Revisão de Mecânica Clássica: Leis de Newton

1) Dinâmica de uma partícula pontual

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = m\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}$$

Se o problema é um sistema de n partículas, vale

$$\mathbf{F}_i = m\frac{d^2\mathbf{x}_i}{dt^2}, \quad i = 1, \ldots n$$

Se todas as forças puderem ser derivadas de um potencial, a equação fica

$$m\frac{d^2\mathbf{x}_i}{dt^2} = -\nabla_i V,$$

onde

$$V = \sum_i^n V_i(\mathbf{x}_i) + \sum_{i<j} V_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \equiv V(\mathbf{x}_i)$$

Em coordenadas cartesianas, o movimento do sistema é descrito por $3n$ equações diferenciais

$$i = 1, 2 \ldots n \begin{cases} m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \\ m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial y_i} \\ m_i \frac{d^2 z_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial z_i} \end{cases}$$

Instituto de Física Gleb Wataghin
MAPLima
UNICAMP

Revisão de Mecânica Clássica: A Lagrangeana

2) Monta-se uma Lagrangeana. Como? De forma que ela produza as equações de Newton corretas:

$$L = L(q_i, \dot{q}_i, t) \longrightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}} \Rightarrow \quad \text{Equações de Lagrange.}$$

Se o problema é um sistema de uma partícula (vale para n partículas também), sob ação de uma força derivada de uma energia potencial $V(\mathbf{x}_i)$, a forma da Langrangeana é:

$$L = T - V = \sum_i^n \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}_i^2 - V(\mathbf{x}_i)$$

Esta Lagrangeana gera as equações de Lagrange

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial x_i} \rightarrow m\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{dV(x_i)}{dx_i},$$

equivalentes às (como esperado) equações de Newton do sistema.

Momento conjugado da coordenada generalizada

3) Define-se o momento conjugado da coordenada generalizada q_i por

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i},$$

onde p_i e q_i são variáveis dinâmicas fundamentais (coordenadas canônicas).

Para o caso do slide anterior, o momento canônico é dado por: $p_i = m\dot{x}_i$.

As coordenadas canônicas viram operadores na Mecânica Quântica.

Nem sempre $L = T - V$

Se o problema é de uma partícula que está sob a ação de uma força de Lorentz

$$\mathbf{F} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t)],$$

a Lagrangeana que fornece a equação de Newton para esta força é

$$L(\mathbf{r},\dot{\mathbf{r}},t) = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 + q\dot{\mathbf{r}}.\mathbf{A}(\mathbf{r},t) - qU(\mathbf{r},t),$$

onde $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ é um potencial vetor $\longrightarrow \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r},t)$

e $U(\mathbf{r},t)$ é um potencial escalar $\longrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\nabla U - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$.

Ambos $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ e $U(\mathbf{r},t)$ podendo depender explicitamente de t.

Para esta Lagrangeana, encontramos o momento canônico $\boxed{\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r},t).}$

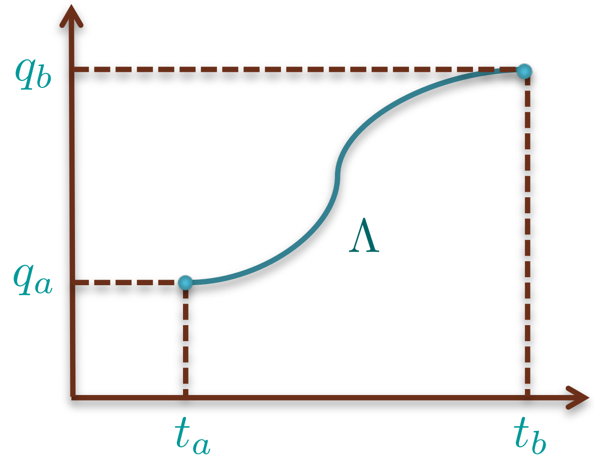
Princípio de Mínima Ação

4) O princípio de mínima ação pode ser escrito como:

> *"De todos os caminhos (Λ) possíveis no espaço-tempo conectando (q_a, t_a) com (q_b, t_b), o caminho que realmente é seguido, é aquele para o qual a ação é mínima".*

A ação é definida por:

$$S_\Lambda = \int_{t_a}^{t_b} dt\, \underbrace{L(q_\Lambda(t), \dot{q}_\Lambda(t); t)}_{\text{Lagrangeana}},$$



onde, o integrando depende apenas de t. Para escrever a ação, é preciso conhecer a dependência temporal de $q_\Lambda(t)$ e $\dot{q}_\Lambda(t)$ e colocá-los na expressão da Lagrangeana. O par $q_\Lambda(t)$ e $\dot{q}_\Lambda(t)$ define uma trajetória Λ da partícula. Em outras palavras, se escolhermos Λ' infinitesimalmente próxima de Λ, a trajetória correta, a variação $\delta S_\lambda = S_{\Lambda'} - S_\Lambda$ é nula, em primeira ordem.

