



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

MARCOS AURÉLIO LEANDRO DA COSTA

***FORMULAÇÃO DA MECÂNICA QUÂNTICA POR
INTEGRAIS DE CAMINHO DE FEYNMAN***

FORTALEZA - CE

2013

MARCOS AURÉLIO LEANDRO DA COSTA

*FORMULAÇÃO DA MECÂNICA QUÂNTICA POR
INTEGRAIS DE CAMINHO DE FEYNMAN*

Monografia apresentada ao Curso de Física do Departamento de Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

FORTALEZA - CE

2013

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca do Curso de Física

- C874f Costa, Marcos Aurélio Leandro da.
Formulação da Mecânica Quântica por Integrais de Caminho de Feynman /
Marcos Aurélio Leandro da Costa. – Fortaleza, 2014.
60 f.: il., enc.; 30 cm.
- Monografia (graduação) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,
Departamento de Física, Fortaleza, 2014.
Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.
1. Mecânica Quântica. 2. Integrais de Caminho. 3. Propagador de Feynman. I.
Título.

CDD 530.12

MARCOS AURÉLIO LEANDRO DA COSTA

*FORMULAÇÃO DA MECÂNICA QUÂNTICA POR
INTEGRAIS DE CAMINHO DE FEYNMAN*

Monografia apresentada ao Curso de Física do Departamento de Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Física.

Aprovada em: 03/01/2014

Prof. Dr. Raimundo N. da Costa Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)
Orientador

Prof. Ms. João Philipe Macedo Braga
Universidade da Integração Internacional
da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Ms. Anderson Magno Chaves Cunha
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Resumo

A formulação da mecânica quântica por integrais de caminho de Feynman surge como uma terceira representação da teoria quântica, análoga as outras duas representações, de Schrödinger e de Heisenberg, de forma que são matematicamente equivalentes. Entretanto, na representação de Feynman o formalismo hamiltoniano é substituído pelo formalismo lagrangiano como ferramenta matemática utilizada na construção da teoria quântica. Na integração funcional da mecânica quântica, os operadores deixam de ser os principais objetos de estudo, tal como são nas outras duas representações, dando lugar aos propagadores, que tem uma relação intrínseca com o operador de evolução temporal, sendo responsável direto pela evolução do estado quântico. Este estudo inicia-se com uma análise matemática do formalismo lagrangiano, fundamental para o desenvolvimento da teoria quântica por integrais de caminho de Feynman. Segue-se com a introdução do propagador quântico a partir da definição do operador de evolução temporal para uma hamiltoniana independente do tempo (sistema autônomo isolado). A partir desses conceitos, introduz-se a idéia da integral de caminho, onde agora tem-se que todos os caminhos são possíveis, ao contrário da ação clássica na qual o único caminho possível seria aquele em que a ação é um mínimo. O estudo continua com a integral de trajetória e sua analogia com a integral de Riemann. Em seguida, investiga-se as regras para dois eventos sucessivos, e também, as regras para vários eventos sucessivos. Por fim, utiliza-se os conhecimentos obtidos da Integral de Caminho de Feynman para resolver o Oscilador Harmônico Simples e o Oscilador Harmônico Forçado, calculando-se suas autofunções e autovalores através do propagador quântico, obtendo-se resultados semelhantes aos encontrados por Schrödinger e Heisenberg, comprovando-se a equivalência dessa representação com as outras duas representações da mecânica quântica.

Palavras-chave: Mecânica Quântica. Integrais de Caminho. Propagador de Feynman.

Abstract

The formulation of quantum mechanics by Feynman path integrals arises as a third representation of the quantum theory, similarly the other two representations, Schrödinger and Heisenberg, so that they are mathematically equivalent. However, the representation of the Feynman Hamiltonian formalism is replaced by the Lagrangian formalism as a mathematical tool used in the construction of quantum theory. In functional integration of quantum mechanics, operators no longer the main objects of study, such as they are in the other two representations, giving place to the propagators, which has an intrinsic relationship with time evolution operator, being directly responsible for the evolution of the quantum state. This study begins with a mathematical analysis of the Lagrangian formalism, fundamental to the development of quantum theory of Feynman path integrals. Following the introduction of the quantum propagator from the definition of the time evolution operator for a time independent Hamiltonian (isolated system). From these concepts, it introduces the idea of path integral, where now has that all paths are possible, unlike the classical action in which the only possible way would be one in which the action is a minimum. The study continues with the path integral and its analogy with the Riemann integral. Then, it investigates the rules for two successive events, and also, the rules for several successive events. Finally, it uses the knowledge obtained from the Feynman path integral to solve the Simple Harmonic Oscillator and Forced Harmonic Oscillator by calculating its eigenvalues and eigenfunctions through quantum propagator, obtaining similar results to those found by Schrödinger and Heisenberg, proving the equivalence of this representation with the other two representations of quantum mechanics.

Keywords : Quantum Mechanics. Path Integrals. Feynman Propagator.

Dedicatória

Aos meus pais.
A minha esposa.
A minha filha.

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus por ter me dado saúde e coragem para enfrentar os desafios que a vida me proporcionou.

Agradeço a minha esposa Adriana Leandro e a minha filha Mariana Leandro pelo amor, paciência, companheirismo e amizade ao longo dos últimos anos.

Agradeço aos meus amigos José Enedilton, José Gadelha, Jorge Luiz e Antônio Joel pelo incentivo e ajuda nos estudos e pelos momentos de descontração durante essa difícil jornada.

Agradeço aos meus colegas Emanuel Wendell e Wendel Mendes pelas importantes sugestões no momento de definição do tema desta monografia e na escolha da bibliografia.

Agradeço aos professores do Curso de Física da Universidade Federal do Ceará pela qualidade de ensino oferecida possibilitando o meu desenvolvimento intelectual nos últimos anos.

Agradeço em especial ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho pela valorosa orientação da monografia, indispensável à conclusão do curso e, conseqüentemente, para a realização deste sonho.

“Quem entra em contato com a Física Quântica sem se espantar, sem ficar perplexo, é porque nada entendeu.”

Albert Einstein

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 11
2	Formulação Variacional da Mecânica Clássica	p. 14
2.1	O conceito de Funcional	p. 14
2.2	A formulação lagrangiana da Mecânica Clássica	p. 15
2.2.1	A ação clássica	p. 15
2.2.2	O Princípio da Mínima Ação	p. 15
2.2.3	Leis de Conservação	p. 16
2.3	A formulação hamiltoniana da Mecânica Clássica	p. 18
2.3.1	As equações de Hamilton	p. 18
2.4	A relação com a Mecânica Quântica	p. 19
3	O propagador de Feynman	p. 22
3.1	O operador de evolução temporal	p. 22
3.2	O propagador na mecânica quântica	p. 28
3.2.1	A origem do propagador	p. 28
3.2.2	Propriedades do propagador	p. 29
3.2.3	O propagador como uma função de Green	p. 31
3.3	O propagador como amplitude de probabilidade	p. 32
4	Integrais de caminho de Feynman	p. 35

4.1	A origem da Integral de Caminho	p. 35
4.2	A relação com a equação de Schrödinger	p. 37
4.3	Analogia com a Integral de Riemann	p. 39
4.4	As regras para dois eventos sucessivos	p. 41
4.5	As regras para vários eventos sucessivos	p. 42
5	O Oscilador Harmônico	p. 44
5.1	Oscilador Harmônico Simples	p. 44
5.2	Oscilador Harmônico Forçado	p. 50
6	Conclusões	p. 56
	Referências	p. 58

Lista de Figuras

- 1 Caminho de uma partícula clássica do sistema no espaço de configuração. p. 15
- 2 Amplitudes de transição para uma partícula ir de ponto inicial $q = q_0$, num instante inicial $t = 0$, a um ponto final $q = q_{N-1}$, num instante final $t = T$, com intervalos de tempo infinitesimal δt , onde utilizamos coordenadas generalizadas q_i em substituição as coordenadas x_i p. 37
- 3 Integral de Riemann sob uma curva $f(x)$ e sobre o eixo das abcissas x , com espaçamento h entre x_i e x_{i+1} p. 39
- 4 A soma sobre todos os caminhos é definido como um limite, em que a princípio o caminho é especificado, dado apenas pela sua coordenada x num número grande de tempos especificados separados por intervalos muito pequenos ε . A soma dos caminhos é, então, uma integral sobre todas essas coordenadas específicas. p. 41
- 5 Amplitudes de probabilidades para dois eventos sucessivos partindo de um ponto a para um ponto intermediário c , em seguida para o ponto b . p. 42

1 Introdução

A mecânica quântica é definida como o ramo da física que estuda o comportamento da matéria e da energia a nível atômico, sendo indispensável para uma compreensão das forças fundamentais da natureza, com exceção da Força Gravitacional, portanto fundamental para entendermos as interações ocorridas pela Força Eletromagnética, Força Nuclear Forte e Força Nuclear fraca.

No final do século XIX e início do século XX alguns experimentos tornaram evidentes que a teoria clássica era falha ou ainda não estava completa, na escala macroscópica dos corpos muito massivos ou com velocidades muito grandes ou na escala microscópica das partículas subatômicas a natureza comportava-se de forma diferente da previsão teórica da física clássica. Foi nesse contexto que surgiram a teoria da Relatividade Geral, que respondia as questões na escala macroscópica, e a teoria Quântica, que resolvia as questões na escala microscópica.

A mecânica quântica teve origem por volta do ano de 1900[1], quando Max Planck publicou na revista alemã *Annalen der Physik* um artigo chamado *Sobre a Teoria da Lei de Distribuição de Energia no Espectro Normal*[2]. A solução de Planck para o problema da Radiação do Corpo Negro contida nesse artigo introduziu o chamado quantum de energia, dado por $\varepsilon = h \times \nu$, em que Planck sugeriu que a troca de energia entre os elétrons da parede da cavidade do Corpo Negro e da radiação eletromagnética só deveriam ocorrer em quantidades discretas, ou seja, $E = n \times \varepsilon$, com $n = 0, 1, 2, \dots$ resolvendo o problema para altas frequências onde a densidade de energia iria para o infinito, problema que ficou conhecido como a *catástrofe do ultravioleta*. Em 1905, Albert Einstein ao publicar um artigo na revista alemã *Annalen der Physik* sobre o Efeito Fotoelétrico[3] com o título *Sobre um ponto de vista heurístico a respeito da produção e transformação da luz*[4], propôs que a luz (onda eletromagnética) era constituída de partículas chamadas fótons (quantum de luz) com energia dada por $E = h \times \nu$ e momento linear $p = \frac{h}{\lambda}$ onde ν e λ são,

respectivamente, a frequência e o comprimento de onda da luz e $h = 6,6260693 \times 10^{-34}$ J.s é a constante de Planck. Em 1913, Niels Bohr[5] estudando o espectro de linha dos átomos verificou que assim como nos osciladores de Planck os átomos só podem trocar energia em quantidades discretas. Bohr postulou então que o momento angular do elétron no átomo é dado por $L = n \times \hbar$ com $n = 1, 2, \dots$ e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. E postulou também, que a mudança de um estado de energia inicial E_i para um estado de energia final E_f provoca a emissão de um fóton de energia $\varepsilon = h \times \nu$, tal que $h\nu = E_i - E_f$. Em 1924, Louis de Broglie propôs que as relações de Planck-Einstein fossem estendidas para partículas materiais, com isso teria-se uma partícula com energia E , associada a uma onda com frequência angular ω , dada pela relação $\omega = \frac{E}{\hbar}$, e o momento linear \vec{p} associado ao comprimento de onda λ dado pela relação $\lambda = \frac{h}{p}$. Essa proposta ficou conhecida como a *Hipótese de De Broglie*[6]. Outros eminentes cientistas, tais como Arnold Sommerfeld e Hendrik Kramers, deram contribuições importantes para a chamada “Velha Mecânica Quântica”. Mas foi a partir de 1925 com os trabalhos de Max Born, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg e Paul Dirac, dentre outros físicos importantes, que a mecânica quântica começou a se fortalecer como teoria, principalmente, com os trabalhos de Schrödinger e Heisenberg que buscaram uma sistematização da teoria quântica desenvolvendo, paralela e independentemente, representações da mecânica quântica, dando início a chamada “Nova Mecânica Quântica”. Contudo, embora fossem abordagens diferentes tratava-se da mesma teoria, apresentando resultados idênticos.

A representação de Heisenberg[7] tinha em seu arcabouço uma estrutura matricial em que os operadores são dependentes do tempo e os estados quânticos são independentes do tempo[8]. Por outro lado, a representação de Schrödinger[9] baseava-se nas evidências experimentais de que o movimento das partículas nos sistemas microscópicos tem natureza ondulatória e, diferentemente da representação de Heisenberg, na mecânica quântica de Schrödinger os operadores são constantes e agora são os estados quânticos que evoluem com o tempo.

