

INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

HERCH MOYSES NUSSENZVEIG

*Instituto de Física - PUC/RJ*

*Rua Marques de S. Vicente, 225*

*20000 - Rio de Janeiro - RJ*

Curso ministrado na I Escola de Verão de Partículas e Campos

## 1. INTRODUÇÃO

O conceito de integral de trajetória foi introduzido por Feynman<sup>1</sup> que, inspirando-se em idéias de Dirac<sup>2</sup>, 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<sup>3</sup>, os raios correspondem às trajetórias clássicas e a fase corresponde à função principal de Hamilton ou integral de ação,

$$S = \int L dt, \quad (1.1)$$

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 qui-

sermos 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.

### 0 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

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

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

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

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

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)

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

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

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

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  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ , por

$$\hat{U}(t) = \sum_{m,n} |\psi_m\rangle \underbrace{\langle \psi_m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi_n \rangle}_{\delta_{nm} \exp(-iE_n t/\hbar)} \langle \psi_n | \implies$$

$$\hat{U}(t) = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (1.7)$$

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  $\vec{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_\ell)$ , onde  $\ell$  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  $|\vec{q}_0\rangle$ , a probabilidade de que esteja entre  $|\vec{q}\rangle$  e  $|\vec{q}+d\vec{q}\rangle$  no instante  $t$  é

$$P(\vec{q}, \vec{q}_0; t) d\vec{q} = |\langle \vec{q} | \hat{U}(t) | \vec{q}_0 \rangle|^2 d\vec{q} \equiv |K(\vec{q}, \vec{q}_0; t)|^2 d\vec{q} \quad (1.8)$$

onde

$$K(\vec{q}, \vec{q}_0; t) \equiv \langle \vec{q} | \hat{U}(t) | \vec{q}_0 \rangle \quad (1.9)$$

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

$$\langle \vec{q} | \psi \rangle = \psi(\vec{q}). \quad (1.10)$$

Inserindo  $\int |\vec{q}_0\rangle \langle \vec{q}_0| d\vec{q}_0 = \hat{I}$  na (1.4), obtemos

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

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):

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

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  $Y(t)$ :

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

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"

$$t = i\hbar\beta, \quad (1.14)$$

o que dá

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

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,

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

é o operador densidade associado ao ensemble canônico.

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

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

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

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

### Exemplo: O Propagador Livre

A Hamiltoniana

$$\hat{H}_0 = \hat{p}^2 / 2m \quad (1.19)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Obtemos assim a expressão do propagador livre:

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

Uma extensa discussão da interpretação física deste propagador pode ser encontrada no livro de Feynman e Hibbs<sup>5</sup>, cap.3. Para  $t \rightarrow 0$ , obtém-se  $K(\vec{q}, \vec{q}_0; t) \rightarrow \delta(\vec{q} - \vec{q}_0)$ , conforme deveria ser (isto é mais fácil de ver para  $t \rightarrow -i0$ , quando se obtém uma representação bem conhecida de  $\delta$ ). Neste caso,  $K(\vec{q}, \vec{q}_0, t)$  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<sup>4</sup>.

## 2. INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA

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

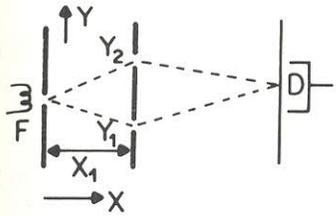


Fig.1

Se entre a fonte e o detetor houver um anteparo opaco na posição  $x_1$  com dois furos em  $y_1$  e  $y_2$  (Fig.1), sabemos que, se o arranjo experimental não permite determinar por qual deles a partícula passa, a amplitude de probabilidade para ir de F a D é a soma das amplitudes para passar por  $y_1$  e  $y_2$  (interferência de caminhos alternativos).

