INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

HERCH MOYSES NUSSENZVEIG

Instituto de Física - PUC/RJ

Rua Marques de S. Vicente, 225

20000 - Rio de Janeiro - RJ

INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

Curso ministrado na I Escola de Verão de Partículas e Campos

1. INTRODUÇÃO

O conceito de integral de trajetória foi introduzido por Feynman[1] que, inspirando-se em idéias de Dirac[2], mostrou que ele permitia obter uma nova formulação da mecânica quântica, equivalente às de Schrödinger e de Heisenberg. A imagem física associada é análoga à formulação da ótica em termos do princípio de Huygens.

Na ótica, podemos descrever a propagação de ondas através das soluções da equação de ondas sujeitas a condições de contorno (análogo da formulação de Schrödinger). Mas também podemos descrevê-la através do princípio de Huygens: se conhecermos a função de onda (e sua derivada normal) sobre uma dada superfície, podemos calcular como ela se propaga, por exemplo, a um ponto P próximo dessa superfície, tomando cada ponto da superfície dada como fonte de "ondas secundárias" cuja superposição no ponto P produz, por interferência, o valor da função de onda nesse ponto. No vácuo, as ondas secundárias são ondas esféricas, correspondendo à função de Green da equação de ondas, ou seja, ao campo de uma fonte puntiforme. Em lugar das frentes de onda (superfícies de fase constante), podemos também estudar a propagação em termos das suas trajetórias ortogonais, que são os raios da ótica geométrica. A propagação entre pontos distantes pode ser tratada como resultante da sucessão de propagações entre pontos vizinhos; para meios inhomogêneos, isso simplifica o problema, pois o meio pode geralmente ser considerado como homogêneo no entorno de cada ponto, levando à propagação retilínea.

Schrödinger já havia lembrado em seus primeiros trabalhos a analogia entre a ótica geométrica e a mecânica clássica descoberta por Hamilton. Nesta analogia[3], os raios correspondem às trajetórias clássicas e a fase corresponde à função principal de Hamilton ou integral de ação,

$$S = \int L \, dt, \tag{1.1}$$

onde L é a Lagrangiana do sistema. Schrödinger propôs tratar a mecânica quântica como uma mecânica ondulatória, que estaria para a mecânica clássica assim como a ótica ondulatória está para a ótica geométrica.

A realização desta idéia do ponto de vista do princípio de Huygens é drasticamente afetada pelo princípio de incerteza. Se quisermos descrever a propagação de um ponto a outro do espaço na mecânica quântica, temos de lembrar que a localização precisa num ponto implica numa incerteza completa do momento. Assim, em lugar de considerar apenas uma trajetória determinada ligando dois pontos, como no caso clássico, temos de considerar todas as trajetórias possíveis, o que efetivamente acontece na formulação de Feynman.

O Propagador

Como o propagador (ou função de Green dependente do tempo) desempenha um papel central na formulação de Feynman, vamos inicialmente rever algumas de suas propriedades.

A evolução de um sistema quântico entre um instante inicial t_0 e um instante final t pode ser obtida a partir de seu operador de evolução $\hat{U}(t,t_0)$ (indicaremos operadores por circunflexos), definido como solução de

$$i\hbar\, \partial\hat{U}(t,t_0)/\partial t = \hat{H}\, \hat{U}(t,t_0) \quad , \qquad (1.2)$$

$$\hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1} \quad , \qquad (1.3)$$

onde $\hat{H}$ é a Hamiltoniana do sistema. Dado o vetor de estado $|\psi(t_0)>$ no instante inicial, o vetor de estado final é (na representação de Schrödinger)

$$|\psi(t)> = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)> \quad . \qquad (1.4)$$

A hermiticidade de $\hat{H}$ implica na unitariedade de $\hat{U}$. Vemos imediatamente pela (1.4) que $\hat{U}$ tem a propriedade fundamental (lei de composição)

$$\hat{U}(t_1,t_0) = \hat{U}(t_1,t)\hat{U}(t,t_0) \qquad (1.5)$$

Em particular, se $\hat{H}$ não depende explicitamente do tempo, temos a representação formal

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar] \qquad (1.6)$$

e podemos, sem restrição de generalidade, tomar $t_0=0$ e usar a notação $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$.