Observe-se que, inicialmente, os dados experimentais da espectroscopia que levaram os físicos a estudarem as diferenças dos níveis de energia no átomo, juntamente com a associação feita entre a hamiltoniana de um sistema com sua energia total, fizeram do formalismo hamiltoniano uma preferência tanto na representação de Heisenberg quanto na de Schrödinger.

Todavia, no ano de 1942 o físico americano Richard Feynman durante a defesa de sua tese de doutorado[10] adotou o formalismo lagrangiano como ferramenta matemática na

análise da teoria quântica, criando uma outra representação da teoria quântica. Feynman baseou-se num artigo de Paul Dirac de 1933 que tinha como título *A Lagrangiana na Mecânica Quântica*[11]. A ideia de Feynman foi fazer uma descrição dos sistemas quânticos a partir da lagrangiana dos sistemas clássicos correspondentes, estendendo o princípio da mínima ação para a mecânica quântica através de uma analogia feita por Dirac em seu artigo de 1933. Introduzindo a ideia de propagadores, Feynman utiliza-se do operador de evolução temporal para calcular as integrais de caminho que descrevem todas as trajetórias possíveis para que uma partícula saindo de um ponto inicial x_i num certo instante inicial t_0 chegar a um ponto final x_f num instante final t_f , onde o *propagador* significa uma amplitude de transição para o sistema quântico evoluir de um estado inicial $|\Psi, t_0\rangle$ para um estado final $|\Psi, t_0; t\rangle$.

Neste trabalho, faremos uma análise da proposta de Feynman para a formulação da mecânica quântica por integrais de caminho, onde no capítulo 2 faremos uma revisão da formulação variacional da mecânica clássica, prosseguindo no capítulo 3 com a introdução do propagador na mecânica quântica. No capítulo 4, faremos uma explicação mais detalhada das Integrais de caminho de Feynman, seguindo-se no capítulo 5 com uma aplicação das Integrais de caminho para resolver os problemas do Oscilador Harmônico Simples e do Oscilador Harmônico Forçado. E no último capítulo faremos a conclusão, discutindo a importância da aplicação do método de Feynman para a mecânica quântica.

2 *Formulação Variacional da Mecânica Clássica*

2.1 O conceito de Funcional

No cálculo diferencial busca-se um valor de x para o qual a função $y(x)$ tem um valor de máximo ou de mínimo. Já no cálculo das variações o que queremos é o valor da função $y(x)$ para o qual o funcional $I[y(x)]$ alcança um valor extremo (máximo ou mínimo). O funcional pode ser definido como uma função real cujo domínio é o espaço das funções[12].

Dizer que $I[y(x)]$ é um funcional da função $y(x)$ significa dizer que I é um número cujo valor depende da forma da função $y(x)$, em que x é apenas um parâmetro usado para definir $y(x)$. Portanto,

$$I[y(x)] = \int_{x_1}^{x_2} F(y(x), x) dx. \quad (2.1)$$

$I[y(x)]$ é um funcional de $y(x)$ uma vez que ele associa um número a cada escolha da função $y(x)$, ou seja, sua integral. Podemos observar que a área sob uma curva é um funcional da função que representa a curva, haja vista que para cada número que define o funcional temos uma área associada.

Um funcional pode ter em seu argumento mais de um parâmetro, assim temos que:

$$I[x(t, s), y(t, s)] = \int_{s_1}^{s_2} \int_{t_1}^{t_2} x(t, s) y(t, s) dt ds \quad (2.2)$$

Um funcional $I[q(t)]$ pode também ser dado como uma série de funções de um número infinito de variáveis, onde as variáveis são o valor da função $q(t)$ em cada valor de t [12].

2.2 A formulação lagrangiana da Mecânica Clássica

2.2.1 A ação clássica

Em mecânica clássica a ação é definida como um funcional de uma função L de coordenadas generalizadas $q(t)$ e velocidades generalizadas $\dot{q}(t)$ dada por [12]

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t)) dt, \quad (2.3)$$

onde L é chamada de função lagrangiana que pode ser obtida pela diferença entre as energias cinética e potencial do sistema [13], de forma que:

$$L = T - V \quad (2.4)$$

Utilizando-se as coordenadas e velocidades generalizadas e para um potencial $V(q)$ podemos escrever a lagrangiana como:

$$L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \quad (2.5)$$

2.2.2 O Princípio da Mínima Ação

O princípio de Hamilton também conhecido como princípio da mínima ação diz que a evolução do sistema de uma configuração 1 para uma configuração 2, no espaço de configurações, ocorre de maneira que a ação é um mínimo [14]. Na figura 1, temos uma representação gráfica da trajetória de uma partícula clássica.

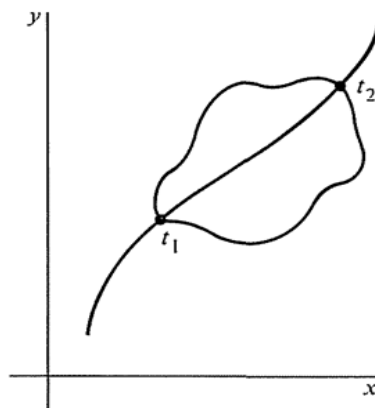


Figura 1: Caminho de uma partícula clássica do sistema no espaço de configuração.

A condição de extremo sugerida pelo princípio de Hamilton é obtida pelo cálculo variacional em analogia com o cálculo diferencial da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \delta S &= S[q + \delta q] - S[q] = 0 \\
 S[q + \delta q] &= \int_{t_1}^{t_2} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) dt \\
 S[q + \delta q] &= \int_{t_1}^{t_2} \left[L(q, \dot{q}, t) + \delta \dot{q} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \delta q \left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) \right] dt \\
 S[q + \delta q] &= S[q] + \int_{t_1}^{t_2} \left[\delta \dot{q} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \delta q \left(\frac{\partial L}{\partial q} \right) \right] dt \\
 S[q + \delta q] &= S[q] + \delta q \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \delta q \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt.
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Então temos que:

$$\delta S = \delta q \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \delta q \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt, \tag{2.7}$$

mas nos extremos a condição é que $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ (pontos fixos)[15], logo:

$$\delta S = - \int_{t_1}^{t_2} \delta q \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt, \tag{2.8}$$

mas entre os extremos δq pode assumir valores arbitrários, assim para termos $\delta S = 0$, temos que:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \tag{2.9}$$

esta equação foi obtida por Euler sendo chamada de equação de Euler-Lagrange por utilizar a formulação lagrangiana.

2.2.3 Leis de Conservação

Se a coordenada generalizada q não aparece explicitamente na função lagrangiana, onde q é chamada de coordenada cíclica [12], temos:

$$\frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = cte \tag{2.10}$$

logo $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ torna-se uma quantidade de interesse físico, pois diante de certas condições, ela se conserva. Devido a uma analogia com a mecânica Newtoniana essa grandeza será chamada de *momento generalizado conjugado à variável q , ou simplesmente, momento canônico*. Podemos observar que quando a coordenada generalizada q tem dimensão de comprimento $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ será o momento linear e quando tem dimensão de ângulo essa quantidade será o momento angular. Representaremos essa grandeza física por:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (2.11)$$

Observe-se que obtivemos essa lei de conservação do momento a partir de uma simetria da função lagrangiana, pois quando a lagrangiana não depende, explicitamente, de uma determinada coordenada q_i ela apresenta uma simetria perante a ação desta coordenada.

Agora observemos uma outra lei de conservação que surge a partir da derivação da lagrangiana em relação ao tempo [14], ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \\ \frac{dL}{dt} &= \sum_i \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \\ \frac{dL}{dt} &= \sum_i p_i \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde na segunda passagem foi utilizada a equação (2.9) de Euler-Lagrange e na terceira passagem a definição do momento dada pela equação (2.11). Mas, agora vejamos o caso em que a lagrangiana não depende explicitamente do tempo, tal que $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, e portanto:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right) = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_i p_i \dot{q}_i - L = cte \quad (2.13)$$

então, aqui surge mais uma quantidade que se conserva. Assim, quando a lagrangiana não depende explicitamente do tempo, a grandeza dada por:

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}), \quad (2.14)$$

que será denominada de função hamiltoniana [14], se conserva. E veremos que para alguns casos, como por exemplo um potencial independente do tempo, a hamiltoniana será a energia total do sistema.

2.3 A formulação hamiltoniana da Mecânica Clássica

2.3.1 As equações de Hamilton

Na formulação lagrangiana as variáveis independentes eram as coordenadas generalizadas q , as velocidades generalizadas \dot{q} e o tempo t . A evolução temporal do sistema físico era dado pela equação de Lagrange. Agora, introduziremos uma formulação onde as variáveis dadas são as coordenadas generalizadas, o momento canônico e o tempo. Essa nova formulação é denominada de hamiltoniana [16]. Tomando a função lagrangiana $L(q, \dot{q}, t)$, tal que:

$$\begin{aligned} dL &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ dL &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde utilizamos a equação (2.11) para substituímos o momento canônico na última equação. Agora utilizando o artifício matemático da diferenciação, em que podemos escrever $p_i d\dot{q}_i = d(p_i \dot{q}_i) - \dot{q}_i dp_i$, e em seguida substituindo na equação (2.15), teremos:

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt, \quad (2.16)$$

donde substituindo a equação (2.14) na equação (2.16) temos que:

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt, \quad (2.17)$$

onde vemos agora que H é uma função de q , p e t , conforme fica claro pelas diferenciais dq_i , dp_i e dt . Agora se reescrevermos a equação (2.17) substituindo-se $\frac{\partial L}{\partial q_i}$ por \dot{p}_i , temos:

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt, \quad (2.18)$$

mas, por outro lado, como $H = H(q, p, t)$ podemos escrever:

$$dH = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt, \quad (2.19)$$

agora comparando as equações (2.18) e (2.19), podemos deduzir que:

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{e} \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (2.20)$$

onde as equações acima são chamadas de equações de Hamilton [16].

Em termos da função hamiltoniana podemos definir a ação como um funcional de $q(t)$ e $p(t)$ dado por:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} [p(t)\dot{q}(t) - H(q(t), p(t), t)] dt \quad (2.21)$$

sendo que essa é a forma canônica da ação.

2.4 A relação com a Mecânica Quântica

Considere uma função $A(q, p, t)$ com q e p sendo, respectivamente, a coordenada generalizada e o momento canônico conjugado e t é o tempo. Sua evolução temporal [12] será dada por:

$$\begin{aligned} dA &= \frac{\partial A}{\partial t} dt + \frac{\partial A}{\partial q} dq + \frac{\partial A}{\partial p} dp \\ \frac{dA}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \\ \frac{dA}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.22)$$

agora utilizando as equações de Hamilton podemos reescrever a última equação como:

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.23)$$

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.24)$$

onde

$$\{A, H\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (2.25)$$

é chamado de parêntese de Poisson [12] de A e H .

Os parênteses de Poisson apresentam algumas propriedades interessantes, a saber:

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad (2.26)$$

$$\{A + B, C\} = \{A, C\} + \{B, C\} \quad (2.27)$$

$$\{AB, C\} = \{A, C\}B + A\{B, C\} \quad (2.28)$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{C, \{A, B\}\} + \{B, \{C, A\}\} = 0 \quad (2.29)$$

Na mecânica quântica utilizamos operadores hermitinianos atuando sobre um função de estado para obtermos os observáveis por meio de uma equação de autovalor [17]:

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (2.30)$$

A condição para o operador \hat{A} ser hermitiano decorre da necessidade do autovalor a ser uma quantidade real. Na representação de Schrödinger, a evolução temporal [17] do estado ψ ocorre da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi \quad (2.31)$$

onde \hat{H} é o operador hermitiano.

Utilizando o cálculo diferencial podemos calcular a evolução temporal do operador \hat{A} a partir da equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hat{A}\psi) = \frac{\partial}{\partial t}(a\psi)$$

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi + \hat{A}\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{da}{dt}\psi + a\frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.32)$$

mas temos da equação (2.24) que $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$, logo a equação acima fica:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi + \frac{1}{i\hbar}\hat{A}\hat{H}\psi = \frac{da}{dt}\psi + \frac{1}{i\hbar}\hat{H}a\psi \quad (2.33)$$

e substituindo a equação (2.23) na equação acima, temos:

$$\frac{\partial A}{\partial t}\psi + \frac{1}{i\hbar}AH\psi = \frac{da}{dt}\psi + \frac{1}{i\hbar}HA\psi \quad (2.34)$$

$$\frac{1}{i\hbar}(AH - HA)\psi + \frac{\partial A}{\partial t}\psi = \frac{da}{dt}\psi \quad (2.35)$$

$$\left(\frac{1}{i\hbar}[A, H] + \frac{\partial A}{\partial t}\right)\psi = \frac{dA}{dt}\psi \quad (2.36)$$

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H] + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.37)$$

onde $[A, H] = AH - HA$ é chamado de comutador entre os operadores A e H .