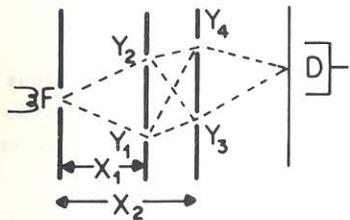
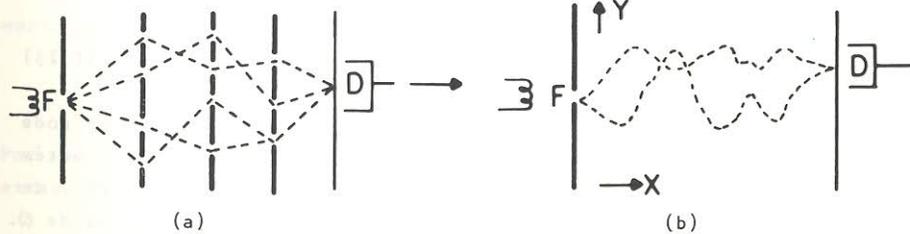


Fig.2

Se colocarmos mais um anteparo na posição  $x_2$  com furos em  $y_3$  e  $y_4$ , temos caminhos possíveis passando sucessivamente por  $(y_1, y_3)$ ,  $(y_1, y_4)$ ,  $(y_2, y_3)$ ,  $(y_2, y_4)$  (Fig.2), e a amplitude é a superposição das amplitudes correspondentes a essas 4 alternativas possíveis. Se aumentarmos o número de furos e de anteparos intermediários (Fig.3(a)), o número de trajetórias alternativas que interferem aumenta, até que, no limite de subdivisão (Fig.3(b)), temos de considerar todas as trajetórias possíveis  $y = y(x)$  com extremos fixos F e D. Podemos ainda dar uma especificação mais detalhada do movimento definindo também o instante  $t$  em que a trajetória passa por um determinado ponto, o que corresponde a especificar a trajetória pelas suas equações paramétricas  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ . A amplitude será, finalmente, a superposição das amplitudes correspondentes a todas as trajetórias possíveis, conforme vimos na Seção 1.

Fig. 3



### Formulação no Espaço de Fase

Para formular matematicamente esta idéia, vamos subdividir o

intervalo de tempo entre o instante inicial  $t_0=0$  e o instante final  $t$  em  $N$  subintervalos tomando instantes intermediários  $t_k$  ( $k=0,1,\dots,N$ ) tais que  $t_0=0$ ,  $t_N = t$ . A propagação entre 0 e  $t$  se reduz a uma sucessão de propagações através dos instantes intermediários com o auxílio da lei de composição (1.5):

$$\hat{U}(t,0) = \hat{U}(t_N,t_0) = \hat{U}(t_N,t_{N-1})\hat{U}(t_{N-1},t_{N-2})\dots\hat{U}(t_1,t_0). \quad (2.1)$$

Inserindo conjuntos completos de estados intermediários, o propagador entre a posição inicial  $\vec{q}_0$  e a posição final  $\vec{q}_f = \vec{q}_N$  pode ser escrito

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_f | \hat{U}(t,0) | \vec{q}_0 \rangle &= \int \dots \int \langle \vec{q}_f | \hat{U}(t_N,t_{N-1}) | \vec{q}_{N-1} \rangle \\ &\times \langle \vec{q}_{N-1} | \hat{U}(t_{N-1},t_{N-2}) | \vec{q}_{N-2} \rangle \dots \langle \vec{q}_1 | \hat{U}(t_1,t_0) | \vec{q}_0 \rangle \\ &\times d\vec{q}_{N-1} \dots d\vec{q}_1. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Queremos estudar o que acontece quando

$$N \rightarrow \infty, \quad \epsilon = \text{Max}(\delta t_k) \rightarrow 0, \quad \delta t_k = t_k - t_{k-1}. \quad (2.3)$$

Para simplificar a notação, consideremos inicialmente um sistema unidimensional, descrito pela Hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}), \quad (2.4)$$

onde  $\hat{q}$  é uma coordenada cartesiana. Como  $\hat{H}$  é independente do tempo, temos, neste caso, pela (1.6),

$$\langle q_k | \hat{U}(t_k,t_{k-1}) | q_{k-1} \rangle = \langle q_k | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t_k) | q_{k-1} \rangle. \quad (2.5)$$

Para calcular este elemento de matriz, introduzimos um conjunto completo de estados intermediários do momento, usando  $\int |p_k\rangle \langle p_k| dp_k = \hat{1}$ , de modo que a (2.2) fica

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0, t) &= \int \dots \int \langle q_f | \hat{U}(\delta t_N) | p_N \rangle \langle p_N | q_{N-1} \rangle \dots \\ &\dots \langle q_1 | \hat{U}(\delta t_1) | p_1 \rangle \langle p_1 | q_0 \rangle dq_{N-1} \dots dq_1 dp_N \dots dp_1. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Note que há uma integração sobre  $p$  a mais do que sobre  $q$ .

