

Algumas Propriedades dos Propagadores

Existem propriedades interessantes dos propagadores para $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}'$

$$G(t) = \int d^3 x' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', t_0) = \int d^3 x' \sum_{a'} \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}\right) =$$

$t_0=0$ para facilitar

$$= \sum_{a'} \left\{ \int d^3 x' |\langle \mathbf{x}' | a' \rangle|^2 \right\} \exp\left(-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}\right) = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}\right)$$

Será que este resultado poderia ter sido antecipado? [lousa](#)

$G(t) = \int d^3 x' \langle x' | U(t, 0) | x' \rangle$ traço da matriz $U(t, 0)$ na representação das coordenadas. O traço não depende da representação, assim:

$$G(t) = \sum_{a'} \langle a' | U(t, 0) | a' \rangle = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}\right)$$

Existe uma certa similaridade com a função de partição da mecânica estatística se tomarmos $\beta = \frac{it}{\hbar}$ e realizarmos uma continuação analítica para t puramente imaginário, $Z = \sum_{a'} \exp(-\beta E_{a'})$. Assim algumas técnicas desenvolvidas para propagadores em Mecânica Quântica são úteis também em Mecânica Estatística.

Algumas Propriedades dos Propagadores

Outra integral interessante (transformada de Laplace-Fourier de $G(t)$)

$$\begin{aligned}\tilde{G}(E) &= -i \int_0^{\infty} dt G(t) \exp(iEt) = -i \int_0^{\infty} dt \sum_{a'} \exp(-iE_{a'}t) \exp(iEt) = \\ &= -i \sum_{a'} \int_0^{\infty} dt \exp[i(E - E_{a'})t].\end{aligned}$$

Esta integral oscila no infinito a menos que tomemos $E \rightarrow E + i\epsilon$.

Com isso, a integral fica:

$$\tilde{G}(E) = -i \sum_{a'} \frac{1}{i(E - E_{a'})} \exp[i(E - E_{a'})t - \epsilon t] \Big|_0^{\infty} = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}}$$

Note que o espectro do problema aparece como polos de $\tilde{G}(E)$. Estudar as propriedades analíticas de $\tilde{G}(E)$ pode ser interessante.

Antes de prosseguir, veja aula 8, slide 16.

Propagador como uma amplitude de transição

Considere $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | U(t, t_0) | \mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{x}', t \rangle$, onde podemos ler: após a evolução do ket $|\mathbf{x}', t_0\rangle$ para $|\mathbf{x}', t\rangle$ tomamos a projeção sobre $\langle \mathbf{x}'' |$.

Outra leitura: o estado $|\mathbf{x}', t_0\rangle$ não muda com o tempo (enfoque de Heisenberg) e a base dos autokets de $\mathbf{x}_H(t)$, $|\mathbf{x}'', t\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\mathbf{x}'', t_0\rangle$, evolui ao contrário no tempo. Assim, $U^\dagger(t, t_0)|\mathbf{x}'', t_0\rangle \rightarrow \langle \mathbf{x}'', t_0 | U(t, t_0) = \langle \mathbf{x}'', t |$, e o propagador seria escrito como: $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$

Poderíamos, ainda, ver isso da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp \left[- \frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] = \\
 &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | \exp \left[- \frac{iE_{a'}t}{\hbar} \right] | a' \rangle \langle a' | \exp \left[+ \frac{iE_{a'}t_0}{\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle = \\
 &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | \exp \left[- \frac{iHt}{\hbar} \right] | a' \rangle \langle a' | \exp \left[+ \frac{iHt_0}{\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle = \\
 &= \underbrace{\left\{ \langle \mathbf{x}'' | \exp \left[- \frac{iHt}{\hbar} \right] | \right\}}_{\text{bra e}} \underbrace{\left\{ | \exp \left[+ \frac{iHt_0}{\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle \right\}}_{\text{ket de Heisenberg}} = {}^{(H)} \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle {}^{(H)}
 \end{aligned}$$

Propagador como uma amplitude de transição

Lembra o que significava a amplitude $\langle b', t' | a' \rangle$ no enfoque de Heisenberg?

Em t_0 , mede-se A , obtemos a' e o sistema fica no estado $|a'\rangle^{(S)} = |a', t_0\rangle^{(H)}$.