Os comutadores também obedecem algumas propriedades [18], tal que:

$$[A, B] = -[B, A] \quad (2.38)$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad (2.39)$$

$$[AB, C] = [A, C] B + A [B, C] \quad (2.40)$$

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0 \quad (2.41)$$

Observe a semelhança entre as propriedades dos comutadores e as propriedades dos parênteses de Poisson. Isto sugere que a mecânica quântica pode ser obtida da sua correspondente clássica fazendo-se a seguinte substituição:

$$\{A, B\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B] \quad (2.42)$$

Esse processo de quantização foi introduzido por Paul Dirac e recebeu o nome de *quantização canônica* [12].

3 O propagador de Feynman

3.1 O operador de evolução temporal

Na mecânica quântica o tempo é apenas um parâmetro, ou seja, não é um observável, onde na representação de Schrödinger o tempo é um parâmetro da função de onda $\Psi(x, t)$ que nos fornece o estado de uma partícula, podendo também ser representado pelo estado ket $|\Psi\rangle$ na notação de Dirac. Assim, para evidenciar o tempo como um parâmetro podemos escrever um estado ket arbitrário como:

$|\Psi, t_0\rangle$, para o sistema em $t = t_0$.

$|\Psi, t_0; t\rangle$, para o sistema em $t > t_0$, que estava em $|\Psi, t_0\rangle$, quando $t = t_0$.

Podemos, então, nos perguntar como passamos de um estado ket inicial $|\Psi, t_0\rangle$ para um estado ket futuro $|\Psi, t_0; t\rangle$ na mecânica quântica. Sabemos que na mecânica clássica basta resolver a equação de Euler-Lagrange, mas na mecânica quântica, segundo Dirac, é impossível obter uma equação diferencial análoga a de Euler-Lagrange [10]. E como se dá essa evolução do estado ket na mecânica quântica? A resposta não poderia ser outra senão através de um operador atuando no estado ket inicial. E quem seria esse operador? O *Operador de Evolução Temporal* $U(t, t_0)$, de forma que:

$$|\Psi, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\Psi, t_0\rangle. \quad (3.1)$$

O operador de evolução temporal tem algumas propriedades [19] importantes que são:

1) *Unitariedade*: o operador de evolução temporal é unitário. De forma que temos:

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1. \quad (3.2)$$

A importância dessa propriedade está no fato de conservar a condição de normalização de um estado ket, devendo um estado ket que estava normalizado em $t = t_0$ permanecer normalizado num tempo futuro $t > t_0$.

2) Composição: o operador de evolução temporal obedece a lei da composição, assim:

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0), \quad \text{para } t_2 > t_1 > t_0. \quad (3.3)$$

Esta propriedade nos diz que para obtermos a evolução temporal de um estado ket inicial $|\Psi, t_0\rangle$ para um estado ket $|\Psi, t_0; t_2\rangle$ basta aplicar o operador de evolução temporal duas vezes, primeiro para obter o estado ket $|\Psi, t_0; t_1\rangle$ e novamente para obter o estado ket $|\Psi, t_0; t_2\rangle$.

3) Infinitesimal: o operador de evolução temporal pode ser representado de forma infinitesimal, tal que:

$$|\Psi, t_0; t_0 + dt\rangle = U(t_0 + dt, t_0)|\Psi, t_0\rangle. \quad (3.4)$$

Podemos verificar como uma importante consequência dessa propriedade que no limite em que $dt \rightarrow 0$, o operador de evolução temporal se transforma numa matriz identidade, ou seja, operador unitário, tal que:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = 1. \quad (3.5)$$

Agora que já sabemos quais as propriedades do operador de evolução temporal podemos nos perguntar como calcular esse operador. Bem, partindo da equação de Schrödinger num estado estacionário onde temos um operador hamiltoniano \hat{H} independente do tempo, que atuando no estado ket arbitrário nos fornece o valor esperado E da energia do sistema que permanece constante, tal que:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad (3.6)$$

com $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$.

Para resolvermos a equação diferencial (3.6) podemos utilizar uma técnica bastante conhecida dos físicos, a técnica da separação de variáveis [20], onde fazemos $\Psi(x, t) = \phi(t)\psi(x)$, ou seja, a função de onda aqui aparece como um produto de duas soluções $\phi(t)$, que depende só do tempo, e $\psi(x)$, que depende apenas da posição. Agora substituindo

$\Psi(x, t) = \phi(t)\psi(x)$ na equação (3.6), temos que:

$$i\hbar\psi\frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\phi + V(x)\psi\phi \quad (3.7)$$

agora dividindo ambos os lados da igualdade por $\Psi(x, t) = \phi(t)\psi(x)$, temos:

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\frac{1}{\psi} + V(x) \quad (3.8)$$

entretanto essa última igualdade só pode ser verdadeira se os dois lados da igualdade forem constantes. Assumindo como verdadeira a igualdade, chamaremos essa constante de separação de variáveis de E , logo temos para a parte que depende do tempo a seguinte equação [18]:

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\frac{d\phi}{dt} = E \quad (3.9)$$

$$\frac{d\phi}{\phi} = -\frac{i}{\hbar}E dt \quad (3.10)$$

$$\int \frac{d\phi}{\phi} = -\frac{i}{\hbar}E \int dt \quad (3.11)$$

$$\ln \phi = -\frac{i}{\hbar}Et \quad (3.12)$$

$$\phi(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right] \quad (3.13)$$

onde por simplicidade optamos por fazer $t_0 = 0$ e omitimos a constante arbitrária que surge na última equação, uma vez que pode ser absorvida pela parte independente do tempo na equação (3.6).

A constante E é a energia total do sistema, que surge como um autovalor do operador hamiltoniano \hat{H} aplicado nos autokets de energia, permanecendo inalterada no caso estacionário. Podemos então escrever a equação (3.6) em termos dos operadores \hat{H} e $U(t, t_0)$, tal que:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = \hat{H}U(t, t_0), \quad (3.14)$$

onde $U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right]$ é o *Operador de Evolução Temporal*.

Agora, se multiplicarmos a equação (3.14) por $|\Psi, t_0\rangle$ pelo lado direito nos dois lados da igualdade [21], obtemos:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0)|\Psi, t_0\rangle = \hat{H}U(t, t_0)|\Psi, t_0\rangle, \quad (3.15)$$

mas veja que $|\Psi, t_0\rangle$ é o estado ket inicial para $t = t_0$, então com a atuação do operador

de evolução temporal neste estado ket, temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi, t_0; t \rangle = \hat{H} |\Psi, t_0; t \rangle, \quad (3.16)$$

que é a equação de Schrödinger dependente do tempo para um estado ket arbitrário.

A equação (3.14) pode ser demonstrada fazendo-se uma expansão em série infinita[22] do operador de evolução temporal, tal que:

Sabendo que

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

Então temos para

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$$

que:

$$U(t, t_0) = 1 - i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t - t_0) + \left[\frac{(-i)^2}{2} \left(\frac{\hat{H}(t - t_0)}{\hbar} \right)^2 \right] + \dots \quad (3.17)$$

Agora tomando a derivada temporal[8] de $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$ temos que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right] = -i \frac{\hat{H}}{\hbar} + \left[(-i)^2 \left(\frac{\hat{H}}{\hbar} \right)^2 (t - t_0) \right] + \dots \quad (3.18)$$

agora multiplicando os dois lados da igualdade por $i\hbar$, temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right] = \hat{H} \left[1 - \frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right] + \dots \quad (3.19)$$

assim, substituindo $U(t, t_0)$ que agora aparece nas duas formas, exponencial e expandido, temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \hat{H} U(t, t_0) \quad (3.20)$$

que é exatamente a equação (3.14).

Quando um operador \hat{A} comuta com o operador hamiltoniano \hat{H} , de forma que os autokets de \hat{A} são também autokets de \hat{H} , chamados de *autokets de energia*, cujos autovalores são denotados por $E_{a'}$:

$$\hat{H} |a' \rangle = E_{a'} |a' \rangle \quad (3.21)$$

Podemos expandir o operador de evolução temporal $U(t, t_0)$ em termos dos autokets $|a' \rangle$, através do emprego do operador de projeção[21], dado por $|a' \rangle \langle a'|$ que obedece

a relação de completeza da mecânica quântica. Portanto tomando $t_0 = 0$, temos que:

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |a'\rangle \langle a'| \\ \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) |a'\rangle \langle a'| \\ \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) |a''\rangle \langle a''| a'\rangle \langle a'| \end{aligned}$$

onde $\langle a''|a'\rangle = \delta_{a'a''}$, assim:

$$\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{a'} \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) |a'\rangle \langle a'| \quad (3.22)$$

O operador de evolução temporal escrito dessa forma nos permite resolver qualquer problema de valor inicial, uma vez que a expansão do ket inicial em termos de $|a'\rangle$ é conhecida. Exemplo: Suponha que a expansão do ket inicial seja

$$|\Psi, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \Psi, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (3.23)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} |\Psi, t_0 = 0; t\rangle &= \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |\Psi, t_0 = 0\rangle \\ |\Psi, t_0 = 0; t\rangle &= \sum_{a'} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) |a'\rangle \langle a'| \Psi, t_0\rangle \\ |\Psi, t_0 = 0; t\rangle &= \sum_{a'} \sum_{a''} \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) |a''\rangle \langle a''| a'\rangle \langle a'| \Psi, t_0\rangle \\ |\Psi, t_0 = 0; t\rangle &= \sum_{a'} c_{a'}(t) |a'\rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Neste caso, observamos que o coeficiente de expansão varia com o tempo, tal que:

$$c_{a'}(t) = c_{a'}(t=0) \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right), \quad (3.25)$$

com seu módulo inalterado. Note que as fases relativas entre as várias componentes variam com o tempo porque as frequências de oscilações, $E_{a'}/\hbar$, são diferentes.

Quando o estado inicial é um dos $\{|a'\rangle\}$, ou seja, temos $|\Psi, t_0 = 0\rangle = |a'\rangle$, podemos escrever para tempos futuros que:

$$|\Psi = a', t_0 = 0; t\rangle = |a'\rangle \exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right). \quad (3.26)$$

Quando o operador hamiltoniano depende do tempo, mas comuta entre si para tempos distintos, ou seja, $\hat{H}(t)$ comuta com $\hat{H}(t')$, o operador de evolução temporal[23] pode ser escrito como:

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]. \quad (3.27)$$

Quando o operador hamiltoniano depende do tempo, mas, ao contrário do caso anterior, não comuta entre si em tempos distintos, escreveremos o operador de evolução temporal com uma série, tal que:

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n), \quad (3.28)$$

que é chamada de série de Dyson[21], em homenagem ao seu criador.

