§ Integrais de Trajetória e Métodos Funcionais

Ref: 'Quantum Field Theory', C. Itzykson + J-B. Zuber
Cap. 9

$\boxed{\hbar \equiv 1}$

Consideramos um sistema com apenas um grau de liberdade, coordenada Q, com relação canônica

$$[Q, P] = i \,, \tag{1}$$

P é o momentum conjugado. O Hamiltoniano do sistema é

$$\mathcal{H}(P,Q) = \frac{P^2}{2m} + V(Q). \tag{2}$$

Estados possíveis do sistema: $|a\rangle, |b\rangle, \ldots$ e queremos calcular uma expressão para a amplitude de probabilidade:

$$\begin{aligned} \langle b(t') | a(t) \rangle &= {}_H\langle b, t' | a, t \rangle_H = (*) \\ &= \langle b | \, e^{-i\mathcal{H}(t'-t)} \, | a \rangle \end{aligned} \tag{3}$$

$$\left.\begin{aligned} 1 = \langle a|a\rangle &= \int dQ \, \langle a|Q\rangle\langle Q|a\rangle = \int dQ \, |\psi_a(Q)|^2 \\ 1 = \langle a|a\rangle &= \int dP \, \langle a|P\rangle\langle P|a\rangle = \int dP \, |\phi_a(P)|^2 \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

(*)

Note que na versão de Heisenberg os kets estados não evoluem no tempo, mas sim os kets base

Schrödinger: $A^{(S)}|a\rangle = a|a\rangle, \quad A^{(S)} = A(0)$

Heisenberg: $A^{(H)}(t) = \mathcal{U}^{\dagger}(t)A(0)\mathcal{U}(t)$

Para a equação de autovalores temos:

$$\left(\mathcal{U}^{\dagger}(t)A(0)\mathcal{U}(t)\right)\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a\rangle = a\,\mathcal{U}^{\dagger}|a\rangle$$

$$A^{(H)}(t)\left(\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a\rangle\right) = a\left(\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a\rangle\right),$$

de maneira que o ket base com autovalor (a) é identificado com:

$$\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a\rangle = |a,t\rangle_H \quad ,$$

evoluindo no tempo, mas em sentido contrário. Para a amplitude de transição temos:

$$\langle b(t')|a(t)\rangle = {}_H\langle b,t'|a,t\rangle_H = \langle b|\mathcal{U}(t')\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a\rangle$$

$$= \langle b|\, e^{-i\mathcal{H}(t'-t)}\,|a\rangle$$

sendo que

$$\left.\begin{array}{l} Q|q\rangle = q|q\rangle \\ P|p\rangle = p|p\rangle \end{array}\right\} \qquad (5)$$

e

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q'-q) \quad , \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p-p') \qquad (6)$$

$$\langle q|p\rangle = \langle p|q\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ipq} \qquad (7)$$

Também

$$\langle q|P|p\rangle = p\langle q|p\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q}\langle q|p\rangle \,. \quad (8)$$

Separamos o intervalo de tempo (t,t') em pedaços infinitesimais $t \to t+\Delta t = t'$. Temos

$$\langle q_2(t+\Delta t)|q_1(t)\rangle = \langle q_2|e^{-i\hat{H}\Delta t}|q_1\rangle \qquad (9)$$

A condição de contorno neste caso é dada por

$$\lim_{\Delta t\to 0} \langle q_2(t+\Delta t)|q_1(t)\rangle = \langle q_2(t)|q_1(t)\rangle = \delta(q_1-q_2) \quad (10)$$

Para Δt pequeno, esperamos que a amplitude (9) seja negligenciável quando q_2 é muito diferente de q_1 (o módulo sendo pequeno ou a fase oscilando muito rapidamente). O operador $V(Q)$ pode então ser sustituído pelo seus valores $V(q_1)$ ou $V(q_2)$. Isso equivale a uma aproximação do tipo