Quando medimos B , no futuro, a probabilidade de encontrarmos b' , é (no enfoque de Heisenberg) o módulo quadrado da amplitude de transição $\langle b', t | a' \rangle$, onde $|b', t\rangle$ é um autoket de $B^{(H)}(t)$.

Assim $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ é a amplitude de transição para uma partícula estando em \mathbf{x}' no instante t_0 , ser encontrada em \mathbf{x}'' no instante t .

Podemos, ainda, interpretar $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ como sendo a matriz de transformação entre duas bases. Ou seja, uma

matriz de transformação $\left\{ \begin{array}{l} \text{da base (1), } \{|\mathbf{x}', t_0\rangle\}, \text{ de autokets de } \mathbf{x}^{(H)}(t_0) \\ \text{para a base (2), } \{|\mathbf{x}'', t\rangle\}, \text{ de autokets de } \mathbf{x}^{(H)}(t). \end{array} \right.$

É interessante mudar um pouco a notação, e tratar espaço e tempo de forma mais simétrica. Usaremos: $\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$ no lugar de $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$.

Propagador como uma amplitude de transição

Quanto vale $\langle \mathbf{x}^b, t^b | \mathbf{x}^a, t^a \rangle$?

Suponha $t^a < t' < t^b$, e use que $\int d^3x' |\mathbf{x}', t'\rangle \langle \mathbf{x}', t'| = \mathbb{1}$ para escrever

$$\langle \mathbf{x}^b, t^b | \mathbf{x}^a, t^a \rangle = \int d^3x' \langle \mathbf{x}^b, t^b | \mathbf{x}', t' \rangle \langle \mathbf{x}', t' | \mathbf{x}^a, t^a \rangle.$$

Poderíamos ter dividido o intervalo de tempo em mais pedaços:

$t^a < t' < t'' < t^b$, de forma que

$$\langle \mathbf{x}^b, t^b | \mathbf{x}^a, t^a \rangle = \int d^3x'' \int d^3x' \langle \mathbf{x}^b, t^b | \mathbf{x}'', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle \langle \mathbf{x}', t' | \mathbf{x}^a, t^a \rangle$$

Se de alguma maneira conseguirmos chutar a forma infinitesimal da amplitude $\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$ poderíamos compô-las para obter a amplitude de transição finita (intervalo de tempo finito).

Esta propriedade de composição dá início:
as *Integrais de Caminho de Feynman*.

Integrais de Caminho

(R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367(1948))

Integrais de caminho como soma de caminhos.

Nova notação $x \overbrace{\dots}^N \equiv x_N$

Considere a amplitude de transição de (x_1, t_1) para (x_N, t_N) . O intervalo entre t_1 e t_N é dividido em $N - 1$ partes iguais $t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{t_N - t_1}{N - 1}$.

Assim, temos:

