AULA 7

Mecânica Quântica I

AULA 7

V - Integral de Trajetória de Feynman

O conceito de Funcional: Um funcional F de uma função $q(\sigma)$ é um número que depende da forma da função $q(\sigma)$, onde σ é apenas um parâmetro usado para especificar a forma de $q(\sigma)$. Assim

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} q(\sigma)^2 e^{-\sigma^2} d\sigma \quad (1)$$

é um funcional de $q(\sigma)$ pois associa um número com cada escolha da função que, o valor da integral. O valor esperado da energia na M.Q. é um funcional da função de onda, ou ainda

$$F = q(0) \quad (2)$$

é um funcional, especialmente simples, cujo valor depende da função $q(\sigma)$ em um único ponto $\sigma = 0$.

Vamos denotar, se F for um funcional de $q(\sigma)$ como $F[q(\sigma)]$.

Note que um funcional pode ter como argumento mais de uma função, ou funções de mais de um parâmetro. ex: $F[x(t,s), y(t,s)] = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, ds\; x(t,s)\, y(t,s) \sin(t-s)$

Podemos compreender um funcional $F[q(\sigma)]$ como uma função de um número infinito de variáveis, as variáveis sendo os valores da função $q(\sigma)$ em cada ponto σ. Se o intervalo de valores de σ for dividido em um número muito grande de pontos σ_i, e o valor da função nesses pontos $q(\sigma_i) = q_i$, podemos aproximar o funcional no caso de eq (1) por

$$F(\ldots q_i \ldots) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} q_i^2 \, e^{-\sigma_i^2} (\sigma_{i+1} - \sigma_i)$$

Podemos definir um processo análogo da diferenciação para funcionais. Suponha que a função $q(\sigma) \longrightarrow q(\sigma) + \lambda(\sigma)$, $\lambda(\sigma)$ é uma função pequena.

Do ponto de vista aproximado acima podemos falar que cada variável $q_i \rightarrow q_i + \lambda_i$

A função mudou então de

$$\sum_i \frac{\partial F(q \ldots q_i \ldots)}{\partial q_i} \lambda_i$$

No caso de um número de variáveis contínuas, a soma se torna uma integral e até ordem λ podemos escrever

$$F[q(\sigma) + \lambda(\sigma)] - F[q(\sigma)] = \int k(t) \, \lambda(t) \, dt \quad (3)$$

onde $K(t)$ depende de F e é o que chamamos de <u>derivada funcional</u> de F com respeito a q em t

i.e. $\dfrac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)}$

Note que $\dfrac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} \neq \dfrac{\partial F(\ldots q_i \ldots)}{\partial q_i}$ pois $\dfrac{\partial F}{\partial q_i}$ é em geral infinitesimal, $\dfrac{\delta F}{\delta q(t)}$ é uma soma desses $\dfrac{\partial F}{\partial q_i}$ sobre um certo intervalo de i.

Podemos escrever

$$F[q(\sigma)+\lambda(\sigma)] = F[q(\sigma)] + \int \frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} \lambda(t)\, dt$$

$$+ \mathcal{O}(\lambda^2) \qquad (4)$$

Por exemplo, se na eq (1) subst. $q(\sigma) \longrightarrow q(\sigma) + \lambda(\sigma)$

$$F[q+\lambda] = \int [q^2 + 2q\lambda + \lambda^2]\, e^{-\sigma^2} d\sigma$$

$$= \overbrace{\int q^2(\sigma)\, e^{-\sigma^2} d\sigma}^{F[q(\sigma)]} + 2\int q(\sigma)\lambda(\sigma)\, e^{-\sigma^2} d\sigma + \varphi(\lambda^2)$$

$$\therefore \frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} = 2\, q(t)\, e^{-t^2}$$

Outro exemplo: se $F[q(\sigma)] = q(0)$ $\dfrac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} = \delta(t)$

Uma função $q_i(\sigma)$ para a qual $\dfrac{\delta F}{\delta q_i(t)}$ é zero $\forall t$ é uma função para a qual F é um extremo, se $\dfrac{\delta F}{\delta q_i(t)} = 0$ e $\dfrac{\delta^2 F}{\delta q_i(t_1)\,\delta q_j(t_2)} \geqslant 0$ então o extremo é um mínimo

---

Podemos ver o propagador como uma soma coerente de um número infinito de amplitudes sobre todos os caminhos do espaço de configurações $\rightarrow$ tese de 1942 Feynman ("Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics", Rev. Mod. Phys 20 (1948) 367)

Consideraremos aqui a situação simples

$$H(t) = H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x},t) \equiv T(\hat{p}) + V(\hat{x}) \quad (5)$$

$$b \longrightarrow a$$

estamos interessados no propagador $(x_b, t_b) \longrightarrow (x_a, t_a)$

$$K(a,b) = \langle x_a | U(t_a, t_b) | x_b \rangle\, \theta(t_a - t_b) \quad (6)$$

a representação de K por uma integral de trajetória se dá através dos seguintes passos:

(1) quebrar a evolução $b \to a$ em uma seqüência de pequenos passos (κ) de duração τ usando a lei de composição de U;

(2) avaliar cada passo explicitamente

(3) mostrar que a soma desses passos leva a $\sum_P \exp\left(i S_{cl}/\hbar\right)$, onde S_{cl} é a ação clássica para algum caminho P composto de segmentos lineares de $b \to a$.