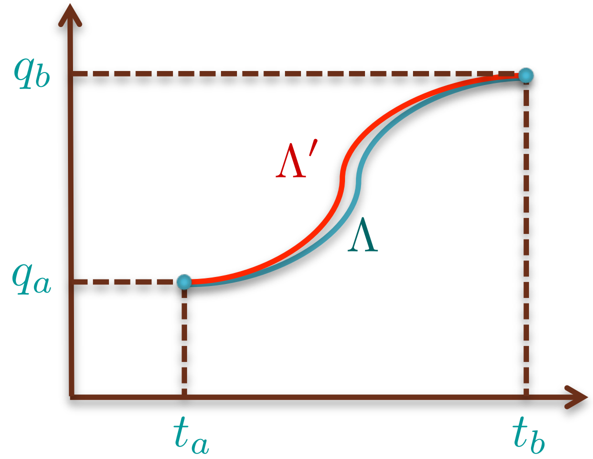
As equações de Lagrange nascem do Princípio de Mínima Ação

Vamos ver como as equações de Lagrange podem ser deduzidas do princípio de mínima ação. Suponha Λ' um caminho infinitesimalmente diferente de Λ. Para construir Λ' é preciso manter fixos os pontos $q_a(t_a)$ e $q_b(t_b)$.

$q'(t) = q(t) + \delta q(t) \rightarrow$ mas, com $\delta q(t_a) = \delta q(t_b) = 0$

Com isso $\dfrac{dq'(t)}{dt} = \dfrac{dq(t)}{dt} + \dfrac{d\delta q(t)}{dt}$ ou

$$\dot{q}'(t) = \dot{q}(t) + \frac{d\delta q(t)}{dt} \rightarrow \delta\dot{q} = \frac{d\delta q(t)}{dt}$$



A variação da ação com a mudança de Λ para Λ' pode ser calculada, pois:

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt\delta L = \int_{t_a}^{t_b} dt[\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q}] = \int_{t_a}^{t_b} dt[\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}\delta q] =$$

$$= \int_{t_a}^{t_b} dt[\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q) - (\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}})\delta q] = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\Big|_{t_a}^{t_b} + \int_{t_a}^{t_b} dt\delta q[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}})]$$

$= 0$ para qualquer variação arbitrária de δq. Só se $\boxed{\dfrac{\partial L}{\partial q} - \dfrac{d}{dt}(\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}}) = 0}$ que é a equação de Lagrange. Fiz para q, mas poderia ter feito para q_i.

A Hamiltoniana

5) Define-se a Hamiltoniana: $\boxed{H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L.}$ Em seguida, reescreve-se a Hamiltoniana em função das coordenadas canônicas, isto é: $H = H(q_i, p_i; t)$.

Na Mecânica Quântica, a Hamiltoniana, escrita desta forma, em função das coordenadas canônicas, define o operador de evolução temporal. Exemplos:

a) Se $L = T - V = \sum_i \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}_i^2 - V(\mathbf{x}_i)$

$$\text{temos} \begin{cases} \mathbf{p}_i = m\dot{\mathbf{x}}_i \\ H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i{}^2}{2m} + V(\mathbf{x}_i) \end{cases}$$

b) Se $L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + q\dot{\mathbf{r}}.\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - qU(\mathbf{r}, t)$

$$\text{temos} \begin{cases} \mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + qU(\mathbf{r}, t) \end{cases}$$

Equações de Hamilton-Jacobi

6) Novas equações, equivalentes às de Lagrange, e conhecidas por equações de Hamilton-Jacobi são definidas, a partir da Hamiltoniana.

$$\boxed{\textit{Mesmo problema, novas equações: } \begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \end{cases}}$$

Para demonstrar a equivalência, construa e compare os diferenciais de H, pela sua definição $H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$ e pela exigência de $H = H(q_i, p_i, t)$.