A idéia básica é agora que a (2.3) pode ser utilizada para simplificar a propagação sobre um intervalo de tempo infinitesimal:

$$\begin{aligned} \langle q_k | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t_k) | p_k \rangle &\langle p_k | q_{k-1} \rangle \\ &\approx \langle q_k | \left[ \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \delta t_k \right] | p_k \rangle \langle p_k | q_{k-1} \rangle, \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde estamos desprezando termos de ordem igual ou superior a  $\epsilon^2$  (cf. (2.3)). Substituindo na (2.7) as relações (2.4) e (1.21), resulta

$$\begin{aligned} \langle q_k | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t_k) | p_k \rangle &\langle p_k | q_{k-1} \rangle \\ &\approx \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} H(p_k, q_k) \delta t_k \right] \underbrace{\langle q_k | p_k \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_k q_k / \hbar}} \underbrace{\langle p_k | q_{k-1} \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip_k q_{k-1} / \hbar}} \\ &\approx \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip_k (q_k - q_{k-1}) / \hbar} \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(p_k, q_k) \delta t_k\right], \end{aligned} \quad (2.8)$$

(sempre desprezando termos de ordem igual ou superior a  $\epsilon^2$ ), onde

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (2.9)$$

é a Hamiltoniana clássica que corresponde à (2.4).

Substituindo a (2.8) na (2.6), no limite definido pela (2.3), obtemos a expressão heurística

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0, t) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \dots \int \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{N-1} \left( \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} \right) \cdot \\ &\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left[ p_k \underbrace{(q_k - q_{k-1})}_{\delta q_k} - H(p_k, q_k) \delta t_k \right] \right\}, \quad (2.10) \\ &\epsilon = \text{Max}(\delta t_k). \end{aligned}$$

Podemos agora interpretar esta expressão da seguinte maneira. No espaço de fase  $(p, q)$  associado ao movimento da partícula, definimos as trajetórias poligonais ilustradas na Fig. 4, de equações paramétricas  $p=p(\tau)$ ,  $q=q(\tau)$ , onde  $0 \leq \tau \leq t$ , e

$$\begin{cases} q(\tau) = \underbrace{\left( \frac{q_k - q_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} \right)}_{\delta q_k / \delta t_k} (\tau - t_{k-1}) + q_{k-1} \\ = \dot{q}_k (\tau - t_{k-1}) + q_{k-1}, \\ p(\tau) = p_k \end{cases} \quad (2.11)$$

no intervalo  $t_{k-1} < \tau < t_k$ .

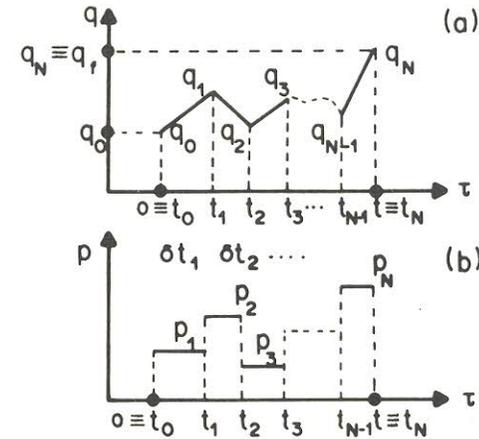


Fig. 4

As trajetórias em  $q$  têm os extremos fixos  $q_0$  e  $q_f$ ; as em  $p$  têm extremos livres, ou seja,  $p(0)$  e  $p(t)$  são arbitrários.

Nestas condições, podemos considerar a somatória no expoente da (2.10) como um aproximante da integral

$$A([p(\tau)], [q(\tau)], q_f, q_0; t) = \int_0^t [p\dot{q} - H(p, q)] d\tau \quad (2.12)$$

onde os colchetes nos argumentos  $p(\tau)$  e  $q(\tau)$  indicam que  $A$  é um funcional desses argumentos, que são funções obtidas como limites das trajetórias poligonais, e definem as trajetórias no espaço de fase.