Sempre tomando $\hat{H}$ independente do tempo, podemos representar $\hat{U}$ em termos de um conjunto ortonormal completo de estados estacionários, ou seja, autoestados de $\hat{H}$, $\hat{H}|\psi_n> = E_n|\psi_n>$, por

$$\hat{U}(t) = \sum_{m,n} |\psi_m> \underbrace{<\psi_m|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\, |\psi_n>}_{\delta_{nm}\exp(-iE_nt/\hbar)} <\psi_n| \Longrightarrow$$

$$\hat{U}(t) = \sum_n e^{-iE_nt/\hbar}\, |\psi_n><\psi_n| \quad , \qquad (1.7)$$

que é a representação espectral de $\hat{U}$; supusemos, por simplicidade, que o espectro é discreto.

Para definir o propagador, suponhamos agora que o sistema seja descrito no espaço de configurações pelas coordenadas $\vec{q} \equiv (q_1,q_2,\ldots,q_\ell)$, onde ℓ é o número de graus de liberdade. Se o sistema está no ponto $\vec{q}_0$ para t=0, o que descrevemos pelo vetor de estado $|\vec{q}_0>$, a probabilidade de que esteja entre $|\vec{q}>$ e $|\vec{q}+d\vec{q}>$ no instante t é

$$P(\vec{q},\vec{q}_0;t)d\vec{q} = |<\vec{q}|\hat{U}(t)|q_0>|^2 d\vec{q} \equiv |K(\vec{q},\vec{q}_0;t)|^2 d\vec{q} \qquad (1.8)$$

onde

$$\boxed{K(\vec{q},\vec{q}_0;t) \equiv <\vec{q}|\hat{U}(t)|\vec{q}_0>} \qquad (1.9)$$

define o propagador de $(\vec{q}_0,t=0)$ a $(\vec{q},t)$; a (1.8) mostra que ele representa uma amplitude de probabilidade para ir de um estado a outro.

A função de onda no espaço de configurações é

$$<\vec{q}|\psi> = \psi(\vec{q}) \quad . \qquad (1.10)$$

Inserindo $\int|\vec{q}_0><\vec{q}_0|d\vec{q}_0 = \hat{1}$ na (1.4), obtemos

$$\psi(\vec{q},t) = \int K(\vec{q},\vec{q}_0,t)\psi(\vec{q}_0)d\vec{q} \quad , \qquad (1.11)$$

o que justifica chamar K de função de Green dependente do tempo. A (1.11) é o análogo do princípio de Huygens.

A representação espectral de K se obtém inserindo a (1.7) na (1.9):

$$K(\vec{q},\vec{q}_0;t) = \sum_n \psi_n(\vec{q})\; \psi_n^*(\vec{q}_0)\, e^{-iE_nt/\hbar} \quad . \qquad (1.12)$$

A partir de (1.12) podemos calcular o traço do operador $\hat{U}$ usando a representação do espaço de configurações, que define outra função importante, a função espectral[4] $Y(t)$:

$$Y(t) = \mathrm{Tr}\ \hat{U}(t) \equiv \int K(\vec{q},\vec{q},t)d\vec{q} = \sum_n N_n \exp(-iE_nt/\hbar), \qquad (1.13)$$

onde N_n é a degenerescência do nível de energia E_n.

A manipulação formal que levou à (1.13) tem um sentido apenas simbólico, mas permite estabelecer uma conexão básica com a mecânica estatística, que desempenha um papel importante nos tratamentos modernos da teoria dos campos. Geralmente temos de supor que o espectro de energia é limitado inferiormente, ou seja, que existe um estado fundamental de energia mínima E_0. Nestas condições, admitindo ainda que o espectro não tem ponto de acumulação a distância finita, podemos esperar que a (1.13) seja convergente para valores complexos de t com parte imaginária negativa, e, em particular, para "tempos imaginários"

$$t = i\hbar\beta, \tag{1.14}$$

o que dá

$$Y(-i\hbar\beta) \equiv Z(\beta) = \sum_n N_n \exp(-\beta E_n) . \tag{1.15}$$

Se identificarmos $\beta = 1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta, vemos que $Z(\beta)$ é a função de partição associada ao sistema quântico à temperatura T. Analogamente,

$$\hat{\rho}(\beta) \equiv \frac{\hat{U}(-i\hbar\beta)}{\mathrm{Tr}\ \hat{U}(-i\hbar\beta)} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z(\beta)} \tag{1.16}$$

é o operador densidade associado ao ensemble canônico.

