

ESPECTRO SEMICLÁSICO USANDO EL PROPAGADOR DE HERMAN –KLUK

John Jairo Zuluaga Quintero¹
 Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A.1226
 Medellín, Colombia.

RESUMEN

Se presentan resultados sobre el espectro semiclásico para potenciales del oscilador armónico tridimensional y oscilador cuártico bidimensional, obtenidos con el uso de propagador temporal semiclásico de Herman-Kluk. Los niveles de energía se obtienen de la densidad de estados. Los resultados para el oscilador cuártico se comparan con los obtenidos por Müller y Heiss .

INTRODUCCIÓN

El conocimiento del espectro de varios sistemas físicos, da una idea importante para el entendimiento de su dinámica. Una manera de obtener el espectro de un sistema hamiltoniano es obtener una señal temporal, generada por un sistema dinámico, usando métodos semiclásicos. La propagación semiclásica en el tiempo se ha estudiado en sistemas tipo oscilador armónico perturbado [1, 2] y sistemas Coulombianos [3]. Aquí se utiliza la aproximación gaussiana “frozen” que fué derivada por Herman y Kluk [4] y que consiste en la propagación de un paquete de onda mediante la suma de las contribuciones de muchas gaussianas que viajan a lo largo de trayectorias clásicas sin cambiar su forma (“frozen”). Este método se diferencia del propuesto por Huber y Heller [2] en que el paquete de onda inicial se expande en términos de un conjunto completo de gaussianas de ancho arbitrario, seleccionadas usando un procedimiento de Montecarlo y no en un número pequeño de gaussianas localizadas estratégicamente. El hecho de poder obtener una función aproximada para cada instante de tiempo permite encontrar una señal temporal y a partir de ésta calcular el espectro semiclásico.

EL PROPAGADOR DE HERMAN-KLUK

La aproximación semiclásica para el propagador cuántico se obtiene introduciendo los estados coherentes y resolviendo algunas integrales por el método de la fase estacionaria [5]. Esto da como resultado el propagador de Herman-Kluk, el cual se define como una integral sobre el espacio de fases:

$$K^{sc}(r, r', t) = (2\pi)^{-f} \int dp \int dq C(p_t, q_t) e^{iS(p_t, q_t)} \times G_\alpha(r, q_t, p_t) G_\alpha^*(r', q, p), \quad (1)$$

donde f es el número de grados de libertad del sistema, (q, p) son las condiciones iniciales y (q_t, p_t) son las condiciones finales en un tiempo t para una trayectoria clásica que se propaga

¹ e-mail: jzulu@fisica.udea.edu.co

usando el hamiltoniano clásico, $S(q_t, p_t)$ es la acción clásica a lo largo de la trayectoria, la función G_α es un paquete de onda Gaussiano de ancho $\frac{1}{\alpha}$ definido como:

$$G_\alpha(r, q_t, p_t) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{f}{4}} e^{(-\alpha(r-q)^2 + ip(r-q))}, \quad (2)$$

y el prefactor $C(p_t, q_t)$ se define en términos de la matriz de estabilidad como:

$$C(p_t, q_t) = \left| \frac{1}{2} \left(M_{qq} + M_{pp} - 2i\alpha M_{qp} - \frac{1}{2i\alpha} M_{pq} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

Para encontrar la función de onda en un tiempo t se toma como estado inicial un paquete gaussiano similar a la ecuación (2), la cual se propaga usando K^{sc} . El propagador de Herman-Kluk también permite determinar los niveles de energía mediante el cálculo de la densidad de estados, lo que es posible si se usa la siguiente identidad:

$$\int dr K^{sc}(r, r, t) = \sum_j e^{-iE_j t} \quad (4)$$

Que permite expresar la densidad de estados [6]:

$$\rho(E) = \sum_j \delta(E - E_j) \quad (5)$$

En la forma

$$\rho(E) = \text{Re} \frac{1}{\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T dt e^{iEt} \int dr K^{sc}(r, r, t) \quad (6)$$

Donde la transformada de Fourier se ha restringido a un tiempo finito T , ya que, a pesar de que las trayectorias clásicas que contribuyen significativamente para la convergencia de la función temporal ocurren en tiempos largos, la presencia de trayectorias caóticas influyen en los cálculos numéricos.