Obtemos assim a seguinte expressão para o propagador (2.10):

$$K(q_f, q_0; t) = \int DpDq \exp\left\{\frac{i}{\hbar} A([p], [q]; q_f, q_0; t)\right\}, \quad (2.13)$$

que define a integral de trajetória no espaço de fase como o resultado do processo limite acima indicado. O "elemento de volume" no espaço funcional das funções  $p(\tau)$ ,  $q(\tau)$  é indicado pela notação

$$DpDq = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{N-1} \left[ \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} \right] \right\} = \prod_{\tau} \left[ \frac{dp(\tau) dq(\tau)}{2\pi\hbar} \right] \quad (2.14)$$

que representa uma "produtória contínua". A expressão (2.13) do propagador é devida a Feynman<sup>6</sup>.

#### Formulação no Espaço de Configurações

Para passar ao espaço de configurações, vamos calcular na (2.10) as integrais sobre o espaço dos momentos. Pelas (2.9) e (2.10), a integral sobre  $p_k$  é

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_k \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{p_k^2}{2m} \delta t_k - p_k(q_k - q_{k-1}) \right]\right\} \\ = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \delta t_k} \right)^{1/2} \exp\left[ \frac{im}{2\hbar \delta t_k} (q_k - q_{k-1})^2 \right], \end{aligned} \quad (2.15)$$

pois é exatamente a integral que calculamos para obter a expressão (1.23) do propagador da partícula livre.

Para simplificar a notação, vamos adotar uma subdivisão do intervalo  $(0, t)$  em subintervalos todos iguais:

$$\delta t_k = \epsilon, \quad \forall k; \quad N\epsilon = t. \quad (2.16)$$

Obtemos então, efetuando as integrações sobre o espaço dos momentos na (2.10):

$$\begin{aligned} K(q_f, q_0; t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \int \dots \int_{k=1}^{N-1} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} dq_k \cdot \\ \times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \epsilon \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(q_k) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Tomamos agora trajetórias poligonais no espaço de configurações, do tipo ilustrado na Fig. 4(a) (com a simplificação (2.16)). A somatória no expoente da (2.17) é um aproximante da integral

$$\begin{aligned} S([q(\tau)], q_f, q_0; t) = \int_0^t \left[ \frac{m}{2} \dot{q}(\tau)^2 - V(q(\tau)) \right] d\tau \\ = \int_0^t L([q(\tau)], [\dot{q}(\tau)]) d\tau \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde  $L$  é a Lagrangiana clássica associada à Hamiltoniana clássica (2.9). A (2.18) é a integral de ação ou função principal de Hamilton calculada ao longo da trajetória  $q(\tau)$  no espaço de configurações, ligando o ponto inicial fixo  $q_0$  ao ponto final fixo  $q_f$ .

Nestas condições, o limite indicado na (2.17) define a integral de trajetória no espaço de configuração, representada simbolicamente por

$$K(q_f, q_0; t) = \int D_F q \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S([q(\tau)], q_f, q_0; t) \right\} \quad (2.19)$$

onde

$$D_F q = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \right\} = \prod_{\tau} d_F q(\tau). \quad (2.20)$$

A (2.19) é a forma pela qual Feynman<sup>1</sup> introduziu originalmente as integrais de trajetória, e corresponde à realização da idéia discutida no início desta Seção: a (2.19) pode ser interpretada como uma superposição de amplitudes de probabilidade correspondentes a todas as trajetórias possíveis para ir de  $q_0$  a  $q_f$ . A fase associada a cada trajetória, que determina os efeitos de interferência, é precisamente dada pela integral de ação (1.1) calculada ao longo da trajetória.

Qual é a natureza das trajetórias que precisamos considerar? Como limites de trajetórias poligonais, elas não são totalmente arbitrárias: podemos tomá-las como contínuas. A (2.17) permite inferir mais: se  $q_k$  e  $q_{k-1}$  não estiverem suficientemente próximos para que a contribuição correspondente à fase seja  $\leq \pi$ , o termo correspondente será rapidamente oscilante, e a integração sobre  $q_k$  e  $q_{k-1}$  levará ao cancelamento por interferência destrutiva. Devemos ter portanto

$$\frac{m}{2\hbar\epsilon} \underbrace{(q_k - q_{k-1})^2}_{\delta q_k} \leq \pi \left\{ \left| \delta q_k \right| \leq \left( \frac{\hbar\epsilon}{m} \right)^{1/2} \right\} \quad (2.21)$$