No limite de temperatura $T\to 0$ $(\beta\to\infty)$, somente o estado fundamental precisa ser levado em conta na (1.15):

$$Z(\beta) \to N_0\ e^{-\beta E_0}, \quad \beta \to \infty . \tag{1.17}$$

Por conseguinte, o valor esperado termodinâmico de um operador $\hat{A}$ no estado fundamental é dado por

$$\begin{aligned} \langle\psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle &= \lim_{\beta\to\infty} \mathrm{Tr}[\hat{\rho}(\beta)\hat{A}] \\ &= \lim_{t\to -i\infty} \{\mathrm{Tr}[\hat{U}(t)\hat{A}]/Y(t)\}. \end{aligned} \tag{1.18}$$

Exemplo: O Propagador Livre

A Hamiltoniana

$$\hat{H}_0 = \hat{\vec{p}}^2/2m \tag{1.19}$$

representa a propagação de uma partícula livre de massa m em ℓ dimensões. Os elementos de matriz de $\hat{U}$ se calculam facilmente no espaço dos momentos:

$$\langle\vec{p}|\hat{U}(t)|\vec{p}_0\rangle = \langle\vec{p}|\exp(-i\hat{H}_0 t/\hbar)|\vec{p}_0\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}_0)\exp(-i\vec{p}^2 t/2m\hbar). \tag{1.20}$$

Para passar ao espaço de configurações, basta usar a função de transformação

$$\langle\vec{q}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\ell/2}} \exp(i\vec{p}.\vec{q}/\hbar) , \tag{1.21}$$

(onde $\vec{q}$ representa as coordenadas cartesianas da partícula) o que dá

$$K_0(\vec{q},\vec{q}_0;t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int \langle\vec{q}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\hat{U}(t)|\vec{p}_0\rangle\langle\vec{p}_0|\vec{q}_0\rangle.$$

$$\times d\vec{p}\,d\vec{p}_0 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\ell}} \int \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\vec{p}^2}{2m}\ t - \vec{p}\cdot(\vec{q}-\vec{q}_0)\right]\right\} d\vec{p} .$$

Para calcular esta integral, usamos o resultado básico (que se obtém completando o quadrado no expoente e utilizando a expressão da integral de Fresnel)

$$\boxed{\int_{\infty}^{\infty} \exp[i(ax^2+bx)]\,dx = \sqrt{\frac{\pi i}{a}}\ \exp(-i\ \frac{b^2}{4a})} \ . \tag{1.22}$$

Obtemos assim a expressão do propagador livre:

$$\boxed{K_0(\vec{q},\vec{q}_0;t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{\ell/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar t}\ (\vec{q}-\vec{q}_0)^2\right]} \tag{1.23}$$

Uma extensa discussão da interpretação física deste propagador pode ser encontrada no livro de Feynman e Hibbs[5], cap.3. Para $t\to 0$, obtém-se $K(\vec{q},\vec{q}_0;t)\to\delta(\vec{q}-\vec{q}_0)$, conforme deveria ser (isto é mais fácil de ver para $t\to -i0$, quando se obtém uma representação bem conhecida de δ). Neste caso, $K(\vec{q},\vec{q},t)$ é independente de $\vec{q}$, de forma que $Y(t)$ diverge (cf.(1.13)). Isto se deve à degenerescência infinita dos níveis de energia, associada com a invariância de translação[4].

2. INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

O argumento intuitivo mais claro que leva ao conceito de integral de trajetória é dado no livro[5] de F.+ H., cap.1. Consideremos uma "experiência mental" em que uma partícula se propaga de uma fonte F até um detetor D, tratando o problema, para simplificar, como bidimensional.