(4) tomar o limite: $\boxed{\tau \to 0,\ \kappa \to \infty,\ \kappa\tau = t_a - t_b \text{ fixo.}}$
Lim

- κ transf. unitárias no intervalo de $b \to a$

$$K(a,b) = \langle x_a | U(t_a, t_a - \tau) \dots U(t_b + 2\tau, t_b + \tau)$$

$$U(t_b + \tau, t_b) | x_b \rangle \quad (7)$$

$$t_b = t_0 \qquad t_k = t_0 + k\tau \qquad t_a = t_k$$

$$x_b = x_0 \qquad x_a = x_k$$

$$K(a,b) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{k-1}\, dx_{k-2} \dots dx_2\, dx_1 \langle x_k | U(t_k, \overbrace{t_k - \tau}^{t_{k-1}}) | x_{k-1} \rangle$$

$$\langle x_{k-1} | U(\overbrace{t_k - \tau}^{t_{k-1}}, \overbrace{t_k - 2\tau}^{t_{k-2}}) | x_{k-2} \rangle \dots \langle x_2 | U(\overbrace{t_0 + 2\tau}^{t_2}, \overbrace{t_0 + \tau}^{t_1}) | x_1 \rangle$$

$$\langle x_1 | U(\overbrace{t_0 + \tau}^{t_1}, t_0) | x_0 \rangle$$

(5)

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{k+1} \ldots dx_2\, dx_1 \langle x_k | e^{-iH(t_{k-1})\tau/\hbar} | x_{k-1} \rangle \ldots$$

$$\ldots \langle x_2 | e^{-iH(t_1)\tau/\hbar} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH(t_0)\tau/\hbar} | x_0 \rangle \quad (8)$$

<u>Obs</u>: como vamos tomar $\tau \to 0$, o argumento de H em qualquer dos passos pode ser qualquer valor de t dentro do intervalo. Se V não for descontínuo no tempo isso está OK, mas não se V depender da velocidade, não!

$$e^{-i\frac{H\tau}{\hbar}} \simeq e^{-i\frac{T\tau}{\hbar}}\, e^{-i\frac{V\tau}{\hbar}} \quad \text{(desprezando termos de ordem } \tau^2 \text{ e além)}$$

$$e^{A} e^{B} = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}[A,B] + \frac{1}{12}\left([A,[A,B]] - [B,[A,B]]\right) \ldots \right)$$

$$\langle x_{k+1} | e^{-iH(t_k)\tau/\hbar} | x_k \rangle = \boxed{\langle x_{k+1} | e^{-i\frac{T\tau}{\hbar}} | x_k \rangle}\, e^{-iV(x_k t_k)\tau/\hbar}$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}}\, \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{(x_{k+1}-x_k)^2 m}{2\tau} - V(x_k t_k)\tau\right)\right] \quad (9)$$

$$\lim_{\tau \to 0} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau}\right) \longrightarrow \dot{x}(t_k) \quad \text{velocidade nesse passo}$$

$$\lim_{\tau \to 0} \left(\frac{(x_{k+1}-x_k)^2 m}{2\tau^2} - V(x_k, t_k)\right) = \frac{m}{2}[\dot{x}(t_k)]^2 - V(x(t_k), t_k)$$

$$\equiv L(x(t_k), \dot{x}(t_k), t_k)$$

(6)

a soma em k é uma aproximação discreta da integral temporal da Lagrangiana de $b \to a$ sobre um caminho particular