$$\text{Assim, temos: } \begin{cases} dH = \sum_i dp_i \dot{q}_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - dL \rightarrow \text{da definição acima} \\ \\ dH = \sum_i dp_i \frac{\partial H}{\partial p_i} + \sum_i dq_i \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial t} \rightarrow \text{de } H = H(q_i, p_i; t) \end{cases}$$

Equações de Hamilton-Jacobi

Assim, $dH = \sum_i dp_i \dot{q}_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - dL =$

$$= \sum_i dp_i \dot{q}_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - [\sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t}] =$$

$$= \sum_i dp_i \dot{q}_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - [\sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t}] =$$

$$= \sum_i dp_i \dot{q}_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} \text{ que por comparação com}$$

$$= \sum_i dp_i \frac{\partial H}{\partial p_i} + \sum_i dq_i \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial t}$$

fornece as equações
$$\begin{cases} 1) \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} \\ 2) \boxed{\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i} \quad \text{(primeira equação)} \\ 3) \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \end{cases}$$

Das equações de Lagrange, da definição de $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$, e equação 1, temos

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \rightarrow \boxed{\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}} \quad \text{(segunda equação).}$$

Transformações canônicas e Princípio de Mínima Ação

7) Pergunta importante: esta é a única maneira de gerar H? existem formas equivalentes? Existe um K que permita outras coordenadas canônicas e que também descreva o problema corretamente? Ou seja, uma transformação de $H(q_i, p_i, t)$ em $K(Q_i, P_i, t)$,

onde $\begin{cases} Q_i = Q_i(q_i, p_i, t) \\ P_i = P_i(q_i, p_i, t) \end{cases}$ e tal que, sabendo que

para H, temos: $\begin{cases} H = H(q_i, p_i, t) \\ \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases}$ para K, teremos: $\begin{cases} K = K(Q_i, P_i, t) \\ \frac{\partial K}{\partial P_i} = \dot{Q}_i \\ \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \end{cases}$

Note que K teria o mesmo papel que H para as novas coordenadas. (E na Mecânica Quântica seria o operador de evolução temporal associado às novas coordenadas canônicas). Para garantir que as equações de K, continuem equivalentes às equações de Newton, é preciso fazer valer o princípio de mínima ação.

Transformações canônicas e Princípio de Mínima Ação

$$\delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \delta L = 0 \longrightarrow \begin{cases} \delta \int_{t_a}^{t_b} dt[p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t)] = 0 \\ \\ \delta \int_{t_a}^{t_b} dt[P_i \dot{Q}_i - K(Q_i, P_i, t)] = 0 \end{cases}$$

Para garantir que valha para ambas, basta fazer os integrandos iguais a menos de uma função, que quando integrada, se anule nos extremos. Para expressar isso, escrevemos:

$p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t) = P_i \dot{Q}_i - K(Q_i, P_i, t) + \dfrac{d}{dt} F(q_i, P_i, t)$ com $\delta F(q_i, P, t_a) = \delta F(q_i, P, t_b) = 0$. Se respeitadas estas condições, teremos H e K para mesmo problema. Observe arbitrariedade de escolha da F. Suponha agora um *caso especial*, definindo $F = F_2(q_i, P_i, t) - P_i Q_i$ onde $\dfrac{dF}{dt} = \dfrac{dF_2}{dt} - P_i \dot{Q}_i - Q_i \dot{P}_i$. Isto gera:

$$p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t) = -K(Q_i, P_i, t) + \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \dot{P}_i + \frac{\partial F_2}{\partial t} - Q_i \dot{P}_i$$

Tal relação é satisfeita, se $K(Q_i, P_i, t) = H(q_i, p_i, t) + \dfrac{\partial F_2}{\partial t}$

e se os coeficientes de $\dot{q}$ e $\dot{P}$ são nulos $\begin{cases} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \end{cases}$

Transformação canônica especial

Considere uma transformação $q = q(Q, P, t)$ e $p = p(Q, P, t)$, tal que Q e P não dependem do tempo e valem q e p no instante t_0. Achando isso, o problema estará resolvido, pois teremos $q = q(q_0, p_0, t)$ e $p(q_0, p_0, t)$. Se P e Q não mudam no tempo,

$$\text{então} \begin{cases} \frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \\ \text{e} \\ \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0. \end{cases} \qquad K \text{ é constante, não depende de } Q_i \text{ e } P_i.$$

Podemos escolher $K = 0$ e obtemos de $K(Q_i, P_i, t) = H(q_i, p_i, t) + \dfrac{\partial F_2}{\partial t}$ a expressão $H(q_i, p_i, t) + \dfrac{\partial F_2}{\partial t} = 0$ e reconhecemos $F_2 \rightarrow$ função principal de Hamilton (chamamos de S, a fase de nossa função de onda $\times\, \hbar$).