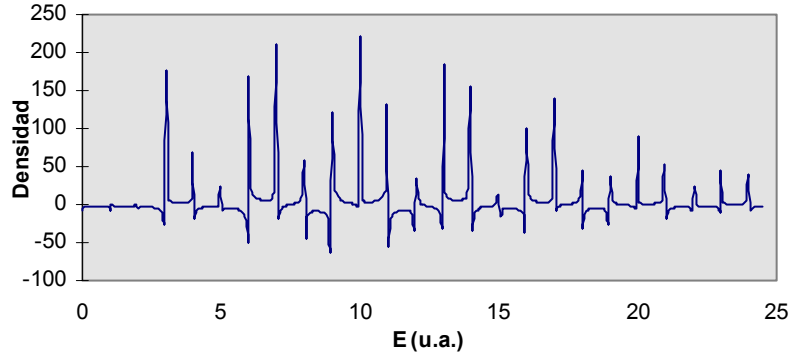


Figura 1: Densidad de estados para el oscilador armónico tridimensional

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La densidad de estados para el oscilador armónico tridimensional, con frecuencias $\omega_x = 3$, $\omega_y = 2$ y $\omega_z = 1$, se muestra en la figura 1. En ella se puede ver que la posición de los picos (positivos) da los valores de energía, los cuales coinciden con los valores cuánticos. También se calculó la densidad de estados para el oscilador cuártico.

El hamiltoniano se eligió de la siguiente manera ($m = 1, \hbar = 1$)

$$H = \frac{1}{2}(P_1^2 + P_2^2 + \beta q_1^2 q_2^2) + 1.2q_1^4 + \frac{1}{1.2}q_2^4 \quad (7)$$

Donde β es un real. Cuando $\beta = 0$, el problema es integrable y su solución se da en términos de integrales elípticas, para otros valores se pueden presentar un comportamiento caótico. En la tabla 1 se comparan los resultados obtenidos, a partir de los valores de la densidad de estados (PG), para diferentes valores de β con los resultados cuánticos (CM) y los resultados de la cuantización EBK (MH), obtenidos por Müller y Heiss [7].

Los resultados para la densidad presenta algunos estados espurios que son producto de la resolución que se obtiene al usar la transformada de Fourier para sacar la información de una señal temporal finita, esto se puede mejorar usando otros métodos para extraer la información de la señal. Los resultados para ambos sistemas son aceptables si se tiene en cuenta que el cálculo se ha realizado para tiempos relativamente cortos.

Tabla 1: valores de la energía para el oscilador cuántico

$\beta=-1$	$\beta=0$	$\beta=1$	$\beta=2$
CM MH PG	CM MH PG	CM MH PG	CM MH PG
1.31 1.00 1.13	1.38 1.10 1.19	1.42 1.15 1.32	1.42 1.20 1.38
2.83 2.70 2.89	2.96 2.80 2.89	3.08 2.95 3.08	3.17 3.05 3.14
3.10 2.90 3.07	3.17 3.05 3.15	3.29 3.15 3.28	3.38 3.30 3.33
4.54 4.45 4.40	4.79 4.70 4.84	5.04 5.00 5.09	5.25 5.20 4.83
4.96 4.80 4.78	5.13 5.00 5.10	5.29 5.20 5.28	5.38 5.30 5.43
5.50 5.30 5.65	5.63 5.50 5.59	5.75 5.70 5.78	5.92 5.80 5.90
6.58 6.60 6.53	6.96 6.90 7.04	7.33 7.20 7.23	7.63 7.60 7.54
6.83 6.85 6.91	7.25 7.20 7.35	7.58 7.50 7.54	7.79 7.90 7.79
7.46 7.25 7.48	7.67 7.50 7.67	7.83 7.70 7.85	8.08 7.92 8.04
8.25 8.10 8.42	8.42 8.30 8.48	8.63 8.50 8.67	8.75 8.70 8.86

Como una técnica para la cuantización semiclásica, el método presente se aplica sin necesidad de modificar el sistema, no demanda una investigación preliminar de la dinámica, no requiere códigos, ni enumeración, ni identificación o estudio de trayectorias especiales, mientras que los métodos de órbitas periódicas y el de la cuantización sobre toros, si lo requieren. Esto hace que el método se pueda aplicar a cualquier sistema simplemente especificando el hamiltoniano del mismo. Sin embargo existen otros tratamientos para determinar los niveles de energía que tienen una convergencia mayor, que se basan sobre la dinámica de la función Zeta, y que permite determinar muchos valores de energía sin extrañar autovalores o predecir estados espurios, como si ocurre con la técnica descrita.

El autor agradece al doctor Nenad Simonovic por su propuesta y ayuda sobre el método de propagación, al doctor Jorge Mahecha G. por su colaboración y a la Universidad de Antioquia por su aporte financiero.

REFERENCIAS

- [1] K.G. Kay., J. Chem. Phys. **101**, 2250 (1994).
- [2] D. Huber y E. J. Heller, J. Chem. Phys. **89**, 4752 (1988).
J. Chem. Phys. **87**, 5302 (1987)
- [3] G. van de Sand y J. M. Rost, Phys. Rev. Lett **262**, R1723 (1999)
- [4] M.F. Herman y E. Kluk, Chem. Phys. **91**, 27 (1984)
- [5] M. Tabor, *Chaos and Integrability in nonlinear Dynamics*.
John Wiley and Sons (1989)
- [6] Martin C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*.
Springer –Verlag, 1990
- [7] M. Müller y W. D. Heiss, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 93 (2000)