Note-se, porém, que isto corresponde a

$$\left| \frac{\delta q_k}{\epsilon} \right| = \left| \frac{\delta q_k}{\delta t_k} \right| = \left| \dot{q}_k \right| \leq \left( \frac{\hbar}{m\epsilon} \right)^{1/2} \quad (2.22)$$

o que permite à velocidade atingir valores arbitrariamente elevados para  $\epsilon \rightarrow 0$ . Por conseguinte, o entorno de uma dada trajetória que pode dar contribuição apreciável é constituído por flutuações quânticas em torno dessa trajetória análogas<sup>1,5</sup> ao movimento browniano (Fig.5), extremamente irregulares numa escala cada vez mais fina. Esta analogia com o movimento browniano corresponde à analogia entre a equação de Schrödinger e a equação de difusão (ou do calor); a diferença, devida ao comparecimento de  $i$  (unidade imaginária) na equação

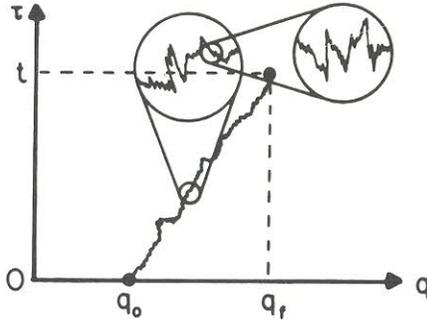


Fig. 5

de Schrödinger, é que no caso da mecânica quântica se trata de um efeito de interferência entre as contribuições das trajetórias "brownianas".

Partindo da formulação usual da mecânica quântica, obtivemos aqui a formulação em termos das integrais de trajetória. Feynman<sup>1</sup> fez o contrário, tomando a expressão das integrais de trajetória como postulado e mostrando que a partir dela se recupera a formulação usual. Assim, pode-se demonstrar<sup>1,5,7</sup> que a (1.11), com  $K$  definido pela (2.17), satisfaz à equação de Schrödinger e se reduz ao valor inicial para  $t \rightarrow 0$ .

#### Exemplo: a partícula livre

O exemplo mais simples do cálculo de integrais de trajetória é o caso da partícula livre, descrita pela Hamiltoniana (1.19). Para calcular  $K$  neste caso, vamos partir da (2.17) com  $V=0$  e efetuar as integrações sucessivas sobre  $q_1, q_2, \dots, q_{N-1}$ .

A integral sobre  $q_1$  é

$$\begin{aligned} & \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} [(q_2 - q_1)^2 + (q_1 - q_0)^2] \right\} \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right) \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (q_2^2 + q_0^2) \right] \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \exp \left\{ \frac{im}{\hbar \epsilon} [q_1^2 - q_1(q_2 + q_0)] \right\} \\ &= \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar (2\epsilon)} \right]^{1/2} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar (2\epsilon)} (q_2 - q_0)^2 \right], \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde usamos a (1.22). O resultado corresponde ao propagador livre (1.23) de  $q_0$  a  $q_2$  no intervalo de tempo  $2\epsilon$ .

Este cálculo nada mais é do que a verificação de uma consequência da lei de composição (1.5) num caso particular. Com efeito, ela dá

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_1 | \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{q}_0 \rangle &= \int d\vec{q} \langle \vec{q}_1 | \hat{U}(t_1, t) | \vec{q} \rangle \\ &\quad \times \langle \vec{q} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{q}_0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.24)$$

ou seja, para o caso (1.6), em que  $\hat{H}$  é independente do tempo,

$$\begin{aligned} K(\vec{q}_1, \vec{q}_0; \overbrace{t_1 - t_0}^{\Delta t_1 + \Delta t_0}) &= \\ &= \int K(\vec{q}_1, \vec{q}; \underbrace{t_1 - t}_{\Delta t_1}) K(\vec{q}, \vec{q}_0; \underbrace{t - t_0}_{\Delta t_0}) d\vec{q}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Fisicamente, isto quer dizer que a amplitude de probabilidade para ir de  $(\vec{q}_0, t_0)$  a  $(\vec{q}_1, t_1)$  é a superposição das amplitudes para ir de  $(\vec{q}_0, t_0)$  a  $(\vec{q}, t)$  e depois de  $(\vec{q}, t)$  a  $(\vec{q}_1, t_1)$ , passando por todos os pontos intermediários  $\vec{q}$  possíveis. Isto também se vê pela (2.10) subdividindo as trajetórias que vão de  $q_0$  a  $q_f$  em algum ponto intermediário  $(q_k, t_k)$  e integrando sobre todas as demais variáveis, o que reproduz a (2.25). No caso da equação de difusão, a (2.25) é conhecida como a equação de Chapman-Kolmogoroff.