Agora voltando ao caso do operador hamiltoniano \hat{H} independente do tempo, podemos calcular $U(t, t_0)$ em termos dos autokets de \hat{H} , tal que:

$$U(t, t_0 = 0) = \sum |a'' \rangle \langle a'' | e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |a' \rangle \langle a' | \quad (3.29)$$

neste caso o espectro é discreto (autokets de energia). E como,

$$\langle a'' | e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |a' \rangle = \delta_{a'' a'} e^{-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}} \quad (3.30)$$

temos então, que:

$$U(t, t_0 = 0) = \sum e^{-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}} |a' \rangle \langle a' | \quad (3.31)$$

Considerando-se agora o espaço de configurações onde temos $\vec{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_j)$, sendo j o número de graus de liberdade do sistema, podemos descrever o estado inicial como $|\vec{q}_0 \rangle$. Com isso a probabilidade de encontrarmos uma partícula no estado $|\vec{q} \rangle$ será dada por:

$$P(\vec{q}, \vec{q}_0; t) = | \langle \vec{q} | U(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle |^2 = |K(\vec{q}, \vec{q}_0; t)|^2 \quad (3.32)$$

onde,

$$K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, 0) = \langle \vec{q} | U(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle \quad (3.33)$$

Definido dessa forma, veremos mais adiante que o kernel (núcleo) K é um propagador[21] do sistema, passando-o do estado inicial $|\vec{q}_0 \rangle$ no instante t_0 para o estado posterior $|\vec{q} \rangle$ no instante posterior $t > t_0$, logo percebe-se que o kernel (núcleo) K representa uma amplitude de probabilidade para o estado ket inicial $|\vec{q}_0 \rangle$ avançar ao estado ket posterior $|\vec{q} \rangle$. Podemos também representar o kernel (núcleo) K em termos dos autokets $|a' \rangle$, basta que tomemos o operador de evolução temporal da equação (3.31) substituindo-o na

equação (3.33), o que nos dá:

$$K(\vec{q}, t; \vec{q}_0, 0) = \sum_n \Psi_{a'}(\vec{q}) \Psi^*(\vec{q}_0) e^{-\frac{iE_{a'} t}{\hbar}} \quad (3.34)$$

onde temos que:

$$\Psi_{a'}(\vec{q}) = \langle \vec{q} | a' \rangle \quad (3.35)$$

3.2 O propagador na mecânica quântica

3.2.1 A origem do propagador

Como vimos na seção anterior podemos solucionar o problema da evolução temporal do sistema com um operador hamiltoniano \hat{H} independente do tempo através da expansão do estado ket inicial em termos dos autokets de um operador \hat{A} que comute com \hat{H} , de modo que:

$$\begin{aligned} |\Psi, t_0; t \rangle &= \exp \left[-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} \right] |\Psi, t_0 \rangle \\ |\Psi, t_0; t \rangle &= |a' \rangle \langle a' | \Psi, t_0 \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right], \end{aligned} \quad (3.36)$$

multiplicando ambos os lados da igualdade, pela esquerda, por $\langle x' |$ temos:

$$\langle x' | \Psi, t_0; t \rangle = \sum_{a'} \langle x' | a' \rangle \langle a' | \Psi, t_0 \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right], \quad (3.37)$$

que pode ser expresso por:

$$\Psi(x', t) = \sum_a' c_a'(t_0) u_a'(x') \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right], \quad (3.38)$$

com

$$u_a'(x') = \langle x' | a' \rangle,$$

sendo a autofunção de \hat{A} com autovalor a' .

Podemos ainda calcular os coeficientes de expansão $c_{a'}$, tal que:

$$\langle a' | \Psi, t_0 \rangle = \int dx' \langle a' | x' \rangle \langle x' | \Psi, t_0 \rangle, \quad (3.39)$$

onde $\langle a' | \Psi, t_0 \rangle = c_{a'}$, tal que:

$$c_{a'}(t_0) = \int dx' u_{a'}^*(x') \Psi(x', t_0). \quad (3.40)$$

Agora, podemos calcular a equação (3.37) utilizando a equação (3.39), onde veremos que aparece um operador na forma de uma integral atuando na função de onda inicial ou ket inicial, tal que:

$$\begin{aligned}\Psi(x'', t) &= \sum_a' \langle x'' | a' \rangle \left(\int dx' \langle a' | x' \rangle \langle x' | \Psi, t_0 \rangle \right) \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right] \\ \Psi(x'', t) &= \int dx' \sum_a' \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right] \langle x' | \Psi, t_0 \rangle \\ \Psi(x'', t) &= \int dx' \left\{ \sum_a' \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right] \right\} \Psi(x', t_0)\end{aligned}$$

onde podemos reescrever como,

$$\Psi(x'', t) = \int dx' K(x'', t; x', t_0) \Psi(x', t_0), \quad (3.41)$$

vemos aqui que o kernel K surge, naturalmente, como o núcleo do operador integral, sendo o referido núcleo o nosso *propagador quântico*, que é dado por:

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{a'} \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right] \quad (3.42)$$

3.2.2 Propriedades do propagador

O propagador apresenta algumas características importantes das quais discutiremos abaixo:

- Para um instante $t > t_0$, $K(x'', t; x', t_0)$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo nas variáveis x'' e t , com x' e t_0 fixos.

Demonstração: A partir da equação (3.42),

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{a'} |a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right] \quad (3.43)$$

que pode ser escrita como,

$$\begin{aligned}K(x'', t; x', t_0) &= \sum_{a'} \left\{ \exp \left[\frac{iE_{a'} t_0}{\hbar} \right] u_{a'}^*(x') \right\} \exp \left[-\frac{iE_{a'} t}{\hbar} \right] u_{a'}^*(x'') \\ &= \sum_{a'} u_{a'}^*(x', t_0) u_{a'}(x'', t)\end{aligned} \quad (3.44)$$

como $u_{a'}(x'', t)$ satisfaz a equação de onda de Schrödinger, uma combinação linear, desde que x' e t_0 sejam fixos, também satisfaz. Portanto, K também satisfaz essa equação de onda.

- O limite de $K(x'', t; x', t_0)$ quando $t \rightarrow t_0$ será:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x'', t; x', t_0) = \delta^3(x'' - x')$$

Demonstração: Usando a relação de completeza da mecânica quântica para os autokets $|a'\rangle$ na equação

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{a'} \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right]$$

reduzimos a

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{a'} \langle x'' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right]$$

e agora usando a propriedade ortogonal dos $\{|x'\rangle\}$, temos:

$$K(x'', t; x', t_0) = \delta^3(x'' - x') \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (3.45)$$

agora tomando o limite quando $t \rightarrow t_0$ tem-se:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x'', t; x', t_0) = \delta^3(x'' - x'). \quad (3.46)$$

Devido a essas duas propriedades o propagador, quando considerado como função de x'' é simplesmente a função de onda, no instante t , de uma partícula que estava precisamente localizada no ponto x' num instante inicial t_0 . De fato, esta interpretação segue da observação que a equação (3.42) também pode ser escrita como:

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'' | \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] | x' \rangle, \quad (3.47)$$

onde o operador de evolução temporal atuando sobre $|x'\rangle$ é justamente o estado ket no instante t de um sistema que estava localizado em x' no instante inicial $t_0 < t$.

Se quisermos resolver um problema mais geral onde a função de onda não está localizada, mas distribui-se numa determinada região finita, devemos multiplicar a função de onda $\Psi(x', t')$ pelo propagador $K(x'', t; x', t_0)$ e integrar sobre todo o espaço de x' , tal que:

$$\Psi(x'', t) = \int d^3x' K(x'', t; x', t_0) \Psi(x', t_0) \quad (3.48)$$

3.2.3 O propagador como uma função de Green

Nesta seção não discutiremos os métodos de resolução da função de Green ou suas diversas aplicações na física e na matemática. O que mostraremos aqui será como a função de Green está relacionada com o propagador em mecânica quântica.

A função de Green[20] surge com a derivação de um potencial eletrostático no interior de uma região fechada no espaço em termos de seu valor na superfície da região. Daí, pode-se generalizar o conceito da função de Green para identificar uma classe de soluções de equações diferenciais não homogêneas com fontes pontuais.

As soluções das equações diferenciais não homogêneas com outros tipos de fontes podem ser determinadas uma vez que sejam conhecidas as soluções com fontes pontuais, com as mesmas condições de contorno impostas a equação original.

Em mecânica ondulatória a evolução temporal de uma frente de onda pode ser determinada uma vez que for conhecida a função de Green independente do tempo que satisfaz as condições de contorno impostas ao problema.

Se a função de onda é conhecida num particular instante t_0 num ponto \vec{x}_0 do espaço, então a função de onda num instante $t > t_0$ num ponto \vec{x} é dada por:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int dx_0 G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) \Psi(\vec{x}_0, t_0) \quad (3.49)$$

sendo $G(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$ a função de Green, que nesse caso é chamada de propagador. Observe-se a semelhança da equação (3.48) com a equação (3.49).

A função de Green descreve a influência da função em \vec{x}_0 no instante t_0 sobre a função em \vec{x} no instante $t > t_0$.

O propagador pode ser considerado como uma função de Green para a equação de onda dependente do tempo:

$$\left[- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla''^2 + V(x'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(x'', t; x', t_0) = -i\hbar \delta^3(x'' - x') \delta(t - t_0) \quad (3.50)$$

com a condição de contorno,

$$K(x'', t; x', t_0) = 0, \quad t < t_0$$

logo temos que o propagador vai depender do tipo de potencial a qual o sistema será submetido.

3.3 O propagador como amplitude de probabilidade

A mecânica quântica difere da mecânica clássica, dentre outros aspectos físicos, pelo fato de se trabalhar com probabilidades, obviamente que isso está relacionado com os seus postulados e com o princípio da incerteza de Heisenberg, e portanto não podemos medir certas quantidades físicas que só existem no plano complexo como a *função de onda*, que pode ser entendida como uma representação matemática abstrata do estado do sistema. Ela somente tem significado no contexto da teoria quântica. A partir da interpretação estatística de Max Born que quantidades físicas como a *função de onda* passaram a fazer sentido no nosso mundo real.

Na representação de Schrödinger da mecânica quântica e, utilizando a notação de Dirac[17], podemos definir a função de onda como o produto interno de um bra $\langle x' |$ fixo com um ket $|\alpha, t_0; t \rangle$ que evolui com o tempo, tal que:

$$\Psi_\alpha(x', t) = \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle$$

Podemos também defini-la na representação de Heisenberg como o produto interno de um bra de posição $\langle x', t |$ movendo no tempo em sentido oposto com um ket $|\alpha, t_0 \rangle$ fixo no tempo, tal que:

$$\Psi_\alpha(x', t) = \langle x', t | \alpha, t_0 \rangle$$

Da mesma forma, podemos definir o propagador na mecânica quântica, utilizando a ideia dos produtos internos e a relação de completeza da teoria quântica, de forma que:

$$\begin{aligned} K(x'', t; x', t_0) &= \sum_{a'} \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle \exp \left[-\frac{iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \\ K(x'', t; x', t_0) &= \sum_{a'} \langle x'' | \exp \left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar} \right) | a' \rangle \langle a' | \exp \left(\frac{iE_{a'}t_0}{\hbar} \right) | x' \rangle \\ K(x'', t; x', t_0) &= \langle x'', t | x', t_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.51)$$

onde $|x', t_0 \rangle$ e $\langle x'', t |$ são, respectivamente, o autoket e o autobra do operador na representação de Heisenberg.

Na representação de Heisenberg, o produto interno dado por $\langle b', t | a' \rangle$ representa a amplitude de probabilidade de um sistema, inicialmente preparado no estado ket de um operador \hat{A} com autovalor a' num instante inicial t_0 , ser encontrado num instante posterior t no estado ket do operador \hat{B} com autovalor b' , que se denominou de amplitude transição para ir do estado ket $|a' \rangle$ para o estado ket $|b' \rangle$.

Agora podemos buscar uma analogia com a expressão que surge para o propagador,

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'', t | x', t_0 \rangle$$

onde a diferença entre esse produto interno e o anterior está no fato do instante inicial $t_0 = 0$, todavia no caso do propagador estamos interessado na diferença $t - t_0$. Portanto, podemos identificar $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ como sendo a probabilidade da partícula inicialmente preparada no instante t_0 com o autovalor da posição x' ser encontrada num instante posterior t com autovalor da posição x'' . Então, em resumo, o propagador $K(x'', t; x', t_0)$ é amplitude de probabilidade para uma partícula ir de um estado localizado num ponto do espaço-tempo (x', t_0) para um outro ponto do espaço-tempo (x'', t) .

Uma outra forma de interpretar o propagador para a representação de Heisenberg, cujo o estado não evolui com o tempo e a base (auto estados do operador) evolui, onde $|x', t_0 \rangle$ é um autoket da posição no instante t_0 com o seu autovalor x' . Como podemos escolher num instante qualquer os autokets de operador (observável) como kets de base, então

$$\langle x'', t | x', t_0 \rangle$$

pode ser considerado uma transformação que faz a conexão entre os dois auto estados (bases) em tempos distintos.

Usando uma notação mais simétrica para os autokets de posição na representação de Heisenberg, que formam um conjunto completo em qualquer instante arbitrário. Podemos definir o operador identidade como:

$$\int d^3x'' |x'', t'' \rangle \langle x'', t''| = 1. \quad (3.52)$$

Agora, podemos usar o operador identidade para escrever a evolução temporal de um sistema quântico do instante t' para o instante t''' . Para isso, podemos dividir o intervalo (t', t''') em dois intervalos menores (t', t'') e (t'', t''') . Assim,

$$\langle x''', t''' | x', t' \rangle = \int d^3x'' \langle x''', t''' | x'', t'' \rangle \langle x'', t'' | x', t' \rangle, \quad (3.53)$$

com $t''' > t'' > t'$.

Esta é a propriedade da composição para a amplitude de transição[21].

