



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Matheus Dalpra de Oliveira

CONTROLE QUÂNTICO DOS OSCILADORES
HARMÔNICOS DEPENDENTE DO TEMPO E FORÇADO

Volta Redonda - RJ

2016

Matheus Dalpra De Oliveira

CONTROLE QUÂNTICO DOS OSCILADORES
HARMÔNICOS DEPENDENTE DO TEMPO E FORÇADO

Dissertação apresentada ao curso de Pós-
Graduação em Física da Universidade Federal
Fluminense, como requisito parcial para a obten-
ção do Título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt

Volta Redonda-RJ

2016

O48 Oliveira, Matheus Dalpra de.
Controle quântico dos osciladores harmônicos dependente do tempo e forçado / Matheus Dalpra de Oliveira ; orientador: Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt -- Volta Redonda, 2016.
105 p. : Il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Volta Redonda, 2016.

Bibliografia: p. 91.93.

1. CONTROLE QUÂNTICO. 2. OSCILADOR HARMÔNICO. 3. OPERADOR INVARIANTE. Schmidt, Alexandre Grezzi de Miranda, Orientador. II. Universidade Federal Fluminense. Instituto de Física, Instituição responsável. III. Título.

CDD 530.12

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por me dar saúde para poder estudar.

Depois agradeço meus pais pela força, apoio moral e carinho que sempre me deram para poder sempre estudar mais.

E agradeço também aos meus professores da pós graduação e aos meus amigos da pós Anderson, Marcelo, Alan, Lais, Leandro, Mariano, pela ajuda e momentos de descontração, e em especial ao meu professor e orientador Alexandre Schmidt , que graças a ajuda dele pude adquirir conhecimento necessário para produzir esse presente trabalho.

Resumo

Nesse trabalho encontramos as funções de onda exatas para sistema quântico do oscilador harmônico com massa $m(t)$ e frequência $\omega(t)$ dependentes do tempo através do método do invariante de Lewis e Riesenfeld. A partir disso, calculamos a expressão exata da probabilidade de transição de um estado inicial dependente de $m(t)$ e $\omega(t)$ para um estado final estacionário conhecido. Assim aplicamos um modelo de massa e depois de frequência, ambos dependentes do tempo e de um parâmetro constante γ , de modo que controlamos o valor de γ para obter a máxima transição. Fizemos o mesmo procedimento para o oscilador harmônico forçado com força externa $f(t)$, calculamos a função de onda exata do sistema, e a expressão exata da probabilidade de transição de um estado inicial dependente de $f(t)$ para um estado final estacionário conhecido. Portanto determinamos, ou controlamos, o valor de γ presente em $f(t)$ para maximizar a transição entre os estados.

Abstract

In this work we found the exact wave functions for the quantum harmonic oscillator system with time-dependent mass $m(t)$ and frequency $w(t)$ through the method of Lewis and Riesenfeld invariant, and from that we calculated the exact expression of the transition probability from a initial state depending on $m(t)$ and $w(t)$ to a final known stationary state. Then we applied this method to a mass model and subsequently to a frequency model, both dependent on time and on a constant parameter γ , so that the the value of γ is controlled for obtaining the maximum transition probability. We applied the same procedure to the forced harmonic oscillator with external force $f(t)$, calculated the exact wave wave function of that system, and then calculated its exact transition probability from a initial state depending of $f(t)$ to a final known stationary state, thereby determining, or controlling, the value of γ in $f(t)$ for maximizing the transition between those states.

Lista de Figuras

1.1	Representação gráfica do controle da transição entre as densidades de probabilidade inicial $ \Psi_i ^2$ e final $ \Psi_f ^2$ através do controle $u(\gamma, t)$	6
4.1	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$	43
4.2	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 182$	43
4.3	Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para quando $m(t) = e^{0.315t}$ (curva azul) e quando $m(t) = 1$ (curva rosa).	44
4.4	Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $m(t) = e^{0.315t}$ (curva azul) e $m(t) = 1$ (curva rosa).	45
4.5	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$	46
4.6	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote final em $t = 150$	47
4.7	Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para quando $m(t) = e^{0.85t}$ (curva azul) e quando $m(t) = 1$ (curva rosa).	48

4.8	Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $m(t) = e^{0.85t}$ (curva azul) e $m(t) = 1$ (curva rosa).	48
4.9	Representação gráfica da energia total $E(t)$ para $\gamma = 0.85$ (curva rosa) e $\gamma = 0.315$ (curva azul).	49
4.10	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$	52
4.11	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 110$	53
4.12	Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para a frequência $\omega(t) = \frac{3.6}{1+1.2t}$ (curva azul) e frequência constante $\omega(t) = 1$ (curva rosa).	54
4.13	Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com frequência $\omega(t) = \frac{3.6}{1+1.2t}$ (curva azul) e $\omega(t) = 1$ (curva rosa).	55
4.14	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$	57
4.15	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 64$	57
4.16	Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para a frequência $\omega(t) = \frac{6}{1+2t}$ (curva azul) e frequência constante $\omega(t) = 1$ (curva rosa).	58
4.17	Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $\omega(t) = \frac{6}{1+2t}$ (curva azul) e $\omega(t) = 1$ (curva rosa).	59
4.18	Representação gráfica da energia total para $\gamma = 1.2$ (curva azul) e $\gamma = 2$ (curva rosa).	60

4.19	Representação gráfica da densidade de probabilidade do pacote de onda inicial(curva azul) e o pacote de onda alvo(curva rosa) em $t = 0$	62
4.20	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$	63
4.21	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $b_0 = 0.5$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).	63
4.22	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $b_0 = 0.5$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).	64
4.23	Representação gráfica da densidade de probabilidade do pacote de onda inicial(curva azul) e o pacote de onda alvo(curva rosa) em $t = 0$	65
4.24	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$	66
4.25	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $b_0 = 0.75$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).	66
4.26	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $b_0 = 0.75$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).	67
4.27	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$	69
4.28	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = e^{-0.465t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).	69

4.29	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = e^{-0.465t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).	70
4.30	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$	71
4.31	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = e^{-0.186t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).	72
4.32	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = e^{-0.186t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).	73
4.33	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180.981$	74
4.34	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = \sin(0.338603t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).	74
4.35	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = \sin(0.338603t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).	75
4.36	Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 179.574$	76
4.37	Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = \sin(1.06456t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).	76
4.38	Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = \sin(1.06456t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).	77

A.1	Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante de amortecimento $\gamma = 0.315$	84
A.2	Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante de amortecido $\gamma = 0.85$	84
A.3	Representação gráfica da energia total do sistema para $\gamma = 0.315$ (curva azul) e $\gamma = 0.85$ (curva rosa).	85
A.4	Representação gráfica da energia total do sistema para $\gamma = 0.315$ (curva azul) e $\gamma = 0.85$ (curva rosa).	86
A.5	Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante $\gamma = 1.2$	87
A.6	Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante $\gamma = 2$	88
A.7	Representação gráfica da energia total com $\gamma = 1.2$ (curva azul) e $\gamma = 2$ (curva rosa).	89

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	1
2 Oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo	8
2.1 Método do invariante quântico de Lewis e Riesenfeld	8
2.2 Construção de $I(t)$ para o oscilador harmônico dependente do tempo . . .	11
2.3 Cálculo dos autoestados de $I(t)$ e função de onda exata de $H(t)$	15
2.4 Construção de pacotes de onda e da probabilidade de transição	21
2.5 Cálculo do valor esperado de $x(t)$ e energia $E(t)$	26
3 Oscilador harmônico forçado	29
3.1 Cálculo da função de onda exata	29
3.2 Construção dos pacotes de onda inicial e final	33
3.3 Cálculo da probabilidade de transição entre os pacotes de onda	36
4 Aplicações	39

4.1	Oscilador harmônico quântico com massa dependente do tempo	40
4.1.1	Transição do pacote inicial centrado em $x = -1$ para o pacote final centrado em $x = 0.5$	42
4.1.2	Transição do pacote inicial centrado em $x = -2$ para o pacote final centrado em $x = 0.5$	45
4.2	Oscilador harmônico quântico com frequência dependente do tempo	50
4.2.1	Transição do pacote inicial centrado em $x = -0.5$ para o pacote final centrado em $x = 1.5$	51
4.2.2	Transição do pacote inicial centrado em $x = -1$ para o pacote final centrado em $x = 2$	56
4.3	Oscilador harmônico quântico forçado	60
4.3.1	Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) = b$	61
4.3.2	Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) = e^{bt}$	68
4.3.3	Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) =$ $\sin(bt)$	73
5	Conclusões e perspectivas	78
A	Oscilador harmônico clássico dependente do tempo	82
A.1	Oscilador harmônico clássico com massa dependente do tempo	83
A.2	Oscilador harmônico clássico com frequência dependente do tempo	86
B	Unidades atômicas	90
	Referências Bibliográficas	91

Capítulo 1

Introdução

No nosso dia-a-dia frequentemente nos deparamos com situações frequentes em que temos que decidir o estado ou comportamento de alguns objetos, por exemplo, a lâmpada está acesa ou apagada, a televisão está ligada ou desligada, e o carro ficará parado ou se movendo. Em todos estes casos quem decide o comportamento da situação somos nós, por exemplo, se a luz ficará acesa ou apagada dependerá da posição do interruptor, se a televisão ficará ligada ou desligada simplesmente apertando um botão do controle remoto, e por fim, o carro vai se mover ou ficar parado, se acelerarmos ou pisarmos no freio. Em suma nós controlamos de que maneira algo deve se comportar em situações corriqueiras. Pois bem, na natureza sabemos que existem leis físicas que governam certos sistemas e conhecendo estas leis e suas soluções saberemos como será seu comportamento. Não é de hoje que o homem tenta além de entender, controlar o comportamento de sistemas físicos para assim desenvolver novas tecnologias, por exemplo em máquinas térmicas, robótica, automóveis[1]. Uma questão importante é como fazer para obter resultados finais diferentes dos quais teríamos de maneira livre em sistemas físicos? Para isso precisaríamos controlar o comportamento desses sistemas assim como controlamos os fatos no nosso dia-

a-dia como visto acima. Com isso precisamos modificar o sistema físico em questão, ou seja, interferir no movimento do sistema, por exemplo acrescentando ou tirando energia do sistema com um potencial externo. Este método é conhecido como teoria de controle, que consiste em levar um sistema físico de um estado inicial até outro estado final pré-estabelecido. Para ilustrar essa ideia, considere o seguinte exemplo qualitativo: seja uma moeda de massa constante uniformemente distribuída, se lançamos ela para cima, ela irá girar no ar e quando atingir o solo vai estar com uma das faces virada para cima, ou seja, naturalmente existe 50% do resultado ser 'cara' e 50% de ser 'coroa'. Até aqui tudo bem, isso nós já sabemos. No entanto, e se quisermos a face 'cara' sempre virada pra cima? Nesse caso teremos que modificar o sistema manipulando a moeda, ou seja, podemos alterar a massa de uma das faces, ou alterar a frequência com que a moeda gira no ar através de um campo externo atuando na moeda, enfim, devemos produzir uma intervenção externa para que a moeda tenda a cair com a face 'cara' virada pra cima. Outro exemplo é o dado viciado, onde se manipula uma das faces aumentando sua massa, de forma que ela sempre ficará para baixo, conseqüentemente a face oposta sempre ficará para cima. Por exemplo, se quisermos que dê sempre a face 6 para cima, devemos aumentar a massa da face 1, ou seja, estamos interferindo no sistema do dado, de modo que estamos controlando o resultado final. Esta é a ideia central de como controlar um sistema físico classicamente. E se quisermos utilizar a teoria de controle num sistema quântico? Para responder essa questão vamos lembrar algumas propriedades de sistemas quânticos.

Em sistemas quânticos sabemos que grandezas físicas como posição $x(t)$, momento $p(t)$ e energia $E(t)$, agora são representadas por operadores e seus valores esperados possuem incertezas, e essas incertezas estão presentes no próprio observador e isso é conhecido

como princípio de incerteza de Heisenberg. Com isso lidamos sempre com probabilidades de encontrar os valores de grandezas e não com valores absolutos como ocorre classicamente. Essa é uma das diferenças primordiais de sistemas clássicos e quânticos. Assim, o nosso foco em teoria de controle em sistemas quânticos será em aumentar a probabilidade de encontrarmos determinados valores esperados das grandezas físicas. Desde as primeiras formulações da teoria quântica, a transição de estados quânticos de um sistema é uma das características que mais se destacam sendo objeto de estudo de muitos trabalhos científicos. A primeira e mais conhecida aplicação é a da transição de estados do átomo de hidrogênio, cujo espectro de energia observamos em experimentos de espectrometria[2]. Infelizmente, não são todos os sistemas quânticos que permitem determinar a transição com alta probabilidade, em tais sistemas as transições são dadas aleatoriamente quando é aplicada uma variação de energia. Nestes casos não conseguimos levar um estado inicial para o estado final alvo como queremos, temos que ir em busca de técnicas para induzir o sistema a produzir tal transição. Isto pode ser feito utilizando a teoria de controle de sistemas quânticos, que consiste na manipulação desses sistemas pela ação de campos com o objetivo de determinar explicitamente seu comportamento. Tipicamente, o problema consiste em conduzir um dado sistema quântico de um estado inicial para um estado final pré-estabelecido por meio de um potencial externo $V(x, t)$. Assim, podemos controlar a transição de estados ou comportamento do sistema através de parâmetros como um campo externo, como vemos na referência[3], ou quando um feixe laser interage com uma partícula[4].

Dentre algumas teorias de controle temos o controle ótimo, que consiste no estudo sobre o problema de controlar um sistema de EDO's (Equações diferenciais Ordinárias), $\dot{x}(t) = f(x(t), u(t))$ e minimizar, simultaneamente, um funcional do estado x e do

controle u . Um dos problemas de controle óptimo mais relevantes é aquele relacionado com a transferência do estado do sistema para um certo estado-alvo desejado em um tempo mínimo. Outra maneira de controlar é a partir da maximização da probabilidade de transição $w(\gamma, t)$, onde t é o tempo de transição, e γ é o controle que está associado à energia do sistema e é determinado para termos a máxima probabilidade de transição. Um dos ramos com mais aplicações é o da computação quântica, cujos especialistas consideram o controle quântico essencial para o desenvolvimento de tecnologias de informação e computação quântica[5].

O fato que torna a teoria do controle de sistemas quânticos ainda mais importante é o Prêmio Nobel de Física do ano 2012 ter sido concedido a Haroche e Wineland por terem desenvolvido técnicas experimentais para medição e manipulação de sistemas quânticos como íons em armadilhas e fótons em cavidades que conservam propriedades quânticas como pureza e emaranhamento. Essas técnicas são obtidas através do controle de sistema quânticos e são de grande importância pois tornam possível observar fenômenos quânticos experimentalmente e possui também aplicações na área de computação quântica[6, 7].

Tendo introduzido as ideias básicas da teoria de controle quântico e algumas aplicações, podemos aplicá-la em diversos sistemas físicos, mas vamos optar pelo oscilador harmônico que é um objeto de estudo importantíssimo na Física possuindo diversas aplicações como por exemplo na mecânica clássica, mecânica quântica, teoria quântica de campos, na matéria condensada no estudo de vibrações de moléculas ou dos átomos em um sólido. Um exemplo mais geral de oscilador é aquele onde tanto a massa quanto a frequência dependem do tempo. Um desses osciladores harmônico dependente do tempo que vem sendo objeto de estudo para modelar por exemplo sistemas dissipativos é o osci-

lador dado pelo Hamiltoniano abaixo

$$H(t) = e^{-\gamma t} \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2} m_0 \omega_0^2 e^{\gamma t} x^2, \quad (1.1)$$

onde ω_0 é frequência constante, e m_0 é a massa constante e γ é independente do tempo. Este sistema é conhecido como oscilador de Caldirola-Kanai descrito por Caldirola[8] e Kanai[9] afim de representarem um sistema quântico dissipativo, onde a massa $m(t) = m_0 e^{\gamma t}$ se comportaria como amortecimento. Sendo ele objeto de estudos em algumas referências como [10-12] que calculam função de onda exata do oscilador dependente do tempo.

Um segundo caso de dependência temporal no oscilador é o dado pelo Hamiltoniano abaixo

$$H(t) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0}{2} \left(\frac{\omega_0}{1 + \gamma t} \right)^2 x^2, \quad (1.2)$$

onde ω_0 é a frequência constante e γ é independente do tempo, e onde m_0 é a massa constante, onde essa frequência é objeto de estudo na referência[13]. Esse sistema é análogo ao de uma partícula carregada em uma região com campo magnético dado por $B(t)$, com $\omega(t) \propto |B(t)|$. Podemos citar outras aplicações do oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo como por exemplo em óptica quântica, onde Colegrave e Abdalla[14] aplicou esse sistema para determinar a intensidade do campo eletromagnético numa cavidade tipo Fabry-Perot e Brown[15]. Assim como em física molecular, onde Chumakov, Dodonov e Man'ko[16] determinaram a função de correlação do oscilador quântico singular não estacionário.

Neste trabalho vamos estudar osciladores mais gerais com $m = m(t)$, $\omega = \omega(t)$ e $f = f(t)$ de modo que manipulando apropriadamente estas funções seja possível interferir nos valores de observáveis físicas, como por exemplo $\langle x(t) \rangle$ e $\langle E(t) \rangle$. Assim vamos definir a função de onda exata $\Psi(x, t)$ do sistema que será dependente de um parâmetro $u(\gamma, t)$,

de modo que u será a massa, frequência e força, onde γ é uma constante, e determinamos analiticamente o valor de u para que aumente a probabilidade de transição do estado inicial evoluir no tempo e atingir um estado final estacionário prestabelecido, como mostra a figura (1.1). Ou seja, definiremos o estado final alvo estacionário, e vamos controlar o valor de $m(t)$, $\omega(t)$ e $f(t)$ para que em um dado tempo t o estado inicial esteja o máximo possível sobre o alvo.

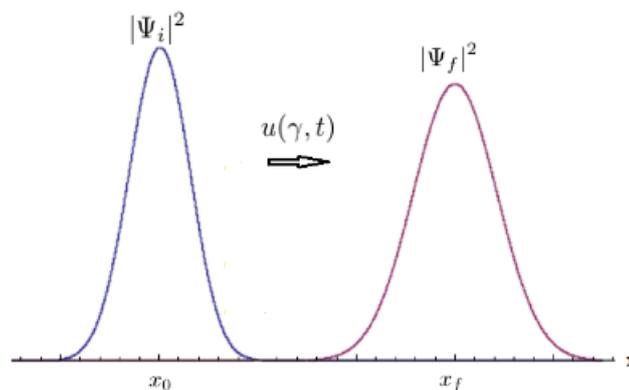


Figura 1.1: Representação gráfica do controle da transição entre as densidades de probabilidade inicial $|\Psi_i|^2$ e final $|\Psi_f|^2$ através do controle $u(\gamma, t)$.

A estrutura deste trabalho é descrita a seguir: no capítulo 2 apresentamos o método dos invariantes que consiste em um sistema de equações diferenciais não lineares acopladas que possuem uma constante de movimento em comum, que é a grandeza chamada invariante, e esse sistema é conhecido como sistema de Ermakov[17]. Foi Lewis[18] e Riesenfeld[19] que utilizaram pela primeira vez esse método em sistemas quântico para encontrar a função de onda exata do oscilador harmônico dependente do tempo, pois tem como base uma relação entre autoestados de um operador invariante e soluções da equação de Schrödinger correspondente aos Hamiltonianos como os dados em (1.1) e (1.2), e obtemos as funções de onda exatas para o oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo. Assim escolhi utilizar o método dos invariantes, pois conseguimos

obter a função de onda exata do sistema de uma forma bem mais simples, e esse método vem sendo muito utilizado como por exemplo nas refs[20, 21]. Também calculamos a expressão exata da probabilidade de transição entre um estado inicial dependente do tempo e um estado final alvo estacionário. No capítulo 3 tratamos o oscilador harmônico com uma força $f = f(t)$ arbitrária e calculamos soluções exatas para determinar a expressão exata da probabilidade de transição em termos de série de polinômios de Hermite. No capítulo 4 fazemos aplicações dos resultados anteriores de modo que controlamos os osciladores com $m(t)$, depois com $\omega(t)$ e por fim $f(t)$. No capítulo final apresentamos nossas conclusões e projetos futuros.

Capítulo 2

Oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo

Neste capítulo vamos construir a base matemática que iremos utilizar para a construção da função de onda exata do oscilador harmônico com frequência e massa dependentes do tempo. Determinada essa função de onda, vamos construir a probabilidade de transição $w(t)$ de um estado inicial que irá evoluir no tempo até atingir um estado final estacionário, e também determinar o comportamento do valor esperado de $x(t)$ e da energia $E(t)$ do sistema.

2.1 Método do invariante quântico de Lewis e Riesenfeld

Nesta seção vamos agora fazer uma descrição do método invariante idealizado por Lewis e Riesenfeld. Na mecânica quântica uma grandeza $I(q, p; t)$ é conservada se

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{[I, H]}{i\hbar} = 0, \quad (2.1)$$

onde q e p são variáveis canônicas, I e H são operadores hermitianos, $[I, H]$ é o comutador e \hbar é a constante de Plank dividida por 2π . O fato de o operador invariante I ser hermitiano nos permite fazer as seguintes afirmações:

- 1) Possui autovalores puramente reais;
- 2) Possui autofunções ortogonais que formam um conjunto completo.

Seja a função de onda de uma partícula dado por $\Phi_n(q, t)$, esse estado satisfaz a equação de Schrödinger, portanto temos que

$$i\hbar \frac{\partial \Phi_n(q, t)}{\partial t} = H(t)\Phi_n(q, t), \quad (2.2)$$

agora, notemos que, se aplicarmos $\Phi_n(q, t)$ à direita da equação (2.1), temos

$$\frac{\partial I}{\partial t} \Phi_n(q, t) = \frac{HI\Phi_n(q, t) - IH\Phi_n(q, t)}{i\hbar}, \quad (2.3)$$

e usando (2.2) obtemos

$$i\hbar \frac{\partial (I\Phi_n(q, t))}{\partial t} = H(I\Phi_n(q, t)). \quad (2.4)$$

Portanto a ação do operador invariante em um estado de Schrödinger $\Phi(q, t)$ produz uma outra solução da equação de Schrödinger $I\Phi_n(q, t)$.

Conforme visto na afirmação 2), um operador hermitiano $I(t)$ possui um conjunto completo de autoestados $\Phi_n(q, t)$ que satisfazem a equação de autovalor dado por λ

$$I(t)\Phi_n(q, t) = \lambda\Phi_n(q, t), \quad (2.5)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{n'}^*(q, t)\Phi_n(q, t)dx = \delta_{n,n'}, \quad (2.6)$$

onde λ é real em virtude de $I(t)$ ser hermitiano. Podemos mostrar que λ é constante da seguinte forma. Derivando (2.5) com relação ao tempo, obtemos

$$\frac{\partial I}{\partial t} \Phi_n + I \frac{\partial \Phi_n}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \Phi_n + \lambda \frac{\partial \Phi_n}{\partial t},$$

usando (2.2), temos

$$\frac{\partial I}{\partial t} \Phi_n + \frac{IH}{i\hbar} \Phi_n - \frac{\lambda}{i\hbar} \Phi_n = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \Phi_n,$$

aplicando $\Phi_{n'}^*$ no lado esquerdo da equação acima e integrando em q , usando (2.1) e (2.6), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda}{\partial t} &= \frac{(\lambda_{n'} - \lambda_n)}{i\hbar} \int \Phi_{n'}^* H \Phi_n dq + \frac{(\lambda_n - \lambda_{n'})}{i\hbar} \int \Phi_{n'}^* H \Phi_n dq \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Vimos então que $\Phi_n(q, t)$ forma um conjunto completo de autoestados para $I(t)$, portanto se multiplicarmos por um fator de fase $e^{i\alpha_n(t)}$, nosso estado continuará formando um conjunto completo, e a densidade de probabilidade não irá se modificar, portanto escrevendo agora na notação de Dirac temos

$$|\Psi_n(q, t)\rangle = e^{i\alpha_n(t)} |\Phi_n(q, t)\rangle. \quad (2.8)$$

Sabemos que $I|\Phi_n(q, t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger. Vamos verificar se $|\Psi_n(q, t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo. Para isso aplicando o autovetor (2.8) na equação de Schrödinger temos

$$i\hbar \frac{\partial (e^{i\alpha_n(t)} |\Phi_n(q, t)\rangle)}{\partial t} = H(t) e^{i\alpha_n(t)} |\Phi_n(q, t)\rangle. \quad (2.9)$$

Aplicando a derivada do lado esquerdo da eq.(2.9), obtemos

$$-i\hbar \frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} e^{i\alpha_n(t)} |\Phi_n(q, t)\rangle = -i\hbar e^{i\alpha_n(t)} \frac{\partial |\Phi_n(q, t)\rangle}{\partial t} + e^{i\alpha_n(t)} H(t) |\Phi_n(q, t)\rangle, \quad (2.10)$$

atuando $\langle \Psi_n(q, t) |$ no lado esquerdo de (2.10), temos

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} \langle \Phi_n(q, t) | \Phi_n(q, t) \rangle = \langle \Phi_n(q, t) | i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_n(q, t) \rangle, \quad (2.11)$$

usando (2.6) encontramos

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = \langle \Phi_n(q, t) | i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_n(q, t) \rangle. \quad (2.12)$$

Assim encontramos a relação de $\alpha_n(t)$ para que o autovetor em (2.8) satisfaça a equação de Schrödinger em (2.9), com isso obtemos a solução geral do sistema que será

$$|\Psi(q, t)\rangle = \sum_n c_n e^{i\alpha_n(t)} |\Phi_n(q, t)\rangle. \quad (2.13)$$

Com isso conseguimos determinar os autoestados de $I(t)$ e a solução exata de $H(t)$ será escrita como combinação linear desses autoestados. Na próxima seção vamos construir a expressão exata do operador invariante para o oscilador harmônico dependente do tempo.