A (2.23) é um caso particular da (2.25) com  $K=K_0$  e  $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \epsilon$ , ou seja,  $\Delta t_1 + \Delta t_2 = 2\epsilon$ . Substituindo a (2.23) na (2.17) com  $V=0$  e integrando sobre  $q_2$ , obtém-se da mesma forma o propagador livre de  $q_0$  a  $q_3$  no intervalo de tempo  $3\epsilon$ , e assim sucessivamente até a integral sobre  $q_{N-1}$ , da qual resulta o propagador livre (1.23) de  $q_0$  a  $q_N \equiv q_f$ .

#### Extensões

(a) Mais graus de liberdade: Consideremos agora, a seguinte generalização da Hamiltoniana (2.4):

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{\ell} \frac{(\hat{p}_{\alpha})^2}{2m_{\alpha}} + V(\vec{q}), \quad (2.26)$$

onde  $\vec{q} = (q_1, q_2, \dots, q_{\ell})$  são coordenadas cartesianas e  $\ell$  é o número de graus de liberdade. Por exemplo, em 3 dimensões, a (2.26) permite descrever um sistema de  $\ell/3$  partículas de massas diferentes interagindo entre si e também com um campo externo.

A generalização da (2.13) é imediata:

$$K(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) = \int D\vec{p}D\vec{q} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[ \sum_{\alpha=1}^{\ell} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(\vec{p}, \vec{q}) \right] d\tau \right\} \quad (2.27)$$

onde  $H(\vec{p}, \vec{q})$  é a Hamiltoniana clássica correspondente à (2.26) e, numa notação análoga à (2.14),

$$D\vec{p}D\vec{q} = \prod_{\tau} \prod_{\alpha=1}^{\ell} \left[ \frac{dp_{\alpha}(\tau) dq_{\alpha}(\tau)}{2\pi\hbar} \right] \quad (2.28)$$

Analogamente, a generalização da (2.19) é dada por

$$K(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) = \int D_F \vec{q} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) d\tau \right\} \quad (2.29)$$

onde

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \sum_{\alpha=1}^{\ell} \frac{m_{\alpha}}{2} \dot{q}_{\alpha}^2 - V(\vec{q}) \quad (2.30)$$

e

$$D_F \vec{q} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \prod_{\alpha=1}^{\ell} \left[ \frac{m_{\alpha}}{2\pi i \hbar \epsilon} \right]^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} \prod_{\alpha=1}^{\ell} dq_{\alpha k} \right\} \quad (2.31)$$

(b) Problemas de ordenamento: As formulações acima em termos de integrais de trajetória só fazem intervir, aparentemente, a Lagrangiana e a Hamiltoniana clássicas, e no entanto são equivalentes à formulação usual da mecânica quântica. Para o sistema descrito pela (2.26), a correspondência entre o operador quântico  $\hat{H}$  e a Hamiltoniana clássica  $H$  é unívoca, mas sabemos que isso deixa de valer se  $H$  contiver termos tais como  $pq^2$ , pois existiriam vários operadores inequivalentes que poderiam corresponder a este termo em  $\hat{H}$ , tais como

$\hat{p}q^2$ ,  $q^2\hat{p}$ ,  $\hat{q}\hat{p}\hat{q}$ ,  $\frac{1}{3}(\hat{q}^2\hat{p} + \hat{q}\hat{p}\hat{q} + \hat{p}\hat{q}^2)$ . O que poderia corresponder na formulação das integrais de trajetória a estas ambiguidades de ordenamento?