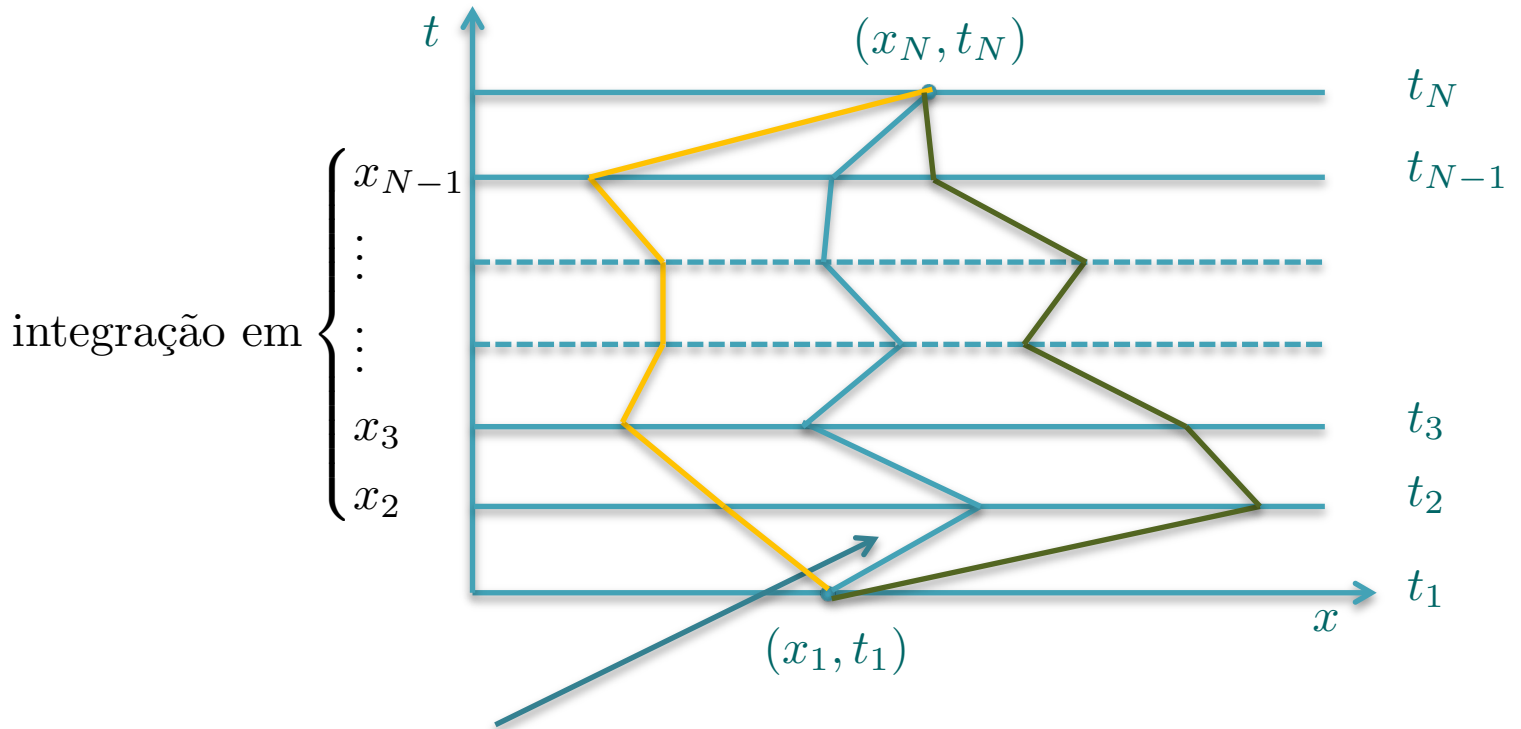
$\left\{ \begin{array}{l} N = 3 \\ N = 4 \\ \vdots \end{array} \right.$	$\frac{t_3 - t_1}{2} \rightarrow$	
	$\frac{t_4 - t_1}{3} \rightarrow$	
	\vdots	\vdots

Usando a propriedade de composição, temos:

$$\langle \mathbf{x}_N, t_N | \mathbf{x}_1, t_1 \rangle = \int d^3 x_{N-1} \int d^3 x_{N-2} \dots \int d^3 x_2 \langle \mathbf{x}_N, t_N | \mathbf{x}_{N-1}, t_{N-1} \rangle \times \langle \mathbf{x}_{N-1}, t_{N-1} | \mathbf{x}_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1 \rangle$$

Integrais de Caminho

Representação Gráfica



Um caminho. Some sobre todos, mesmo os mais esquisitos.

Como é que os “caminhos” aparecem na mecânica clássica? Princípio de mínima ação. A Lagrangeana L , define a ação, S , e vimos que o caminho real é aquele que satisfaz a condição $\delta S = 0$, e que nestas condições as equações de Lagrange (equivalentes às equações de Newton) estarão satisfeitas.