2.2 Construção de $I(t)$ para o oscilador harmônico dependente do tempo

Nesta seção vamos construir o operador invariante $I(t)$ para o oscilador harmônico dependente do tempo.

Seja o oscilador harmônico dependente do tempo, cujo Hamiltoniano é dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega(t)^2q^2, \quad (2.14)$$

onde p e q são variáveis canônicas. Vamos definir o operador invariante quadrático dado por

$$I(t) = a(t)\frac{p^2}{2} + b(t)\frac{\{q, p\}}{2} + c(t)\frac{q^2}{2}, \quad (2.15)$$

onde $a(t)$, $b(t)$ e $c(t)$ são funções dependentes do tempo e $\{q, p\}$ é o anti-comutador.

Aplicando (2.15) em (2.1), obtemos

$$\frac{dI}{dt} = \frac{da(t)}{dt}\frac{p^2}{2} + \frac{a(t)}{2}\frac{dp^2}{dt} + \frac{b(t)}{dt}\frac{\{q, p\}}{2} + \frac{b(t)}{2}\frac{d\{q, p\}}{dt} + \frac{dc(t)}{dt}\frac{q^2}{2} + \frac{c(t)}{2}\frac{dq^2}{dt} = 0. \quad (2.16)$$

Lembrando da mecânica clássica que

$$p(t) = m(t)\frac{dq}{dt}, \quad (2.17)$$

e

$$\frac{dp}{dt} = -m(t)\omega(t)^2q(t), \quad (2.18)$$

a partir das relações (2.17) e (2.18), chegamos à

$$\frac{dq^2}{dt} = \frac{qp + pq}{m(t)} = \frac{\{q, p\}}{m(t)}. \quad (2.19)$$

Derivando $\{q, p\}$ com relação ao tempo, temos

$$\frac{d}{dt}\{q, p\} = \frac{dq}{dt}p + q\frac{dp}{dt} + \frac{dp}{dt}q + p\frac{dq}{dt}. \quad (2.20)$$

Utilizando novamente as relações (2.17) e (2.18), encontramos

$$\frac{d\{q, p\}}{dt} = \frac{2p^2}{m(t)} - 2m(t)\omega(t)^2q^2. \quad (2.21)$$

Multiplicando em (2.18) à esquerda por p e depois à direita por p e somando ambos os resultados, temos

$$\frac{dp^2}{dt} = -m(t)\omega(t)^2\{q, p\}. \quad (2.22)$$

Aplicando (2.19), (2.21) e (2.22) em (2.16), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} = \frac{da(t)}{dt} \frac{p^2}{2} - \frac{a(t)}{2} m(t)\omega(t)^2\{q, p\} + \frac{db(t)}{dt} \frac{\{q, p\}}{2} - \frac{b(t)}{2} 2m(t)\omega(t)^2q^2 + \\ \frac{b(t)}{2} \frac{2p^2}{m(t)} + \frac{dc(t)}{dt} \frac{q^2}{2} + \frac{c(t)}{2} \frac{\{q, p\}}{m(t)}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

reescrevendo (2.23) e usando a relação (2.1), temos

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} = \left(\frac{1}{2} \frac{da(t)}{dt} + \frac{b(t)}{m(t)} \right) p^2 + \left(-\frac{a(t)}{2} m(t)\omega(t)^2 + \frac{1}{2} \frac{db(t)}{dt} + \frac{c(t)}{2m(t)} \right) \{q, p\} \\ + \left(\frac{1}{2} \frac{dc(t)}{dt} - b(t)m(t)\omega(t)^2 \right) q^2 = 0. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Como $q^2 \neq 0$, $p^2 \neq 0$ e $\{q, p\} \neq 0$, e são linearmente independentes, então para que a igualdade em (2.24) seja satisfeita, podemos impor que

$$\frac{1}{2} \frac{da(t)}{dt} + \frac{b(t)}{m(t)} = 0, \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{2} \frac{dc(t)}{dt} - b(t)m(t)\omega(t)^2 = 0, \quad (2.26)$$

$$-\frac{a(t)}{2}m(t)\omega(t)^2 + \frac{1}{2} \frac{db(t)}{dt} + \frac{c(t)}{2m(t)} = 0. \quad (2.27)$$

Isolando $b(t)$ em (2.25) e substituindo em (2.27) e resolvendo para $c(t)$, temos

$$c(t) = m(t)^2\omega(t)^2a(t) + \frac{1}{2}m(t)\frac{dm(t)}{dt}\frac{da(t)}{dt} + \frac{m(t)^2}{2}\frac{d^2a(t)}{dt^2}. \quad (2.28)$$

Isolando $b(t)$ em (2.26) e substituindo em (2.25), obtemos

$$\frac{1}{2} \frac{dc(t)}{dt} + \frac{m(t)^2\omega(t)^2}{2} \frac{da(t)}{dt} = 0, \quad (2.29)$$

substituindo (2.28) em (2.29) e fazendo $a(t) = \lambda(t)$, definimos a função $a(t)$, assim obtemos

$$\frac{m(t)}{2} \frac{d^3\lambda}{dt^3} + \frac{dm(t)}{dt} \frac{d^2\lambda}{dt^2} + \left(2m(t)\omega(t)^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2m(t)}{dt^2}\right) \frac{d\lambda}{dt} + \left(\frac{dm(t)}{dt}\omega(t)^2 + m(t)\frac{d\omega^2}{dt}\right) \lambda = 0. \quad (2.30)$$

Integrando com relação ao tempo, e usando a ref.[22], temos

$$\frac{m(t)^2}{2} \frac{d^2\lambda}{dt^2} + \frac{m(t)}{2} \frac{dm(t)}{dt} \frac{d\lambda}{dt} + m(t)^2\omega(t)^2\lambda = \frac{1}{\lambda} + \frac{m(t)^2}{4\lambda} \left(\frac{d\lambda}{dt}\right)^2, \quad (2.31)$$

vemos que a relação do lado esquerdo de (2.31) é o próprio $c(t)$. Dessa forma obtemos os valores de $a(t)$, $b(t)$ e $c(t)$ em função de $\lambda(t)$, e são dados por

$$a(t) = \lambda(t), \quad (2.32)$$

$$b(t) = -\frac{m(t)}{2} \frac{d\lambda(t)}{dt}, \quad (2.33)$$

$$c(t) = \frac{1}{\lambda(t)} + \frac{m(t)^2}{4\lambda(t)} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt}\right)^2. \quad (2.34)$$

Agora, substituindo (2.32), (2.33) e (2.34) em (2.15), obtemos

$$I(t) = \left[\frac{1}{\lambda(t)} + \frac{m(t)^2}{4\lambda(t)} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt}\right)^2 \right] \frac{q^2}{2} - \frac{m(t)}{4} \frac{d\lambda(t)}{dt} \{q, p\} + \frac{\lambda(t)}{2} p^2, \quad (2.35)$$

simplificando,

$$I(t) = \frac{q^2}{2\lambda(t)} + \frac{1}{2\lambda(t)} \left[\frac{m(t)^2}{4} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt}\right)^2 q^2 - \frac{m(t)\lambda(t)}{2} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt}\right) \{q, p\} + \lambda(t)^2 p^2 \right], \quad (2.36)$$

o termo entre colchetes pode ser reescrito como

$$\frac{m(t)^2}{4} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt} \right)^2 q^2 - \frac{m(t)\lambda(t)}{2} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt} \right) \{q, p\} + \lambda(t)^2 p^2 = \left[\frac{m(t)}{2} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt} \right) q - \lambda(t)p \right]^2, \quad (2.37)$$

portanto, (2.36) ficará

$$I(t) = \frac{1}{2\lambda(t)} \left[q^2 + \left(\frac{m(t)}{2} \left(\frac{d\lambda(t)}{dt} \right) q - \lambda(t)p \right)^2 \right], \quad (2.38)$$

fazendo a mudança de variável $\lambda(t) = \rho^2 = \rho^2(t)$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda(t)}{dt} &= 2\rho \frac{d\rho}{dt}, \\ \frac{d^2\lambda(t)}{dt^2} &= 2 \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + 2\rho \frac{d^2\rho}{dt^2}, \end{aligned}$$

logo (2.38) ficará

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\frac{q^2}{p^2} + \frac{1}{\rho^2} \left(m(t)\rho \frac{d\rho}{dt} q - \rho^2 p \right)^2 \right] \quad (2.39)$$

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{q^2}{\rho^2} + \left(\rho p - m(t) \frac{d\rho}{dt} q \right)^2 \right]. \quad (2.40)$$

Com isso obtemos a expressão exata do operador intevariante $I(t)$. Agora, voltando a equação (2.31), obtemos

$$\frac{m(t)^2}{2} \left[2 \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + 2\rho \frac{d^2\rho}{dt^2} \right] + m(t) \frac{dm(t)}{dt} \rho \frac{d\rho}{dt} + m(t)^2 \omega(t)^2 \rho^2 = \frac{1}{\rho^2} + \frac{m(t)^2}{4\rho^2} 4\rho^2 \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2, \quad (2.41)$$

dividindo (2.41) por $m^2(t)$ e simplificando, temos

$$\frac{d^2\rho}{dt^2} + \gamma \frac{d\rho}{dt} + \omega(t)^2 \rho = \frac{1}{m^2(t)\rho^3}, \quad (2.42)$$

onde $\gamma = \frac{1}{m(t)} \frac{dm(t)}{dt}$. E escolhemos somente soluções reais de (2.42) pra que I seja hermitiano.

Portanto determinamos o operador invariante dado na eq.(2.40) para o oscilador harmônico dependente do tempo. Na próxima seção vamos determinar a expressão exata do autoestado de $I(t)$ e a solução exata do sistema para $H(t)$.

2.3 Cálculo dos autoestados de $I(t)$ e função de onda exata de $H(t)$

Conhecendo o Hamiltoniano $H(t)$ do sistema, e o operador $I(t)$, podemos agora determinar o autoestado de $I(t)$, e conseqüentemente a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo como dado abaixo

$$i\frac{\partial\Phi_n(q,t)}{\partial t} = H(t)\Phi_n(q,t), \quad (2.43)$$

onde fizemos $\hbar = 1$. Primeiramente, vamos definir a transformação unitária dada por

$$\Phi'_n(q,t) = U\Phi_n(q,t), \quad (2.44)$$

onde $U^\dagger U = \mathbf{1}$, e é dado por

$$U = \exp\left[-i\frac{m(t)q^2}{2\rho}\frac{d\rho}{dt}\right]. \quad (2.45)$$

Como já vimos na equação (2.6)

$$I\Phi_n(q,t) = \lambda_n\Phi_n(q,t), \quad (2.46)$$

aplicando U à esquerda de (2.46), temos

$$UI(\mathbf{1}\Phi_n(q,t)) = \lambda_n U\Phi_n(q,t), \quad (2.47)$$

usando (2.44) e $U^\dagger U = \mathbf{1}$, conseguimos escrever

$$I'\Phi'_n(q,t) = \lambda_n\Phi'_n(q,t), \quad (2.48)$$

com

$$I' = UIU^\dagger, \quad (2.49)$$

$$= U\left[\frac{1}{2}\frac{q^2}{\rho^2} + \frac{1}{2}\left(p\rho - m(t)q\frac{d\rho}{dt}\right)^2\right]U^\dagger, \quad (2.50)$$

ou,

$$I' = \frac{1}{2}\rho^{-2}Uq^2U^\dagger + \frac{1}{2}\rho^2Up^2U^\dagger + \frac{1}{2}m(t)^2 \left(\frac{d\rho}{dt}\right)^2 Uq^2U^\dagger - \frac{1}{2}\rho\frac{d\rho}{dt}m(t)U\{q,p\}U^\dagger. \quad (2.51)$$

Lembrando que para dois operadores A e B quaisquer, usando a relação de Baker-Hausdorff-Campbell, temos

$$B' = e^{\theta A} B e^{-\theta A}, \quad (2.52)$$

$$= B + \theta[A, B] + \frac{\theta^2}{2!}[A, [A, B]] + \frac{\theta^3}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (2.53)$$

Aplicando (2.53) em (2.51), com $A = q^2$ e $\theta = -i\frac{m(t)}{2\rho}\frac{d\rho}{dt}$, obtemos

$$I' = -\frac{1}{2}\rho^2\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2}\frac{q^2}{\rho^2}, \quad (2.54)$$

onde usamos também o fato de que $[q, p] = i$. Seja a mudança de variável $\sigma = \frac{q}{\rho}$, então $q = \sigma\rho$. Logo

$$I' = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} + \frac{1}{2}\sigma^2, \quad (2.55)$$

podemos escrever,

$$I' \phi_n(\sigma) = \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} + \frac{1}{2}\sigma^2\right) \phi_n(\sigma) = \lambda_n \phi_n(\sigma), \quad (2.56)$$

onde $\phi_n(\sigma)$ é a função de onda do oscilador harmônico livre com $\lambda_n = (n + \frac{1}{2})$. Portanto

$$\phi_n(\sigma) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}n!2^n}} e^{-\frac{\sigma^2}{2}} H_n(\sigma). \quad (2.57)$$

Agora temos que encontrar a condição de normalização de $\Phi_n(\sigma)$, assim devemos impor que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n'^*(q, t) \Phi_n'(q, t) dq = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(\sigma) \phi_n(\sigma) d\sigma = 1, \quad (2.58)$$

mudando a variável da segunda integral para $\sigma = \frac{q}{\rho}$, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n'^*(q, t) \Phi_n'(q, t) dq = \frac{1}{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*\left(\frac{q}{\rho}\right) \phi_n\left(\frac{q}{\rho}\right) dq = 1, \quad (2.59)$$

portanto temos que

$$\Phi'_n(q, t) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \phi_n \left(\frac{q}{\rho} \right). \quad (2.60)$$

Com isso podemos obter $\Phi_n(q, t)$ fazendo,

$$\Phi_n(q, t) = U^\dagger \Phi'_n(q, t), \quad (2.61)$$

$$= \exp \left[i \frac{m(t) q^2}{2\rho} \frac{d\rho}{dt} \right] \Phi'_n(q, t), \quad (2.62)$$

ou

$$\Phi_n(q, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} n! 2^n \rho}} \exp \left[\frac{im(t)}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \frac{i}{m(t)\rho^2} \right) q^2 \right] H_n \left(\frac{q}{\rho} \right). \quad (2.63)$$

Usando agora a equação (2.12), vamos determinar o valor de $\alpha_n(t)$,

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = \langle \Phi_n(q, t) | i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \Phi_n(q, t) \rangle, \quad (2.64)$$

$$= \langle \Phi_n(q, t) | \mathbf{1} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \mathbf{1} | \Phi_n(q, t) \rangle, \quad (2.65)$$

usando $\mathbf{1} = U^\dagger U$, temos

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = \langle \Phi_n(q, t) | U^\dagger U \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) U^\dagger U | \Phi_n(q, t) \rangle, \quad (2.66)$$

temos agora

$$U \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) U^\dagger = U i \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger - U H(t) U^\dagger, \quad (2.67)$$

assim, vamos resolver as duas transformações unitárias por parte, logo

$$\frac{\partial}{\partial t} U^\dagger = \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp \left[i \frac{m(t)}{2\rho} \frac{d\rho}{dt} q^2 \right] \right), \quad (2.68)$$

$$= \frac{i}{2} \left[\frac{\partial m(t)}{\partial t} \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + m(t) \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - m(t) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 \right] \left(\frac{q^2}{\rho^2} \right) U^\dagger, \quad (2.69)$$

portanto

$$U i \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial m(t)}{\partial t} \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + m(t) \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - m(t) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 \right] \left(\frac{q^2}{\rho^2} \right), \quad (2.70)$$

com $q'^2 = Uq^2U^\dagger$. Agora vamos reescrever $H(t)$ usando os operadores de criação a^\dagger e aniquilação a do operador invariante $I(t)$, logo usando a equação (2.40)

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\frac{q^2}{\rho^2} + \left(\rho p - m(t) \frac{d\rho}{dt} q \right)^2 \right], \quad (2.71)$$

reescrevendo,

$$I(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{q}{\rho} \right) + i \left(\rho p - m(t) q \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{q}{\rho} \right) - i \left(\rho p - m(t) q \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \right] - \frac{1}{2}, \quad (2.72)$$

assim, obtemos

$$I(t) = aa^\dagger - \frac{1}{2}, \quad (2.73)$$

onde,

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{q}{\rho} \right) + i \left(\rho p - m(t) q \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \right], \quad (2.74)$$

e

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{q}{\rho} \right) - i \left(\rho p - m(t) q \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \right], \quad (2.75)$$

de modo que usamos o fato de $[q, p] = i$. Agora somando (2.74) com (2.75) e simplificando, obtemos

$$q = \frac{\rho}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger), \quad (2.76)$$

subtraindo (2.74) com (2.75) e simplificando, obtemos

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{i}{\rho} + m(t) \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) a + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\rho} + m(t) \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) a^\dagger, \quad (2.77)$$

assim, substituindo (2.76) e (2.77) em (2.14), temos

$$H(t) = \frac{\beta_1^2 a^2 + \beta_2 (a^\dagger)^2 + \beta_1 \beta_2 (aa^\dagger + a^\dagger a)}{2m(t)} + \frac{m(t) \omega(t)^2 \rho^2}{4} (a + a^\dagger)^2, \quad (2.78)$$

$$= A + \left(\frac{\beta_1 \beta_2}{2m(t)} + \frac{m(t) \omega(t)^2 \rho^2}{4} \right) \{a, a^\dagger\}, \quad (2.79)$$

onde usamos,

$$(a + a^\dagger)^2 = a^2 + (a^\dagger)^2 + \{a, a^\dagger\},$$

com,

$$\begin{aligned}\beta_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{i}{\rho} + m(t) \frac{\partial \rho}{\partial t} \right), \\ \beta_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\rho} + m(t) \frac{\partial \rho}{\partial t} \right),\end{aligned}$$

e $\{a, a^\dagger\} = aa^\dagger + a^\dagger a = 2aa^\dagger - 1$ é o anticomutador, e usamos o fato de que o comutador $[a, a^\dagger] = 1$. E A é um operador dado por

$$A = \frac{\beta_1^2 a^2 + \beta_2 (a^\dagger)^2}{2m(t)} + \frac{m(t)\omega(t)^2 \rho^2}{4} (a^2 + (a^\dagger)^2). \quad (2.80)$$

Assim, temos que $H(t)$ ficará

$$H(t) = A + \left(2 \frac{\beta_1 \beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2 \rho^2 \right) \frac{I(t)}{2}, \quad (2.81)$$

usando $[a, a^\dagger] = 1$ e a relação (2.73), temos que o anticomutador ficará

$$\{a, a^\dagger\} = aa^\dagger + a^\dagger a, \quad (2.82)$$

$$= 2I(t), \quad (2.83)$$

voltando a equação (2.67), temos

$$UH(t)U^\dagger = UAU^\dagger + \frac{1}{2} \left(2 \frac{\beta_1 \beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2 \rho^2 \right) UI(t)U^\dagger, \quad (2.84)$$

$$= A' + \frac{1}{2} \left(2 \frac{\beta_1 \beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2 \rho^2 \right) I'(t), \quad (2.85)$$

onde usamos (2.59) e $A' = UAU^\dagger$. Portanto voltando à equação(2.66), obtemos

$$\begin{aligned}\langle \Phi_n(q, t) | U^\dagger U i \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger U | \Phi_n(q, t) \rangle &= \frac{1}{2\rho^2} \left(m(t) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 - \frac{\partial m(t)}{\partial t} \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} - m(t) \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} \right) \\ &\quad \times \langle \Phi'_n(q, t) | (q^2) | \Phi'_n(q, t) \rangle, \quad (2.86)\end{aligned}$$

usando (2.76), temos

$$\langle \Phi'_n(q, t) | (q^2) | \Phi'_n(q, t) \rangle = \frac{\rho^2}{2} \langle \Phi'_n(q, t) | (a^2 + (a^\dagger)^2 + \{a, a^\dagger\}) | \Phi'_n(q, t) \rangle, \quad (2.87)$$

$$= \rho^2 \langle \Phi'_n(q, t) | (I'(t)) | \Phi'_n(q, t) \rangle, \quad (2.88)$$

onde usamos o fato de que $\langle \Phi'_n(q, t) | (a^2 + (a^\dagger)^2) | \Phi'_n(q, t) \rangle = 0$ e de (2.48) temos que

$$\langle \Phi'_n(q, t) | (I'(t)) | \Phi'_n(q, t) \rangle = \rho^2 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.89)$$

então

$$\langle \Phi'_n(q, t) | U^\dagger U i \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger U | \Phi'_n(q, t) \rangle = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial m(t)}{\partial t} \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + m(t) \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - m(t) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 \right) \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.90)$$

Agora, para o segundo termo em (2.66), temos

$$\langle \Phi'_n(q, t) | H'(t) | \Phi'_n(q, t) \rangle = \langle \Phi'_n(q, t) | \left(A' + \frac{1}{2} \left(\frac{2\beta_1\beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2\rho^2 \right) \right) I'(t) | \Phi'_n(q, t) \rangle, \quad (2.91)$$

como $\langle \Phi'_n(q, t) | (a^2) | \Phi'_n(q, t) \rangle = 0$ e $\langle \Phi'_n(q, t) | (a^\dagger)^2 | \Phi'_n(q, t) \rangle = 0$, temos

$$\langle \Phi'_n(q, t) | A | \Phi'_n(q, t) \rangle = 0,$$

e

$$\begin{aligned} \langle \Phi'_n(q, t) | H'(t) | \Phi'_n(q, t) \rangle &= \left(\frac{2\beta_1\beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2\rho^2 \right) \langle \Phi'_n(q, t) | \frac{I'(t)}{2} | \Phi'_n(q, t) \rangle, \quad (2.92) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{2\beta_1\beta_2}{m(t)} + m(t)\omega(t)^2\rho^2 \right) \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.93) \end{aligned}$$

onde novamente usamos (2.48). Aplicando os valores de β_1 e β_2 , encontramos

$$\langle \Phi'_n(q, t) | H'(t) | \Phi'_n(q, t) \rangle = \left[\frac{1}{2m(t)} \left(\frac{1}{\rho^2} + m(t)^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^2 \right) + m(t)\omega(t)^2\rho^2 \right] \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.94)$$

somando (2.90) e (2.94), e simplificando obtemos

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial m(t)}{\partial t} \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{1}{2} m(t) \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \frac{1}{2m(t)\rho^2} - \frac{m(t)\omega(t)^2\rho^2}{2} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.95)$$

usando (2.42), obtemos

$$\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{m(t)\rho^2}, \quad (2.96)$$

assim, integrando ambos os lados com relação a t , obtemos

$$\alpha_n(t) = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{1}{m(t')\rho(t')^2} dt', \quad (2.97)$$

com isso, conseguimos obter o autoestado completo $\Psi_n(q, t)$, dado por

$$\Psi_n(q, t) = e^{i\alpha_n(t)} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n! \rho}} H_n \left(\frac{q}{\rho} \right) \exp \left[\frac{im(t)}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{m(t)\rho^2} \right) q^2 \right], \quad (2.98)$$

onde $\alpha_n(t)$ é dado em (2.97). Com isso obtemos a função de onda exata do sistema que satisfaz (2.43).