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} = e^{-i\Delta t \frac{P^2}{2m}} \, e^{-i\Delta t V(Q)} \qquad (11)$$

porque

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} = 1 - i\hat{H}\Delta t + o(\Delta t^2)$$

$$= 1 - i\left[\frac{P^2}{2m}\Delta t + V(Q)\Delta t\right]$$

$$\simeq \left(1 - i\frac{P^2}{2m}\Delta t\right)\left(1 - i V(Q)\Delta t\right) + o(\Delta t^2)$$

Temos negligênciado em (11) termos de ordem superior em Δt e os comutadores do $\left[\frac{P^2}{2m}, V(Q)\right]$. Obtemos a estimação

$$\langle q_2(t+\Delta t) | q_1(t)\rangle \simeq \langle q_2 | e^{-i\Delta t \frac{P^2}{2m}} e^{-i\Delta t V(Q)} | q_1\rangle$$

$$= \int dp \, \langle q_2 | e^{-i\Delta t \frac{P^2}{2m}} | p\rangle \langle p | e^{-i\Delta t V(Q)} | q_1\rangle$$

$$= \int dp \, e^{-i\frac{\Delta t p^2}{2m}} \langle q_2 | p\rangle \, e^{-i\Delta t V(q_1)} \langle p | q_1\rangle$$

$$= e^{-i\Delta t V(q_1)} \int dp \cdot e^{-i\frac{\Delta t p^2}{2m}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iq_2 p} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iq_1 p}$$

$$= e^{-i\Delta t V(q_1)} \frac{1}{2\pi} \int dp \, e^{-i\frac{\Delta t p^2}{2m}} e^{i(q_2 - q_1)p}$$

Completando o quabrado obtemos:

$$\frac{\Delta t\, p^2}{2m} - (q_2-q_1)p = \frac{\Delta t}{2m}\left[p^2 - \frac{q_2-q_1}{\Delta t}2m\,p\right]$$

$$= \frac{\Delta t}{2m}\left[p^2 - 2\frac{q_2-q_1}{\Delta t}m\,p + \frac{(q_2-q_1)^2}{\Delta t^2}m^2\right] - \frac{(q_2-q_1)^2 m}{2\Delta t}$$

$$= \frac{\Delta t}{2m}\left[p - \frac{m}{\Delta t}(q_2-q_1)\right]^2 - \frac{(q_2-q_1)^2 m}{2\Delta t}.$$

Assim

$$\langle q_2(t+\Delta t)|q_1(t)\rangle \simeq e^{-i\Delta t V(q_1)}\frac{1}{2\pi}\int dp\, e^{-i\frac{\Delta t}{2m}\left[p-\frac{m}{\Delta t}(q_2-q_1)\right]^2}$$

$$\times\, e^{+i\frac{(q_2-q_1)^2 m}{2\Delta t}}$$

$$= e^{-i\Delta t V(q_1)}\, e^{i\frac{m}{2}\frac{(q_2-q_1)^2}{\Delta t}} \cdot \frac{1}{2\pi}\left(\frac{i\pi}{\Delta t}2m\right)^{1/2}$$

$$= \left(\frac{m i}{2\pi\Delta t}\right)^{1/2} e^{-i\Delta t V(q_1)}\, e^{i\frac{m}{2}\frac{(q_2-q_1)^2}{\Delta t}}$$

$$= \left(\frac{m i}{2\pi\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left[i\left\{\frac{m}{2}\frac{(q_2-q_1)^2}{\Delta t} - \Delta t\, V(q_1)\right\}\right] \qquad (12).$$

Em vista das considerações feitas o termo $V(q_1)$ pode ser simetrizado

$$V(q_1) \longrightarrow \frac{1}{2}\left[V(q_1)+V(q_2)\right] \equiv V(\bar{q}) \qquad (13)$$

assumindo que a variação do potencial é lenta.

Notamos também que

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{q_2 - q_1}{\Delta t} = \dot{q} \qquad (14)$$

é a velocidade generalizada. Escrevemos a amplitude de probabilidade como

$$\langle q_2(t+\Delta t) | q_1(t) \rangle \simeq \left(\frac{m i}{2\pi \Delta t}\right)^{1/2} \exp\left\{ i \Delta t \left[\frac{m \dot{q}^2}{2} - V(q) \right] \right\} \qquad (15)$$

Notamos que

$$L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) = L(q, \dot{q}), \qquad (16)$$

onde L é o Lagrangeano clássico.