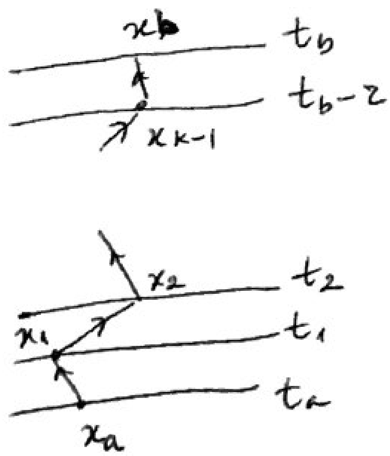
$$K(a,b) = \text{Lim} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{K/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{K-1} \ldots dx_2\, dx_1 \; \exp\left[\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{K-1} \left(\frac{(x_{k+1}-x_k)^2 m}{2\tau^2} - V(x_k t_k)\right)\right] \quad (10)$$

$$\text{Lim} \sum_{k=0}^{K-1} L(t_0 + k\tau) = \text{Lim} \sum_{k=0}^{K-1} L(t_k)$$

$$= \int_{t_b}^{t_a} dt' \; L\left(x(t'), \dot{x}(t'), t'\right) \equiv S_{ab}\left[x(t)\right] \quad (11)$$

onde $x(t) \equiv (x_b t_b; \; x_k t_k; \ldots; x_a t_a)$ de a até b

<u>é um</u> <u>caminho</u> <u>particular</u>



$S_{ab}[x(t)]$ é um <u>funcional</u> de <u>$x(t)$</u>

É a <u>ação clássica</u> para o movimento ao longo de um caminho arbitrário $x(t)$

$$K(a,b) = \mathrm{Lim} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{K/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{K-1} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \; e^{\frac{i}{\hbar} S_{ab}[x(t)]} \qquad (12)$$

o caminho $x(t)$ só tem uma restrição: os pontos inicial
e final, não é apenas o caminho selecionado pelas
equações de movimento clássicas (que minimiza a
ação); no $\lim_{\tau \to 0}$ as integrais em (12) incluem todos os
caminhos de a até b.

Escrevemos normalmente

$$K(a,b) = \int_a^b \mathcal{D}(x(t)) \; e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_{ab}[x(t)]\right)} \qquad (13)$$

para significar a integral de caminho (12).

Há razões para suspeitar que possam existir caminhos
que possam apresentar problemas e que não possam
ser submetidos a uma integral usual. A "aposta" é que esses
caminhos patológicos produzem oscilações suficientemente
rápidas em $e^{iS/\hbar}$ que não contribuem no limite de
interesse. Isso parece razoável pois a fase em (10)
oscila rapidamente se o caminho for suficientemente
errático para violar

$$|x_{k+1} - x_k| \lesssim \sqrt{\hbar \tau / m} \qquad (14)$$

Para τ fixo, uma massa suficientemente grande suprimirá caminhos que estão longe do caminho clássico diferenciável. Para qualquer massa, há um τ suficientemente pequeno para suprimir caminhos que pulam no espaço de quantidades que violam (14)

A generalização para mais partículas em 3D, na ausência de forças que dependem da velocidade, é imediata. $x(t) \longrightarrow$ caminho no espaço de configuração do sistema. Avaliar essas integrais de trajetória não é, em geral, fácil. Quando há forças que dependem da velocidade há uma pequena sutileza na discretização que fizemos (Veja Gottfried p. 95)

$\boxed{\text{Partícula Livre}}$: tarefa: Vamos encontrar o propagador usando integrais de trajetória

$x(t)$ = caminho arbitrário

$\varphi(t)$ = caminho clássico

(x_a, t_a) = ponto inicial

(x_b, t_b) = ponto final

$\Longrightarrow$ todos os caminhos começam e terminam em $y=0$

$$\boxed{y(t) = x(t) - \varphi(t)}$$

(é o desvio do caminho clássico)

$$S[x(t)] = S[\varphi(t) + y(t)] = \frac{1}{2} m \int_{t_a}^{t_b} dt \, [\dot{\varphi}^2(t) + \dot{y}^2(t)] \quad (1)$$

Ação p/ um caminho arbitrário

Euler-Lagrange (Caminho Clássico)

$$L = \dot{Q}^2(t)\,\frac{m}{2}$$

$$\frac{dL}{dQ} = \frac{d}{dt}\left(\frac{dL}{d\dot{Q}}\right) = 0 \Rightarrow \ddot{Q} = 0 \qquad \dot{Q} = v = \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}$$

$$S_{cl}(b,a) = \int_{t_a}^{t_b} dt\ \frac{1}{2} m \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right)^2 = \frac{1}{2} m \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \quad (2)$$

a separação de (1) em caminho clássico e desvio do caminho clássico

$$K(b,a) = F(t_b - t_a)\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}(b,a)\right) \quad (3)$$

onde $F(t_b - t_a)$ é a integral sobre todos os caminhos de $y=0$ de volta a $y=0$ durante o intervalo $t_b - t_a$

$$F(t_b - t_a) = \int_{t_a, y=0}^{t_b, y=0} \mathcal{D}(y(t)) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\ \frac{1}{2} m \dot{y}^2(t)\right) \quad (4)$$

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy\ K(0,t;y,t')\,K(y,t';0,0)$$

propagador da origem de volta para a origem.