2.4 Construção de pacotes de onda e da probabilidade de transição

Vamos agora definir duas funções de onda, inicial e final, de modo que iremos determinar a probabilidade de transição do estado inicial para o final. Seja o pacote de onda inicial,

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \exp \left[-\frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right], \quad (2.99)$$

onde, x_{0i} é o centro do pacote e Δ_0 é a sua largura. O pacote final é dado por

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \exp \left[-\frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} \right], \quad (2.100)$$

onde x_{0f} é o centro do pacote. Portanto, queremos que a densidade de probabilidade do pacote inicial evolua no tempo até atingir o pacote final estacionário, assim vamos usar a equação (2.98) como base do pacote de onda inicial, logo

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \Psi_n(x, t), \quad (2.101)$$

onde c_n são independentes do tempo. Assim, precisamos determinar os valores de c_n no instante $t = 0$, multiplicando à esquerda de (2.101) por $\Psi_m^*(x, 0)$ e integrando em x , temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x, 0) \Psi(x) dx = \sum_n c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x, 0) \Psi_n(x, 0) dx, \quad (2.102)$$

como $\Psi_n(x, t)$ forma uma base ortonormal, temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x, 0) \Psi_n(x, 0) dx = \delta_{m,n}, \quad (2.103)$$

com isso, obtemos

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x, 0) \Psi(x, 0) dx. \quad (2.104)$$

Assim, sabemos como determinar o valor de c_n no instante $t = 0$, pois é quando o pacote inicial começa a evoluir no tempo. Usando $\dot{\rho}$ como notação de derivada temporal, temos

$$c_n = z \int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{x}{\rho(0)} \right) \exp \left[\frac{im(0)}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{m(0)\rho(0)} \right) x^2 - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx, \quad (2.105)$$

onde,

$$z = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi n!} 2^n \rho(0)}},$$

completando o quadrado do termo entre colchetes na integral em (2.105), temos

$$\frac{im(0)}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{m(0)\rho(0)} \right) x^2 - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} = -c \left(x - \frac{d}{2c} \right)^2 + \frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2}, \quad (2.106)$$

onde

$$c = \frac{1}{4\Delta_0^2} - \frac{i}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{\rho(0)^2} \right),$$

$$d = \frac{x_{0i}}{2\Delta_0^2},$$

assim, a integral em (2.105) fica

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{x}{\rho(0)} \right) \exp \left[\frac{im(0)}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{m(0)\rho(0)} \right) x^2 - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx =$$

$$\exp \left[\frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{x}{\rho(0)} \right) \exp \left[- \left(\sqrt{c}x - \frac{d}{2\sqrt{c}} \right)^2 \right] dx, \quad (2.107)$$

fazendo mudança de variável $y = \sqrt{c}x$, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{x}{\rho(0)} \right) \exp \left[\frac{im(0)}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{m(0)\rho(0)} \right) x^2 - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx = \exp \left[\frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2} \right] \frac{1}{\sqrt{c}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{y}{\sqrt{c}\rho(0)} \right) \exp \left[- \left(y - \frac{d}{2\sqrt{c}} \right)^2 \right] dy, \quad (2.108)$$

usando o resultado dado na ref.[23], temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\alpha y) e^{-(y-z)^2} dy = \sqrt{\pi} (1 - \alpha^2)^{\frac{n}{2}} H_n \left(\frac{\alpha z}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \right), \quad (2.109)$$

logo, aplicando (2.109) em (2.108)

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{x}{\rho(0)} \right) \exp \left[\frac{im(0)}{2} \left(\frac{\dot{\rho}(0)}{\rho(0)} + \frac{i}{m(0)\rho(0)} \right) x^2 - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx = \exp \left[\frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2} \right] \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{\rho^2 c - 1}{\rho^2 c} \right)^{\frac{n}{2}} H_n \left(\frac{d}{2\sqrt{c}(\rho^2 c - 1)} \right), \quad (2.110)$$

voltando à equação (2.105)

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}n!2^n\rho(0)}} \exp \left[\frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2} \right] \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{\rho(0)^2 c - 1}{\rho(0)^2 c} \right)^{n/2} \times H_n \left(\frac{d}{2\sqrt{c}(\rho(0)^2 c - 1)} \right), \quad (2.111)$$

Agora, vamos definir o pacote de onda final usando como base uma função de onda estacionária $\phi_m(x)$, logo

$$\Phi(x) = \sum_m d_m \phi_m(x), \quad (2.112)$$

onde

$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}m!2^m}} H_m(x) \exp \left[-\frac{x^2}{2} \right], \quad (2.113)$$

logo, assim como fizemos para c_n , temos para d_m que

$$d_m = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m(x) \Phi(x) dx, \quad (2.114)$$

usando (2.100), temos

$$d_m = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}m!2^m}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) \exp \left[-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx, \quad (2.115)$$

completando quadrado o termo entre colchetes, temos

$$-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} = -a \left(x - \frac{b}{2a} \right)^2 + \frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2}, \quad (2.116)$$

onde

$$a = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\Delta_0^2} \right),$$

$$b = \frac{x_{0f}}{4\Delta_0^2},$$

a integral em (2.115) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) \exp \left[-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx = \exp \left[\frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2} \right] \times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) \exp \left[- \left(\sqrt{a}x - \frac{b}{2\sqrt{a}} \right)^2 \right] dx, \quad (2.117)$$

fazendo a mudança de variável $y = \sqrt{a}x$, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) \exp \left[-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx = \exp \left[\frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2} \right] \frac{1}{\sqrt{a}} \times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n \left(\frac{y}{\sqrt{a}} \right) \exp \left[- \left(y - \frac{b}{2\sqrt{a}} \right)^2 \right] dy, \quad (2.118)$$

usando novamente o resultado (2.109), (2.118) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) \exp \left[-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0f})^2}{4\Delta_0^2} \right] dx = \exp \left[\frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2} \right] \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(1 - \frac{1}{a} \right)^{\frac{m}{2}} \times$$

$$H_m \left(\frac{b}{2\sqrt{a(a-1)}} \right), \quad (2.119)$$

portanto, substituindo (2.119) em (2.115), obtemos

$$d_m = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}m!2^m}} \exp \left[\frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2} \right] \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(1 - \frac{1}{a} \right)^{\frac{m}{2}} H_m \left(\frac{b}{2\sqrt{a(a-1)}} \right).$$

(2.120)

Tendo calculado os valores de c_n e d_m , construímos os pacotes de onda inicial e final, de modo que o pacote de onda inicial irá evoluir no tempo até atingir o pacote de

onda final estacionário. Para sabermos o quanto o pacote de onda inicial vai estar sobre o final, vamos construir a probabilidade de transição entre $\Psi(x, t)$ e $\Phi(x)$ definida por

$$w(t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \Psi(x, t) dx \right|^2, \quad (2.121)$$

usando (2.112) e (2.101), temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \Psi(x, t) dx = \sum_m \sum_n d_m^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \Psi_n(x, t) dx, \quad (2.122)$$

definindo

$$a_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \Psi_n(x, t) dx, \quad (2.123)$$

e usando (2.113) e (2.98), temos

$$a_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{\pi m! n! 2^{m+n} \rho}} e^{i\alpha_n(t)} \int_{-\infty}^{\infty} H_m^*(x) H_n \left(\frac{x}{\rho} \right) \exp \left[- \left(\frac{1}{2\rho^2} - \frac{-im(t)\dot{\rho}}{2\rho} \right) x^2 - \frac{x^2}{2} \right] dx, \quad (2.124)$$

fazendo

$$\gamma = \left(\frac{1}{2\rho^2} - \frac{-im(t)\dot{\rho}}{2\rho} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.125)$$

temos que a integral em (2.124) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m^*(x) H_n \left(\frac{x}{\rho} \right) \exp \left[- \left(\frac{1}{2\rho^2} - \frac{-im(t)\dot{\rho}}{2\rho} \right) x^2 - \frac{x^2}{2} \right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n \left(\frac{x}{\rho} \right) e^{-\gamma x^2} dx. \quad (2.126)$$

Seja o resultado dado na ref.[25]

$$J_{(m,n)} = \int_{-\infty}^{\infty} H_m(ax) H_n(bx) e^{-cx^2} dx, \quad (2.127)$$

$$J_{(m,n)} = n_{<}! \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{c-a^2}{c-b^2} \right)^{\frac{m-n}{4}} \left(2\sqrt{\frac{a^2}{c} + \frac{b^2}{c} - 1} \right)^{\frac{m-n}{2}} P_{\frac{m+n}{2}}^{\frac{|m-n|}{2}} \left(\frac{a^2 b^2}{ca^2 + b^2 c - c^2} \right),$$

onde $c > 0$, $n_<$ é o mínimo entre m e n , P é o polinômio de Legendre Associado[26] e $J_{m,n} \neq 0$, se e somente se $m - n$ for par, assim aplicando (2.127) em (2.126), temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n\left(\frac{x}{\rho}\right) e^{-\gamma x^2} dx = n_<! \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \left(\frac{\gamma-1}{\gamma-\frac{1}{\rho^2}}\right)^{\frac{m-n}{4}} \left(\sqrt{\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma\rho^2}} - 1\right)^{\frac{m+n}{2}} \times P_{\frac{m+n}{2}}^{\frac{|m-n|}{2}}\left(\frac{1}{\rho^2\gamma + \gamma - \rho^2\gamma^2}\right), \quad (2.128)$$

por fim, substituindo (2.128) em (2.124), obtemos

$$a_{m,n} = \frac{e^{i\alpha_n(t)} (-\theta i)^{\frac{|m-n|}{2}}}{\sqrt{\sqrt{\pi} m! n! \rho}} (n_<!) \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \left(\frac{\gamma-1}{\gamma-\frac{1}{\rho^2}}\right)^{\frac{m-n}{4}} \left(\sqrt{\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma\rho^2}} - 1\right)^{\frac{m+n}{2}} \times P_{\frac{m+n}{2}}^{\frac{|m-n|}{2}}\left(\frac{1}{\rho^2\gamma + \gamma - \rho^2\gamma^2}\right), \quad (2.129)$$

introduzimos o fator $(-\theta i)^{\frac{|m-n|}{2}}$, onde θ é o sinal de $\frac{m(t)\dot{\rho}}{\rho}$, para corrigir o resultado da integral, pois γ possui termo imaginário que pode variar o sinal de acordo com o tempo, por isso introduzimos o fator para ajustar o sinal correto de cada valor de $a_{m,n}$. Assim, tendo encontrado o valor de $a_{m,n}$ voltamos a equação (2.120), logo

$$w(t) = \left| \sum_m \sum_n d_m^* c_n a_{m,n} \right|^2, \quad \text{para } (m-n) \text{ par}, \quad (2.130)$$

com $a_{m,n}$ dado em (2.129) e c_n e d_m dados em (2.111) e (2.120) respectivamente.

Construímos nesta seção os pacotes de onda inicial e final e a probabilidade de transição deles para o oscilador harmônico dependente do tempo.

2.5 Cálculo do valor esperado de $x(t)$ e energia $E(t)$

Agora vamos determinar o comportamento do valor esperado de $x(t)$ e a energia do sistema $E(t)$. Assim $x(t)$ é definido como

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx, \quad (2.131)$$

usando (2.101), temos

$$\langle x(t) \rangle = \sum_n \sum_{n'} c_{n'}^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_{n'}^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx, \quad (2.132)$$

logo, usando (2.98) a integral em (2.132) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_{n'}^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = \frac{e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_{n'}(t))}}{\sqrt{\pi n! n'! 2^{n+n'} \rho^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x H_n \left(\frac{x}{\rho} \right) H_{n'} \left(\frac{x}{\rho} \right) \exp \left[-\frac{x^2}{\rho^2} \right] dx, \quad (2.133)$$

fazendo a mudança de variável $y = \frac{x}{\rho}$, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_{n'}^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_{n'}(t))} \frac{1}{\sqrt{\pi n! n'! 2^{n+n'} \rho^2}} \rho^2 \int_{-\infty}^{\infty} y H_n(y) H_{n'}(y) e^{-y^2} dy, \quad (2.134)$$

usando a identidade dada na ref.[27], temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} y H_n(y) H_{n'}(y) e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} 2^{n-1} n! \delta_{n', n-1} + \sqrt{\pi} 2^n (n+1)! \delta_{n', n+1}, \quad (2.135)$$

aplicando o resultado de (2.135) em (2.134) e substituindo o resultado em (2.132), obtemos uma expressão exata para o valor esperado da posição,

$$\langle x(t) \rangle = \sum_n \sum_{n'} c_{n'}^* c_n \frac{e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_{n'}(t))}}{\sqrt{\pi n! n'! 2^{n+n'}}} \rho (\sqrt{\pi} 2^{n-1} n! \delta_{n', n-1} + \sqrt{\pi} 2^n (n+1)! \delta_{n', n+1}). \quad (2.136)$$

Tendo determinado o valor esperado de $x(t)$, vamos agora calcular a energia do sistema que será dada por

$$\langle E(t) \rangle = \langle \Psi(x, t) | H(t) | \Psi(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx, \quad (2.137)$$

efetuando a derivada temporal, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(x, t), \quad (2.138)$$

usando (2.98), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{i\alpha_n(t)} \left(i\dot{\alpha}_n(t) \Phi_n - \frac{\dot{\rho}}{2\rho} \Phi_n + \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{im(t)\rho}{2\rho} - \frac{1}{2\rho} \right] x^2 \Phi_n \right) \\ &- \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{i\alpha_n(t)} \left((\sqrt{\pi n! 2^n \rho})^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{im(t)\rho}{2\rho} x^2 - \frac{x^2}{2\rho} \right] \frac{2n\dot{\rho}}{\rho^2} x H_{n-1} \left(\frac{x}{\rho} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.139)$$

onde Φ_n é dado em (2.63). Substituindo (2.139) em (2.137) e efetuando a integral, obtemos

$$\langle E(t) \rangle = i \sum_n \sum_{n'} c_{n'}^* c_n e^{-i(\alpha_{n'} - \alpha_n)} \left(i\alpha_n \delta_{n,n'} - \frac{\dot{\rho}}{2\rho} \delta_{n,n'} + (\pi n! n'! 2^{n+n'})^{-\frac{1}{2}} [y_{n,n'} - z_{n,n'}] \right), \quad (2.140)$$

onde definimos

$$y_{n,n'} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{im(t)\dot{\rho}}{2\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right] \rho^2 \sqrt{\pi} [2^{2n-1}(2n+1)n! \delta_{n',n} + 2^n(n+2)! \delta_{n',n+2} + 2^{n-2}n! \delta_{n',n-2}], \quad (2.141)$$

$$z_{n,n'} = \frac{2n\dot{\rho}}{\rho} \sqrt{\pi} (2^{n-2}(n-1)! \delta_{n',n-2} + 2^{n-1}n! \delta_{n',n}). \quad (2.142)$$

Com isso concluímos o capítulo tendo calculado o valor esperado de $x(t)$ e a respectiva energia do sistema. No próximo capítulo vamos estudar o oscilador harmônio forçado e determinar a expressão exata da transição entre pacotes de onda inicial e final.

Capítulo 3

Oscilador harmônico forçado

Neste capítulo, na primeira seção, vamos construir a função de onda exata do oscilador harmônico forçado e usá-la como base para determinar o pacote de onda inicial que irá evoluir no tempo até atingir um pacote de onda final estacionário. Depois de determinado os pacotes de onda inicial e final vamos calcular a expressão exata da probabilidade de transição entre eles em função do tempo.

3.1 Cálculo da função de onda exata

Seja o Hamiltoniano do oscilador harmônico forçado dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2x^2 - u(t)x, \quad (3.1)$$

onde, m_0 e ω_0 são constantes, e $u(t)$ é a força externa finita no intervalo $[0, T]$. Seja agora a função de onda $\Psi_n(x, t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\frac{\partial\Psi_n(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi_n(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2\Psi_n(x, t) - u(t)x\Psi_n(x, t), \quad (3.2)$$

a partir daqui vamos usar $m = 1$, $w = 1$ e $\hbar = 1$.

Assim, vamos supor o seguinte ansatz dado na ref.[3]

$$\Psi_n(x, t) = \exp(i(\dot{\eta}x_1 + \sigma))\phi(x_1, t), \quad (3.3)$$

onde queremos que ϕ seja a base, ou seja, um conjunto completo de autofunções, e $\exp(i(\dot{\eta}x_1 + \sigma))$ seja fator de fase global do sistema. Com $x_1 = x - \eta(t)$, as derivadas se transformam como

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \quad (3.4)$$

aplicando (3.4) e (3.3) em (3.2)

$$i\frac{\partial}{\partial t} [e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t)] = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} [e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t)] + \left[\frac{1}{2}(x_1 + \eta)^2 - u(t)(x_1 + \eta) \right] \times e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t), \quad (3.5)$$

efetuando a derivada temporal, o lado esquerdo da igualdade em (3.5) ficará

$$i\frac{\partial}{\partial t} [e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t)] = i \left[i(\ddot{\eta}x_1 + \dot{\sigma})e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t) + \dot{\phi}e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)} \right], \quad (3.6)$$

e a derivada do lado direito

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} [e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}\phi(x_1, t)] = -\frac{1}{2} \left[\dot{\eta}^2\phi + 2i\dot{\eta}\frac{\partial\phi}{\partial x_1} + \frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2} \right] e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma)}, \quad (3.7)$$

substituindo (3.6) e (3.7) em (3.5) e simplificando, obtemos

$$-(\ddot{\eta}x_1 + \dot{\sigma})\phi + i\dot{\phi} = -\frac{\dot{\eta}^2}{2}\phi - i\dot{\eta}\frac{\partial\phi}{\partial x_1} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}[(x_1^2 + 2x_1\eta + \eta^2) - u(t)(x_1 + \eta)]\phi, \quad (3.8)$$

reescrevendo

$$i\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}x_1^2\phi + (\ddot{\eta} + \eta - u(t))x_1\phi + \left(\dot{\sigma} - \frac{\dot{\eta}^2}{2} - i\dot{\eta}\frac{\partial\phi}{\partial x_1} + \frac{1}{2}\eta^2 - u(t)\eta \right) \phi. \quad (3.9)$$

Vamos impor que ϕ satisfaça a equação de Schrödinger dependente do tempo sem força externa, pois ϕ forma um conjunto completo de autofunções, logo teremos

$$i\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}x_1^2\phi, \quad (3.10)$$

se

$$\ddot{\eta} + \eta - u(t) = 0, \quad (3.11)$$

$$\dot{\sigma} - \frac{\dot{\eta}^2}{2} - i\dot{\eta} \frac{\partial \phi}{\partial x_1} + \frac{1}{2}\eta^2 - u(t)\eta = 0, \quad (3.12)$$

em (3.11) temos a equação de movimento clássica do oscilador harmônico forçado com $\omega^2 = 1$ e

$$\eta(0) = \dot{\eta}(0) = 0, \quad (3.13)$$

e em (3.12) temos

$$\begin{aligned} i\dot{\eta} \frac{\partial \phi}{\partial x_1} &= 0, \\ \dot{\sigma} &= \frac{\dot{\eta}^2}{2} - \frac{1}{2}\eta^2 + u(t)\eta, \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde (3.14) representa a ação clássica do sistema e integrando ambos os lados no tempo, obtemos então

$$\sigma(t) = \int_0^t L(t') dt', \quad (3.15)$$

onde $L(t')$ é a Lagrangeana definida por

$$L(t') = \frac{\dot{\eta}(t')^2}{2} - \frac{1}{2}\eta(t')^2 + u(t')\eta(t'). \quad (3.16)$$

Com isso, chamando a solução de (3.10) de $\phi_n(x_1, t)$, reescrevemos (3.3)

$$\Phi_n(x, t) = \phi_n(x - \eta(t), t) \exp \left[i\dot{\eta}(t)(x - \eta(t)) + i \int_0^t L(t') dt' \right], \quad (3.17)$$

com

$$\phi_n(x - \eta(t), t) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n\sqrt{\pi}}} H_n(x - \eta(t)) \exp \left[-\frac{(x - \eta(t))^2}{2} - i\left(n + \frac{1}{2}\right)t \right]. \quad (3.18)$$

Resta determinar a solução de $\eta(t)$ para concluir a solução de (3.17). Seja a solução de (3.11) dada por

$$\eta(t) = f(t) + g(t), \quad (3.19)$$

onde $f(t)$ é a solução da EDO(Equação Diferencial Ordinária) homogênea e $g(t)$ é a solução particular, logo

$$\ddot{f} + f = 0, \quad (3.20)$$

cuja solução é

$$f(t) = af_1(t) + bf_2(t) = a \cos t + b \sin t. \quad (3.21)$$

A função $g(t)$ é dada na ref.[28]

$$g(t) = -f_1(t) \int_0^t \frac{f_2(s)u(s)}{W(f_1, f_2)} ds + f_2(t) \int_0^t \frac{f_1(s)u(s)}{W(f_1, f_2)} ds, \quad (3.22)$$

onde $W(f_1, f_2)$ é o Wronskiano de f_1 e f_2 , e é dado por

$$W(f_1, f_2) = f_1(s)f_2'(s) - f_1'(s)f_2(s) \quad (3.23)$$

$$= 1, \quad (3.24)$$

e pela condição inicial, obtemos

$$g(0) = \dot{g}(0) = 0, \quad (3.25)$$

pois $u(0) = 0$. E para (3.21), temos

$$f(0) = a = 0, \quad \dot{f}(0) = b = 0, \quad (3.26)$$

com isso, obtemos

$$\eta(t) = -\cos(t) \int_0^t \sin(s)u(s)ds + \sin(t) \int_0^t \cos(s)u(s)ds, \quad (3.27)$$

$$= \int_0^t (\sin(t) \cos(s) - \cos(t) \sin(s))u(s)ds, \quad (3.28)$$

usando a identidade $\sin(t) \cos(s) - \cos(t) \sin(s) = \sin(t - s)$, obtemos

$$\eta(t) = \int_0^t \sin(t - s)u(s)ds, \quad (3.29)$$

e usando

$$\sin(t-s) = \frac{e^{i(t-s)} - e^{-i(t-s)}}{2i}, \quad (3.30)$$

reescrevemos (3.29)

$$\begin{aligned} \eta(t) &= \frac{1}{2i} \int_0^t (e^{i(t-s)} - e^{-i(t-s)})u(s)ds, \\ &= \frac{1}{2i} \left(\int_0^t u(s)e^{i(t-s)}ds - \int_0^t u(s)e^{-i(t-s)}ds \right), \\ &= \frac{1}{2i} \left(e^{it} \int_0^t u(s)e^{-is}ds - e^{-it} \int_0^t u(s)e^{is}ds \right), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{it} \frac{(-i)}{\sqrt{2}} \int_0^t u(s)e^{-is}ds - e^{-it} \frac{(i)}{\sqrt{2}} \int_0^t u(s)e^{is}ds \right), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{it}y^*(t) + e^{-it}y(t)), \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde

$$y(t) = \frac{i}{\sqrt{2}} \int_0^t u(s)e^{is}ds, \quad (3.32)$$

com isso encontramos o valor de $\eta(t)$ em função de uma força $u(t)$ qualquer, e vimos que ele satisfaz a equação de movimento do oscilador harmônico forçado clássico. Desta forma, sabendo o valor da força encontramos $\eta(t)$ e conseqüentemente $\Psi_n(x, t)$ que será dada por

$$\Psi_n(x, t) = \frac{H_n(x - \eta(t))}{\sqrt{n!2^n\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{(x - \eta(t))^2}{2} - i(n + \frac{1}{2})t \right] \exp \left[i\dot{\eta}(x - \eta) + i \int_0^t L(t')dt' \right].$$

3.2 Construção dos pacotes de onda inicial e final

Tendo encontrado a função de onda exata do sistema (3.2), vamos agora construir o pacote de onda inicial usando como base a equação (3.17), pois queremos que ele evolua no tempo. Considerando o pacote de onda inicial como

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \exp \left[-\frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2} \right], \quad (3.33)$$

onde x_{0i} é o centro do pacote e Δ_0 é a largura do pacote, e queremos escrever (3.33) na forma

$$\Psi(x, t) = \sum_{n'} c_{n'} \Phi_{n'}(x, t), \quad (3.34)$$

então precisamos determinar os valores de c_n no instante $t = 0$. Multiplicando à esquerda de (3.34) por $\Phi_m^*(x, 0)$ e integrando em x , obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m^*(x, 0) \Psi(x, t=0) dx = \sum_{n'} c_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m^*(x, 0) \Phi_{n'}(x, 0) dx, \quad (3.35)$$

como $\Phi_n(x, t)$ forma uma base completa, temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_m^*(x, 0) \Phi_{n'}(x, 0) dx = \delta_{m,n'}, \quad (3.36)$$

logo (3.35) ficará

$$c_{n'} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{n'}^*(x, 0) \Psi(x, 0) dx, \quad (3.37)$$

e usando (3.17), obtemos

$$c_{n'} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} (n'! 2^{n'} \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(x) \exp\left[-\frac{x^2}{2} - \frac{(x - x_{0i})^2}{4\Delta_0^2}\right] dx, \quad (3.38)$$

observamos que (3.38) é idêntico a (2.119), portanto

$$c_{n'} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}n'!2^{n'}}} \exp\left[\frac{b^2}{4a} - \frac{x_{0i}^2}{4\Delta_0^2}\right] \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(1 - \frac{1}{a}\right)^{\frac{n'}{2}} H_{n'}\left(\frac{b}{2\sqrt{a(a-1)}}\right), \quad (3.39)$$

com

$$a = \frac{1}{4\Delta_0^2} + \frac{1}{2}, \quad b = \frac{x_{0i}}{2\Delta_0}. \quad (3.40)$$

Agora, vamos definir o pacote de onda final dado por

$$\Phi(x) = \sum_{m'} d_{m'} \phi_{m'}(x), \quad (3.41)$$

onde

$$\phi_{m'}(x) = \frac{1}{\sqrt{m'!2^{m'}\sqrt{\pi}}} H_{m'}(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad (3.42)$$

novamente temos que $d_{m'}$ será dado da mesma forma que (2.119), logo

$$d_{m'} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\Delta_0}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}m'!2^{m'}}} \exp\left[\frac{d^2}{4c} - \frac{x_{0f}^2}{4\Delta_0^2}\right] \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{\frac{m'}{2}} H_{m'}\left(\frac{d}{2\sqrt{c(c-1)}}\right), \quad (3.43)$$

com

$$c = \frac{1}{4\Delta_0^2} + \frac{1}{2}, \quad d = \frac{x_{0f}}{2\Delta_0}. \quad (3.44)$$

Sabendo o valor do pacote de onda inicial, podemos calcular o valor esperado de $\langle x(t) \rangle$, e será dado por

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.45)$$

$$= \sum_n \sum_{n'} c_n^* c_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} x \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx, \quad (3.46)$$

usando (3.17), a integral em (3.46) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx = \frac{e^{-i(n-n')t}}{\sqrt{n!n'!2^{n+n'}\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x H_{n'}(x - \eta) H_n(x - \eta) e^{-(x-\eta)^2} dx, \quad (3.47)$$

efetuando a mudança de variável $y = x - \eta$, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx = \frac{e^{-i(n-n')t}}{\sqrt{n!n'!2^{n+n'}\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (y + \eta) H_{n'}(y) H_n(y) e^{-y^2} dy, \quad (3.48)$$

ou

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx = \frac{e^{-i(n-n')t}}{\sqrt{n!n'!2^{n+n'}\pi}} \left(\eta \int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(y) H_n(y) e^{-y^2} dy \right) + \frac{e^{-i(n-n')t}}{\sqrt{n!n'!2^{n+n'}\pi}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} y H_{n'}(y) H_n(y) e^{-y^2} dy \right), \quad (3.49)$$

logo, usando a identidade dada na ref.[27], temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{n', n}, \quad (3.50)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y H_{n'}(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} (n! 2^{n-1} \delta_{n', n-1} + (n+1)! 2^n \delta_{n', n+1}), \quad (3.51)$$

aplicando o resultado de (3.50) e (3.51) em (3.49)

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \Phi_n^*(x, t) \Phi_{n'}(x, t) dx = (n!n'!2^{n+n'}\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{-i(n-n')t} (n!2^n \sqrt{\pi} \delta_{n',n} \eta) + (n!n'!2^{n+n'}\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{-i(n-n')t} (\sqrt{\pi}(n!2^{n-1} \delta_{n',n-1} + (n+1)!2^n \delta_{n',n+1})), \quad (3.52)$$

portanto, substituindo (3.52) em (3.46)

$$\langle x(t) \rangle = \sum_{n'} \sum_n c'_n c_n \frac{e^{-i(n-n')t}}{\sqrt{n!n'!2^{n+n'}\pi}} \alpha_{n',n}(t), \quad (3.53)$$

com

$$\alpha_{n',n}(t) = (n!2^n \sqrt{\pi} \delta_{n',n} \eta + \sqrt{\pi}(n!2^{n-1} \delta_{n',n-1} + (n+1)!2^n \delta_{n',n+1})). \quad (3.54)$$

Portanto, construímos os pacotes de onda inicial e final e o valor esperado de $x(t)$.