Mais precisamente: Seja $q(t')$ a trajetória que liga q_1 e q_2 no intervalo do tempo $(t, t+\Delta t)$ de acordo com a mecânica clássica (isto é com equações que obedecem o. $\hbar$ princípio da Ação estacionária). Para $|q_2 - q_1| \gg \left(\frac{\hbar \Delta t}{m}\right)^{1/2}$ as oscilações na fase de (12) são muito fortes produzindo um amortecimento da amplitude (interferência destrutiva). No limite $\Delta t \to 0$, só valores de q_2 próximos a q_1 contribuem, num domínio de largura $\left(\frac{\hbar \Delta t}{m}\right)^{1/2}$. A fase na amplitude

Comentário:

a grandeza

$$\xi \equiv \left(\frac{\hbar \Delta t}{m}\right)^{1/2}$$

é um comprimento caraterístico que fornece a meia largura da gaussiana:

$$\langle q_2(t+\Delta t)|q_1(t)\rangle \simeq \left(\frac{mi}{2\pi\Delta t}\right) \times \exp\left[i\left\{\frac{(q_2-q_1)^2}{2\xi^2} - \Delta t\, V(q_1)\right\}\right]$$

Para q_2 muito afastado de q_1:

$$|q_2 - q_1| \gg \xi$$

a ~~fase da~~ amplitude oscila fortemente, dando um amortecimento, com tal que o potencial varie lentamente numa distância ξ. Dai a substituição:

$$V(q_1) \longrightarrow \frac{1}{2}\left[V(q_1) + V(q_2)\right]$$

Para $\Delta t \to 0$, $\xi \to 0$, o que conduz a considerar a trajetória clássica.

(15) é equivalente à Ação ao longo da trajetória clássica que liga (q_1, t) com $(q_2, t+\Delta t)$:

$$I(2,1) = \int_{q_1(t)}^{q_2(t+\Delta t)} dt' \, L(q, \dot{q}) \, . \qquad (17)$$

A trajetória clássica não é muito diferente da trajetória linear que interpola q_1 e q_2.

$$q(t') = \left(1 + \frac{t-t'}{\Delta t}\right) q_1 + \frac{t'-t}{\Delta t} q_2 \qquad (18)$$

Daí:

$$I(2,1) = \int dt' \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right) = \frac{1}{2} m \left(\frac{q_2 - q_1}{\Delta t} \right)^2 \Delta t - \int_t^{t+\Delta t} dt' \, V(q)$$

com $\dot{q}(t') = \dfrac{q_2 - q_1}{\Delta t}$

$$I(2,1) \simeq \frac{1}{2} m \frac{(q_2 - q_1)^2}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left[V(q_1) + V(q_2) \right] \Delta t$$

Logo escrevemos

$$\langle q_2(t+\Delta t) | q_1(t) \rangle \simeq \left(\frac{m i}{2\pi \Delta t} \right)^{1/2} e^{i I [q_2(t+\Delta t), q_1(t)]} \qquad (19)$$

▸ Exercício. Mostrar que no limite $\Delta t \to 0$ obtemos o resultado

$$\lim_{\Delta t \to 0} \langle q_2(t+\Delta t) | q_1(t) \rangle = \delta(q_1 - q_2)$$

Para um intervalo finito iteramos transformações infinitesimais. Sejam

$$\Delta t \equiv \frac{t_f - t_i}{n}$$

$$t_\nu \equiv t_i + \nu \Delta t \qquad \nu = 0, 1, \dots, n$$

$$t_\nu = t_i + \nu \left(\frac{t_f - t_i}{n} \right)$$

Temos $\quad t_0 \equiv t_i$ (tempo inicial), $\qquad \nu = 0$

$\quad t_n = t_f$ (tempo final), $\qquad \nu = n$

Assim a amplitude

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)} | q_i \rangle$$

$$= \langle q_f | e^{-in\Delta t \hat{H}} | q_i \rangle = \langle q_f | \underbrace{e^{-i\Delta t H} e^{-i\Delta t H} \dots e^{-i\Delta t H}}_{n \text{ vezes}} | q_i \rangle$$