usando (3)

$$F(t) = F(t-t')\,F(t')\int_{-\infty}^{+\infty} dy\ \exp\left[i y^2 \left(\frac{1}{t-t'} + \frac{1}{t'}\right)\frac{m}{2\hbar}\right]$$

$$= F(t-t')\,F(t')\,\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}}\,\sqrt{\frac{t'(t-t')}{t}}$$

$$F(t_b-t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,(t_b-t_a)}}$$

$$K(b,a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,(t_b-t_a)}}\; e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a}}$$

Na Mec. Clássica um sistema segue uma trajetória no espaço que é determinada pelo princípio de mínima ação. Escolhe o caminho que minimiza a ação de todos os caminhos possíveis. Na M.Q. não há princípio de mínima ação, temos que levar em conta todos os caminhos do sistema.

Uma das aplicações mais importantes de propagadores, como veremos mais adiante, aparece em problemas onde

$$H = H_0 + V(t) \qquad \underset{\text{perturbação}}{V \ll H_0} \quad \text{(em algum sentido)}$$

e conhecemos a solução do problema para H_0. Admitimos que V seja diagonal na representação das coordenadas

Vimos que

$$\left[i\hbar\,\partial_t - H(t)\right] K(\vec{r}\,t,\vec{r}\,'t') = i\hbar\,\delta(t-t')\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

então

$$\left[i\hbar\,\partial_{t_1} - H_0\right] K(\vec{r}_1 t_1,\vec{r}_2 t_2) = V(\vec{r}_1 t_1)\,K(\vec{r}_1 t_1,\vec{r}_2 t_2)$$
$$+\, i\hbar\,\delta(t_1-t_2)\,\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$$

mas se $K_0(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_2 t_2)$ é o propagador do sistema não perturbado

$$\left[i\hbar\, \partial_{t_1} - H_0\right] K_0(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_2 t_2) = i\hbar\, \delta(t_1 - t_2)\, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\therefore\ K(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_2 t_2) = K_0(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_2 t_2) + \frac{1}{i\hbar}\int d\vec{r}_3\, dt_3$$

$$K_0(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_3 t_3)\, V(\vec{r}_3, t_3)\, K(\vec{r}_3 t_3, \vec{r}_2 t_2)$$

simbolicamente

$$K(1,2) = K_0(1,2) + \frac{1}{i\hbar}\int d3\ \ K_0(1,3)\, V(3)\, K(3,2)$$

temos uma série

$$K = K_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n K_0 \left(V K_0\right)^n$$

$$= K_0 \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n (V K_0)^n\right)$$

que é a base da teoria de perturbação dependente do tempo. Na TQC $\Rightarrow$ diagramas de Feynman

Existe uma expansão em série de potências de V importante para a função de Green.

Introduzimos agora um operador G chamado de <u>resolvente</u>

$$\mathcal{G}(z) = \sum_{n\nu} |n\nu\rangle \frac{1}{z - E_n} \langle n\nu| = \sum_n \frac{P_n}{z - E_n}$$

$$= \frac{1}{z - H}$$

definido para z não real pois o espectro de H é real.

A função de Green como vimos pode ser escrita como

$$G(\vec{r}, \vec{r}\,'; E+i\varepsilon) = \sum_{n\nu} \frac{\psi_{n\nu}(\vec{r})\, \psi^*_{n\nu}(\vec{r}\,')}{E + i\varepsilon - E_n}$$

$$= \langle \vec{r}\,| \mathcal{G}(E+i\varepsilon) |\vec{r}\,'\rangle$$

a função de Green é o conj de todos os elementos de matriz do resolvente na representação das coordenadas para $z = E + i\varepsilon$

Se $\mathcal{G}_0$ é $\mathcal{G}$ não perturbado, i.e. $\mathcal{G}_0 = \frac{1}{z - H_0}$

$$(z - H_0)\, \mathcal{G}_0(z) = 1$$

lembrando que

$$\frac{1}{A-B} = \frac{1}{A} + \frac{1}{A-B} B \frac{1}{A} = \frac{1}{A} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A-B}$$

$$\mathcal{G}(z) = \frac{1}{\underbrace{z - H_0}_{A} - V} = \frac{1}{z - H_0} - \frac{1}{z - H_0} V \frac{1}{z - H_0 - V}$$

$$= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V \mathcal{G}$$

expansão do resolvente em potências da perturbação V pode ser agora obtida por iteração.

$$\mathcal{G}(z) = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V\left(\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V\left(\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V\left(\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V \mathcal{G}\right)\right)\right)$$

$$= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 V \mathcal{G}_0 V \mathcal{G}_0 + \cdots$$ série de Born.

~~[illegible]~~ usada para resolver problemas de espalhamento