Na próxima seção vamos determinar a expressão exata da probabilidade de transição entre os pacotes inicial e final.

3.3 Cálculo da probabilidade de transição entre os pacotes de onda

Depois de ter calculado os pacotes de onda inicial e final, podemos agora determinar a probabilidade de transição, pois a densidade de probabilidade do pacote inicial irá evoluir no tempo e queremos saber o quanto e quando irá atingir o pacote final estacionário, essa probabilidade será dada por

$$w(t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(x) \Psi(x, t) dx \right|^2, \quad (3.55)$$

onde $\Psi(x, t)$ é dado em (3.34) e $\Phi(x)$ é dado em (3.41), assim a integral fica

$$w(t) = \left| \sum_m \sum_n d_m^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \Phi_n(x, t) dx \right|^2, \quad (3.56)$$

definindo

$$a_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \Phi_n(x, t) dx, \quad (3.57)$$

e usando (3.42) e (3.17), temos

$$a_{m,n} = \frac{\exp[-i(\eta\eta - \sigma + (n + \frac{1}{2})t)]}{\sqrt{(m!n!2^{m+n}\pi)}} \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x-\eta) \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{(x-\eta)^2}{2} + i\eta x\right) dx, \quad (3.58)$$

completando quadrado o termo entre parênteses na integral em (3.58), obtemos

$$-\frac{x^2}{2} - \frac{(x-\eta)^2}{2} + i\eta x = -\left[x - \frac{(\eta + i\eta)}{2}\right]^2 + \frac{(\eta + i\eta)^2}{4} - \frac{\eta^2}{2}, \quad (3.59)$$

portanto, a integral (3.58) ficará

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x-\eta) \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{(x-\eta)^2}{2} + i\eta x\right) dx = \exp\left[\frac{(\eta + i\eta)^2}{4} - \frac{\eta^2}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x-\eta) \exp\left[-\left(x - \frac{\eta + i\eta}{2}\right)^2\right] dx, \quad (3.60)$$

usando a identidade dada na ref.[24]

$$H_i(x+y) = 2^{-\frac{i}{2}} \sum_{k=0}^i \binom{i}{k} H_k(\sqrt{2}x) H_{i-k}(\sqrt{2}y), \quad (3.61)$$

os polinômios de Hermite presentes na integral em (3.60) ficam

$$H_m(x) = 2^{-\frac{m}{2}} \sum_{l=0}^m \binom{m}{l} H_l(\sqrt{2}x) H_{m-l}(0), \quad (3.62)$$

$$H_n(x-\eta) = 2^{-\frac{n}{2}} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} H_k(\sqrt{2}x) H_{n-k}(-\sqrt{2}\eta), \quad (3.63)$$

aplicando (3.62) e (3.63) em (3.60)

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x-\eta) \exp\left(-\frac{x^2}{2} - \frac{(x-\eta)^2}{2} + i\eta x\right) dx = \exp\left[\frac{(\eta + i\eta)^2}{4} - \frac{\eta^2}{2}\right] 2^{-\frac{m+n}{2}} \beta_{m,n}, \quad (3.64)$$

com

$$\beta_{k,l} = \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^m H_{n-k}(-\sqrt{2}\eta) H_{m-l}(0) \binom{n}{k} \binom{m}{l} \int_{-\infty}^{\infty} H_k(\sqrt{2}x) H_l(\sqrt{2}x) e^{-[x - \frac{\eta + i\eta}{2}]^2} dx, \quad (3.65)$$

usando a tabela de integral na ref[23], temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\alpha x) H_m(\alpha x) e^{-(x-\gamma)^2} dx = \sqrt{\pi} \sum_{p=0}^{\text{Min}(m,n)} 2^p p! \binom{m}{p} \binom{n}{p} (1-\alpha^2)^{\frac{m+n}{2}-p} H_{m+n-2p} \left[\frac{\alpha\gamma}{\sqrt{1-\alpha^2}} \right], \quad (3.66)$$

logo, aplicando o resultado de (3.66) em (3.65), obtemos

$$\beta_{m,n} = \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^m H_{n-k}(-\sqrt{2}\eta) H_{m-l}(0) \binom{n}{k} \binom{m}{l} \sqrt{\pi} \sum_{p=0}^{\text{Min}(k,l)} 2^p p! \binom{k}{p} \binom{l}{p} \times \quad (3.67)$$

$$(-1)^{\frac{m+n}{2}-p} H_{l+k-2p} \left[\frac{(\eta+i\dot{\eta})}{\sqrt{2}i} \right].$$

Assim, conseguimos determinar o valor de $\beta_{m,n}$ em (3.67), e substituindo (3.67) em (3.58), obtemos

$$a_{m,n} = \frac{2^{-\frac{m+n}{2}}}{\sqrt{m!n!2^{m+n}\pi}} \exp \left[\frac{(\eta+i\dot{\eta})^2}{4} - \frac{\eta^2}{2} \right] \beta_{m,n}, \quad (3.68)$$

substituindo (3.68) em (3.56) e simplificando, obtemos

$$w(t) = \exp \left[-\frac{\eta^2 + \dot{\eta}^2}{2} \right] \left| \sum_m \sum_n d_m^* c_n \frac{2^{-(m+n)}}{\sqrt{m!n!\pi}} e^{-int} \beta_{k,l} \right|^2, \quad (3.69)$$

com $\beta_{k,l}$ dado em (3.67).

Obtemos assim a expressão exata da probabilidade de transição de pacotes para o oscilador harmônico forçado.

Capítulo 4

Aplicações

Neste capítulo iremos aplicar as equações de probabilidades de transição que foram calculadas nas seções anteriores e apresentadas nas equações (2.130) e (3.69), de modo que vamos controlar essas probabilidades de transições determinando o tempo em que ocorre o máximo *overlap* e o seu valor, e também calcular o valor da massa, frequência e da força para sistemas quânticos com massa, frequência e força dependentes do tempo. Também vamos determinar o valor esperado de $x(t)$ para cada transição. Vamos utilizar o sistema de Unidades atômicas dado no Apêndice B, desse modo a massa será dada em unidade da massa do elétron, $\hbar = 1$, posição x em unidade do raio de Bohr a_0 , a frequência em unidade da frequência de revolução do elétron no átomo de Hidrogênio para o raio igual a a_0 e o tempo em unidade do período de revolução do elétron no átomo de Hidrogênio para o raio igual a a_0 . Para obter os resultados e gráficos desta seção, utilizei o programa Mathematica. Os valores dos tempos que obtemos numericamente e nos gráficos estão em radianos, ou seja, estão multiplicados por um fator $\frac{\pi}{180}$.

4.1 Oscilador harmônico quântico com massa dependente do tempo

Seja o hamiltoniano do oscilador harmônico com massa dependente do tempo e frequência constante $w = 1$ dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{m(t)}{2}x^2, \quad (4.1)$$

onde a massa é dada por

$$m(t) = m_0 e^{\gamma t}, \quad (4.2)$$

com m_0 sendo a massa inicial, e γ uma constante positiva e dimensão de frequência.

Assim, o Hamiltoniano em (4.1) será

$$H(t) = \frac{e^{-\gamma t} p^2}{2m_0} + \frac{m_0 e^{\gamma t}}{2} x^2, \quad (4.3)$$

portanto esse é o Hamiltoniano para um sistema com massa dependente do tempo e esse sistema é conhecido como oscilador harmônico de Caldirola-Kanai, que foi descrito por Caldirola e Kanai. O Hamiltoniano de Caldirola-Kanai tem sido estudado no contexto da mecânica quântica como um modelo alternativo na descrição de sistemas dissipativos.

Assim, fazendo $m_0 = 1$, seja a equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i \frac{\partial \Psi_n(x, t)}{\partial t} = H(t) \Psi_n(x, t), \quad (4.4)$$

cuja solução de $\Psi_n(x, t)$ será obtida aplicando (4.2) em (2.98) e dada por

$$\Psi_n(q, t) = e^{i\alpha_n(t)} (\sqrt{\pi} 2^n n! \rho)^{-\frac{1}{2}} H_n \left(\frac{q}{\rho} \right) \exp \left(\frac{ie\gamma t}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{ie^{-\gamma t}}{\rho^2} \right) q^2 \right), \quad (4.5)$$

com $\rho(t)$ e $\alpha_n(t)$ dados por (2.42), e (2.97) respectivamente, logo

$$\rho(t) = e^{-\gamma t} \left(1 - \frac{\gamma^2}{4} \right)^{-\frac{1}{4}}, \quad (4.6)$$

$$\alpha_n(t) = -\sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{4}} \left(n + \frac{1}{2} \right) t, \quad (4.7)$$

com, $-2 < \gamma < 2$, e usamos o resultado em (4.6) que foi dado na ref[22].

Utilizando as equações (2.129) e (2.130), obtemos a probabilidade de transição de um pacote de onda inicial centrado em x_{0i} para um pacote final centrado em x_{0f} , logo

$$w(t) = \left| \sum_m \sum_n d_m^* c_n a_{m,n} \right|^2 \quad \text{para } (m-n) \text{ par,} \quad (4.8)$$

onde

$$a_{m,n} = \frac{e^{i\alpha_n(t)} (-\theta i)^{\frac{|m-n|}{2}}}{\sqrt{\sqrt{\pi} m! n! \rho}} (n_<)! \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{c-1}{c - \frac{1}{\rho^2}} \right)^{\frac{m-n}{4}} \left(\sqrt{\frac{1}{c} + \frac{1}{c\rho^2} - 1} \right)^{\frac{m+n}{2}} \times P_{\frac{m+n}{2}}^{\frac{|m-n|}{2}} \left(\frac{1}{\rho^2 c + c - \rho^2 c^2} \right), \quad (4.9)$$

com

$$c = \left(\frac{\sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{4}} e^{2\gamma t}}{2} + \frac{i\gamma e^{\gamma t}}{2} + \frac{1}{2} \right),$$

temos que θ será sempre igual a -1 independente do valor de γ e do tempo. A probabilidade de transição em (4.8) depende de γ e t , de modo que aplicando para algumas transições, ou seja, definindo os valores de x_{0i} e x_{0f} conseguimos calcular os valores de γ e t para que a probabilidade seja máxima, e conseqüentemente determinamos o valor da massa que depende de γ .

A seguir, recordaremos brevemente como maximizar uma função real de duas variáveis. Seja uma função $f(x, y)$ contínua e derivável, logo os pontos críticos de f será dado por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x,y)=(x_0,y_0)} = 0, \quad (4.10)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_0,y_0)} = 0. \quad (4.11)$$

Resolvendo o sistema, encontramos pontos críticos (x_0, y_0) e para sabermos qual é o máximo, examinaremos o hessiano

$$H(x, y) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{vmatrix}, \quad (4.12)$$

e (x_0, y_0) será máximo se e somente se, $H(x_0, y_0) < 0$.

4.1.1 Transição do pacote inicial centrado em $x = -1$ para o pacote final centrado em $x = 0.5$

Portanto utilizaremos estes resultados para duas transições, a primeira será a transição de um pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -1$ para um pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 0.5$ com ambos tendo $\Delta_0 = 0.3$. Logo temos que a probabilidade de transição é dada por (4.8), assim aplicando o critério de maximização em $w(\gamma, t)$, obtemos

$$\left. \frac{\partial w}{\partial \gamma} \right|_{(\gamma, t) = (\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.13)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(\gamma, t) = (\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.14)$$

determinando e substituindo os pontos críticos obtidos em (4.12), obtemos que o máximo será atingido quando

$$\gamma_0 = 0.315, \quad (4.15)$$

$$t_0 = 182, \quad (4.16)$$

$$w(\gamma_0, t_0) = 0.834696. \quad (4.17)$$

Assim, sabendo o valor de γ , conseqüentemente temos o valor de $m(t)$, então os pacotes de onda inicial e final em $t = 0$ dados na figura (4.1).

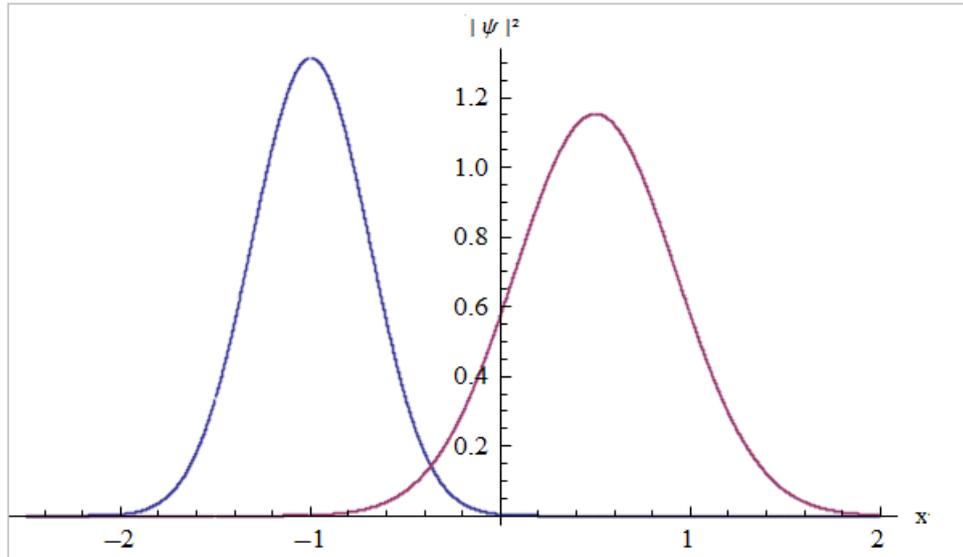


Figura 4.1: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$.

No instante $t = 182$, temos que a densidade de probabilidade do pacote de onda inicial é dado na figura(4.2).

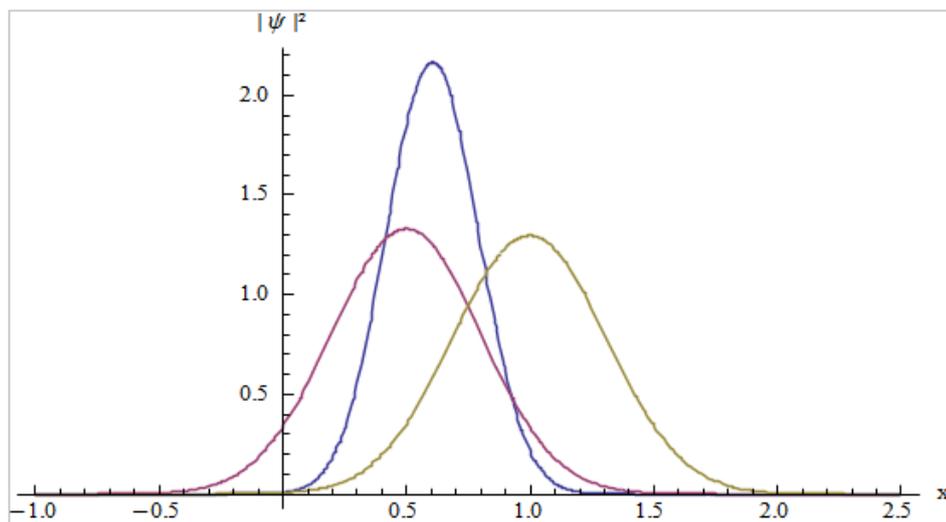


Figura 4.2: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 182$.

A partir da norma dos pacotes inicial e final, usando uma superposição de 20

estados obtemos numericamente a precisão dos pacotes que são dados por

$$\sum_{n=0}^{20} |c_n(\gamma = 0.315)|^2 = 0.999886, \quad (4.18)$$

$$\sum_{m=0}^{20} |d_m|^2 = 0.99992, \quad (4.19)$$

onde usamos as equações (2.111) e (2.120). O comportamento de $w(t)$ com o valor de $\gamma = 0.315$ é dado na figura(4.3).

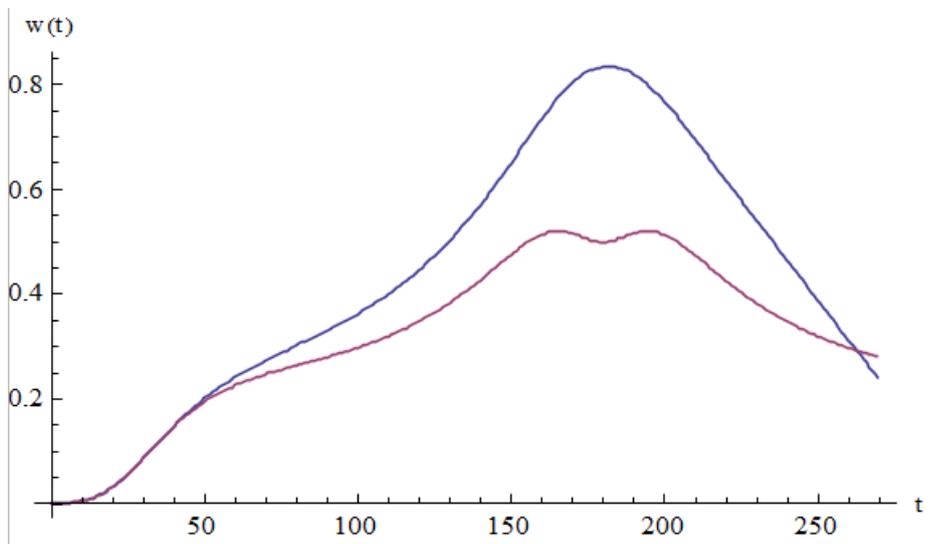


Figura 4.3: Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para quando $m(t) = e^{0.315t}$ (curva azul) e quando $m(t) = 1$ (curva rosa).

Vemos então pelo gráfico em (4.3) que conseguimos aumentar o *overlap* dos pacotes de onda inicial e final em aproximadamente 34% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. Para finalizar temos na figura (4.4) o valor esperado de $x(t)$ com a massa variável e constante.

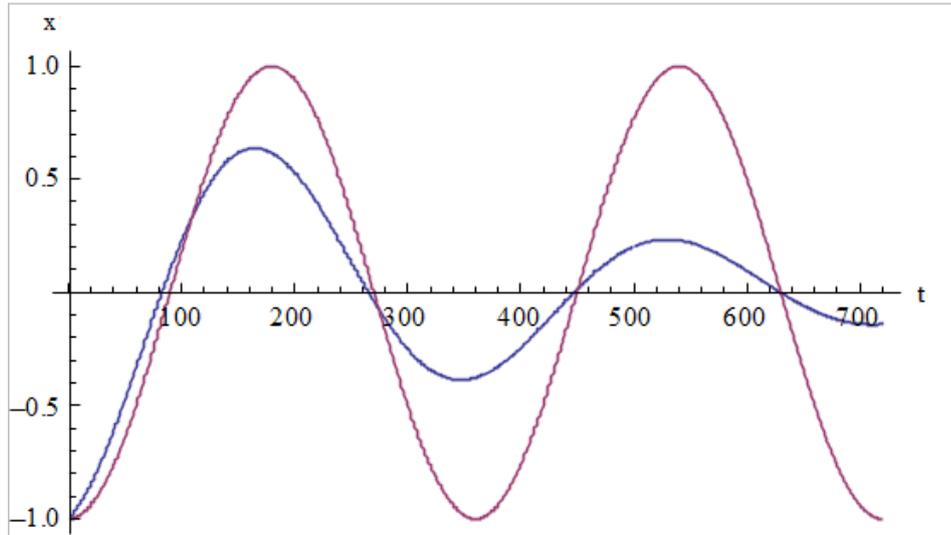


Figura 4.4: Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $m(t) = e^{0.315t}$ (curva azul) e $m(t) = 1$ (curva rosa).

No sistema do oscilador harmônico livre o comportamento que a densidade de probabilidade do pacote inicial irá ter é de se propagar até o ponto em $x = -x_0$ simétrico ao valor inicial x_0 no decorrer do tempo, e quando essa densidade de probabilidade se propaga ela se espalha, e só irá se reconstruir novamente como no instante $t = 0$ quando atingir o ponto máximo em x e retornará novamente para a posição inicial, no nosso caso que é um sistema para modelar um sistema dissipativo o ponto máximo não será simétrico ao ponto inicial, logo vemos que o comportamento de $x(t)$ é análogo com o da equação de movimento de $x(t)$ para o caso clássico amortecido (Apêndice A.1), confirmando assim que a massa $m(t) = e^{0.315t}$ representa um amortecimento no sistema.

4.1.2 Transição do pacote inicial centrado em $x = -2$ para o pacote final centrado em $x = 0.5$

A segunda aplicação será a transição de um pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -2$ para um pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 0.5$ com ambos tendo $\Delta_0 = 0.3$ e usando

superposição com 25 estados. Logo temos novamente que a probabilidade de transição é dada por (4.8), assim aplicando o critério de maximização em $w(\gamma, t)$, obtemos

$$\left. \frac{dw}{d\gamma} \right|_{(\gamma,t)=(\gamma_0,t_0)} = 0, \quad (4.20)$$

$$\left. \frac{dw}{dt} \right|_{(\gamma,t)=(\gamma_0,t_0)} = 0. \quad (4.21)$$

Novamente, determinando e substituindo os pontos críticos obtidos em (4.12), obtemos o máximo quando

$$\gamma_0 = 0.85, \quad (4.22)$$

$$t_0 = 150, \quad (4.23)$$

$$w(\gamma_0, t_0) = 0.487603. \quad (4.24)$$

Dessa forma, com $m(t) = e^{0.85t}$, então os pacotes de onda inicial e final em $t = 0$ dados na figura (4.5).

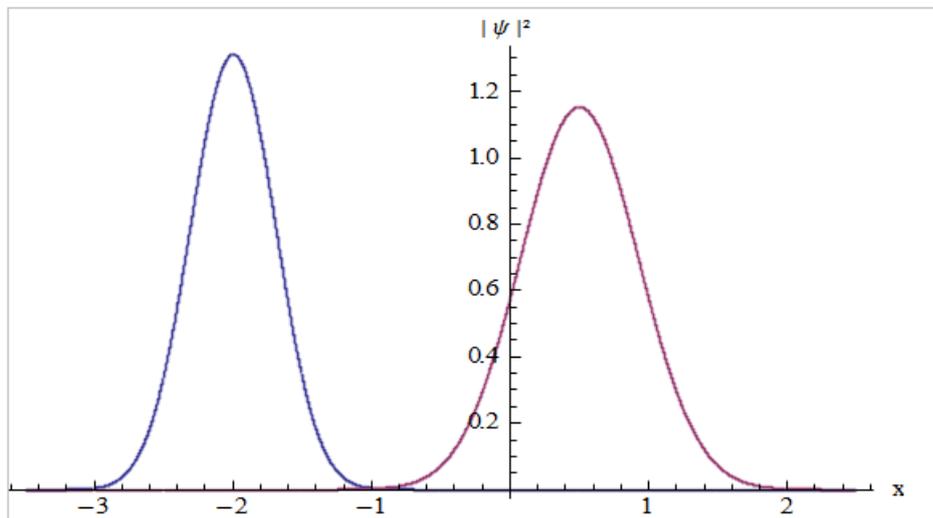


Figura 4.5: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$.

A densidade de probabilidade do pacote inicial em $t = 150$ é dado na figura (4.6).

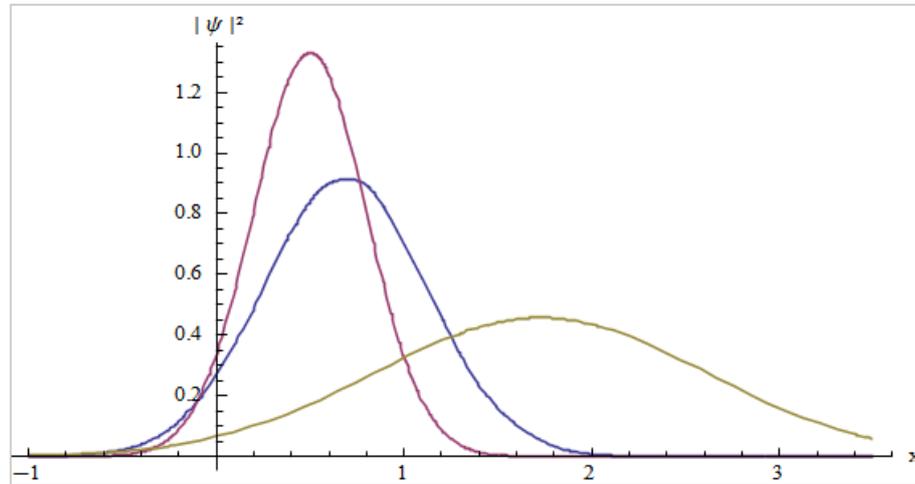


Figura 4.6: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote final em $t = 150$.

