad (\text{A.5})$$

e

$$\left[X, \frac{P^2}{2m} \right] = \frac{i\hbar}{m} P \quad (\text{A.6})$$

$$\left[P, \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right] = -i\hbar m \omega^2 X \quad (\text{A.7})$$

chegamos a:

$$\langle \dot{X} \rangle = \frac{1}{m} \langle P \rangle \quad (\text{A.8})$$

$$\langle \dot{P} \rangle = -m\omega^2 \langle X \rangle \quad (\text{A.9})$$

O sistema de equações (A.8,A.9) pode ser facilmente resolvido, e obtemos:

$$m \langle \ddot{X} \rangle = -m\omega^2 \langle X \rangle \quad (\text{A.10})$$

e

$$\langle \ddot{P} \rangle = -\omega^2 \langle P \rangle \quad (\text{A.11})$$

Onde reconhecemos as equações de movimento clássicas.

Pode-se também demonstrar que um estado coerente é um autoestado fundamental de oscilador deslocado da origem. Rotulando-se um estado fundamental de oscilador, $|0\rangle$, deslocado Δx da origem por β , temos:

$$|\beta\rangle = \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right]|0\rangle \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned}
a|\beta\rangle &= a \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right]|0\rangle \\
a|\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \right) \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right]|0\rangle \\
a|\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] + i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] \right) |0\rangle \\
a|\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \Delta x \right) + \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \right) |0\rangle \\
a|\beta\rangle &= \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + i\sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} P \right) |0\rangle + \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right] \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \Delta x |0\rangle \\
a|\beta\rangle &= a|0\rangle + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \Delta x \text{Exp}\left[\frac{-iP\Delta x}{\hbar}\right]|0\rangle \\
a|\beta\rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \Delta x |\beta\rangle \tag{A.13}
\end{aligned}$$

O que demonstra que estes são estados coerentes rotulados por $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \Delta x$. Portanto, por estar associado ao deslocamento em relação a origem de um autoestado fundamental de oscilador, o rótulo β é muitas vezes designado de *magnitude* do estado coerente.

Os estados coerentes possuem ainda uma série de propriedades úteis, que podem ser encontradas em várias referências, em particular em [] e []. Aqui ainda destacaremos que estes podem ser decompostos numa base de autofunções de oscilador harmônico, da forma:

$$|\alpha\rangle = \text{Exp}\left[-\frac{|\alpha|^2}{2}\right] \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi\rangle_n \tag{A.14}$$

E a partir do qual calculamos diretamente o *overlap*:

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \text{Exp} \left[-\frac{1}{2} (\alpha - \alpha')^2 \right] \quad (\text{A.15})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] N. Makri e W. H. Miller, *J. Chem. Phys.*, **91**(7), 4026 (1989).
- [2] C. H. Dasso, *Effects of Reaction Channels In Subbarrier Fusion Reactions* - Proceedings of the XXII International Winter meeting on nuclear Physics, Bornio, Italy - 1984, edited by I. Iorio.
- [3] N. Makri e W. H. Miller, *J. Chem. Phys.*, **86**(3), 1451 (1987).
- [4] D. M. Brink, M. C. Nemes e D. Vautherin *Annals of Physics*, **147**, 171 (1983).
- [5] André Campos Kersten Schmidt, *Tese de Mestrado*, UFSC, Agosto 1995
- [6] James J. Griffin, John A. Wheeler *Physical Review*, Volume 108, Number 2, 311 (1957).
- [7] A. F. R. de Toledo Piza, E. J. V. de Passos, D. Galetti, M. C. Nemes e M. M. Watanabe *Phys. Rev. C*, **15**(4), 1477 (1977).
- [8] A. F. R. de Toledo Piza e E. J. de Passos *Il Nuovo Cimento*, **45**(B), 1 (1978).
- [9] E. J. de Passos, F. F. de Souza Cruz, *Phys. Rev. C*, **24**(2), 690 (1981).
- [10] A. F. R. de Toledo Piza e E. J. de Passos *Phys. Rev. C*, **21**(1), 425 (1980)

- [11] P. Ring e P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem*, Capítulo 10, Springer-Verlag, New Iork, Heidelberg, Berlin, (1982).