Podemos dividir o intervalo de tempo em subintervalos cada vez menores na quanti-

dade que desejarmos. Logo:

$$\langle x, t | x', t' \rangle = \int d^3 x''' \int d^3 x'' \langle x'''' , t'''' | x'''' , t'''' \rangle \langle x'''' , t'''' | x'' , t'' \rangle \langle x'' , t'' | x' , t' \rangle \quad (3.54)$$

com $t'''' > t'''' > t'' > t'$, e assim sucessivamente.

E se de algum modo soubéssemos a forma de $\langle x'' , t'' | x' , t' \rangle$ para um intervalo de tempo infinitesimal t' e $t' + dt$, poderíamos obter a amplitude $\langle x'' , t'' | x' , t' \rangle$ para um intervalo de tempo finito compondo amplitudes de transição apropriadas para intervalos de tempo infinitesimais de maneira análoga a equação (3.54). E foi exatamente esse o raciocínio desenvolvido por Richard Feynman que o levou a uma nova formulação para a mecânica quântica, denominada de Integrais de Caminho de Feynman.

4 *Integrais de caminho de Feynman*

4.1 A origem da Integral de Caminho

A proposta de Feynman surgiu a partir de um artigo de Paul Dirac de 1933, *A Lagrangiana na Mecânica Quântica*[11], no qual Dirac mostra que o análogo quântico do *Princípio da Mínima Ação*[10] para uma variável dinâmica que evolui entre os tempos T e t é dado por:

$$(q_t|q_T) = \iint \dots \int (q_t|q_m)dq_m(q_m|q_{m-1})dq_{m-1} \dots (q_2|q_1)dq_1(q_1|q_T) \quad (4.1)$$

onde, na notação utilizada nesse trabalho, $(q_t|q_T)$ equivale a $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ para os tempos $t = t_N$ e $T = t_1$.

Segunda o artigo de Dirac, considerando-se uma sequência de tempos intermediários entre T e t , tal que:

$$T < t_1, t_2 \dots t_{m-1}, t_m < t$$

da qual fazendo-se $t_j - t_{j-1} = \delta t$, isto resulta em

$$(q_{t+\delta t}|q_t) \sim \exp \frac{1}{\hbar} \left[L \left(\frac{q_{t+\delta t} - q_t}{\delta t}, q_{t+\delta t} \right) \delta t \right]$$

Dirac mostra que L é, de fato, a função lagrangiana, usando o princípio da correspondência de Bohr, pois quando $\hbar \rightarrow 0$,

$$\int_{t_m}^t Ldt + \int_{t_{m-1}}^{t_m} Ldt + \dots + \int_{t_1}^{t_2} Ldt + \int_T^{t_1} Ldt = \int_T^t Ldt = S,$$

onde S é a ação clássica do sistema clássico correspondente[10].

Diante das informações contidas no trabalho de Dirac, Feynman passa a analisar o emprego da função lagrangiana nas soluções de problemas em sistemas quânticos e chega a conclusão que não somente

$$(q_{t+\delta t}|q_t) \sim \exp \frac{1}{\hbar} \left[L \left(\frac{q_{t+\delta t} - q_t}{\delta t}, q_{t+\delta t} \right) \delta t \right],$$

mas na verdade, frequentemente, temos que são iguais, tal que:

$$(q_{t+\delta t}|q_t) = \exp \frac{1}{\hbar} \left[L \left(\frac{q_{t+\delta t} - q_t}{\delta t}, q_{t+\delta t} \right) \delta t \right]$$

É importante ressaltar que a diferença entre a mecânica clássica e a mecânica quântica deve-se a associação dos caminhos entre um ponto inicial e um ponto final da trajetória de uma partícula. Enquanto na mecânica clássica esse caminho é único, devido ao princípio da mínima ação, na mecânica quântica todos os caminhos possíveis são considerados. E no limite $\hbar \rightarrow 0$ a mecânica quântica reverte-se na mecânica clássica. Segundo Stephen Hawking[24], *"Feynman desafiou o pressuposto clássico básico de que a partícula possui uma história particular. Em vez disso, ele propôs que as partículas se deslocassem de um local para o outro ao longo de todas as trajetórias possíveis no espaço-tempo (...) Contudo, no dia-a-dia, parece-nos que os objetos seguem uma única trajetória entre sua origem e seu destino final. Isso está de acordo com a idéia das histórias múltiplas de Feynman, porque para objetos grandes, sua regra de atribuir números a cada trajetória, assegura que todas as trajetórias, exceto uma, anulam-se quando suas contribuições se combinam"*.

Adotaremos um tratamento unidimensional para a integração funcional e substituiremos a notação utilizada no capítulo anterior $x \overset{\text{Nvezes}}{\dots}$ por x_N . Agora, com esta notação podemos considerar a amplitude de transição para uma partícula ir do ponto inicial dado por (x_1, t_1) ao ponto final dado por (x_N, t_N) , em que dividiremos o intervalo total entre t_1 e t_N em $N - 1$ partes iguais (fig. 2), tal que:

$$t_j - t_{j-1} = \delta t = \frac{t_N - t_1}{N - 1}$$

onde, explorando a propriedade da composição, temos:

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\quad \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (4.2)$$

que é igual ao propagador $K(x_N, t_N; x_1, t_1)$.

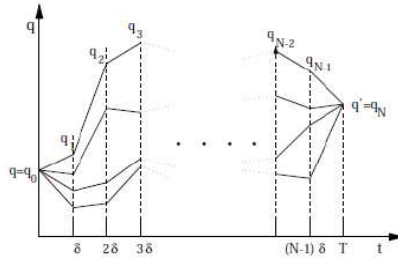


Figura 2: Amplitudes de transição para uma partícula ir de ponto inicial $q = q_0$, num instante inicial $t = 0$, a um ponto final $q = q_{N-1}$, num instante final $t = T$, com intervalos de tempo infinitesimal δt , onde utilizamos coordenadas generalizadas q_i em substituição as coordenadas x_i .

Postulados de Feynman

Lembrando que $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ é a amplitude de probabilidade para a partícula ir de x_1 num instante t_1 a x_N num instante de tempo t_N , temos então que:

✓ $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ é a soma de infinitas amplitudes parciais, sendo uma para cada um dos caminhos que sai de (x_1, t_1) e chega a (x_N, t_N) ;

✓ A amplitude parcial $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle_\Gamma$ associada a um desses caminhos Γ é determinada da seguinte forma: Seja S_Γ a ação clássica calculada ao longo do caminho Γ , tal que

$$S_\Gamma = \int_{(\Gamma)} dt L_{cl}(x, \dot{x})$$

onde L_{cl} é a lagrangiana clássica. Logo, se $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle_\Gamma \sim \exp\left(\frac{iS_\Gamma}{\hbar}\right)$ então,

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \sum_{\Gamma} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle_\Gamma \sim \sum_{\Gamma} \exp\left(\frac{iS_\Gamma}{\hbar}\right)$$

4.2 A relação com a equação de Schrödinger

Em sua tese[10], Feynman estabelece uma expressão genérica para calcular a função de onda a partir da relação proposta por Dirac que envolve a função lagrangiana de um sistema clássico correspondente a um determinado sistema quântico. Para tanto, inserindo uma constante de normalização, A , no limite em que δt se aproxima de zero, com $\sqrt{g(q)}dq$ sendo o elemento de volume no espaço- q , temos que:

$$\begin{aligned} \Psi(q'_{t+\delta t}, t + \delta t) &= \int (q'_{t+\delta t} | q'_t) \Psi(q'_t, t) \sqrt{g(q'_t)} dq'_t \\ &= \int e^{\frac{i\delta t}{\hbar} L\left(\frac{q'_{t+\delta t} - q'_t}{\delta t}, q'_{t+\delta t}\right)} \Psi(q'_t, t) \frac{\sqrt{g} dq'}{A(\delta t)} \end{aligned} \quad (4.3)$$

portanto, essa expressão serve para qualquer função de onda como a da equação de Schrödinger, e de fato é equivalente a essa equação se a constante de normalização $A(\delta t)$, uma função de δt , for escolhida adequadamente. Para ver como isso acontece, tomamos o caso mais simples de uma partícula de massa m movendo-se em uma dimensão em um campo de força dado pelo potencial $V(x)$. Assim, a função lagrangiana clássica é $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$, onde substituiremos $\delta t \rightarrow \varepsilon$, para ε infinitesimal, tal que a equação será dada por:

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x-y}{\varepsilon} \right)^2 - V(x) \right\}} \Psi(y, t) \frac{dy}{A} \quad (4.4)$$

Agora, substituindo $y = \eta + x$ na integral, temos:

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m\eta^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x) \right\}} \Psi(x + \eta, t) \frac{d\eta}{A} \quad (4.5)$$

Somente os valores de η próximo de zero irão contribuir para a integral, uma vez que, para ε pequeno, outros valores de η fazem a exponencial oscilar tão rapidamente que surgiriam pequenas contribuições para a integral. Somos, portanto, levados a expandir $\Psi(x + \eta, t)$ numa série de Taylor em torno de $\eta = 0$, obtendo, depois de reorganizar a integral:

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \frac{e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x)}}{A} \int e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\varepsilon} \eta^2} \left[\Psi(x, t) + \eta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \dots \right] d\eta. \quad (4.6)$$

Agora, $\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\varepsilon} \eta^2} d\eta = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}}$ (ver Pierces integral tables 487), e fazendo a diferenciação de ambos os lados com respeito a m , pode-se mostrar que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\varepsilon} \eta^2} d\eta = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}} \frac{\hbar\varepsilon i}{m}. \quad (4.7)$$

entretanto, a integral com η no integrando é zero, uma vez que é a integral de uma função ímpar. Portanto,

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \frac{\sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}}}{A} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x)} \left\{ \Psi(x, t) + \frac{\hbar\varepsilon i}{m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + O(\varepsilon^2) \right\} \quad (4.8)$$

analisando a equação (4.8) verifica-se que quando $\varepsilon \rightarrow 0$ devemos ter $\Psi(x, t + \varepsilon) \rightarrow \Psi(x, t)$, mas para que isso seja verdade devemos ter $A(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m}}$. Isso deve-se ao fato de que a medida de integração no espaço complexo das trajetórias possíveis para a partícula não é positivo-definida.

Expandindo-se ambos os lados da equação (4.8) em termos de potência de ε em primeira ordem, encontramos:

$$\Psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \Psi(x, t) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) + \frac{\hbar\varepsilon i}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}, \quad (4.9)$$

e portanto,

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (4.10)$$

que é a equação de Schrödinger para o sistema em questão.

4.3 Analogia com a Integral de Riemann

Sabemos que na mecânica clássica o que importa é o particular valor da trajetória num extremo (mínimo) que contribui para a ação clássica, agora a ideia é somar todas as contribuições de cada trajetória que contribui para a amplitude total de probabilidades para uma partícula ir de um ponto x_0 ao ponto x_N . Cada trajetória particular apresenta uma fase de contribuição que é a ação S própria a essa trajetória, dada em unidades de quantum de ação \hbar .

$$K(b, a) = \sum_{\text{traj. } a \rightarrow b} \phi[x(t)] \quad (4.11)$$

A contribuição de uma trajetória que possui uma fase proporcional à ação S é dada por $\phi[x(t)] = A \exp\{iS[x(t)]/\hbar\}$, onde esta ação é a do sistema clássico correspondente. Aqui vemos que surge uma constante A que será calculada de forma que se possa normalizar $K(b, a)$.

Em seu livro sobre Integrais de Caminho[15], Feynman parte da definição da Integral de Riemann, conforme ilustração abaixo (fig. 2), onde uma área A sob uma curva dada por uma função $f(x)$ é, aproximadamente, a soma de todas as ordenadas da função tal que

$$A \sim \sum_i f(x_i),$$

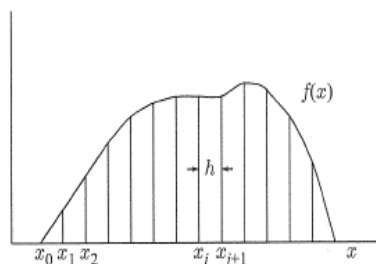


Figura 3: Integral de Riemann sob uma curva $f(x)$ e sobre o eixo das abcissas x , com espaçamento h entre x_i e x_{i+1} .

onde a soma é calculada sobre o conjunto de pontos $\{x_0, x_1, \dots, x_i, x_{i+1}, \dots\}$, e temos

que $(x_{i+1} - x_i) = h$. Agora tomando o limite quando h tende a 0 e calculando A para esse passo h constante, temos que:

$$A = \lim_{h \rightarrow 0} \left(h \sum_i f(x_i) \right). \quad (4.12)$$

Agora, de forma análoga a integral de Riemann podemos definir a soma sobre todas as trajetórias possíveis para uma partícula ir de ponto x_0 num instante t_0 ao ponto futuro x_N num instante futuro t_N . Inicialmente tomamos um subconjunto de trajetórias e dividimos o tempo em subintervalos igualmente espaçados, tal que a diferença entre dois instantes subsequentes será ε . A cada tempo t_i selecionamos especialmente um ponto x_i , e em seguida construímos uma trajetória, interligando todos esses pontos selecionados através de segmentos de linhas retas. É possível então definir uma soma sobre todas as trajetórias assim construídas, tomando uma integral múltipla sobre todos os valores x_i , com i variando entre 1 e $N - 1$, de tal forma que

$$N\varepsilon = t_b - t_a, \quad \varepsilon = t_{i+1} - t_i, \quad t_0 = t_a, \quad t_N = t_b, \quad x_0 = x_a, \quad x_N = x_b.$$

A equação será

$$K(b, a) \sim \iint \dots \int \phi[x(t)] dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}. \quad (4.13)$$

Os extremos x_0 e x_N não fazem parte da soma, por se tratarem das extremidades fixas x_a e x_b .