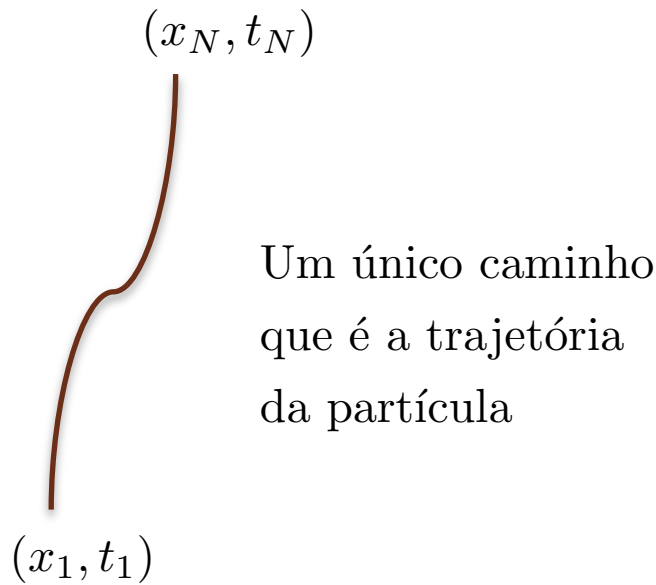
De forma geral, o caminho clássico (único) é aquele que minimiza a ação:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L_{\text{clássico}}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = 0$$

Formulação de Feynman:

A diferença básica entre mecânica clássica e quântica deve ficar clara agora.

Clássica



Quântica



Todos os caminhos possíveis. Mesmo aqueles que são muito diferentes do clássico. No limite $\hbar \rightarrow 0$, a mecânica quântica deveria reproduzir a clássica de maneira suave

Integrais de Caminho

Dirac diz: $\exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{L_{\text{clássica}}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})}{\hbar} \right]$ corresponde à $\langle \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1 \rangle$.

Feynman pergunta: corresponde ou é igual? Veremos que nesta nova formulação da mecânica quântica por integrais de caminho, a ação tem um papel muito especial.

Vamos em frente. Define-se $S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \underbrace{L_{\text{clássica}}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})}$

Para um caminho particular definido a priori, a integração só é possível após definirmos \mathbf{x} e $\dot{\mathbf{x}}$ de t . Ou seja, após definirmos o caminho.

Seguindo a sugestão de Dirac

$$\langle \mathbf{x}_n, t_n | \mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} \rangle \rightarrow \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right]$$

Se caminhar sobre um determinado caminho entre (\mathbf{x}_1, t_1) e (\mathbf{x}_N, t_N) , teremos:

$$\prod_{n=2}^N \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right] = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S(n, n-1) \right] = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(N, 1) \right]$$

Lembre que $\langle \mathbf{x}_N, t_N | \mathbf{x}_1, t_1 \rangle$ carrega uma soma (integral) sobre todos os caminhos existentes.

Integrais de Caminho

$$\text{Assim, } \langle \mathbf{x}_N, t_N | \mathbf{x}_1, t_1 \rangle \approx \underbrace{\sum_{\text{todos os caminhos}}}_{\text{conjunto inumerável e infinito de caminhos}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(N, 1) \right]$$

conjunto inumerável e infinito de caminhos

Antes de apresentar uma formulação mais precisa, tentemos uma conexão

clássica (limite de $\hbar \rightarrow 0$). Quando $\hbar \rightarrow 0$, $\frac{S(N, 1)}{\hbar}$ cresce e os valores de

$\exp \left[i \frac{S(N, 1)}{\hbar} \right]$ correspondendo à $S(N, 1)$'s diferindo só um pouquinho, oscilam muito. Quando somados eles se cancelam. Assim a maioria dos caminhos não contribuem quando \hbar é considerado muito pequeno. Tem uma exceção importante. Se o caminho é tal que $\delta S(N, 1) = 0$, os caminhos vizinhos não diferem dele em primeira ordem e todos contribuem na mesma “direção” quando somados. O caminho tal que $\delta S(N, 1) = 0$, será chamado de S_{\min} .

Quando \hbar vai a zero, a soma sobre todos os caminhos vai se transformando em uma soma ao redor do caminho clássico (princípio da mínima ação). Só eles contribuem por gerarem interferência construtiva.