$$\cong \int dq_1 \int \dots \int dq_{n-1} \langle q_f | e^{-i\Delta t H} | q_{n-1} \rangle \langle q_{n-1} | e^{-i\Delta t H} | q_{n-2} \rangle \langle \dots$$

$$\dots | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\Delta t H} | q_i \rangle$$

$$= \int \prod_{\nu=1}^{n-1} dq_\nu \prod_{0}^{n-1} \langle q_{\nu+1}, t_{\nu+1} | q_\nu, t_\nu \rangle \tag{20}$$

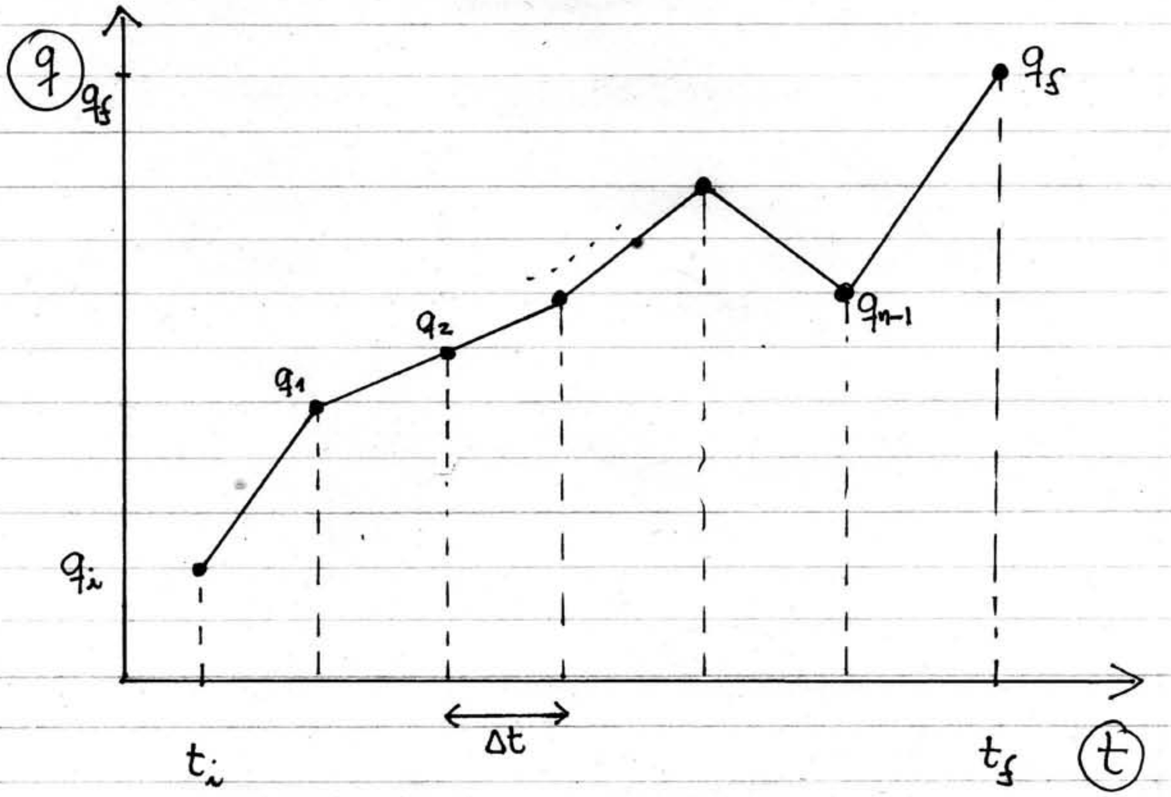
No limite

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \lim_{n\to\infty} \int \prod_{1}^{n-1} dq_\nu \prod_{0}^{n-1} \langle q_{\nu+1}, t_{\nu+1} | q_\nu, t_\nu \rangle$$

$$= \lim_{n\to\infty} \int \prod_{1}^{n-1} dq_\nu \left[\frac{nmi}{2\pi(t_f - t_i)}\right]^{\frac{n}{2}} \exp\left[i\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(q,\dot{q})\right], \tag{21}$$

onde o fatôr de fase é dado pela soma:

$$I = \int_{t_i}^{t_f} dt\, L(q,\dot{q}) = I(n,n-1) + I(n-1,n-2) + \cdots + I(1,0) \tag{22}$$



I é a ação computada ao longo da trajetória quebrada mostrada na figura anexa. Quando o intervalo $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{n}$ vai à zero podemos pensar que I é a Ação ao longo de uma trajetória arbitrária.