A partir da norma dos pacotes inicial e final, usando uma superposição de 25 estados obtemos numericamente a precisão dos pacotes que são dados por

$$\sum_{n=0}^{25} |c_n(\gamma = 0.85)|^2 = 0.999721, \quad (4.25)$$

$$\sum_{m=0}^{25} |d_m|^2 = 0.99992, \quad (4.26)$$

onde usamos as equações (2.115) e (2.124). O comportamento de $w(t)$ com o valor de $\gamma = 0.85$ é dado na figura(4.7).

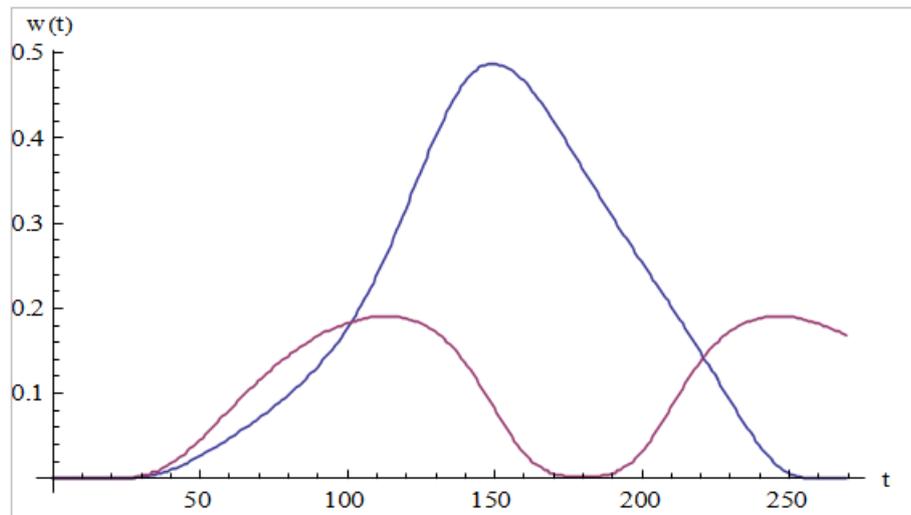


Figura 4.7: Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para quando $m(t) = e^{0.85t}$ (curva azul) e quando $m(t) = 1$ (curva rosa).

Vemos então pelo gráfico em (4.7) que conseguimos aumentar o *overlap* dos pacotes de onda inicial e final em aproximadamente 30% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. Na figura (4.8) temos o valor esperado de $x(t)$ com a massa variável e constante.

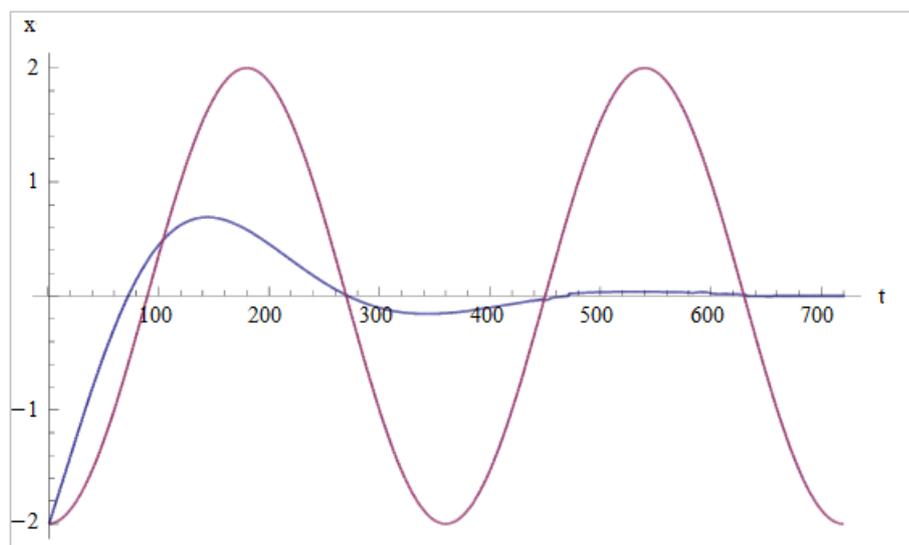


Figura 4.8: Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $m(t) = e^{0.85t}$ (curva azul) e $m(t) = 1$ (curva rosa).

Assim como na transição anterior temos que o comportamento do valor esperado de $x(t)$ é análoga com o da equação de movimento de $x(t)$ para o caso clássico amortecido (Apêndice A.1), confirmando novamente que a massa $m(t) = e^{0.85t}$ representa um amortecimento no sistema, mas agora o amortecimento é ainda maior, já que o valor da posição do pacote inicial aumentou, aumentando assim sua energia inicial, logo temos que tirar mais energia do sistema para ele 'parar' na posição $x_{0f} = 0.5$, com isso aumenta-se a perda de energia através do amortecimento, portanto γ agora é maior. Seja a energia do sistema em ambos os casos dada em (2.141), o comportamento é dado abaixo na figura (4.9).

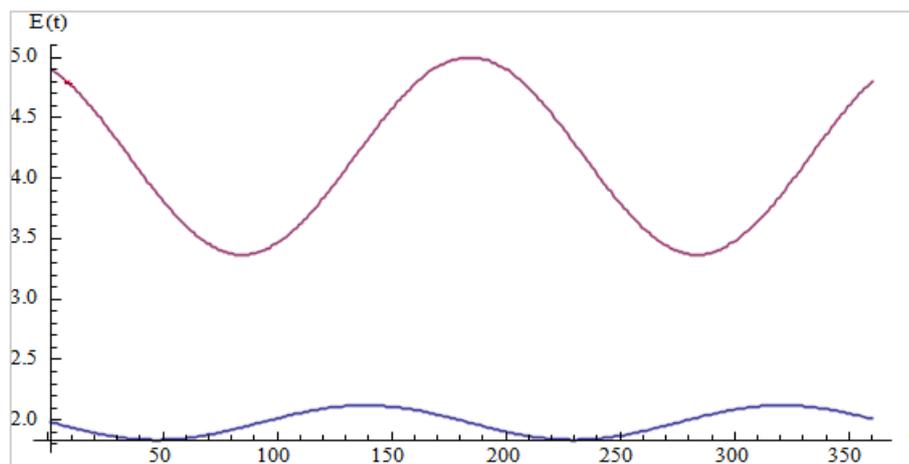


Figura 4.9: Representação gráfica da energia total $E(t)$ para $\gamma = 0.85$ (curva rosa) e $\gamma = 0.315$ (curva azul).

Sabemos que para um sistema de oscilador harmônico ser dissipativo a energia total terá que decrescer com o tempo até ser nula como vemos na figura (A.4) no Apêndice (A.1). Na figura (4.9) temos que o comportamento da energia para ambos os amortecimentos oscila em torno de uma energia média, ou seja, temos uma controvérsia, já que a massa $m(t)$ foi modelada para representar um sistema dissipativo. Temos então um sistema com massa variável, não dissipativo.

4.2 Oscilador harmônico quântico com frequência dependente do tempo

Nessa seção vamos fazer a aplicação dos resultados obtidos na seção (2.4), porém agora vamos considerar um sistema onde somente a frequência depende do tempo, ou seja, agora $m(t) = m_0$. Assim temos então o Hamiltoniano do sistema dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0}{2}\omega(t)^2x^2, \quad (4.27)$$

agora vamos utilizar a frequência que é objeto de estudo na ref[13] que é dada por

$$\omega(t) = \frac{\omega_0}{1 + \gamma t}, \quad (4.28)$$

onde ω_0 e γ são constantes com $(\omega_0, \gamma) > 0$ e γ tem dimensão de frequência. Escolhi essa aplicação para analisar o comportamento das transições para o oscilador cuja frequência de oscilação diminui com o tempo. Esse sistema (4.27) com $\omega(t)$ tem como característica ser análogo a um sistema com uma partícula carregada em uma região com um campo magnético $B(t)$ que satisfaz a relação $\omega(t) \propto |B(t)|$. Assim vamos definir $\omega_0 = 3\gamma$ e $m_0 = 1$, logo (4.27) ficará

$$H(t) = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{3\gamma}{1 + \gamma t} \right)^2 x^2, \quad (4.29)$$

a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para o hamiltoniano (4.29) será dada por (2.98)

$$\Psi_n(q, t) = e^{i\alpha_n(t)} (\sqrt{\pi} 2^n n! \rho)^{-\frac{1}{2}} H_n \left(\frac{q}{\rho} \right) \exp \left[\frac{i}{2} \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{\rho^2} \right) q^2 \right], \quad (4.30)$$

com $\alpha_n(t)$ dado em (2.97). Aplicando (4.28) em (2.42), obtemos

$$\rho(t) = \sqrt{u(t)^2 + \frac{v(t)^2}{W(t)^2}}, \quad (4.31)$$

$$u(t) = \sqrt{1 + \gamma t} \cos\left(\frac{\sqrt{35}}{2} \log[1 + \gamma t]\right), \quad (4.32)$$

$$v(t) = \sqrt{1 + \gamma t} \sin\left(\frac{\sqrt{35}}{2} \log[1 + \gamma t]\right), \quad (4.33)$$

$$W(t) = u(t) \frac{dv}{dt} - \frac{du}{dt} v(t), \quad (4.34)$$

onde (4.31) é conhecido também como solução do sistema de Ermakov[29].

Com isso, obtemos a função de onda exata $\Psi_n(x, t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo. Usando $\Psi_n(x, t)$ como base, construímos o pacote de onda inicial dado em (2.101) que irá se propagar até atingir o pacote de onda final estacionário dado em (2.112). A probabilidade de transição em função de γ e t usando 20 estados nos pacotes inicial e final será por (2.131)

$$w(\gamma, t) = \left| \sum_m^{20} \sum_n^{20} d_m^* c_n a_{m,n} \right|^2 \quad \text{para } (m - n) \text{ par} \quad (4.35)$$

com,

$$a_{m,n} = \frac{e^{i\alpha_n(t)}}{\sqrt{\sqrt{\pi} m! n! \rho}} (-\theta i)^{\frac{|m-n|}{2}} (n_{<})! \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{c-1}{c-\frac{1}{\rho^2}}\right)^{\frac{m-n}{4}} \left(\sqrt{\frac{1}{c} + \frac{1}{c\rho^2}} - 1\right)^{\frac{m+n}{2}} \times P_{\frac{m+n}{2}}^{\frac{|m-n|}{2}} \left(\frac{1}{\rho^2 c + c - \rho^2 c^2}\right), \quad (4.36)$$

onde,

$$c = \left(\frac{1}{2\rho^2} - \frac{-i\dot{\rho}}{2\rho} + \frac{1}{2}\right).$$

4.2.1 Transição do pacote inicial centrado em $x = -0.5$ para o pacote final centrado em $x = 1.5$

Agora, assim como fizemos na seção 4.1, vamos aplicar a probabilidade de transição em dois casos. O primeiro para a transição do pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -0.5$

para o pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 1.5$ com $\Delta_0 = 0.3$, assim utilizamos o critério de maximização para função de duas variáveis, ou seja, aplicamos (4.35) em (4.10) e (4.11), logo

$$\left. \frac{\partial w}{\partial \gamma} \right|_{(\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.37)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.38)$$

encontrando os pontos críticos (γ_0, t_0) e aplicando em (4.12), obtemos então o ponto que irá maximizar $w(\gamma, t)$, logo

$$\gamma_0 = 1.2, \quad (4.39)$$

$$t_0 = 110, \quad (4.40)$$

$$w(\gamma_0, t_0) = 0.524591. \quad (4.41)$$

Assim, sabendo o valor de γ_0 , conseguimos determinar o valor de $\omega(t) = \frac{3.6}{1+1.2t}$, então os pacotes inicial e final em $t = 0$ dados na figura (4.10).

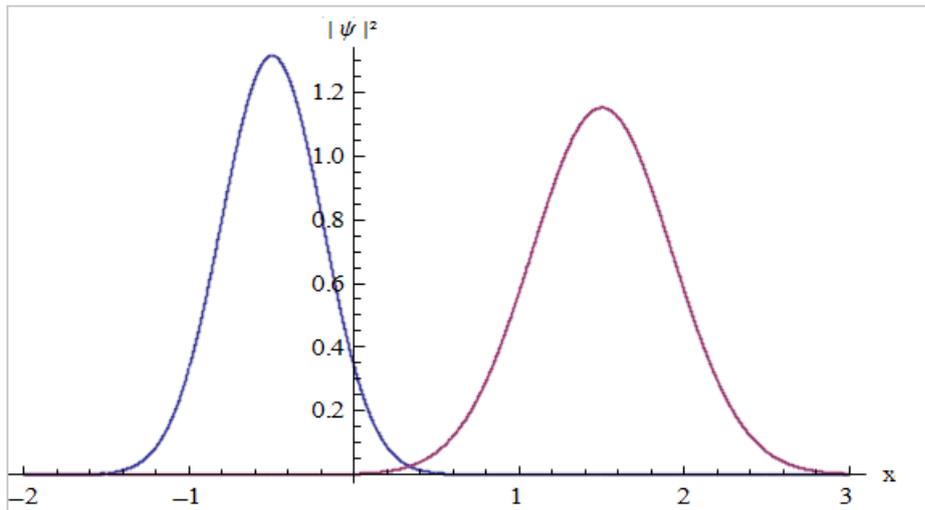


Figura 4.10: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$.

A densidade de probabilidade do pacote inicial evoluído até $t = 110$ é dada na figura (4.11).

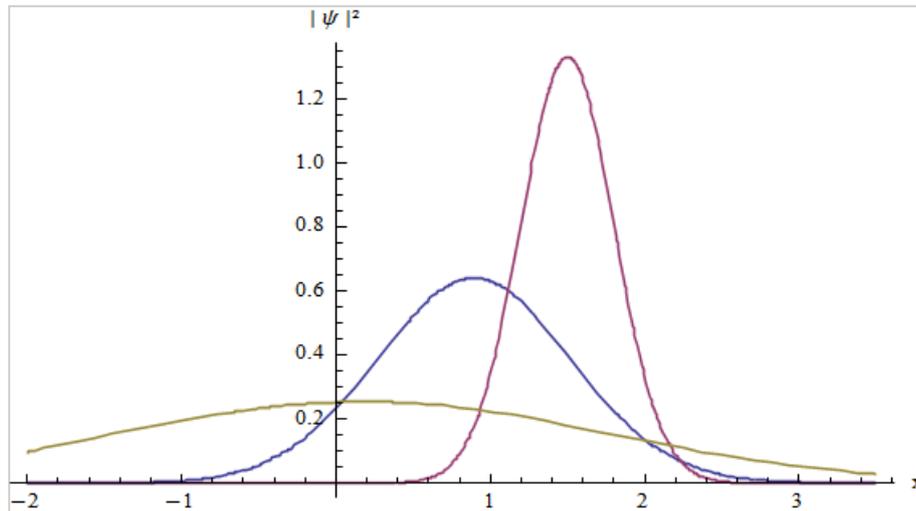


Figura 4.11: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 110$.

A partir da norma dos pacotes inicial e final, usando uma superposição de 20 estados obtemos numericamente a precisão dos pacotes que são dados por

$$\sum_{n=0}^{20} |c_n(\gamma = 1.2)|^2 = 0.999881, \quad (4.42)$$

$$\sum_{m=0}^{20} |d_m|^2 = 0.999875, \quad (4.43)$$

onde usamos as equações (2.111) e (2.120). O comportamento da probabilidade $w(t)$ com o valor de $\gamma = 1.2$ é dado na figura(4.12).

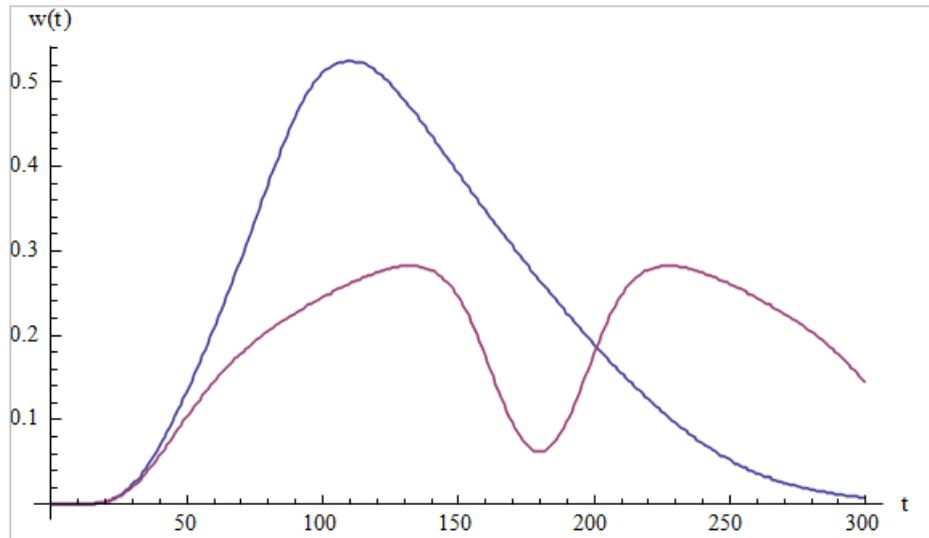


Figura 4.12: Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para a frequência $\omega(t) = \frac{3.6}{1+1.2t}$ (curva azul) e frequência constante $\omega(t) = 1$ (curva rosa).

Vemos então pelo gráfico em (4.12) que conseguimos aumentar o *overlap* dos pacotes de onda inicial e final em aproximadamente 25 % com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. Para concluir temos na figura (4.13) o valor esperado de $x(t)$ com a frequência variável e constante.

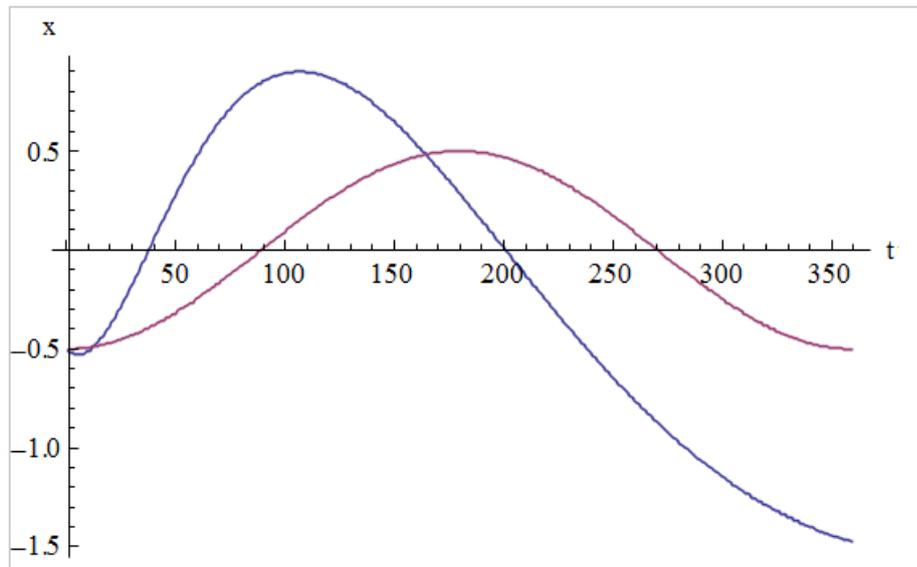


Figura 4.13: Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com frequência $\omega(t) = \frac{3.6}{1+1.2t}$ (curva azul) e $\omega(t) = 1$ (curva rosa).

Na figura (4.13) temos o comportamento do valor esperado de $x(t)$ que a partícula chega aproximadamente até a posição de $x = 0.9$ ao invés de $x = 1.5$ como queríamos, o que podemos justificar também o aumento não tão grande no *overlap*, e podemos notar também que ao contrário do sistema com a massa dependente do tempo, a frequência $\omega(t)$ funciona fazendo com que a força restauradora $f = -kx$ diminua, já que a constante da elástica da mola $k = m\omega(t)^2$ diminui com o passar do tempo, isso faz com que a densidade de probabilidade do pacote inicial chegue até uma posição maior do que o simétrico da posição inicial, ou seja, comparando com o oscilador harmônico livre, é o mesmo que dizer que partindo da posição inicial $x_{0i} = -0.5$ tinha energia suficiente para ir até $x = 0.5$ e em seguida retornar a posição inicial, mas com a frequência $\omega(t)$ conseguimos chegar até aproximadamente $x = 0.9$.

4.2.2 Transição do pacote inicial centrado em $x = -1$ para o pacote final centrado em $x = 2$

A segunda aplicação será para a transição do pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -1$ para o pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 2$ com $\Delta_0 = 0.3$ usando superposição de 20 estados, assim utilizamos o critério de maximização para $w(\gamma, t)$, e aplicamos (4.35) em (4.10) e (4.11), logo

$$\left. \frac{\partial w}{\partial \gamma} \right|_{(\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.44)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(\gamma_0, t_0)} = 0, \quad (4.45)$$

encontrando os pontos críticos (γ_0, t_0) e aplicando em (4.12), obtemos então o ponto que irá maximizar $w(\gamma, t)$, logo

$$\gamma_0 = 2, \quad (4.46)$$

$$t_0 = 64, \quad (4.47)$$

$$w(\gamma_0, t_0) = 0.781337. \quad (4.48)$$

Assim, sabendo o valor de γ_0 , conseguimos determinar o valor de $\omega(t) = \frac{6}{1+2t}$, então os pacotes inicial e final em $t = 0$ dados na figura (4.14).

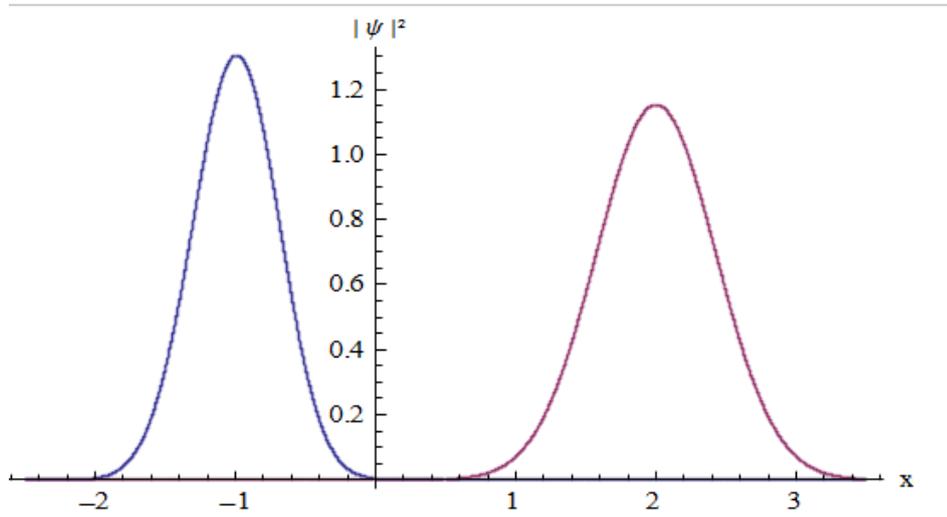


Figura 4.14: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 0$.

A densidade de probabilidade do pacote inicial evoluído até $t = 64$ é dado na figura (4.15).

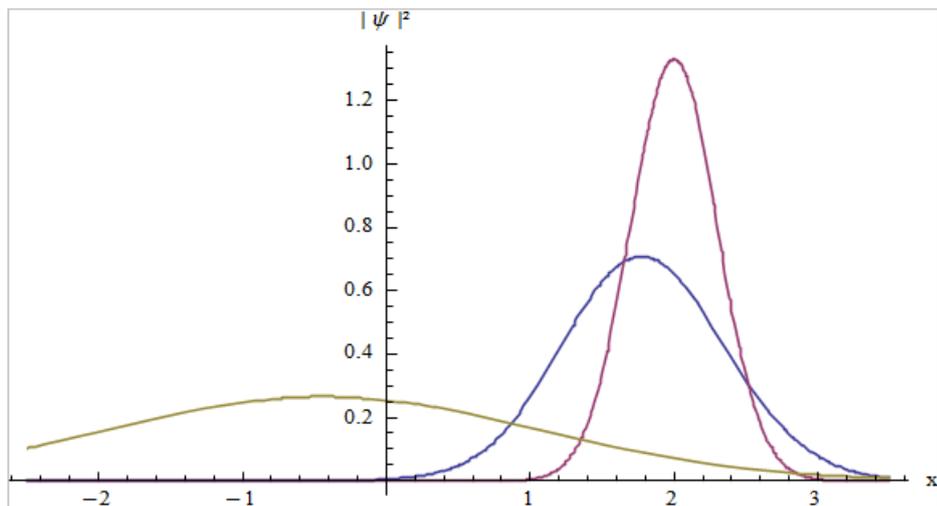


Figura 4.15: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 64$.