Ao calcularmos os elementos de matriz (2.7), poderíamos igualmente ter inserido os estados intermediários da forma

$$\begin{aligned} \langle q_k | p_k \rangle \langle p_k | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t_k) | q_{k-1} \rangle \\ = \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} H(p_k, q_{k-1}) \delta t_k \right] \langle q_k | p_k \rangle \langle p_k | q_{k-1} \rangle, \end{aligned} \quad (2.32)$$

e a única diferença com a (2.8) teria sido na substituição

$$H(p_k, q_k) \rightarrow H(p_k, q_{k-1}) \quad (2.33)$$

na (2.10), ou seja, em lugar de calcularmos a Hamiltoniana na extremidade direita de cada subintervalo na poligonal da Fig. 4(a), estaríamos calculando-a na extremidade esquerda. Para a Hamiltoniana considerada, a única diferença que isto acarreta é a substituição

$$V(q_k) \rightarrow V(q_{k-1}) \quad (2.34)$$

na (2.17). Temos, porém,

$$V(q_k) = V(q_{k-1}) + \mathcal{O}(\delta q_k) \quad (2.35)$$

e pela (2.21),  $\mathcal{O}(\delta q_k)$  equivale a  $\mathcal{O}(\epsilon^{1/2})$ , de modo que isso não faz diferença no cálculo da (2.17). Poderíamos igualmente bem tomar as expressões simétricas

$$\frac{1}{2} [V(q_k) + V(q_{k-1})], \quad V\left(\frac{q_k + q_{k-1}}{2}\right), \quad (2.36)$$

que só diferem das anteriores por termos de ordem  $\delta q_k$ .

Consideremos, porém, o que acontece com a Lagrangiana de uma partícula num campo eletromagnético, que contém como termo adicional o "potencial dependente de velocidade"

$$- \frac{e}{c} \vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}), \quad (2.37)$$

onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor. A ambiguidade acima corresponde agora à diferença entre os termos

$$\left( \frac{\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}}{\epsilon} \right) \cdot \vec{A}(\vec{r}_k), \quad \left( \frac{\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}}{\epsilon} \right) \cdot \vec{A}(\vec{r}_{k-1}). \quad (2.38)$$

Tomando a componente x, temos, analogamente à (2.35),

$$A_x(\vec{r}_k) = A_x(\vec{r}_{k-1}) + (\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}) \cdot \nabla A_x, \quad (2.39)$$

de modo que as duas expressões (2.38) diferem por termos da ordem de

$$\frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1})^2}{\epsilon} \quad (2.40)$$

Pela (2.21), este termo é da ordem da unidade, ou seja, dos demais termos da Lagrangiana, de modo que a ambiguidade de ordenamento quântico existente neste caso,

$$\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \vec{A}, \quad (2.41)$$

corresponde a ambiguidade entre expressões do tipo (2.34), (2.35), (2.36).

Como é bem conhecido, a prescrição de acoplamento mínimo  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$  leva na Hamiltoniana a expressões simetrizadas, do tipo  $(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p})$ . É fácil ver<sup>5</sup> que isto equivale a tomar uma combinação simétrica das (2.38), do tipo das (2.36) (que diferem entre si por termos de ordem superior a  $(\delta q_k)$ , de modo que fornecem prescrições equivalentes).

Modificaremos portanto as definições (2.10) e (2.17) introduzindo nelas as substituições:

$$\begin{aligned} H(p_k, q_k) &\longrightarrow H(p_k, \frac{q_k + q_{k-1}}{2}) \\ V(q_k) &\longrightarrow V(\frac{q_k + q_{k-1}}{2}) \\ L(\dot{q}_k, q_k) &\longrightarrow L(\frac{q_k - q_{k-1}}{\epsilon}, \frac{q_k + q_{k-1}}{2}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Com esta modificação, a formulação em termos de integrais de trajetória se estende também à interação com um campo eletromagnético.

Pode-se estabelecer uma correspondência geral entre métodos de definição das integrais de trajetória e regras de ordenamento dos operadores quânticos<sup>8</sup>.

c) Transformações canônicas: Embora na (2.10) apareça o elemento de volume no espaço de fase, que é invariante para transformações canônicas, o mesmo não se aplica à integral de trajetória no caso geral. A formulação foi feita inteiramente em coordenadas cartesianas (cf. (1.21)), e as coordenadas foram tratadas de forma di-

ferente dos momentos, como é claro na definição das trajetórias poligonais da Fig. 4. Esta assimetria se relaciona com o fato de que calculamos o propagador no espaço de configurações.