O limite (21) se escreve na forma abreviada

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \int \mathcal{D}(q) \exp\left[i \int_{t_i}^{t_f} dt \, L(q, \dot{q}) \right] \qquad (23)$$

A medida usada na integração, e que se refere ao espaço funcional das trajetórias $q(t)$, denota-se por $\mathcal{D}(q)$ e inclue os produtos dos fatores de normalização

$$\left(\frac{m i}{2\pi \Delta t} \right)^{1/2}$$

As trajetórias estão restritas as condições de contorno

$$q(t_i) = q_i, \quad q(t_f) = q_f$$

Colocando a constante de Planck no formalismo se tem

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \int \mathcal{D}(q) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \, L(q, \dot{q}) \right\} \qquad (24)$$

O princípio de superposição se reflete na seguinte relação

$$\int \mathcal{D}(q)\, e^{\frac{i}{\hbar} I(t_f,t_i)} = \int dq(t) \int \mathcal{D}(q)\, e^{\frac{i}{\hbar} I(t_f,t)} \int \mathcal{D}(q)\, e^{\frac{i}{\hbar} I(t,t_i)} \quad (25)$$

O limite clássico $(I/\hbar) \to 0$ está ligado a avaliar uma integral de trajetória pelo método da fase estacionária. A trajetória clássica corresponde então a um extremo da ação. Se a trajetória clássica de q_i à q_f é única, esperamos que salvo por um fator de normalização se tenha

$$\langle f | i \rangle \xrightarrow[\hbar \to 0]{} e^{\frac{i}{\hbar} I(f,i)}$$

A mecânica Quântica pode ser interpretada em termos de flutuações em relação à trajetória clássica.

A medida $\mathcal{D}(q)$ é complexa e o integrando é uma função oscilatória. Uma teoria matemáticamente mais satisfatória pode ser obtida mediante uma transformação para tempo imaginário (rotação de Wick). Neste caso os elementos de matriz envolvidos correspondem ao operador $e^{-\mathcal{H}t}$, e a equação de Schrödinger se transforma numa equação de difusão. Este processo conduz à chamada medida de Wiener.

O formalismo desenvolvido pode ser usado para calcular elementos de matriz de operadores. Por exemplo suponhamos que queremos calcular elementos de matriz de um operador $\hat{\Theta}(t)$ entre os estados (q_f, t_f) e (q_i, t_i):

$$\langle q_f, t_f | \hat{\Theta}(t) | q_i, t_i \rangle = \langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t)} \hat{\Theta}\, e^{-i\hat{H}(t - t_i)} | q_i \rangle$$

$$= \int dq' \int dq'' \langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t)} | q' \rangle \langle q' | \hat{\Theta} | q'' \rangle \langle q'' | e^{-i\hat{H}(t - t_i)} | q_i \rangle$$

$$= \int dq' \int dq'' \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(q_f, t_f; q', t)} \langle q' | \hat{\Theta} | q'' \rangle \times \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(q'', t; q_i, t_i)}$$

Suponhamos para simplificar que o operador $\hat{\Theta}$ é diagonal na representação de coordenadas

$$\langle q' | \hat{\Theta} | q'' \rangle = \Theta(q')\, \delta(q' - q''),$$

assim obtemos

$$= \int dq' \int dq'' \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(t_f, t)}\, \Theta(q')\, \delta(q' - q'') \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(t, t_i)}$$

$$= \int dq' \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(q_f, t_f; q', t)}\, \Theta(q') \int \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(q', t; q_i, t_i)}$$

que se escreve simbolicamente como:

$$= \int' \mathcal{D}(q)\, e^{-iI(q_f,t_f;\, q_i t_i)}\, \mathcal{O}[q(t)]$$

§ A Integral de trajetória e a Matriz de Transferência para o Oscilador harmônico