A partir da norma dos pacotes inicial e final, usando uma superposição de 20 estados obtemos numericamente a precisão dos pacotes que são dados por

$$\sum_{n=0}^{20} |c_n(\gamma = 2)|^2 = 0.999823, \quad (4.49)$$

$$\sum_{m=0}^{20} |d_m|^2 = 0.999875, \quad (4.50)$$

onde usamos as equações (2.111) e (2.120). O comportamento de $w(t)$ com o valor de $\gamma = 2$ é dado na figura(4.16).

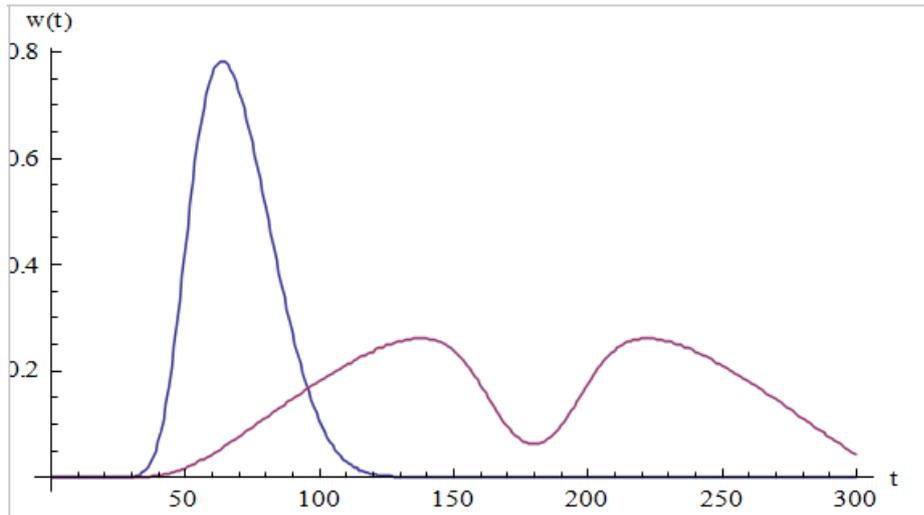


Figura 4.16: Representação gráfica comparando o comportamento de $w(t)$ para a frequência $\omega(t) = \frac{6}{1+2t}$ (curva azul) e frequência constante $\omega(t) = 1$ (curva rosa).

Vemos então pelo gráfico acima que conseguimos aumentar o *overlap* dos pacotes de onda inicial e final em aproximadamente 51% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. Para finalizar temos na figura (4.17) o valor esperado de $x(t)$ com a frequência variável e constante.

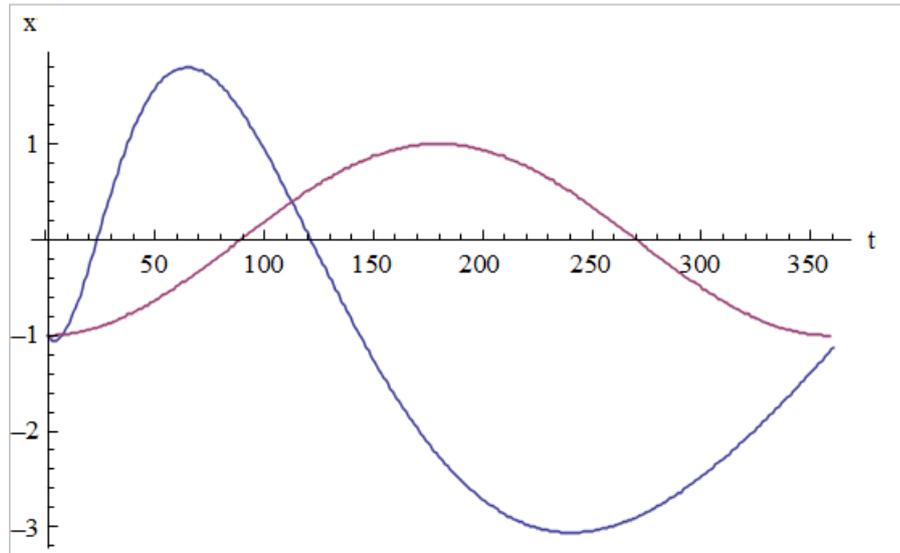


Figura 4.17: Representação gráfica comparando o comportamento de $x(t)$ com $\omega(t) = \frac{6}{1+2t}$ (curva azul) e $\omega(t) = 1$ (curva rosa).

Novamente vemos no comportamento do valor esperado de $x(t)$ que a partícula chega próxima de $x = 2$ que é o ponto máximo que queremos atingir, isso explica também o grande aumento de *overlap* que conseguimos. Ou seja a frequência $\omega(t)$ faz com que o sistema perca força restaurada suficiente para chegar próximo do alvo, pois se o sistema fosse livre a densidade de probabilidade iria chegar até $x = 1$ e não até $x = 2$. E o valor esperado da energia do sistema será dada por (2.141), o seu comportamento é dado na figura(4.18).

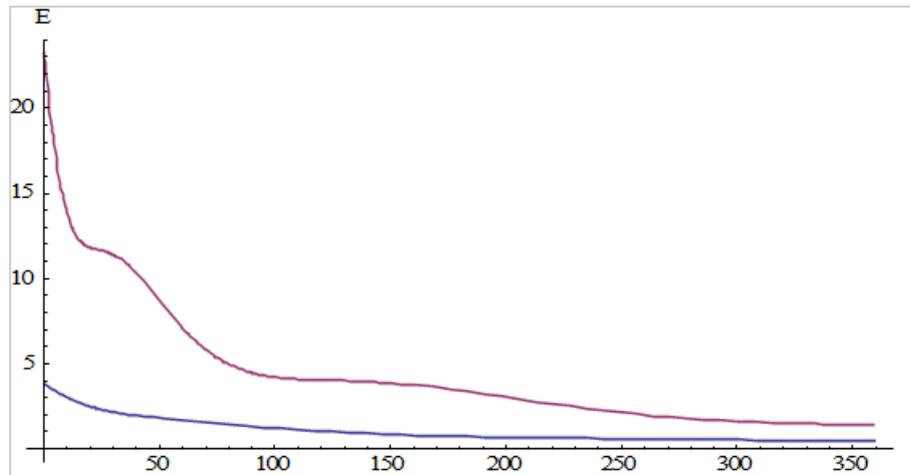


Figura 4.18: Representação gráfica da energia total para $\gamma = 1.2$ (curva azul) e $\gamma = 2$ (curva rosa).

Notemos que para ambas as frequências, a energia total do sistema decresce com o tempo até ser nula, e esse comportamento é típico de um sistema dissipativo, pois a frequência $\omega(t) = \frac{3\gamma}{1+\gamma t}$ irá diminuir sua intensidade tendendo a zero, com isso a energia potencial tenderá a zero, e por conservação, a energia cinética também irá tender a zero, com isso a energia do sistema realmente vai ser nula com o passar do tempo.

4.3 Oscilador harmônico quântico forçado

Seja agora o hamiltoniano do sistema do oscilador harmônico quântico forçado dado

$$H(t) = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2}m_0\omega_0^2x^2 - f(t)x, \quad (4.51)$$

onde m_0 e ω_0 são constantes e $f(t)$ uma força externa qualquer. A função de onda exata $\Psi_n(x, t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo é dado por (3.17) e o pacote de onda inicial usando $\Psi_n(x, t)$ como base será dado por (3.34) e o pacote de onda final dado por (3.41).

4.3.1 Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) = b$

Assim, iremos aplicar a equação da probabilidade que calculamos na seção (3.1). E aqui vamos estudar alguns valores de força e para cada força vamos maximizar duas transições. Logo vamos considerar a primeira força dada por $f(t) = b$, onde b é uma constante. Com isso temos que a probabilidade de transição dada em (3.69) ficará

$$w(t) = \left| e^{\left[\frac{(\eta+i\dot{\eta})^2}{4} - \frac{\eta^2}{2} \right]} \sum_m^{20} \sum_n^{20} \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^m d_m^* c_n \frac{2^{-(m+n)}}{\sqrt{m!n!\pi}} \binom{n}{k} \binom{m}{l} H_{n-k}(-\sqrt{2}\eta) H_{m-l}(0) e^{-int} \beta_{k,l} \right|^2, \quad (4.52)$$

com

$$\beta_{k,l} = \sqrt{\pi} \sum_{p=0}^{\text{Min}(k,l)} 2^p p! \binom{k}{p} \binom{l}{p} (-1)^{\frac{m+n}{2}-p} H_{l+k-2p} \left[\frac{(\eta+i\dot{\eta})}{\sqrt{2}i} \right], \quad (4.53)$$

e usando (3.31), η será dado por

$$\eta(t) = b - b \cos(t). \quad (4.54)$$

Assim a primeira transição será dada por um pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -1$ para um pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 2$ com $\Delta_0 = 0.3$. A partir da norma dos pacotes inicial e final, usando uma superposição de 20 estados obtemos numericamente a precisão dos pacotes que são dados por

$$\sum_{n=0}^{20} |c_n|^2 = 0.999905, \quad (4.55)$$

$$\sum_{m=0}^{20} |d_m|^2 = 0.999823, \quad (4.56)$$

os pacotes inicial e final são dados na figura (4.19).

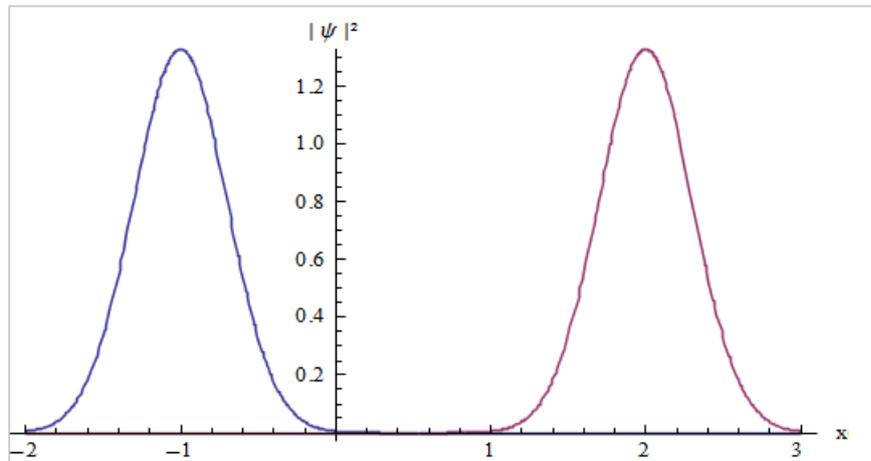


Figura 4.19: Representação gráfica da densidade de probabilidade do pacote de onda inicial (curva azul) e o pacote de onda alvo (curva rosa) em $t = 0$.

Logo, maximizando $w(b, t)$ com relação a b e t , temos que os pontos críticos (b_0, t_0) serão dados por

$$\left. \frac{\partial w}{\partial b} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.57)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.58)$$

aplicando os pontos (b_0, t_0) encontrado em (4.12), obtemos então que os valores que maximizam $w(b, t)$ serão

$$b_0 = 0.5, \quad (4.59)$$

$$t_0 = 180, \quad (4.60)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.99965. \quad (4.61)$$

A densidade de probabilidade do pacote inicial em $t = 180$ é dada na figura (4.20).

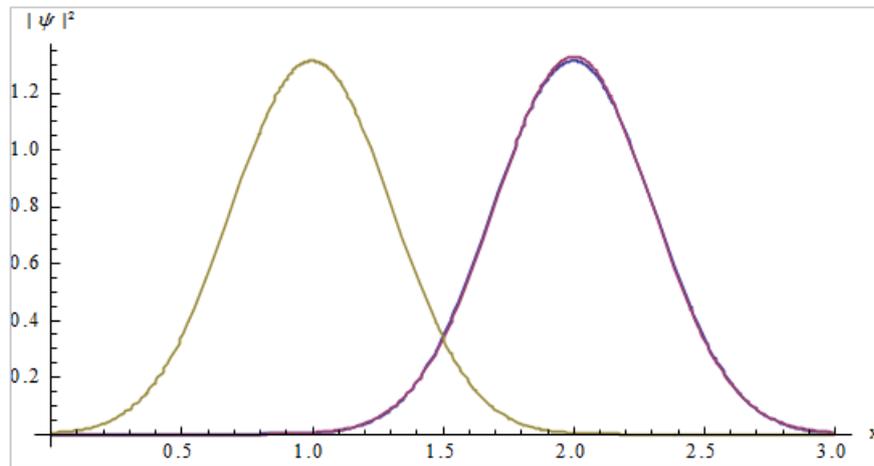


Figura 4.20: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$.

Aplicando esse valor de b_0 na força, obtemos então a probabilidade de transição em função do tempo, e $w(t)$ é dado na figura (4.21).

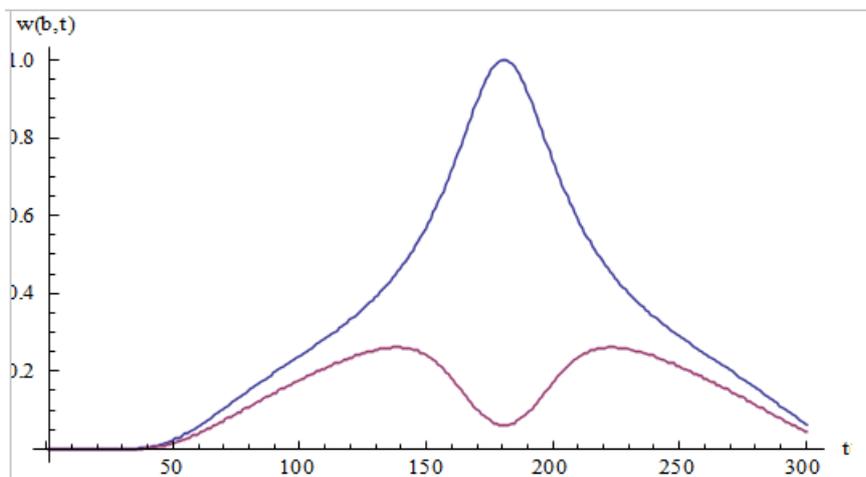


Figura 4.21: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $b_0 = 0.5$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).

Vemos pelo gráfico (4.21) e na maximização de $w(b, t)$ que a probabilidade de transição com a força calculada é excelente, com um aumento de aproximadamente 75% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre, chegando a quase 100% de *overlap*. O valor esperado de $x(t)$ com a força $f(t) = 0.5$ será dada na figura (4.22).

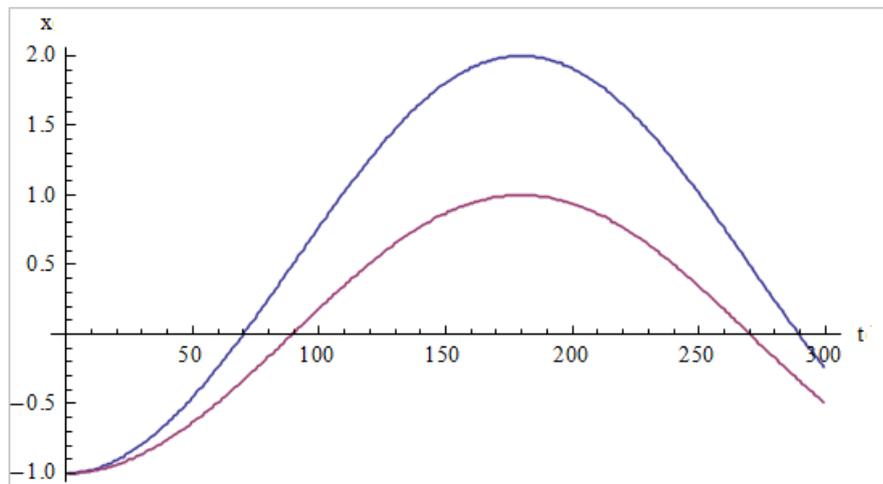


Figura 4.22: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $b_0 = 0.5$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).

O gráfico do valor esperado de $x(t)$ do sistema forçado mostra que realmente o pacote atinge um valor bem próximo do que queríamos que era $x = 2$, o que confirma o resultado que obtemos na maximização de $w(b, t)$. A ação da força funciona como um 'empurrão' gerado por um campo qualquer por exemplo, acrescentando assim energia ao sistema de modo que ele consegue atingir o alvo em um ponto x acima do qual o oscilador harmônico livre atingiria.

Agora vamos analisar a transição do pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -0.5$ para um pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 2$ com $\Delta_0 = 0.3$, com superposição de 20 estados novamente utilizando a mesma força $f(t) = b$. Temos então a probabilidade de transição será dada novamente usando (4.52),(4.53) e (4.54). A precisão dos pacotes

inicial e final dado respectivamente pela norma

$$\sum_{n=0}^{20} |c_n|^2 = 0.99992, \quad (4.62)$$

$$\sum_{m=0}^{20} |d_m|^2 = 0.999823. \quad (4.63)$$

Os pacotes inicial e final é dada pela figura (4.23).

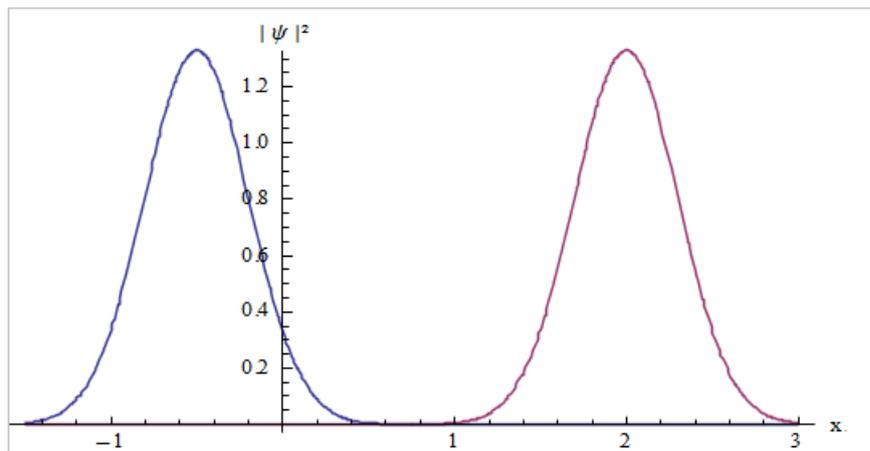


Figura 4.23: Representação gráfica da densidade de probabilidade do pacote de onda inicial(curva azul) e o pacote de onda alvo(curva rosa) em $t = 0$.

Logo, maximizando $w(b, t)$ com relação a b e t , temos que os pontos críticos (b_0, t_0) serão dados por,

$$\left. \frac{\partial w}{\partial b} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.64)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.65)$$

e aplicando os pontos (b_0, t_0) encontrado em (4.12), obtemos então que os valores que maximizam $w(b, t)$ serão,

$$b_0 = 0.75, \quad (4.66)$$

$$t_0 = 180, \quad (4.67)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.999644. \quad (4.68)$$

Assim a densidade de probabilidade do pacote de onda inicial em $t = 180$ é dada na figura (4.24).

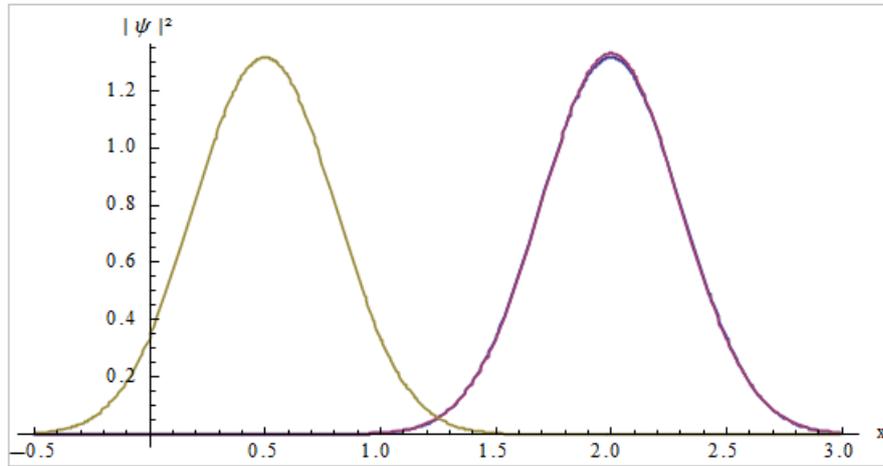


Figura 4.24: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$.

Aplicando esse valor de b_0 na força, obtemos então a probabilidade de transição em função do tempo, e a probabilidade de transição $w(t)$ é dado na figura (4.25).

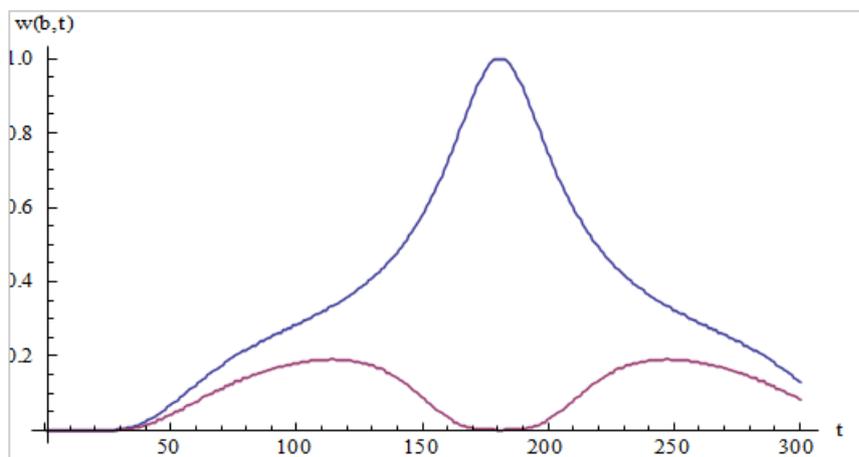


Figura 4.25: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $b_0 = 0.75$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).

Vemos pelo gráfico e na maximização de $w(b, t)$ que a probabilidade de transição com a força calculada novamente é excelente, com um aumento de aproximadamente 80% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. O valor esperado de $x(t)$ com a força $f(t) = 0.75$ será dada na figura (4.26),

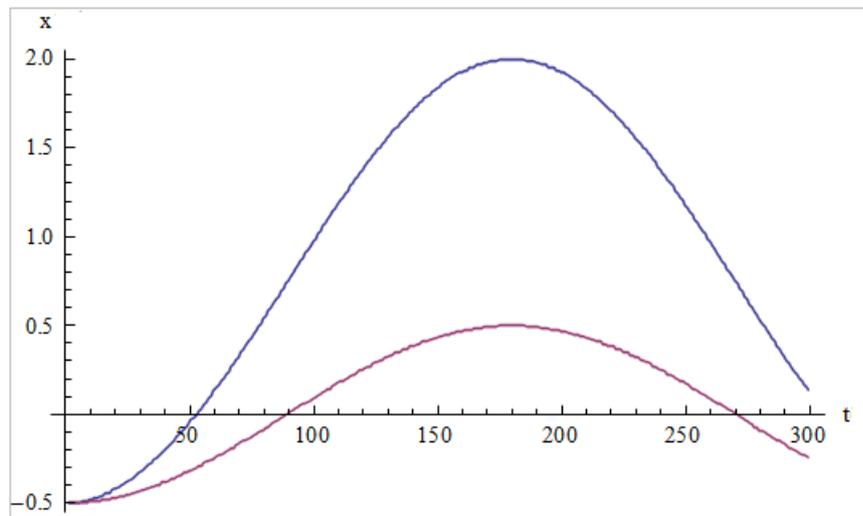


Figura 4.26: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $b_0 = 0.75$ (curva azul) e $b_0 = 0$ (curva rosa).

Novamente o gráfico do valor esperado de $x(t)$ do sistema forçado mostra que o pacote de onda inicial chega bem próximo do valor que queríamos atingir de $x = 2$, com a força $f(t) = 0.75$ calculada, o que confirma o resultado que obtemos na maximização de $w(b, t)$. Vemos também que agora a distância entre o valor que a densidade de probabilidade atingiria se o sistema fosse livre ($x = 0.5$) para a posição que queremos atingir ($x = 2$) é maior que no caso anterior, logo a força terá que ser maior também, e é justamente isso que aconteceu, a força aumentou.

4.3.2 Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) = e^{bt}$

Agora vamos fazer o mesmo procedimento, porém utilizando uma força dada por $f(t) = e^{bt}$, onde b é constante e tem dimensão de frequência, de modo que vamos calcular o valor de b para maximizar a probabilidade de transição para as mesmas transições estudadas acima. Logo a primeira transição é um pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -1$ para um pacote de onda alvo centrado em $x_{0f} = 2$ e os pacotes de onda inicial e alvo são dados na figura (4.19). A probabilidade de transição será dada por (4.52) e (4.53) com

$$\eta(t) = -\frac{\cos(t) - e^{bt} \cos(t)^2 + b \sin(t) - e^{bt} \sin(t)^2}{b^2 + 1}. \quad (4.69)$$

Logo, maximizando $w(b, t)$ com relação a b e t , temos que os pontos críticos (b_0, t_0) serão dados por

$$\left. \frac{\partial w}{\partial b} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.70)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.71)$$

e aplicando os pontos (b_0, t_0) encontrado em (4.12), obtemos então que os valores que maximizam $w(b, t)$ serão,

$$b_0 = -0.465, \quad (4.72)$$

$$t_0 = 179, \quad (4.73)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.980378. \quad (4.74)$$

A densidade de probabilidade do pacote de onda inicial e do pacote de onda alvo é dada na figura(4.27).