Agora analisando o caso em que a lagrangiana é dada por $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$. Como já vimos na seção 4.2 o fator de normalização para este caso será A^{-N} , onde $A = (2\pi i\hbar\varepsilon/m)^{1/2}$. Então, podemos escrever:

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \iint \dots \int \exp[(iS[b, a])/\hbar] \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A}, \quad (4.14)$$

onde a ação $S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt$ ao longo do caminho dado pelos pontos x_i é a integral de linha executada sobre a trajetória poligonal composta pelos segmentos de reta que conectam todas os pontos x_i . A figura 3 ilustra o limite dado na equação (4.14).

Também podemos escrever a soma sobre todas as trajetórias, agora usando uma notação mais compacta, tal que,

$$K(b, a) = \int_a^b \exp \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \right) S[b, a] \right\} D[x(t)], \quad (4.15)$$

que será denominada de *kernel*(núcleo) da integral de caminho, simplificada pela notação

$D[x(t)]$ que representa a medida de integração adequada, tal que,

$$D[x(t)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{A^N} \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right]$$

A equação (4.15) é conhecida como a *Integral de Caminho de Feynman*[15].

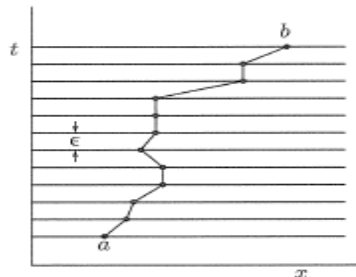


Figura 4: A soma sobre todos os caminhos é definido como um limite, em que a princípio o caminho é especificado, dado apenas pela sua coordenada x num número grande de tempos especificados separados por intervalos muito pequenos ε . A soma dos caminhos é, então, uma integral sobre todas essas coordenadas específicas.

4.4 As regras para dois eventos sucessivos

Para dois eventos em sucessão, analisaremos o caso de um ponto x_c , dado num instante t_c , localizado entre os pontos x_a e x_b , em que a ação para o cálculo da trajetória será determinada pela soma das ações dos dois eventos ocorridos entre o instante inicial t_a e o instante final t_b , tal que:

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a] \quad (4.16)$$

Agora substituindo a equação (4.16) na equação (4.15), podemos escrever o propagador (kernel) como:

$$K(b, a) = \int \exp \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \right) S[b, c] + \left(\frac{i}{\hbar} \right) S[c, a] \right\} D[x(t)]. \quad (4.17)$$

portanto, a trajetória inicial pode ser dividida em duas partes, sendo que a primeira parte terá como extremidades os pontos x_a e x_c , enquanto a segunda terá como extremidades os pontos x_c e x_b . Para obtermos a amplitude total devemos integrar sobre todos os caminhos(trajetórias) de a para c e em seguida de c para b , e finalmente integrar sobre todos os valores possíveis de x_c , num instante t_c .

Assim teremos a amplitude total calculada entre os instantes t_a e t_b , passando pelo

instante t_c . Podemos representar o propagador[15] por:

$$K(b, a) = \int_{x_c} K(b, c)K(c, a)dx_c. \quad (4.18)$$

onde temos que esse resultado pode ser resumido pelas seguintes regras:

1. O *propagador* para uma partícula ir de um ponto a para um ponto b será dado pela soma de todas as amplitudes de probabilidade de a para c e de c para b , sobre todos os valores possíveis de x_c ;
2. A amplitude de probabilidade total para a partícula ir de a para c e em seguida de c para b será obtida multiplicando-se o propagador de a para c , $K(c, a)$, pelo propagador de c para b , $K(b, c)$. A figura 3, ilustra as trajetórias para dois eventos sucessivos.

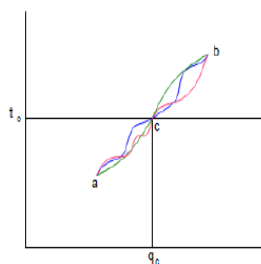


Figura 5: Amplitudes de probabilidades para dois eventos sucessivos partindo de um ponto a para um ponto intermediário c , em seguida para o ponto b .

4.5 As regras para vários eventos sucessivos

Agora que sabemos quais as regras para dois eventos sucessivos podemos verificar quais são as regras para N eventos sucessivos. Para tanto será necessário ampliarmos o conceito que vimos na seção anterior.

Iniciaremos buscando uma expressão para o propagador de uma partícula que vai de um ponto a para um ponto b , mas agora passa por dois pontos intermediários, primeiro c , e em seguida d . Logo, pelo que vimos na seção anterior, temos que esse propagador será dado por:

$$K(b, a) = \int_{x_c} \int_{x_d} K(b, d)K(d, c)K(c, a)dx_c dx_d. \quad (4.19)$$

Observe-se que a partícula, inicialmente, vai de a para c , depois de c para d e por último vai de d para b , integrando-se sobre todos os valores de x_c e x_d .

Para estendermos para N eventos, basta inserir $N - 1$ intervalos, entre os pontos

inicial a e final b , no qual teríamos para o propagador a seguinte expressão:

$$K(b, a) = \int_{x_1} \int_{x_2} \int_{x_{N-1}} K(b, N-1)K(N-1, N-2) \dots K(1, a) dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}, \quad (4.20)$$

onde verificamos que as amplitudes para eventos que ocorrem em sucessão com a evolução temporal multiplicam-se, sendo portanto, uma extensão das regras para dois eventos sucessivos.

5 O Oscilador Harmônico

Utilizaremos aqui os resultados obtidos por Hagen Kleinert[23] na solução do Oscilador Harmônico por Integrais de Caminho de Feynman.

5.1 Oscilador Harmônico Simples

A lagrangiana para o Oscilador Harmônico em uma dimensão é dada por:

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}\mu\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2. \quad (5.1)$$

Da equação de Euler-Lagrange, temos:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \omega^2x = 0 \quad (5.2)$$

cuja solução é dada por,

$$x(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t. \quad (5.3)$$

Aplicando as condições de contorno, $t = 0$ e $t = T$,

$$x(t = 0) = x_0 = A \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} x(t = T) = x_T &= x_0\cos\omega T + B\sin\omega T \\ \Rightarrow B &= \frac{x_T - x_0\cos\omega T}{\sin\omega T}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Assim,

$$x(t) = \frac{x_T\sin\omega t + x_0\sin\omega(T - t)}{\sin\omega T} \quad (5.6)$$

$$\dot{x}(t) = \frac{x_T\omega\cos\omega t - x_0\omega\cos\omega(T - t)}{\sin\omega T} \quad (5.7)$$

Então,

$$\begin{aligned}
S_{cl} &= \int_0^T dt L(x, \dot{x}) = \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} \mu \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right) \\
&= \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} \mu \frac{d}{dt} (x\dot{x}) - \frac{1}{2} \mu x \ddot{x} - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right] \\
&= -\frac{1}{2} \mu \int_0^T dt x [\ddot{x} + \omega^2 x] + \frac{\mu}{2} x \dot{x} \Big|_0^T
\end{aligned} \tag{5.8}$$

mas $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$, logo:

$$\begin{aligned}
&= \frac{\mu}{2} [x(T)\dot{x}(T) - x(0)\dot{x}(0)] \\
&= \frac{\mu}{2} \left[\frac{x_T \omega}{\text{sen} \omega T} (x_T \cos \omega T - x_0) - \frac{x_0 \omega}{\text{sen} \omega T} (x_T - x_0 \cos \omega T) \right] \\
&= \frac{\mu \omega}{2 \text{sen} \omega T} [(x_T^2 + x_0^2) \cos \omega T - 2x_0 x_T]
\end{aligned} \tag{5.9}$$

O fator de flutuação é definido pela parte flutuante da ação,

$$S^{(f)}[X] = \int_0^{T_0} dt \frac{\mu}{2} (\dot{X}^2 - \omega^2 X^2) \tag{5.10}$$

e o cálculo explícito é dado pelas múltiplas integrais de caminho, com N aproximações de infinitesimal de dimensão ε . Então,

$$\phi^N(T) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \prod_{j=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar \varepsilon}} dX_j \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\mu}{2} \varepsilon \sum_{j,k=0}^{N+1} X_j [-\partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)} - \omega^2]_{jk} X_k \right\} \tag{5.11}$$

Aqui usamos os operadores $\partial^{(\varepsilon)}$ e $\bar{\partial}^{(\varepsilon)}$ definidos por

$$\partial^{(\varepsilon)} x(t) \equiv \frac{1}{\varepsilon} [x(t + \varepsilon) - x(t)] \tag{5.12}$$

$$\bar{\partial}^{(\varepsilon)} x(t) \equiv \frac{1}{\varepsilon} [x(t) - x(t - \varepsilon)] \tag{5.13}$$

no limite contínuo, temos:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \partial^{(\varepsilon)} x(t), \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x(t) \rightarrow \partial_t. \tag{5.14}$$

Então, se esses operadores atuam como funções diferenciáveis

$$\partial^{(\varepsilon)} x_j \equiv \frac{1}{\varepsilon} (x_{j+1} - x_j) \quad 0 \leq j \leq N \tag{5.15}$$

$$\bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j \equiv \frac{1}{\varepsilon}(x_j - x_{j-1}) \quad 1 \leq j \leq N+1 \quad (5.16)$$

Em particular, eles satisfazem a regra de soma por parte, que é análoga a integração por partes,

$$\varepsilon \sum_{j=1}^{N+1} p_j \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j = p_j x_j \Big|_0^{N+1} - \varepsilon \sum_{j=0}^N (\partial^{(\varepsilon)} p_j) x_j. \quad (5.17)$$

Assim, temos alguns casos úteis:

1. Se $x_{N+1} = x_0 = 0$, temos

$$\sum_{j=1}^{N+1} p_j \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j = - \sum_{j=0}^N (\partial^{(\varepsilon)} p_j) x_j.$$

2. Se $p_0 = p_{N+1}$ e $x_0 = x_{N+1}$, temos

$$\sum_{j=1}^{N+1} p_j \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j = - \sum_{j=1}^{N+1} (\partial^{(\varepsilon)} p_j) x_j.$$

Para funções cujos pontos extremos se anulam, dessas relações anteriores temos,

$$\sum_{j=1}^{N+1} \left(\bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j \right)^2 = \sum_{j=1}^{N+1} \left(\partial^{(\varepsilon)} x_j \right)^2 = - \sum_{j=0}^N x_j \partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j. \quad (5.18)$$

que podem ser apresentados como uma matriz-padrão

$$- \sum_{j=0}^N x_j \partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)} x_j = - \sum_{j,k=0}^N x_j (\partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)}) x_k$$

em que a matriz $(N+1) \times (N+1)$, com $\partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)}$, simétrica, é dada por

$$\partial^{(\varepsilon)} \bar{\partial}^{(\varepsilon)} = \bar{\partial}^{(\varepsilon)} \partial^{(\varepsilon)} = \frac{1}{\varepsilon^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

Essa é obviamente a versão da derivada ∂_t^2 no limite contínuo. Usando as componentes

da expansão da integral de Fourier, em que usamos a decomposição,

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} x(\omega), \quad (5.20)$$

vemos facilmente que as componentes de Fourier são autofunções das derivadas discretas,

$$i\partial^{(\varepsilon)} e^{-i\omega t} = \Omega e^{-i\omega t} \quad (5.21)$$

$$i\bar{\partial}^{(\varepsilon)} e^{-i\omega t} = \bar{\Omega} e^{-i\omega t} \quad (5.22)$$

com os respectivos autovalores,

$$\Omega = \frac{1}{\varepsilon} (e^{-i\omega\varepsilon} - 1) \quad (5.23)$$

$$\bar{\Omega} = -\frac{1}{\varepsilon} (e^{i\omega\varepsilon} - 1). \quad (5.24)$$

Está claro que no limite contínuo

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Omega, \bar{\Omega} \rightarrow \omega,$$

isto é, tanto Ω quanto $\bar{\Omega}$ tornam-se autovalores de $i\partial_t$. De (5.23) e (5.24) vemos que $\bar{\Omega} = \Omega^*$, tal que o operador $-\partial^{(\varepsilon)}\bar{\partial}^{(\varepsilon)} = -\bar{\partial}^{(\varepsilon)}\partial^{(\varepsilon)}$ é real e tem valores não negativos,

$$-\partial^{(\varepsilon)}\bar{\partial}^{(\varepsilon)} e^{-i\omega t} = \frac{1}{\varepsilon^2} [2 - 2\cos\omega\varepsilon] e^{-i\omega t} \quad (5.25)$$

ou seja,

$$[2 - 2\cos\omega\varepsilon] \geq 0.$$

Voltemos agora à solução da equação (5.11). Podemos escrever essa equação como,

$$\phi^N(T) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar\varepsilon}} \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar\varepsilon}} da_n \right] \prod_{n=1}^N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\mu}{2} (\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2) a_n^2 \right\}, \quad (5.26)$$

em que a_n são os coeficientes da expansão de Fourier de $X(T)$.