Note que da condição do coeficiente de $\dot{q}$ ser nulo (slide anterior), temos $p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i}$ (conforme já vimos neste curso, como $\mathbf{p} = \nabla S$).

Para $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \rightarrow \dfrac{(\nabla F_2)^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + \dfrac{\partial F_2}{\partial t} = 0$ conforme vimos.

Propagadores e Integrais de Caminho de Feynman

Definindo o propagador pela evolução temporal na linguagem da mecânica ondulatória:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\big(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\big)|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\big)$$

na representação das coordenadas, temos

$$\langle \mathbf{x}''|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\big)$$

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}'', t) = \sum_{a'} u_{a'}(\mathbf{x}'')C_{a'}(t_0) \exp\big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\big) \text{ com } u_{a'}(\mathbf{x}'') = \langle \mathbf{x}''|a'\rangle$$

$$\text{e } C_{a'} = \langle a'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' \langle a'|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' u^*_{a'}(\mathbf{x}')\psi_\alpha(\mathbf{x}', t_0)$$

devolvendo para a equação de ψ, temos:

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}'', t) = \sum_{a'} \int d^3x' \langle \mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle \exp\big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\big)\psi_\alpha(\mathbf{x}', t_0)$$

Define-se, assim, o propagador por:

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle \exp\big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\big) \text{ para } t > t_0$$

independente de $\psi_\alpha(\mathbf{x}', t_0)$ mas, dependente de H(via $E_{a'}$, e $u_{a'}(\mathbf{x}'')$)

Propagadores e Integrais de Caminho de Feynman

Note que o futuro da função de onda é completamente conhecido se conhecermos,

$$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=\sum_{a'}\langle\mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle\exp\Big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\Big),\ \text{pois}$$

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}'',t)=\int d^3x' K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)\psi_\alpha(\mathbf{x}',t_0)$$

Neste sentido, a mecânica ondulatória de Schrödinger é determinista. O único problema é que quando uma medida é feita, a função de onda muda abruptamente (incontrolavelmente) para uma das autofunções da observável de medida. Duas propriedades interessantes de $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$:

1) $\lim_{t\to t_0} K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=\sum_{a'}\langle\mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle=\langle\mathbf{x}''|\mathbf{x}'\rangle=\delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')$

2) $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=\sum_{a'}\langle\mathbf{x}''|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle\exp\Big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\Big)=$

$$=\langle\mathbf{x}''|\sum_{a'}\exp\Big(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\Big)|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle=\sum_{a'}\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|a'\rangle\langle a'|\mathbf{x}'\rangle=$$

$$=\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle\longrightarrow\ \text{futuro de um estado que estava em } \mathbf{x}' \text{ em } t_0.$$

Note que $\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|a'\rangle$, satisfaz a equação de Schrödinger nas coordenadas $\mathbf{x}''$ e t. A soma em a', faz de K uma combinação de soluções. Ou seja:

K é uma solução da equação de Schrödinger em $\mathbf{x}''$ e t.

Propagadores e Integrais de Caminho de Feynman

Note que podemos olhar para a expressão,

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}'',t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)\psi_\alpha(\mathbf{x}',t_0) = \int d^3x' \langle \mathbf{x}''|U(t,t_0)\underbrace{|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|}_{\text{várias contribuições para diferentes } \mathbf{x}'}\alpha,t_0\rangle$$

como olhamos para:

$\phi(\mathbf{x}) = \int d^3x' \dfrac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$. Primeiro encontramos a contribuição de um ponto de carga, $\dfrac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$, depois integramos, multiplicando pela distribuição de cargas $\rho(\mathbf{x}')$. A amplitude $\langle\mathbf{x}'|\alpha,t_0\rangle$ faz o papel do $\rho(\mathbf{x}')$.