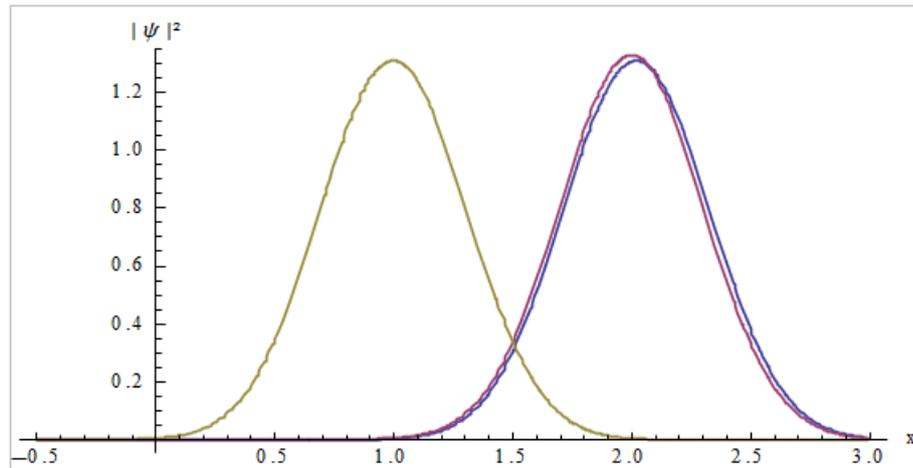


Figura 4.27: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$.

Aplicando esse valor de b_0 na força, obtemos então a probabilidade de transição em função do tempo, e $w(t)$ é dado na figura (4.28).

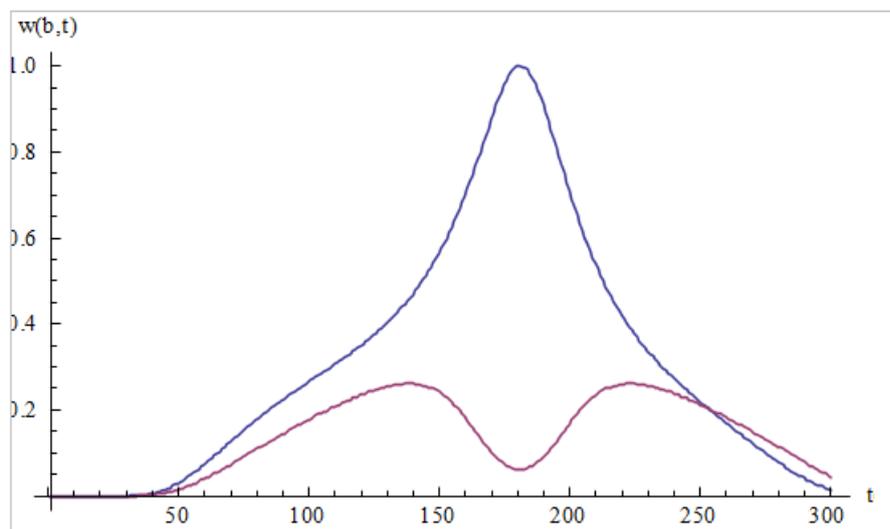


Figura 4.28: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = e^{-0.465t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).

Vemos pelo gráfico (4.28) e na maximização de $w(b, t)$ que a probabilidade de transição com a força calculada é excelente atingindo quase 100%, com um aumento de aproximadamente 73% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. O valor esperado de $x(t)$ com a força $f(t) = e^{-0.465t}$ será dada na figura (4.29).

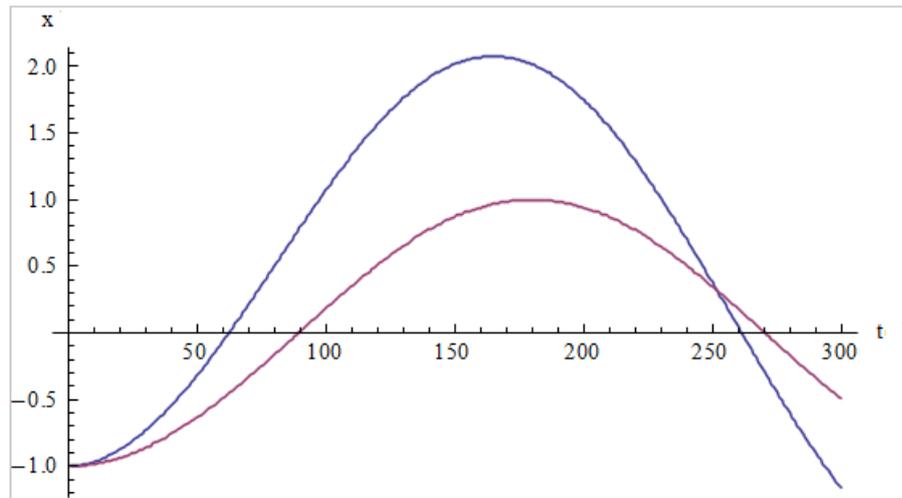


Figura 4.29: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = e^{-0.465t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).

O gráfico do valor esperado de $x(t)$ do sistema forçado mostra que realmente o pacote atinge um valor bem próximo do que queríamos atingir $x = 2$, o que confirma o resultado que obtemos na maximização de que foi de aproximadamente 98% de *overlap*. Essa força tem maior intensidade nos instantes iniciais, e ao passar do tempo ela vai diminuindo, de modo que ela perde essa intensidade de maneira lenta conseguindo assim ter energia para chegar bem próxima do alvo.

Agora vamos analisar a transição do pacote de onda inicial centrado em $x_{0i} = -0.5$ para um pacote de onda final centrado em $x_{0f} = 2$ com $\Delta_0 = 0.3$, com superposição de 20 estados novamente utilizando a mesma força $f(t) = e^{bt}$ e os pacotes de onda inicial e final são dados na figura(4.23). Logo, maximizando $w(b, t)$ com relação a b e t , temos que

os pontos críticos (b_0, t_0) serão dados por

$$\left. \frac{\partial w}{\partial b} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.75)$$

$$\left. \frac{\partial w}{\partial t} \right|_{(b,t)=(b_0,t_0)} = 0, \quad (4.76)$$

e aplicando os pontos (b_0, t_0) encontrado em (4.12), obtemos então que os valores que maximizam $w(b, t)$ serão,

$$b_0 = -0.186, \quad (4.77)$$

$$t_0 = 180, \quad (4.78)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.9925. \quad (4.79)$$

A densidade de probabilidade do pacote de onda inicial e do pacote de onda alvo é dada na figura (4.30).

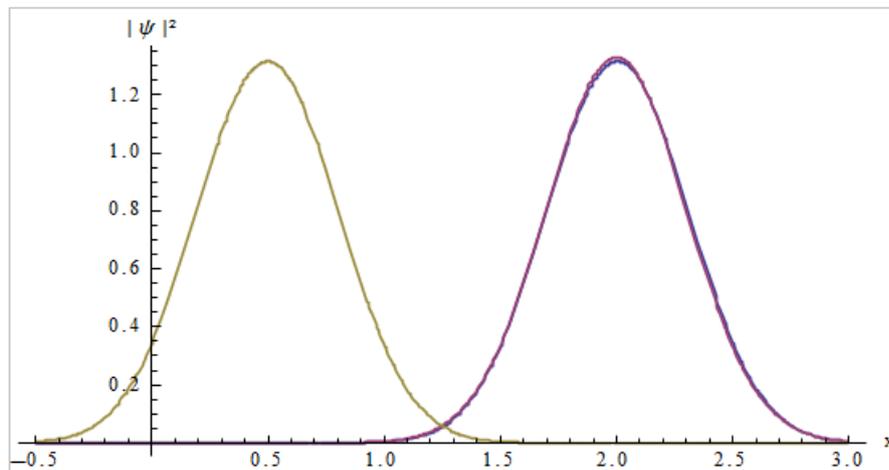


Figura 4.30: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180$.

Aplicando esse valor de b_0 na força, obtemos então a probabilidade de transição em função do tempo, e $w(t)$ é dado na figura (4.31).

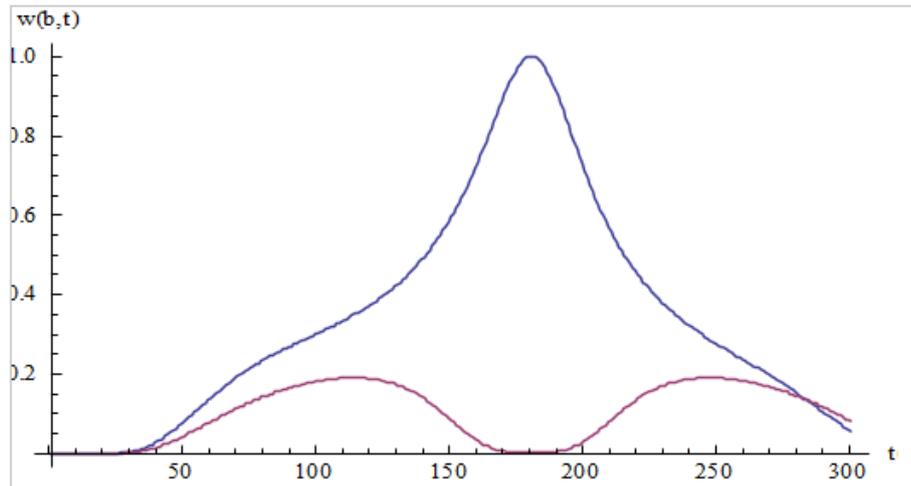


Figura 4.31: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = e^{-0.186t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).

Vemos pelo gráfico (4.31) e na maximização de $w(b, t)$ que a probabilidade de transição com a força calcular é excelente, com um aumento de aproximadamente 80% com relação a probabilidade de transição do oscilador harmônico livre. O valor esperado de $x(t)$ com a força $f(t) = e^{-0.186t}$ será dada na figura (4.32).

Com isso temos que gráfico do valor esperado de $x(t)$ do sistema forçado mostra que novamente o pacote atinge um valor bem próximo do que queríamos em $x = 2$ com essa força calculada, o que confirma o resultado que obtemos na maximização de $w(b, t)$. Agora temos que a força perde intensidade mais lentamente, o que significa que precisamos de uma força mais intensa por mais tempo, e por consequência uma energia maior, já que o valor que queremos atingir ($x = 2$) está mais distante do valor simétrico a posição inicial ($x = 0.5$).

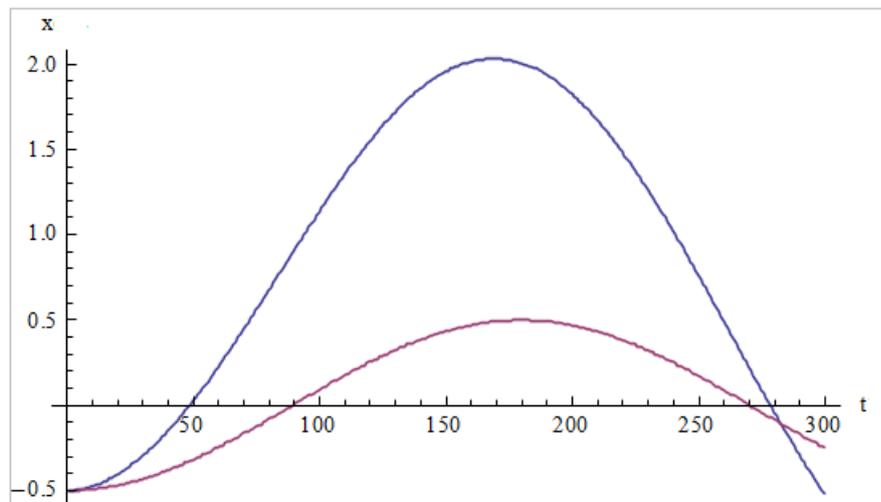


Figura 4.32: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = e^{-0.186t}$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva rosa).

4.3.3 Transições entre os pacotes de onda inicial e final com a força $f(t) = \sin(bt)$

Agora sejam as mesmas transições porém para a força dada por $f(t) = \sin(bt)$, onde b é uma constante e tem dimensão de frequência, assim a transição do pacote inicial centrado em $x = -1$ para o pacote final centrado em $x = 2$ será dada por $w(b, t)$ e maximizando com relação a b e t , obtemos

$$b_0 = 0.338603, \quad (4.80)$$

$$t_0 = 180.981, \quad (4.81)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.971519. \quad (4.82)$$

A densidade de probabilidade do pacote de onda inicial e do pacote de onda alvo em $t = 180.981$ é dada na figura(4.33).

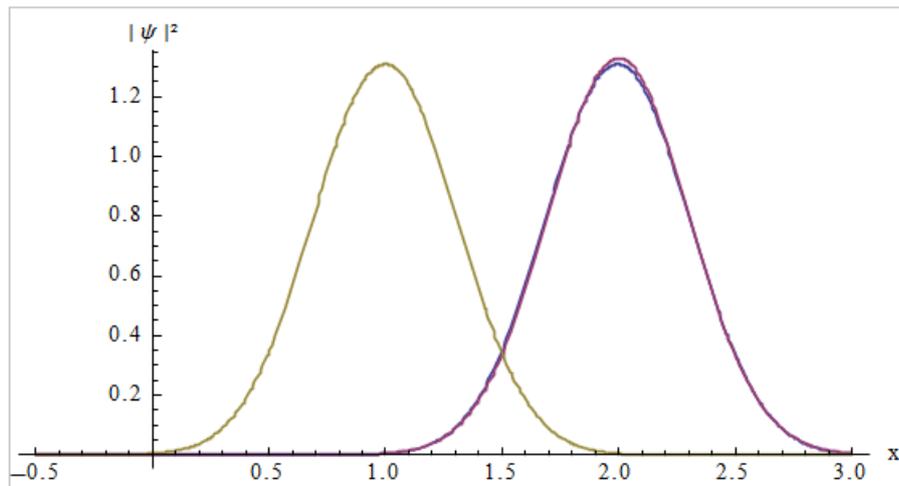


Figura 4.33: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 180.981$.

A probabilidade de transição em função do tempo quando $b_0 = 0.338603$ é dada na figura(4.34).

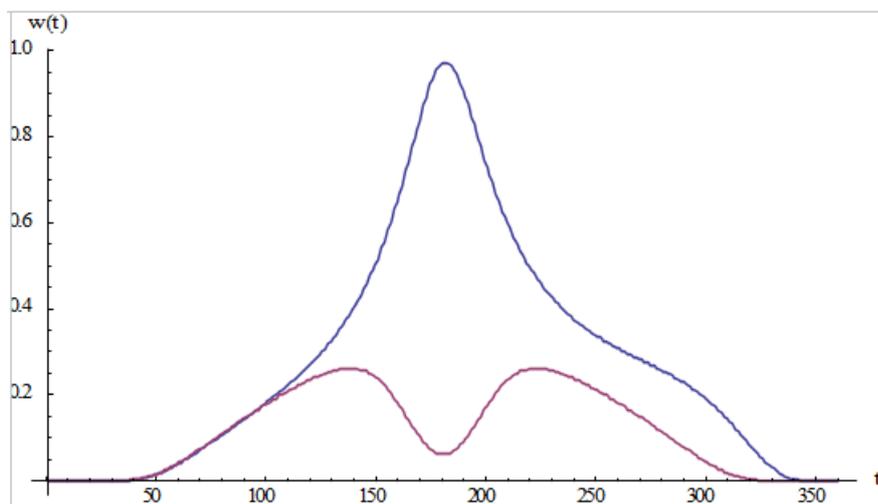


Figura 4.34: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = \sin(0.338603t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).

Conseguimos verificar então um grande aumento no *overlap* dos pacotes de onda inicial e final com relação a transição do sistema livre, por conta da influência da força $f(t) = \sin(0.338603t)$. O comportamento do valor esperado de $x(t)$ é dada na figura(4.35).

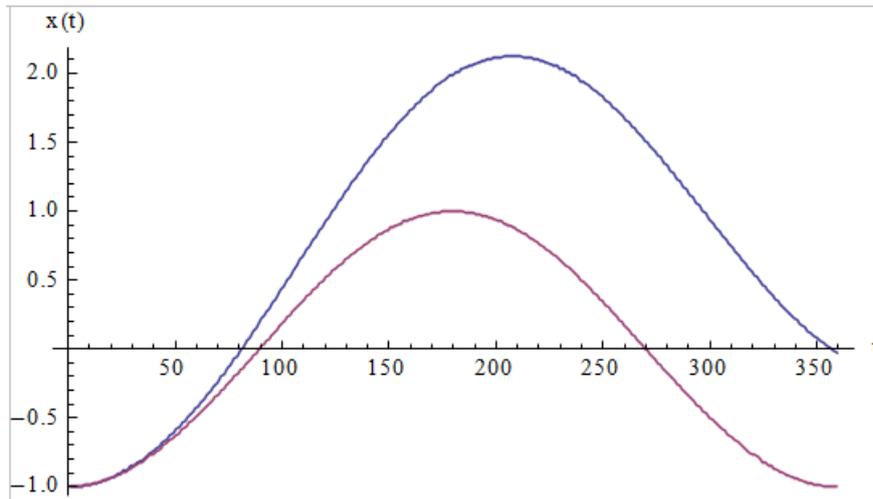


Figura 4.35: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = \sin(0.338603t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).

Vemos então na figura (4.35) que o valor máximo de $x(t)$ é bem próximo de $x = 2$ como queríamos e quando $t = 180.981$, $x(t) \approx 2$, ou seja, queríamos que o valor máximo fosse $x = 2$ mas não atingimos ele exatamente, isso justifica o valor de 97%(e não 100%) de *overlap* encontrado.

Agora fazemos o mesmo procedimento para a transição do pacote inicial centrado em $x = -0.5$ para o pacote final centrado em $x = 2$ será dada por $w(b, t)$ e maximizando com relação a b e t , obtemos

$$b_0 = 1.06456, \quad (4.83)$$

$$t_0 = 179.574, \quad (4.84)$$

$$w(b_0, t_0) = 0.997093. \quad (4.85)$$

A densidade de probabilidade do pacote inicial em $t = 179.574$ é dada na fi-

gura(4.36).

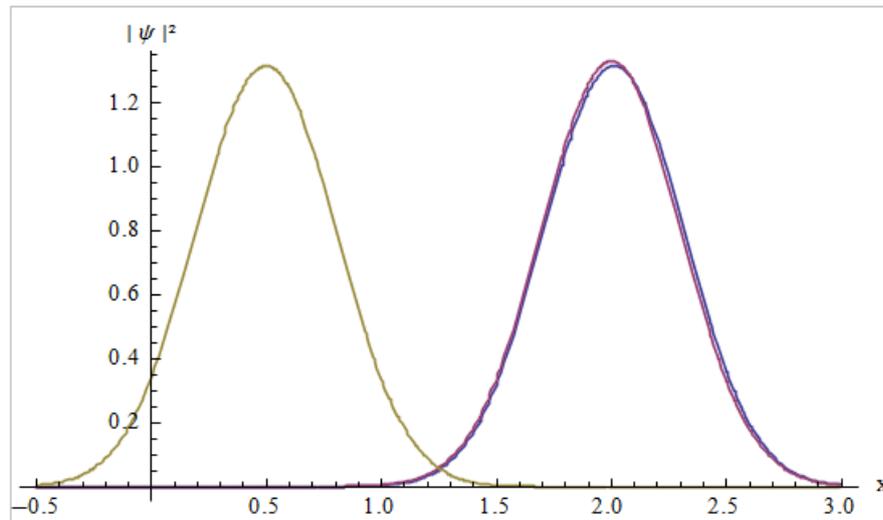


Figura 4.36: Representação gráfica da densidade probabilidade com a curva azul sendo o pacote de onda inicial controlado, a curva amarela o pacote de onda inicial livre e a rosa o pacote de onda alvo em $t = 179.574$.

A probabilidade de transição em função do tempo quando $b_0 = 1.06456$ é dado na figura(4.37).

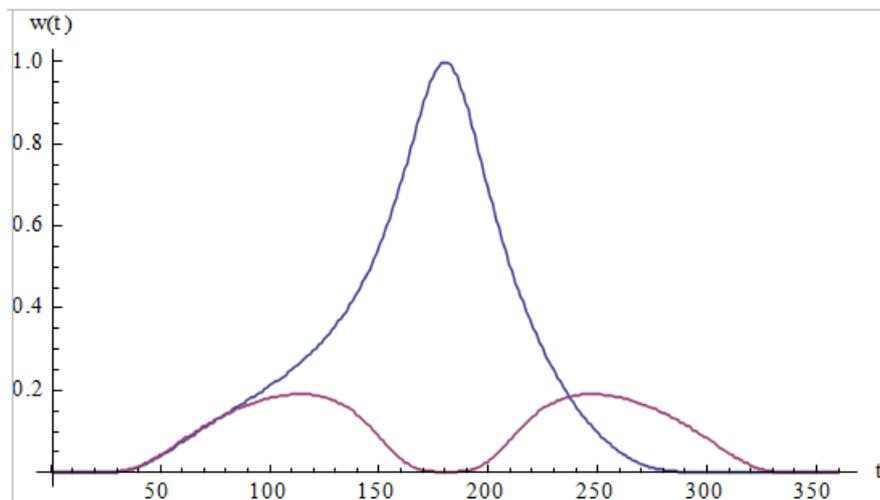


Figura 4.37: Representação gráfica comparando a probabilidade de transição com $f(t) = \sin(1.06456t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).

Conseguimos verificar um aumento na transição dos pacotes de onda inicial e final com relação ao sistema livre para aproximadamente 99% de *overlap*, por conta da influência da força $f(t) = \sin(1.06456t)$. O comportamento do valor esperado de $x(t)$ é dada na figura(4.38).

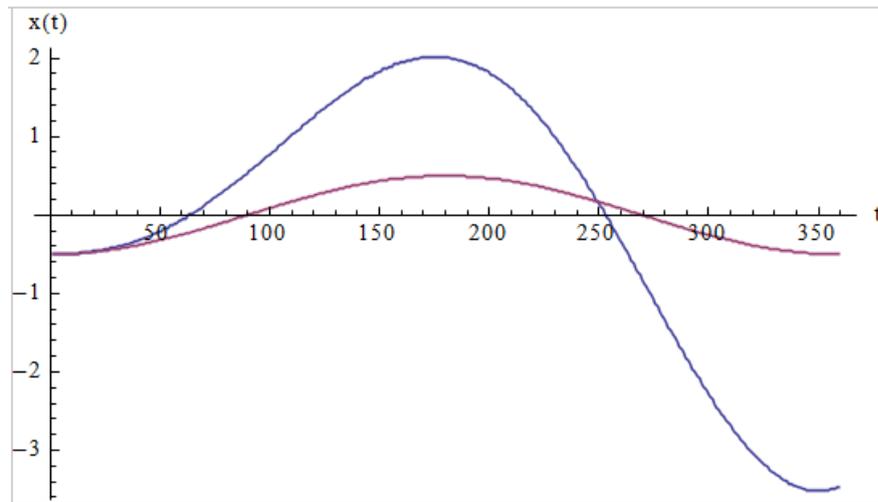


Figura 4.38: Representação gráfica do valor esperado de $x(t)$ com $f(t) = \sin(1.06456t)$ (curva azul) e $f(t) = 0$ (curva laranja).

Vemos na figura (4.38) que o valor máximo de $x(t)$ é aproximadamente $x = 2$, o que justifica então termos encontrado que o *overlap* é altíssimo de quase 100%. Comparando com a força encontrada acima notamos uma diferença que é o aumento do argumento do seno. Isso explica porque agora precisamos de uma força maior nos instantes iniciais para levar o sistema de $x = 0.5$, que é onde ele iria se fosse livre, para $x = 2$, anteriormente tínhamos que levar de $x = 1$ para $x = 2$. Lembrando que quando aumentamos o valor de b_0 no seno, estamos diminuindo o valor do período da função seno, assim no segundo caso a força atingirá o valor máximo mais rapidamente.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Vimos nesse trabalho que conseguimos controlar uma transição de pacotes de onda para o sistema quântico do oscilador harmônico dependente do tempo maximizando a probabilidade de transição entre eles. Essa probabilidade foi dada por $w(\gamma, t)$ na seção (2.4), dependente de um parâmetro γ independente do tempo presente na massa $m(\gamma, t)$ ou na frequência $\omega(\gamma, t)$, e do tempo. Desse modo maximizamos $w(\gamma, t)$ com relação a essas variáveis, determinando o tempo em que atingirá e também o valor de γ que irá aumentar o *overlap* e conseqüentemente o valor da massa $m(\gamma, t)$ e da frequência $\omega(\gamma, t)$.

O cálculo da probabilidade de transição se deu primeiramente construindo a função de onda exata inicial do sistema do oscilador harmônico dependente do tempo, com a dependência temporal na massa $m(\gamma, t)$ e frequência $\omega(\gamma, t)$, que foi obtida através do operador invariante de Lewis e Riesenfeld dado na seção (2.2). Assim usamos esse resultado para construir o pacote de onda inicial dependente do tempo e por fim a expressão exata da probabilidade de transição.

Tendo calculado a expressão exata da probabilidade de transição, como primeira aplicação usamos um modelo de massa $m(\gamma, t)$ que cresce exponencialmente com o tempo,

e esse sistema é o oscilador de Caldirola-Kanai, que foi modelado para representar um sistema dissipativo. Com base nos resultados e gráficos obtidos na seção (4.1), vemos que nas duas transições que usamos conseguimos controlar o valor da posição final do pacote de onda inicial, de modo que a posição x final é menor que x_0 , onde $x = -x_0$ é a posição inicial do centro do pacote de onda. Ou seja, a massa $m(t)$ funciona bem como um amortecimento ao sistema de modo que assim conseguimos levar a densidade do pacote de onda inicial a uma posição inferior a x_0 . Confirmamos que o sistema é amortecido pois o comportamento de $x(t)$ é análogo ao sistema do oscilador harmônico amortecido clássico (Apêndice A.1), porém como vemos na figura (4.9) há uma controvérsia quanto ao sistema ser dissipativo ou não.