Calculando essa integral, temos uma importante distinção para os autovalores,

$$\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2 = \frac{1}{\varepsilon^2} \left[2 - 2\cos \left(\frac{\pi n}{T} \varepsilon \right) \right] - \omega^2, \quad (5.27)$$

do operador na exponencial do integrando da equação (5.26). Ele poderá ser negativo para casos em que o intervalo de tempo, $T = t - t_0$, seja suficientemente grande.

Primeiro, vamos considerar os autovalores inteiramente positivos. A fórmula gaussiana

nos dá

$$\phi^N(T) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \prod_{n=1}^N \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2(\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2)}}, \quad (5.28)$$

introduzindo uma nova variável para a frequência, $\tilde{\omega}$, que satisfaz

$$\text{sen} \frac{\varepsilon \tilde{\omega}}{2} = \frac{\varepsilon \omega}{2},$$

o produto dos autovalores pode ser decomposto em resultados conhecidos para o fator de flutuação. Assim,

$$\prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\text{sen}^2 b}{\text{sen}^2 \left(\frac{n\pi}{2(N+1)} \right)} \right) = \frac{1}{\text{sen} 2b} \frac{\text{sen}(2(N+1)b)}{(N+1)}, \quad (5.29)$$

naturalmente, usando $b = \frac{\varepsilon \tilde{\omega}}{2}$, temos

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^N \varepsilon^2(\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2) &= \prod_{m=1}^N \varepsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m \prod_{n=1}^N \left[\frac{\varepsilon^2(\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2)}{\varepsilon^2 \Omega_n \bar{\Omega}_n} \right] \\ &= \prod_{m=1}^N \varepsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\text{sen}^2 \frac{\varepsilon \tilde{\omega}}{2}}{\text{sen}^2 \left(\frac{n\pi}{2(N+1)} \right)} \right). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Como resultado, chegamos em

$$\det_N(-\varepsilon^2(\partial^\varepsilon \bar{\partial}^\varepsilon - \omega^2)) = \prod_{n=1}^N \varepsilon^2(\Omega_n \bar{\Omega}_n - \omega^2) = \frac{\text{sen} \tilde{\omega} T}{\text{sen} \varepsilon \tilde{\omega}}, \quad (5.31)$$

e o fator flutuante total será

$$\phi^N(T) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar}} \sqrt{\frac{\text{sen} \varepsilon \tilde{\omega}}{\varepsilon \text{sen} \tilde{\omega} T}}. \quad (5.32)$$

Esse resultado é válido para autovalores positivos, em particular para o intervalo de tempo que satisfaz

$$T = (t - t_0) < \frac{\pi}{\tilde{\omega}}.$$

Se o intervalo de tempo $T = t - t_0$ aumentar e ficar maior que $\frac{\pi}{\tilde{\omega}}$, o menor autovalor $\Omega_1 \bar{\Omega}_1 - \omega^2$ se torna negativo e a amplitude resultante carregará um fator de fase extra $e^{-i\frac{\pi}{2}}$ que será válido até $T = t - t_0$ tornar-se maior que $\frac{2\pi}{\tilde{\omega}}$, em que o segundo autovalor se torna negativo também e é necessário a introdução de um outro fator de fase $e^{-i\frac{\pi}{2}}$, e assim por diante.

No limite contínuo $\varepsilon \rightarrow 0$, o fator de flutuação será então

$$\phi^N(T) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar}} \sqrt{\frac{\omega}{\text{sen}\omega T}}. \quad (5.33)$$

Logo o kernel será:

$$\begin{aligned} K(x_T, T; x_0, 0) &= \langle x_T, T | x_0, 0 \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \phi(T) \\ &= \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\pi i\hbar \text{sen}\omega T}} \exp \left\{ \frac{i\mu\omega}{2\hbar \text{sen}\omega T} \left[(x_T^2 + x_0^2) \cos\omega T - 2x_0 x_T \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

que é a expressão da amplitude de evolução temporal para um oscilador harmônico.

Autofunções e Autovalores do Oscilador: para obter os autoestados e autovalores de energia, precisamos reformular o propagador, equação (5.34), de tal forma que permita uma comparação direta com a representação espectral do propagador de Feynman dado por

$$K(x, T; x', 0) = \eta(T) \sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T}, \quad (5.35)$$

em que $\eta(T)$ é a função degrau de Heaviside. Se definirmos a variável $z = e^{-i\omega T}$, podemos escrever,

$$\text{sen}\omega T = \frac{1}{2i} \frac{1 - z^2}{z},$$

e

$$\cos\omega T = \frac{1 + z^2}{2z}.$$

Além disso, definimos $\xi_0 = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} x_0$ e $\xi_T = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} x_T$.

Assim, expressamos o propagador do oscilador harmônico como:

$$\begin{aligned} K(x_T, T; x_0, 0) &= \sqrt{\frac{\mu}{\omega}} z \pi \hbar (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{1 - z^2} \left[2\xi_0 \xi_T z - (\xi_0^2 + \xi_T^2) \left(\frac{1 + z^2}{2} \right) \right] \right\} \\ &= \sqrt{\frac{\mu}{\omega}} z \pi \hbar (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\xi_0^2 + \xi_T^2) \right\} \exp \left\{ \frac{2\xi_0 \xi_T z - (\xi_0^2 + \xi_T^2) z^2}{1 - z^2} \right\}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

em que usamos a identidade

$$\frac{1+z^2}{2(1-z^2)} = \frac{1}{2} + \frac{z^2}{1-z^2}.$$

Agora vamos considerar a fórmula de Mehler

$$(1-z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1-z^2}\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)H_n(y) \frac{z^n}{2^n n!} \quad (|z| < 1). \quad (5.37)$$

Entretanto, devemos tomar algum cuidado ao usar a equação (5.37) na equação (5.36), pois $|z| = 1$ e a fórmula de Mehler requer $|z| < 1$. Esse problema pode ser solucionado se adicionarmos uma parte imaginária em ω , nominalmente, se fizermos $\omega \rightarrow \omega - i\varepsilon$, e após os cálculos a condição de $\varepsilon \rightarrow 0$. Assim, se usarmos a eq. (5.37), a eq. (5.36) terá a forma

$$K(x_T, T; x_0, 0) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(x_T^2 + x_0^2)\right\} \sum_{n=0}^{\infty} H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x_T\right) H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x_0\right) \frac{e^{-i\omega T(n+\frac{1}{2})}}{2^n n!}, \quad (5.38)$$

em que usamos $x = \xi_T = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x_T$ e $y = \xi_0 = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x_0$.

Comparando a eq. (5.38) com a eq. (5.35), a representação espectral, temos:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x\right), \quad (5.39)$$

e

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (5.40)$$

que são os conhecidos resultados para as autofunções (a menos de um fator de fase) e os autovalores de energia do oscilador harmônico.

5.2 Oscilador Harmônico Forçado

A lagrangiana para o Oscilador Harmônico Forçado de massa μ e frequência ω , é dado por

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{x}^2 - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + xf(t), \quad (5.41)$$

em que $f(t)$ representa uma força externa dependente do tempo que pode ser devida a um campo externo como por exemplo, o campo elétrico de acoplamento através da interação de um dipolo a uma partícula carregada.

Podemos escrever o kernel, utilizando a aproximação semiclássica, como

$$K(x_f, t; x_i, 0) = \int D_x e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$$

De acordo com a equação anterior, podemos obter o kernel para todos os caminhos possíveis começando em x_i quando $t = 0$ e terminando em x_f quando $t = t$. É conveniente decompor os caminhos em

$$x(s) = x_{cl}(s) + \xi(s), \quad (5.42)$$

em que s é uma variável auxiliar temporal, onde o caminho clássico $x_{cl}(0) = x_i$, $x_{cl}(t) = x_f$ e uma parte da flutuação quântica ξ desaparece no contorno, isto é, $\xi(0) = \xi(t) = 0$.

O caminho clássico tem que satisfazer a equação de movimento

$$\mu \ddot{x}_{cl} + \mu \omega^2 x_{cl} = f(s), \quad (5.43)$$

que é obtida da lagrangiana.

A ação é dada por

$$S = \int_0^t dt L.$$

Substituindo a lagrangiana na relação acima

$$S = \int_0^t ds \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 + x f(s) \right),$$

e usando a equação (5.42)

$$\begin{aligned} S = \int_0^t ds \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x_{cl}^2 + x_{cl} f(s) \right) + \\ \int_0^t ds \left(\mu \dot{x}_{cl} \dot{\xi} - \mu \omega^2 x_{cl} \xi + \xi f(s) \right) + \\ \int_0^t ds \left(\frac{\mu}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{1}{2} \mu \omega^2 \xi^2 \right). \end{aligned} \quad (5.44)$$

Para o nosso caso, de um potencial harmônico, o terceiro termo é independente do valor de contorno x_i e x_f assim como condições externas. O segundo termo desaparece em consequência da expansão em torno do caminho clássico. Isso pode ser visto pela integração por partes e usando o fato de que x_{cl} é solução da equação de movimento

clássica,

$$\int_0^t ds \left(\mu \dot{x}_{cl} \dot{\xi} - \mu \omega^2 x_{cl} \xi + \xi f(s) \right) = - \int_0^t ds \left(\mu \ddot{x}_{cl} + \mu \omega^2 x_{cl} - f(s) \right) \xi = 0 \quad (5.45)$$

Vamos agora proceder em duas etapas, primeiro determinando a contribuição do caminho clássico e, em seguida, abordando as flutuações quânticas. A solução da equação de movimento clássica que satisfaz às condições de contorno é dada por

$$x_{cl}(s) = x_f \frac{\text{sen} \omega s}{\text{sen} \omega t} + x_i \frac{\text{sen} \omega (t-s)}{\text{sen} \omega t} + \frac{1}{\mu \omega} \left[\int_0^s du \text{sen} \omega (s-u) f(u) - \frac{\text{sen} \omega s}{\text{sen} \omega t} \int_0^t du \text{sen} \omega (t-u) f(u) \right] \quad (5.46)$$

em que u também é uma variável auxiliar temporal.

A ideia de avaliar a ação do caminho clássico pode ser simplificada por uma integração por partes

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_0^t ds \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}_{cl}^2 - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x_{cl}^2 + x_{cl} f(s) \right) \\ &= \frac{\mu}{2} x_{cl} \dot{x}_{cl} \Big|_0^t - \int_0^t ds \left(\frac{\mu}{2} x_{cl} \ddot{x}_{cl} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x_{cl}^2 - x_{cl}^2 f(s) \right) \\ &= \frac{\mu}{2} (x_f \dot{x}_{cl}(t) - x_i \dot{x}_{cl}(0)) + \frac{1}{2} \int_0^t ds x_{cl}(s) f(s), \end{aligned} \quad (5.47)$$

em que usamos a equação de movimento clássica para obter a terceira linha. Da solução, eq. (5.46), temos:

$$\dot{x}_{cl}(0) = \omega \frac{x_f - x_i \cos \omega t}{\text{sen} \omega t} - \frac{1}{\mu \text{sen} \omega t} \int_0^t ds \text{sen} \omega (t-s) f(s) \quad (5.48)$$

$$\dot{x}_{cl}(t) = \omega \frac{x_f \cos \omega t - x_i}{\text{sen} \omega t} + \frac{1}{\mu \text{sen} \omega t} \int_0^t ds \text{sen} \omega s f(s). \quad (5.49)$$

Inserindo as velocidades inicial e final na eq. (5.47), encontramos a ação clássica

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \frac{\mu \omega}{2 \text{sen} \omega t} \left[(x_i^2 + x_f^2) \cos \omega t - 2 x_i x_f \right] + \\ &\frac{x_f}{\text{sen} \omega t} \int_0^t ds \text{sen} \omega s f(s) + \frac{x_i}{\text{sen} \omega t} \int_0^t ds \text{sen} \omega (t-s) f(s) - \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\mu\omega\text{sen}\omega t} \int_0^t ds \int_0^t du \text{sen}\omega u \text{sen}\omega(t-s) f(s) f(u), \quad (5.50)$$

sendo t o tempo necessário para deslocar da posição inicial x_i para a posição final x_f .