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

A hipótese de Feynman foi $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right],$

para $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ infinitesimal. A presença de $w(\Delta t)$ é necessária, pois $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ tem unidade de $\frac{1}{\text{comprimento}}$. Nossa hipótese é que w depende só do intervalo de tempo e não depende do potencial V . A dependência em V está exclusivamente em S . Nossa tarefa é calcular

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} S(n, n-1) \text{ e } w(\Delta t)$$

Se Δt for suficientemente pequeno, é justo fazer uma aproximação linear para o caminho que une (x_{n-1}, t_{n-1}) e (x_n, t_n) da seguinte forma:

$$S(n, n-1) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right] = \Delta t \left\{ \frac{m}{2} \underbrace{\left[\frac{(x_n - x_{n-1})}{\Delta t} \right]^2}_{\text{velocidade média}} - V \left(\underbrace{\frac{(x_n + x_{n-1})}{2}}_{\text{ponto médio}} \right) \right\}$$

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Será que funciona? Vamos testar primeiro com a partícula livre, $V = 0$.

$$S(n, n-1) = \Delta t \left\{ \frac{m}{2} \left[\frac{(x_n - x_{n-1})}{\Delta t} \right]^2 \right\} = \frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\Delta t} \text{ e assim}$$

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t} \right].$$

Compare com o propagador da partícula livre que obtivemos na aula passada

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

Como $w(\Delta t)$ não depende de V , comparação direta com o propagador de

partícula livre nos leva à $\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}$. Podemos obter isso,

sem fazer pela comparação, usando a propriedade:

$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \Big|_{t_n=t_{n-1}} = \delta(x_n - x_{n-1})$ e sabendo que uma das definições da função delta é:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp \left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right] = \delta(\xi) \rightarrow \frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}$$

lousa

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Assim, para um potencial arbitrário podemos escrever:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right], \text{ válida para } \lim_{\Delta t \rightarrow 0}$$

Calcule $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ para o oscilador harmônico simples, e compare com seu propagador, dado por:

$$K(x'', t, x', t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega(t-t_0))}} \times \\ \times \exp \left\{ \left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega(t-t_0))} \right] [(x''^2 + x'^2) \cos(\omega(t-t_0)) - 2x''x'] \right\}$$

$$\text{Use que } \begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sin[\omega \Delta t] = \omega \Delta t \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \cos[\omega \Delta t] = 1 - \frac{\omega^2 (\Delta t)^2}{2} \end{cases}$$

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Para uma transição finita entre t_1 e t_N

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \times \\ &\times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \prod_{n=2}^N \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right] \end{aligned}$$

$$\text{mas, } \prod_{n=2}^N \exp \left[i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right] = \exp \left[\sum_{n=2}^N i \frac{S(n, n-1)}{\hbar} \right] = \exp \left[i \frac{S(N, 1)}{\hbar} \right]$$

Assim, temos a integral de caminho de Feynman

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \times \\ &\times \exp \left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{\text{clássico}}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] = \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{\text{clássico}}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] \end{aligned}$$

$$\text{com, } \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{N-1}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2$$

Para entender a integração,
ver figura do slide 7

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

O que acabamos de fazer foi o desenvolvimento de uma nova formulação da Mecânica Quântica baseada em integrais de caminho. Para tanto, utilizamos três idéias da Mecânica Quântica convencional:

- 1) O princípio da superposição (quando somamos as contribuições de vários caminhos alternativos.
- 2) A propriedade de composição da amplitude de transição.
- 3) A correspondência clássica (limite quando $\hbar \rightarrow 0$).

Lembre que obtivemos nesta formulação o mesmo resultado obtido para o propagador na formulação anterior. Elas são equivalentes!

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Para fechar, mostraremos que a $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ obtida satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo para as variáveis x_N e t_N . Comece com

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \text{ e}$$

use $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar \Delta t} - i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right]$ para obter

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{im(x_N - x_{N-1})^2}{2\hbar \Delta t} - i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right] \times \\ \times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle, \text{ onde consideramos } t_N - t_{N-1} \text{ infinitesimal.}$$

$$\text{Tome } \begin{cases} \xi = x_N - x_{N-1} \\ t_N = t + \Delta t \\ x_N = x, \end{cases} \quad \text{obtenha } \begin{cases} t_N = t + \Delta t = t + t_N - t_{N-1} \therefore t_{N-1} = t \\ dx_{N-1} = d(x_N - \xi) = -d\xi \quad (x_N \text{ está fixo}) \\ V = V\left(\frac{x_N + x_{N-1}}{2}\right) = V\left(x - \frac{\xi}{2}\right) \end{cases}$$

e reescreva:

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} - i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right] \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle$$

Agora vamos tomar o limite quando Δt vai a zero .