A segunda aplicação dada na seção (4.2), usamos um modelo de frequência $\omega(\gamma, t)$ objeto de estudo na ref[13], que é um sistema de oscilador harmônico cuja frequência diminui com o tempo, e este sistema físico é análogo ao de uma partícula carregada penetrando em uma região com campo magnético variável $B(t)$ com $w \propto |B|$. Aplicando essa frequência obtivemos a partir da densidade de probabilidade do pacote inicial dada por $|\Psi(x, t)|^2$ e o valor esperado de $x(t)$, que a posição final máxima que x irá atingir será maior que a posição simétrica do valor inicial de x_0 . Assim de acordo com que o tempo evolui a frequência diminui sua intensidade, com isso a densidade de probabilidade do pacote inicial irá evoluir no tempo cada vez mais lentamente e atinge um valor de x acima do qual o sistema livre atingiria.

Portanto com essa frequência conseguimos controlar a posição $x(t)$ do sistema quando quisermos que a posição alvo seja $x > x_0$. Podemos obter a interpretação física desse sistema fazendo um análogo com o caso o sistema massa-mola no caso clássico dado em (Apêndice A.2). Para o sistema clássico massa-mola com a mesma frequência $\omega(\gamma, t)$

que usamos, é o mesmo de dizer que quanto menor for a intensidade de w menor será a intensidade de k que é coeficiente elástico da mola, já que $k(t) = m\omega(t)^2$, com isso a força elástica perderá cada vez mais intensidade com o passar do tempo e irá diminuir o valor da energia para fazer com que a partícula retorne a posição inicial. Desse modo ela conseguirá atingir um posição final em x maior do que a posição simétrica do valor inicial de x_0 , como vimos nas figuras (4.13) e (4.17).

Para o sistema do oscilador harmônico com uma força externa $f(b, t)$ novamente controlamos as transições através da probabilidade de transição para pacotes de onda. Determinamos primeiramente a função de onda exata dada em (3.17), a partir de um ansatz usado na Ref[3]. Usando essa função de onda como base construímos o pacote de onda inicial que irá evoluir até atingir um pacote de onda final estacionário. Depois calculamos a expressão exata da probabilidade de transição dada na seção (3.3), assim na seção (4.3) fizemos aplicações com alguns modelos de força dependentes do tempo e de um parâmetro b qualquer independente do tempo. Desse modo fizemos o controle da transição através de b e t , ou seja, determinamos para que valores de b e t temos a probabilidade máxima de transição, e conseqüentemente controlamos o valor da força que depende de b . Encontramos assim bons resultados, pois conseguimos levar os pacotes de onda inicial para os pacotes de onda alvo com probabilidades de no mínimo 97% de *overlap* usando as forças $f(b, t) = b$, $f(b, t) = e^{bt}$ e $f(b, t) = \sin(bt)$. Temos então de acordo com as transições usadas como exemplo, que esses modelos de força nos permitem controlar a posição final x dos pacotes de ondas inicial com uma ótima eficácia quando queremos que o pacote de onda alvo esteja em $x > x_0$.

Com base nos resultados obtidos no capítulo 4, vemos a eficácia da teoria de controle quântico, pois mostramos que conseguimos elevar a probabilidade de um estado

inicial de um sistema quântico atingir um estado final alvo pré-estabelecido controlando parâmetros presente no sistema físico em questão, no nosso caso do oscilador harmônico dependente do tempo.

Como perspectiva futura, vamos propor uma maneira analítica de encontrar um sistema com $f(\gamma, t)$ que seja análogo ao com massa $m(\gamma, t)$ e frequência $\omega(\gamma, t)$, ou seja, assim poderemos substituir um sistema com massa e frequência variável no tempo por um sistema com uma força dependente do tempo, pois é bem mais complicado aplicar experimentalmente uma massa $m(t)$. Assim possivelmente podemos buscar resultados experimentais aplicando um sistema de oscilador harmônico forçado que simule um sistema com massa ou frequência dependentes do tempo.

Apêndice A

Oscilador harmônico clássico dependente do tempo

O sistema com o oscilador harmônico clássico dependente do tempo pode ser dado em três casos, a primeira com a dependência temporal somente na massa, a segunda com a dependência temporal somente na frequência, e a terceira com a dependência temporal tanto na massa quanto na frequência. Assim seja o sistema com a massa dada por $m(t)$ e frequência dada por $\omega(t)$, logo pela segunda lei de Newton temos

$$\frac{dp(t)}{dt} = -kx, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{d}{dt}(m(t) \frac{dx}{dt}) = -kx, \quad (\text{A.2})$$

$$\dot{m}(t) \frac{dx}{dt} + m(t) \frac{d^2x}{dt^2} = -kx, \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \frac{dx}{dt} + \frac{k}{m(t)} x = 0, \quad (\text{A.4})$$

fazendo $k = m(t)\omega(t)^2$, obtemos então

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \frac{dx}{dt} + \omega(t)^2 x = 0, \quad (\text{A.5})$$

e nas seções a seguir vamos determinar a equação de movimento $x(t)$ para os dois primeiros casos.

A.1 Oscilador harmônico clássico com massa dependente do tempo

Seja agora a frequência dada por $\omega(t) = \omega_0$, onde ω_0 é independente do tempo, e a massa dada por $m(t) = m_0 e^{\gamma t}$, com γ independente do tempo, assim a equação (A.5) ficará

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0 x = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$x(0) = x_0, \quad (\text{A.7})$$

$$\dot{x}(0) = 0, \quad (\text{A.8})$$

onde (A.6) é a EDO da equação de movimento para $x(t)$ para o oscilador harmônico clássico amortecido e a solução é dada por

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{\gamma}{2m_0}t} \left[\cos\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}t\right) + \frac{\gamma}{2\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}} \sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}t\right) \right], \quad (\text{A.9})$$

vamos agora aplicar o resultado em (A.9) para dois casos, o primeiro quando $x_0 = -1\text{m}$, $\gamma = 0.315$, $\omega_0 = 1 \text{ rad/s}$ e $m_0 = 1 \text{ kg}$, assim temos o comportamento de $x(t)$ na figura (A.1).

Agora seja as constantes em (A.9) dadas por $x_0 = -2\text{m}$, $\omega_0 = 1\text{rad/s}$, $m_0 = 1\text{kg}$ e $\gamma = 0.85$, logo $x(t)$ é dado na figura(A.2).

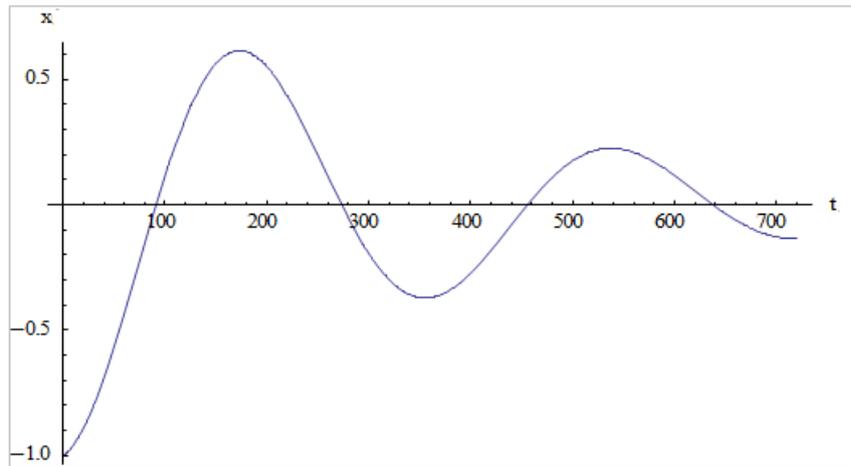


Figura A.1: Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante de amortecimento $\gamma = 0.315$.

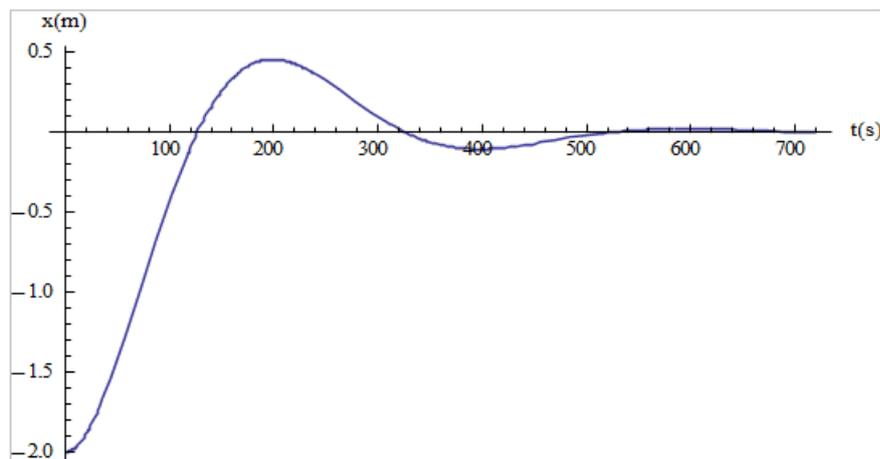


Figura A.2: Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante de amortecido $\gamma = 0.85$.

Vemos pelas figuras (A.1) e (A.2) que em ambos os casos o valor máximo que x atinge é próximo de $x = 0.5m$ e que no segundo caso o amortecimento tem que ser maior pois a energia potencial inicial é maior, com isso temos que tirar mais energia do sistema para o corpo ir até $x = 0.5m$ e retornar.

A energia total do sistema é dado por

$$E(t) = \frac{1}{2}m(t) \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}m(t)x(t)^2, \quad (\text{A.10})$$

e na figura (A.3) temos o comportamento de $E(t)$ para ambos os casos

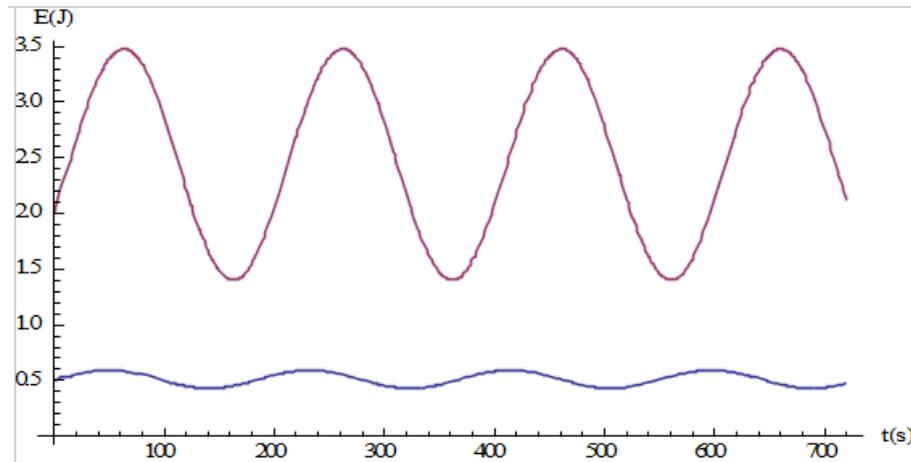


Figura A.3: Representação gráfica da energia total do sistema para $\gamma = 0.315$ (curva azul) e $\gamma = 0.85$ (curva rosa).

Para o sistema amortecido por um força externa $f = -\gamma \frac{dx}{dt}$, e usando $m = 1\text{kg}$ e $w = 1\text{rad/s}$. Temos pela segunda lei de Newton

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + x = 0, \quad (\text{A.11})$$

logo temos a mesma de (A.9) e a energia do sistema é dada por

$$E(t) = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} x(t)^2, \quad (\text{A.12})$$

e na figura (A.4) temos o comportamento de $E(t)$ para ambos os valores de γ .

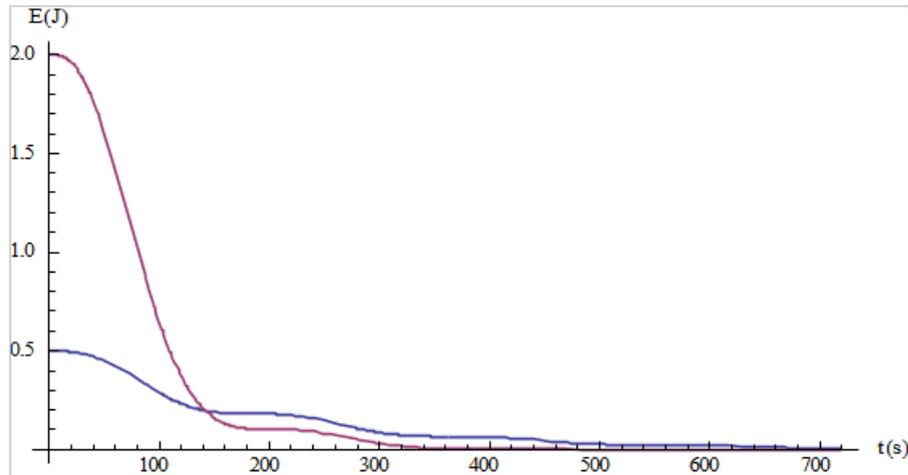


Figura A.4: Representação gráfica da energia total do sistema para $\gamma = 0.315$ (curva azul) e $\gamma = 0.85$ (curva rosa).

Vemos a partir da figura (A.4) que o sistema é amortecido e dissipativo já que a energia do sistema tende a zero, diferentemente da figura (A.3), onde a energia varia com o tempo oscilando em torno de uma energia fixa, ou seja no sistema onde a massa é dada por $m(t) = e^{\gamma t}$ temos um amortecimento como vimos nas figuras (A.1) e (A.2), mas o sistema não é dissipativo.

A.2 Oscilador harmônico clássico com frequência dependente do tempo

Seja agora a frequência dada por

$$\omega(t) = \frac{3\gamma}{1 + \gamma t},$$

onde γ é independente do tempo, e a massa dada por $m(t) = m_0$, onde m_0 é a massa independente do tempo, assim a equação (A.5) ficará

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \left(\frac{3\gamma}{2 + \gamma t}\right)^2 x = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$x(0) = x_0, \quad (\text{A.14})$$

$$\dot{x}(0) = 0, \quad (\text{A.15})$$

onde (A.13) é a EDO da equação de movimento para $x(t)$ para o oscilador harmônico clássico com a frequência variável e a solução é dada por

$$x(t) = \frac{x_0}{35} \left[35\sqrt{1 + \gamma t} \cos\left(\frac{\sqrt{35}}{2} \log(1 + \gamma t)\right) - \sqrt{35}\sqrt{1 + \gamma t} \sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{35} \log(1 + \gamma t)\right) \right], \quad (\text{A.16})$$

vamos agora aplicar o resultado em (A.16) para dois casos, o primeiro quando $x_0 = -0.5m$, $\gamma = 1.2$, assim temos o comportamento de $x(t)$ na figura (A.5).

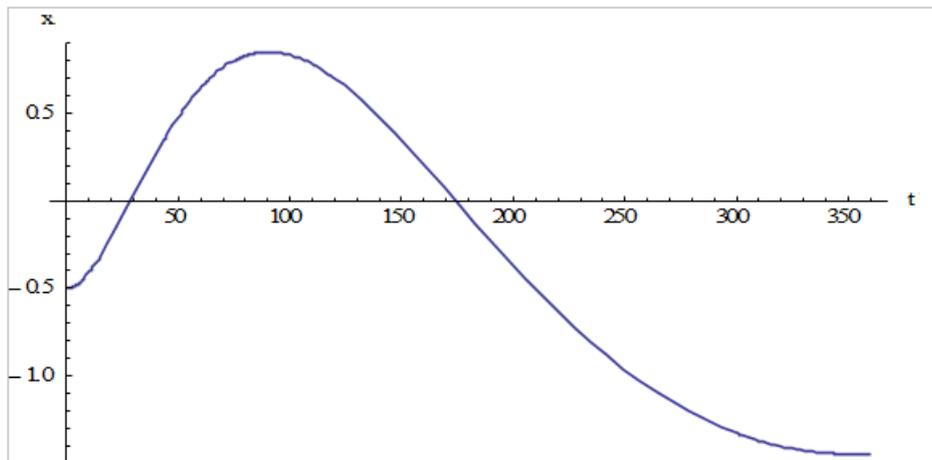


Figura A.5: Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante $\gamma = 1.2$.

Agora seja as constantes em (A.16) dadas por $x_0 = -2m$ e $\gamma = 2$, logo $x(t)$ é dado na figura(A.6).

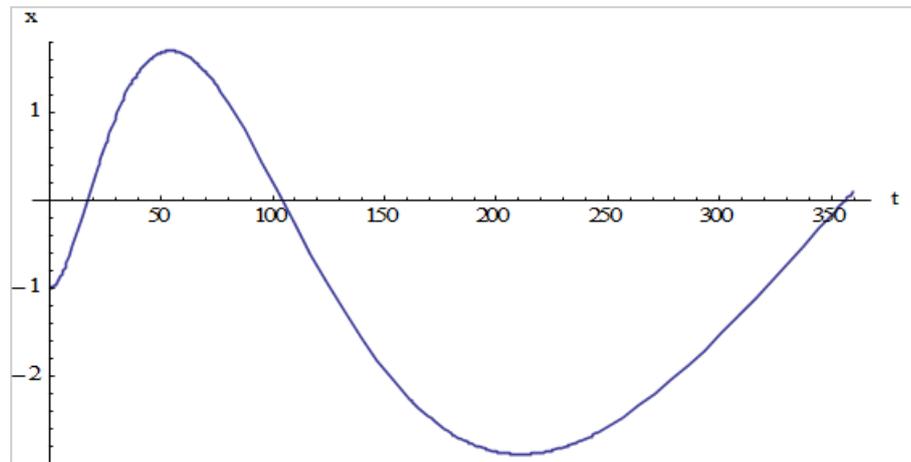


Figura A.6: Representação gráfica da trajetória de $x(t)$ com a constante $\gamma = 2$.

Vemos pelas figuras (A.5) e (A.6) que em ambos os casos o valor máximo que x é superior ao valor simétrico da posição inicial, ou seja, o sistema livre oscilaria entre $x = -0.5m$ e $x = 0.5m$, porém com a frequência $\omega(t)$ atingiu o valor de $x = 0.9m$ aproximadamente no primeiro caso, e no segundo caso para o sistema livre oscilaria entre $x = -1m$ até $x = 1m$, porém atingiu $x = 1.85m$ aproximadamente. E isso se justifica pelo fato de que a frequência $\omega(t)$ diminui a intensidade com o tempo, desse modo a constante elástica da mola $k(t) = m\omega(t)^2$ irá diminuir mais rapidamente pois temos um fator quadrado em $\omega(t)$, fazendo com que a força elástica de restauração $f = -kx$ diminua rapidamente, com isso a posição x máxima que o sistema atingirá será maior que $x = -x_0$ (posição simétrica ao valor da posição inicial x_0). E no gráfico abaixo temos a energia do sistema para ambos os casos

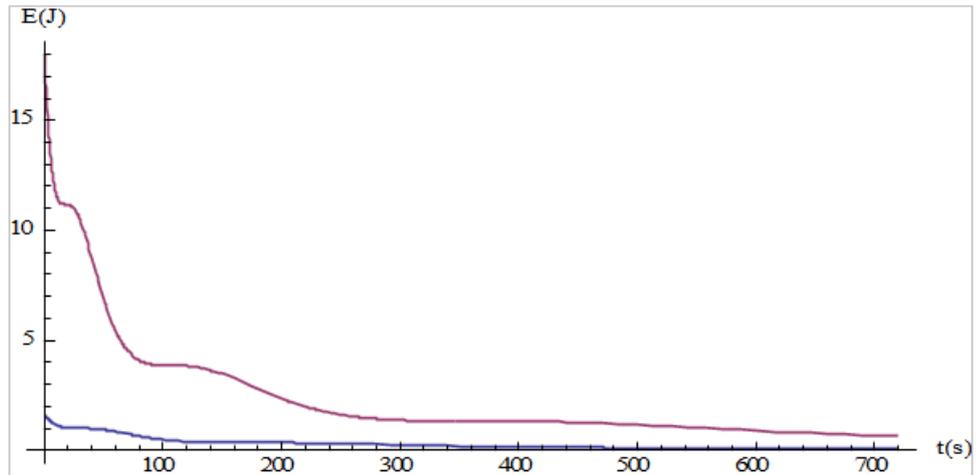


Figura A.7: Representação gráfica da energia total com $\gamma = 1.2$ (curva azul) e $\gamma = 2$ (curva rosa).

Podemos notar que a energia do sistema decresce com o tempo até ser nula, com isso conclui-se que o sistema com a frequência variável $\omega(t)$ é dissipativo.

Apêndice B

Unidades atômicas

Seja a representação de algumas constantes físicas em unidade atômica e sistema internacional dada na tabela abaixo[30].

Constante	Unidade atômica	Unidade no SI
Massa do elétron	$m = 1$	$19.109382 \times 10^{-31} kg$
Carga do elétron	$e = 1$	$1.6021765 \times 10^{-19} C$
Constante de Plank	$\hbar = 1$	$1.0545716 \times 10^{-34} J.s$
Permissividade no vácuo	$\epsilon_0 = 1$	$1.11265 \times 10^{-10} \frac{C^2}{J.m}$
Raio de Bohr	$a_0 = 1$	$5.2917721 \times 10^{-11} m$
Força eletrostática do H com $r = a_0$	$F = 1$	$6,5561671 \times 10^{-9} N$
Dobro da energia do H com $n = 1$	$E = 1$	$4.359744 \times 10^{-18} J$
Periodo de revolução do H com $r = a_0$	$t = 1$	$2.4188843 \times 10^{-17} s$
Frequência de revolução do H com $r = a_0$	$w = 1$	$0,413413737 \times 10^{17} Hz$

Tabela B.1: Tabela com algumas constantes escritas em unidades atômicas e no SI, onde H é o átomo de Hidrogênio.

Referências Bibliográficas

- [1] E. Fernandez-Cara and E. Zuazua, *Control Theory: History, Mathematical Achievements and Perspectives*.
- [2] Eisberg e Resnick, *Física Quântica*, capítulo 4
- [3] A.G.Butkovskiy and Yu. I. Samoilenko, *Control of Quantum-Mechanical Processes and Systems*, capítulo 2, seção (2.8).
- [4] <https://repositorio.ufsc.br/handle/123456789/96446>.
- [5] V. Ramakrishna, H. Rabitz, *Phys. Rev. A* 54, 1715 (1996).
- [6] <https://blog.ufes.br/luciofassarella/2013/02/16/control-de-sistemas-quanticos-o-caminho-para-a-computacao-quantica>
- [7] http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2012/advanced-physicsprize2012_02.pdf
- [8] P. Caldirola, *Nuovo Cimento* 18, 393 (1941).
- [9] E. Kanai, *Progress of Theoretical Physics* 3, 440 (1948).
- [10] I.A. Pedrosa, G.P. Serra e I. Guedes, *Phys. Rev. A* 5, 56 (1997).

- [11] Surarit Peporea, Pongtip Winotaia, Tanakorn Osotchanb and Udom Robkobb, *Science Asia*, 32, 173-179.
- [12] Herrera, L., Nuñez, L., Patiño, A., and Rago, H., *American Journal of Physics*, 54, 273-277,(1986).
- [13] Xu Xiu-Wei, En Ting-Qi e Liu Sheng-Dian ,*Chin. Phys. Soc. Volume 8, Number 9* (1999).
- [14] Colegrave, R. K., Abdalla, M. S., *Optica Acta* 28,495-501 (1981).
- [15] Brown, L. S., *Phys. Rev. Lett.* 66,526-529 (1991).
- [16] Chumakov, S. M., Dodonov, V. V., Man'ko, V. I., *Phys. A*, 19,3229-3239 (1986).
- [17] John G. Hartley and John R. Ray, *Phys. Rev. A* 24, 2873 (1981).
- [18] H.R. Lewis, Jr.,*Phys.Rev.Lett.* **27**,510(1967); *J. Math. Phys. (N.Y.)***9**, 1976(1968).
- [19] H.R. Lewis, Jr. and W.B. Riesenfeld, *J. Math. Phys. (N.Y.)***10**,1458 (1969).
- [20] Xi Chen, E. Torrontegui, J. G. Muga, *Phys. Rev. A* 83, 062116 (2011).
- [21] Pi-Gang Luan and Chi-Shung Tang, *Phys. Rev. A* 71, 014101 (2005).
- [22] M.C.Bertin, B.M.Pimentel, J.A.Ramirez, *Construction of dynamical invariants for the time-dependent harmonic oscillator with a time-dependent driven force*, 2014.
- [23] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik ,*Table of Integrals, Series and Products*,Seventh edition, pág. 804.
- [24] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik ,*Table of Integrals, Series and Products*,Seventh edition, pág. 998.

- [25] V.S.Popov and A.M. Perelomov, Soviet Physics JETP,**29**,4(1969).
- [26] G.B. Arfken, H.J. Weber and F.E. Harris ,*Mathematical Methods for Physicists*, 7a edição, pág. 741.
- [27] G.B. Arfken, H.J. Weber and F.E. Harris ,*Mathematical Methods for Physicists*, 7a edição, pág. 871.
- [28] G.B. Arfken, H.J. Weber and F.E. Harris ,*Mathematical Methods for Physicists*, 7a edição, pág. 375.
- [29] Stefan C. Mancas e Haret C. Rosu, Phys. Lett. A 378 (2014) 2113-2117.
- [30] http://faculty.ycp.edu/~jforesma/educ/pchem/atomic_units.pdf.