Como um segundo passo, temos que calcular a contribuição das flutuações quânticas, que é determinada pelo terceiro termo da eq. (5.44). Depois de uma integração por partes, esse termo fica:

$$S^{(2)} = \int_0^t ds \left(\frac{\mu\dot{\xi}^2}{2} - \frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2 \right) = - \int_0^t ds \frac{\mu}{2} \xi \left(\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2 \right) \xi. \quad (5.51)$$

Aqui, o número (2) acima de S indica que esse termo corresponde a uma contribuição de segunda ordem em ξ . É apropriado expandir a flutuação ξ ,

$$\xi(s) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \xi_n(s), \quad (5.52)$$

em autofunções de

$$\left(\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2 \right) \xi_n = \lambda_n \xi_n \quad (5.53)$$

com $\xi_n(0) = \xi_n(t) = 0$. Como autofunções de um operador autoadjunto, ξ_n , são completos, e podemos também dizer que são ortonormais. Resolvendo a eq. (5.53), temos para as autofunções

$$\xi_n(s) = \sqrt{\frac{2}{t}} \text{sen} \left(\pi n \frac{s}{t} \right) \quad (5.54)$$

e os correspondentes autovalores

$$\lambda_n = - \left(\frac{\pi n}{t} \right)^2 + \omega^2 \quad (5.55)$$

Devemos enfatizar que a (5.52) não é uma série de Fourier usual, em um intervalo t . Uma expansão semelhante pode ser usada na forma

$$\xi(s) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \left(\cos \left(2\pi n \frac{s}{t} \right) - 1 \right) + \text{sen} \left(2\pi n \frac{s}{t} \right) \right], \quad (5.56)$$

que nos garante que as flutuações desaparecem nos contornos. se refizemos as contas substituindo por (5.56), vamos observar que no final encontramos o mesmo propagador.

A integração sobre as flutuações agora se torna uma integração sobre os coeficientes da expansão, a_n . Inserindo a expansão (5.54) na ação, encontramos

$$S^{(2)} = - \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2 = \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\pi n}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2. \quad (5.57)$$

Como esse resultado mostra, a ação clássica é somente um extremo da ação, mas não necessariamente um mínimo, embora este seja o caso para pequenos intervalos de tempo $t < \frac{\pi}{\omega}$. A existência de pontos conjugados nos tempos $T_n = \frac{n\pi}{\omega}$ mostra aqui um desaparecimento do autovalor λ_n . A ação é independente de a_n , o que implica que para um intervalo de tempo T_n todos os caminhos $x_{cl} + a_n \xi_n$ com coeficientes arbitrários a_n são soluções da equação de movimento clássica.

Depois da expansão das flutuações em termos das autofunções (5.54), o propagador tem a forma

$$K(x_f, t; x_i, 0) \approx \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right] \int \left(\prod_{n=1}^{\infty} da_n\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\mu}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n^2\right]. \quad (5.58)$$

Como o determinante de Jacobi é independente da frequência de oscilação, podemos comparar com a partícula livre. Resolvendo as integrais de flutuação gaussianas, encontramos a relação entre os fatores dos propagadores K_ω e K_0 do oscilador harmônico e da partícula livre,

$$\frac{K_\omega e^{-\frac{i}{\hbar} S_{cl,\omega}}}{K_0 e^{-\frac{i}{\hbar} S_{cl,0}}} = \sqrt{\frac{D_0}{D}}. \quad (5.59)$$

Aqui introduzimos o determinante da flutuação para o oscilador harmônico

$$D = \det\left(\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n, \quad (5.60)$$

e o da partícula livre

$$D_0 = \det\left(\frac{d^2}{ds^2}\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \lambda_n^0. \quad (5.61)$$

Os autovalores para a partícula livre

$$\lambda_n^0 = -\left(\frac{\pi n}{t}\right)^2$$

são obtidos dos autovalores do oscilador harmônico colocando a frequência ω igual a zero em (5.55). Usando o fator do propagador de uma partícula livre

$$K_0 e^{-\frac{i}{\hbar} S_{cl,0}} = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar t}} \quad (5.62)$$

e a equação (5.59), o propagador do oscilador harmônico fica

$$K(x_f, t; x_i, 0) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar t}} \sqrt{\frac{D_0}{D}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl,0}}. \quad (5.63)$$

Cada um dos determinantes (5.60) e (5.61) diverge por si só. Entretanto, estamos

interessados na relação entre eles, que é bem definida,

$$\frac{D}{D_0} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{\omega t}{\pi n} \right)^2 \right] = \frac{\text{sen} \omega t}{\omega t}$$

Colocando esse resultado em (5.63), temos a forma final do propagador do oscilador harmônico forçado

$$\begin{aligned} K(x_f, t; x_i, 0) &= \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\pi i \hbar \text{sen} \omega t}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \\ &= \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\pi \hbar |\text{sen} \omega t|}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{cl} - i \left(\frac{\pi}{4} + n \frac{\pi}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.64)$$

com a ação clássica definida em (5.50).

O índice de Morse n no fator de fase é dado pela parte inteira de $\frac{\omega t}{\pi}$. É interessante notar que o fator de fase $e^{-in\frac{\pi}{2}}$ em (5.64) implica que:

$$K \left(x_f, \frac{2\pi}{\omega}; x_i, 0 \right) = K(x_f, 0; x_i, 0) = -\delta(x_f - x_i),$$

ou seja, a função de onda depois de um período de oscilação difere da função de onda original por um fator -1 . O oscilador retorna ao seu estado original somente após dois períodos, sendo portanto parecido com uma partícula de spin $\frac{1}{2}$. Esse efeito pode ser observado no caso do oscilador harmônico deixando interferir as ondas de dois osciladores com frequências diferentes.

Esse resultado tem grande importância em muitos problemas avançados, em especial quando aplicamos em *eletrodinâmica quântica*, devido ao fato do campo eletromagnético poder ser representado como um conjunto de osciladores harmônicos forçados.

6 Conclusões

Analisando os resultados teóricos obtidos na realização deste trabalho, concluímos que através da formulação das integrais de caminho de Feynman encontramos resultados conhecidos da mecânica quântica formulada por Schrödinger e Heisenberg. Enquanto que nas representações de Schrödinger e Heisenberg da mecânica quântica, trabalhamos com operadores que atuam sobre vetores de estado, na representação da integral de caminho Feynman trabalharemos apenas com funções. Todavia, as três formulações (Schrödinger, Heisenberg e Feynman) são equivalentes.

Podemos concluir também que a formulação da mecânica quântica por integrais de caminho de Feynman é uma representação matemática da teoria quântica, que generaliza o princípio de Hamilton, também conhecido como princípio da mínima ação, extendendo-o à mecânica quântica, em que esse formalismo substitui a noção clássica de uma única trajetória, dado pelo princípio da mínima ação, por um funcional integral, sobre o qual podemos ter uma infinidade de trajetórias possíveis para calcular a amplitude de probabilidade do caminho quântico[25].

Durante os cálculos das integrais de caminho nos deparamos com problemas que apresentaram, em sua formulação, algumas classes de integrais gaussianas, sendo que este é o maior desafio na técnica. Na tentativa de solucionar esses problemas buscamos fazer uma aproximação, através de uma expansão em série de Taylor do potencial $V(q, t)$ até segunda ordem, tornando-o equivalente ao potencial de um oscilador harmônico.

A integral de caminho de Feynman reproduz a equação de Schrödinger, as equações do movimento de Heisenberg, e as relações canônicas de comutação e mostra que elas são compatíveis com a relatividade, mas agora a unicidade da teoria quântica já não é tão evidente, porém pode-se verificá-la alterando variáveis para uma representação canônica.

No caso da mecânica quântica não-relativística, o conhecimento das amplitudes de probabilidade dadas pelas integrais de caminho são suficientes na solução dos problemas.

Entretanto, a grande importância dessa formulação da mecânica quântica aparece na Teoria Quântica de Campos, onde as funções de Green são as quantidades que buscamos calcular através de métodos perturbativos e não-perturbativos.

Devido a engenhosidade matemática na solução dos problemas por integrais de caminho de Feynman, geralmente, essa formulação da teoria quântica não é estudada nos cursos de graduação das universidades brasileiras, onde se faz opção pelas formulações de Schrödinger e Heisenberg para a mecânica quântica.

Referências

- [1] EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. [S.l.]: Campus, 1988.
- [2] PLANCK, M. *Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspectrum*. [S.l.]: Annalen der Physik, 1900.
- [3] NUSSENZVEIG, H. *Curso de física básica: ótica, relatividade, física quântica*. [S.l.]: Edgar Blücher, 1998. (Curso de física básica). ISBN 9788521201632.
- [4] EINSTEIN, A. *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*. [S.l.]: Annalen der Physik, 1905.
- [5] BOHR, N. *On the Constitution of Atoms and Molecules*. [S.l.]: Philosophical Magazine, 1913.
- [6] CARUSO, F.; OGURI, V. *Física moderna: origens clássicas e fundamentos quânticos*. [S.l.]: Elsevier, 2006. ISBN 9788535218787.
- [7] HEISENBERG, W. *Über Quantentheoretische Umdeutung Kinematischer Und Mechanischer Beziehungen*. [S.l.]: Zeitschrift für Physik, 1925. ISBN 9781157646723.
- [8] PIZA, A. D. T. *Mecânica Quântica Vol. 51*. [S.l.]: EDUSP, 2003. ISBN 9788531407482.
- [9] SCHRODINGER, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. (Erste Mitteilung.). *Ann. Phys. (Leipzig)*, v. 79, p. 361–376, 1926.
- [10] FEYNMAN, R.; BROWN, L. *Feynman's Thesis: A New Approach to Quantum Theory*. [S.l.]: World Scientific, 1942. ISBN 9789812567635.
- [11] DIRAC, P. A. *The Lagrangian in Quantum Mechanics*. [S.l.]: Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, 1933.
- [12] NETO, J. *Mecânica Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2004. ISBN 9788588325265.
- [13] LIBOFF, R. *Introductory Quantum Mechanics*. [S.l.]: ADDISON WESLEY Publishing Company Incorporated, 2003. ISBN 9780805387148.
- [14] GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. *Classical Mechanics, 3e*. [S.l.]: Addison-Wesley Longman, Incorporated, 2002. ISBN 9780201657029.
- [15] FEYNMAN, R.; HIBBS, A. *Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition*. [S.l.]: Dover Publications, Incorporated, 2012. ISBN 9780486134635.

-
- [16] LEMOS, N. *Mecânica Analítica*. [S.l.]: LIVRARIA DA FISICA, 2007. ISBN 9788588325241.
- [17] GRIFFITHS, D. *Mecânica quântica*. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2011. ISBN 9788576059271.
- [18] COHEN-TANNOUJDI, B. C. *Quantum Mechanics Volume 1*. [S.l.]: Hermann. ISBN 9782705683924.
- [19] MESSIAH, A. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, 1999. (Dover books on physics). ISBN 9780486409245.
- [20] BUTKOV, E. *Física matemática*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 1988. ISBN 9788521611455.
- [21] SAKURAI, J. J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.]: ADDISON WESLEY Publishing Company Incorporated, 2010. ISBN 9780805382914.
- [22] WEBER, H.; ARFKEN, G. *Essential Mathematical Methods for Physicists*. [S.l.]: Academic Press, 2004. ISBN 9780120598779.
- [23] KLEINERT, H. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, and Polymer Physics*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, Incorporated, 1995. ISBN 9789810214722.
- [24] HAWKING, S. *O universo numa casca de noz*. [S.l.]: Arx, 2004. ISBN 9788575810170.
- [25] RODRIGUES, A. F. *A Integral de Feynman: Das origens as teorias de campos a temperaturas finitas*. [S.l.]: CBPF, 2010.