Podemos escrever $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)\begin{cases}\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle & \text{para } t \geq t_0\\ 0 & \text{para } t < t_0\end{cases}$

ou de forma compacta $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \eta(t-t_0)\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle$

onde $\begin{cases}\eta(t-t_0) = 1 \rightarrow t-t_0 \geq 0\\ \eta(t-t_0) = 0 \rightarrow t-t_0 < 0\end{cases}$

Propagadores

Inserindo a expressão:

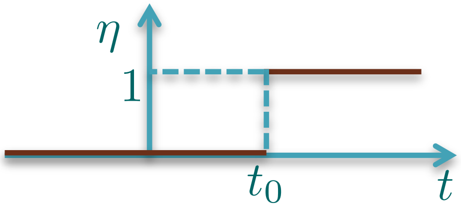
$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=\eta(t-t_0)\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle$ na equação de Schrödinger, temos:

$$\Big(H(x'',\frac{\hbar}{i}\nabla'')-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big)K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=\eta(t-t_0)H(x'',\frac{\hbar}{i}\nabla'')\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle+$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\eta(t-t_0)\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle-i\hbar\eta(t-t_0)\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle.$$

Como, $H(x'',\frac{\hbar}{i}\nabla'')\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle$, temos

$$\Big(H(x'',\frac{\hbar}{i}\nabla'')-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big)K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=-i\hbar\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle\frac{\partial}{\partial t}\eta(t-t_0)$$



Mas, $\frac{\partial}{\partial t}\eta(t-t_0)=\delta(t-t_0)$, e isso torna o produto

$$\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle\delta(t-t_0)=\langle\mathbf{x}''|U(t_0,t_0)|\mathbf{x}'\rangle\delta(t-t_0)=\delta^3(\mathbf{x}''-\mathbf{x}')\delta(t-t_0)$$

Assim, a equação para K para $t>t_0$ fica:

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla''^2+V(\mathbf{x}'')-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big)K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)=-i\hbar\delta^3(\mathbf{x}''-\mathbf{x}')\delta(t-t_0)$$

Ou seja, $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$ é uma função de Green da equação de Schrödinger dependente do tempo. Para $t<t_0$, $K=0$.

Propagador: partícula livre em uma dimensão

A forma particular de K depende do potencial V, sob o qual a partícula está submetida. Exemplo: $V = 0$ para partícula livre em uma dimensão.

Sabendo que $\begin{cases} p|p'\rangle = p'|p'\rangle, \\ H|p'\rangle = \frac{p'^2}{2m}|p'\rangle, \text{ e} \\ U(t,t_0) = \int dp'|p'\rangle\langle p'| \exp\big(-\frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\big) \end{cases}$

construimos $K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \eta(t-t_0)\langle\mathbf{x}''|U(t,t_0)|\mathbf{x}'\rangle =$

$$= \eta(t-t_0)\int dp'\langle\mathbf{x}''|p'\rangle\langle p'|\mathbf{x}'\rangle \exp\big(-\frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\big) =$$

$$= \eta(t-t_0)\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp' \exp\big[\frac{ip'}{\hbar}(x''-x') - \frac{ip'^2}{2m\hbar}(t-t_0)\big] = \eta(t-t_0)\times$$

$$\times\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp' \exp\left[-i\big[p'\sqrt{\frac{t-t_0}{2m\hbar}} - \sqrt{\frac{2m\hbar}{t-t_0}}.\frac{1}{2}.\frac{x''-x'}{\hbar}\big]^2 + i\frac{2m\hbar}{t-t_0}.\frac{1}{4}.\frac{(x''-x')^2}{\hbar^2}\right]$$

Assim, temos o propagador da partícula livre:

$$\boxed{K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0) = \eta(t-t_0)\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]}$$

Propagador: Oscilador Harmônico Simples

Use $u_n(x).\exp\big(-\frac{iE_nt}{\hbar}\big) = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\big)^{\frac{1}{4}}\exp\big(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\big).H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)\times$

$\times\exp\big(-i\omega(n+\frac{1}{2})t\big)$ para obter:

$$K(x'',t,x',t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\big(\omega(t-t_0)\big)}}\times$$

$$\times\exp\Big\{\big[\frac{im\omega}{2\hbar\sin\big(\omega(t-t_0)\big)}\big]\big[(x''^2+x'^2)\cos\big(\omega(t-t_0)\big)-2x''x'\big]\Big\}$$

Para obter essa expressão, veja Cap. 15 do Merzbacher.

Note que a dependência temporal é periódica, repetindo-se a situação a cada $\frac{2\pi}{\omega}$ segundos. Assim, um oscilador preparado em $\delta(x-x_0)$ voltará em x_0 após $\frac{2\pi}{\omega}$ segundos.