Ref: J.B. Kogut, Rev. Mod. Physics 51, 659 (1979)

O cálculo que faremos a continuação mostrará a equivalência entre a integral de trajetória de Feynman e a equação de Schrödinger. Como sub-produto obteremos uma ligação entre a mecânica Estatística de sistemas clássicos e a teoria quântica de campos. Na seção anterior obtivemos a amplitude de probabilidade como uma integral de trajetória. Trabalhamos agora com o caso do oscilador harmônico, onde a Lagrangeana é dada por

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \qquad (1)$$

Chamamos Z a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula no ponto (x_b, t_b), quando inicialmente estava em (x_a, t_a) :

$$\mathcal{Z} = \langle x_b, t_b \mid x_a, t_a \rangle \tag{2}$$

Na seção anterior obtivemos o resultado

$$\mathcal{Z} = \sum_{\text{Trajetórias}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} I_m(a,b)\right\} , \tag{3}$$

onde $I_m(a,b)$ é a ação para um caminho particular que liga os pontos (x_a, x_b). Voltamos atrás na nossa formulação discretizando o tempo. Introduzimos então uma rede discreta para o eixo do tempo com

$$\Delta t \equiv t_{i+1} - t_i \tag{4}$$

sendo a constante da rede. Realizamos agora uma rotação de Wick passando para tempo imaginário por

$$t = -i\tau \quad \text{ou} \quad \tau = it , \tag{5}$$

assim $\dot{x}(t) = \dfrac{dx}{dt} = i\dfrac{dx}{d\tau}$

$$[\dot{x}(t)]^2 = -\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 .$$

O fator que aparece na exponencial em (3) fica

$$\frac{i}{\hbar} I_m(a,b) = \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\}$$

$$= \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[-\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right]$$

$$= -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left\{ \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\} \qquad (6)$$

▸ <u>Def</u>. Ação Euclideana

$$I_\varepsilon \equiv \frac{1}{2} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left[m \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + m\omega^2 x^2 \right] d\tau \qquad (7)$$

A amplitude de probabilidade então fica como

$$\mathcal{Z} = \sum_{(\text{trajetórias})} \exp\left\{ -\frac{I_\varepsilon}{\hbar} \right\} \qquad (8)$$

Discretizando o eixo τ temos

$$\frac{dx}{d\tau} \longrightarrow \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta\tau} ,$$

$$x \longrightarrow x_i ,$$

daí

$$I_\varepsilon = \frac{1}{2} m \Delta\tau \sum_i \left[\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta\tau} \right)^2 + \omega^2 x_i^2 \right]$$

e a amplitude de probabilidade é

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \dots \exp\left\{ -\frac{m\Delta\tau}{2\hbar} \sum_i \left[\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau} \right)^2 + \omega^2 x_i^2 \right] \right\}. \quad (9)$$

Notemos que a fórmula (9) representa formalmente a função de partição da Mecânica Estatística de um problema clássico unidimensional. Temos uma rede unidimensional cujos sítios são dados pelo índice $i = 1, 2, \dots, n \dots$ Em cada sítio temos uma variable x_i que varia no intervalo

$$-\infty < x_i < +\infty \, .$$

A Ação euclideana acopla os primeiros vizinhos (x_i, x_{i+1}). A integral $\int_{-\infty}^{\infty} \prod dx_i$ é feita sobre todas as configurações possíveis, sendo que cada configuração é pesada pelo "fator de Boltzmann" $\exp\left(-\frac{I_E}{\hbar}\right)$. Neste caso, a constante de Planck, $\hbar$, faz as vezes da temperatura. Esta associação é extremamente interessante, pois a temperatura T é uma medida das flutuações num problema de Mecânica Estatística, enquanto que $\hbar$ é uma medida das flutuações quânticas através do princípio de incerteza.