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Quando Δt fica muito pequeno, o que ocorre na expressão?

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} - i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right] \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle$$

$$\text{no limite } \Delta t \rightarrow 0 \left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \text{ explode} \\ \exp \left[-i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right] \text{ vai a um número} \\ \exp \left[\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} \right] \text{ oscila muito, a menos que } \xi \rightarrow 0 \end{array} \right.$$

Quando oscila, as contribuições se cancelam, a menos que $\xi \rightarrow 0$. Tomemos expansões ao redor de $\xi \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$

$$\text{Assim } \left\{ \begin{array}{l} \langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \\ \exp \left[-i \frac{V \Delta t}{\hbar} \right] = 1 - iV \frac{\Delta t}{\hbar} + \dots \\ \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle = \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \xi \frac{\partial}{\partial x} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \end{array} \right.$$

Integrais de Caminho: Formulação mais Precisa

Considere o integrando que compõe $\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle$

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \underbrace{\exp\left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right]}_{\text{par em } \xi} \left[1 - i\frac{V\Delta t}{\hbar}\right] \times$$

$$\times \left[\underbrace{\langle x, t | x_1, t_1 \rangle}_{\text{ímpar em } \xi} - \xi \frac{\partial}{\partial x} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \underbrace{\frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle}_{\text{par em } \xi} \right]$$

De $\begin{cases} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right] = \delta(\xi) \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \exp\left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right] = \sqrt{2\pi} \left(i\frac{\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} \end{cases}$ podemos escrever

$$\left[1 - i\frac{V\Delta t}{\hbar}\right] \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \sqrt{2\pi} \left(i\frac{\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle =$$

$$\langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \text{ só termos em primeira ordem em } \Delta t.$$

Reorganizando, temos $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$

Slide 1

Quanto vale $G(t) = \int d^3 x' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', t_0)$, sabendo que

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \eta(t - t_0) \langle \mathbf{x}'' | U(t, t_0) | \mathbf{x}' \rangle? \text{ Isto é, } G(t) = \int d^3 x' \langle \mathbf{x}' | U(t, t_0) | \mathbf{x}' \rangle,$$

para $t \geq t_0$ e isso é o traço de U na representação das coordenadas. Lembre que o traço independe da representação. Usando a base $|a'\rangle$ de autokets de H , temos

$$G(t) = \int d^3 x' \langle \mathbf{x}' | \exp \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right] \left(\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \right) | \mathbf{x}' \rangle, \text{ caímos na dedução do slide 1.}$$

Slide 11

Aqui tem uma sutileza. Se diminuirmos infinitamente o intervalo de tempo, não precisa somar sobre todos os caminhos. Todos vão para um só!

Qual é a unidade do ket $|x'\rangle$ ou do bra $\langle x'|$?

Lembre que se $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$, sem unidades, então $\langle \varphi | \left(\int dx' |x'\rangle \langle x'| \right) | \varphi \rangle = 1$

também não tem unidades. Assim se dx' tem unidade comprimento, $|x'\rangle \langle x'|$ tem unidade de inverso de comprimento. Assim, tanto o ket quanto o bra tem unidade de inverso de comprimento^{1/2}.

APPENDIX II

b. FUNCTIONS WHICH APPROACH δ

It can easily be shown that, in addition to $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ defined by (1), the following functions approach $\delta(x)$, that is, satisfy (5), when the parameter ε approaches zero from the positive side:

(i) $\frac{1}{2\varepsilon} e^{-|x|/\varepsilon}$

(ii) $\frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$

(iii) $\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\varepsilon^2}$

(iv) $\frac{1}{\pi} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{x}$

(v) $\frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\varepsilon)}{x^2}$

De $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t} \right]$

tome $x = x_n - x_{n-1}$ e $\frac{im}{2\hbar\Delta t} = -\frac{1}{\xi^2} \Rightarrow \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[\frac{-x^2}{\xi^2} \right]$ e

compare com a definição (iii) de $\delta(x)$ para obter,

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \frac{1}{\xi\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{-im}{2\hbar\Delta t}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}$$

(11)

Do apêndice II do livro *Quantum Mechanics*,
Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë,
Vol. 2, página 1470.