Pode-se mostrar<sup>9</sup> que a formulação permanece válida para transformações canônicas lineares. Isto exclui mudanças de variáveis para coordenadas curvilíneas. No caso de um potencial central, é possível formular as integrais de trajetória em coordenadas esféricas<sup>10</sup>. De Witt<sup>11</sup> discutiu a formulação das integrais de trajetória em espaços curvos.

### Formulações Mais Rigorosas

O tratamento acima foi essencialmente heurístico. Há uma considerável variedade de métodos que têm sido propostos para definir integrais de trajetória como objetos matematicamente respeitáveis.

No caso da equação de difusão, em que o propagador livre da (1.23) é substituído por uma função gaussiana (solução fundamental), o análogo das integrais de trajetória havia sido introduzido por Wiener em 1923. A integral de Wiener é uma integral no espaço funcional de trajetórias (movimentos Brownianos), e o "elemento de volume no espaço funcional" é uma medida, a medida de Wiener<sup>12</sup>.

Entretanto, Cameron<sup>13</sup> demonstrou que não existe nenhuma medida com as propriedades necessárias no caso da integral de Feynman, de modo que é preciso utilizar um método diferente. Alguns dos métodos propostos são os seguintes:

(i) Partindo da integral de Wiener para a equação de difusão, fazer um prolongamento analítico para tempo imaginário<sup>13</sup> (análogo à (1.14)) ou massa imaginária<sup>14</sup> para obter a integral de Feynman.

(ii) Interpretar<sup>14</sup> a integral de Feynman em termos da fórmula de produto de Trotter<sup>15</sup>

$$\exp[t(\hat{A} + \hat{B})] = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \exp\left(\frac{t}{n} \hat{A}\right) \exp\left(\frac{t}{n} \hat{B}\right) \right]^n, \quad (2.43)$$

tomando  $\hat{A} = -i\hat{H}_0$ , onde  $\hat{H}_0$  é a Hamiltoniana livre, e  $\hat{B} = -i\hat{V}$ , onde o potencial  $\hat{V}$  é suficientemente regular. É fácil ver<sup>15,16</sup> que isto permite uma construção da integral de Feynman análoga à (2.17), que pode assim ser melhor justificada.

(iii) Construção em termos de integrais oscilatórias que constituem uma generalização da integral de Fresnel<sup>17</sup>.

(iv) Construção baseada em métodos da teoria das distribuições<sup>18</sup>.

### 3. APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA

De acordo com as considerações da Seção 1, a passagem da mecânica quântica à mecânica clássica deveria ser análoga à passagem da ótica ondulatória à ótica geométrica. Na formulação de Schrödinger, a realização desta idéia corresponde à bem conhecida aproximação WKB, válida no limite de pequenos comprimentos de onda de de Broglie (limite semiclassical).

Na formulação da ótica em termos do princípio de Huygens, embora cada ponto de uma frente de ondas se comporte como fonte de ondas secundárias, as direções de interferência construtiva dessas ondas correspondem aos raios da ótica geométrica, pois a fase é dada pelo caminho ótico, e o caminho ótico é estacionário ao longo dos raios, pelo princípio de Fermat.

A aproximação semiclassical das integrais de trajetória se obtém por um raciocínio inteiramente análogo. Numa típica situação semiclassical, a ação ao longo das trajetórias na (2.19) satisfaz à condição  $S/\hbar \gg 1$ , e, para pequenas variações  $\delta q(\tau)$  das trajetórias, a variação correspondente da fase também será tal que  $\delta S/\hbar \gg 1$ , de modo que as contribuições resultantes à integral de Feynman tendem a se cancelar por interferência destrutiva. Isto só não ocorre na vizinhança de trajetórias  $q_c(\tau)$  tais que

$$\delta S([q_c(\tau)], q_f, q_0; t) = \delta \int_0^t L d\tau = 0, \quad (3.1)$$

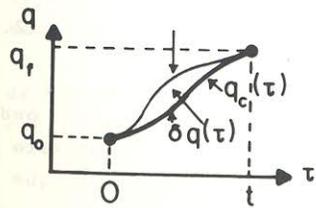


Fig. 6

pois neste caso a fase é estacionária para pequenas variações  $\delta q(\tau)$  em torno de  $q_c(\tau)$  (fig. 6). Como  $L$  é a Lagrangiana clássica, a (3.1) é o princípio de Hamilton, e  $q_c(\tau)$  é portanto uma trajetória clássica ligando os pontos  $(0, q_0)$  e  $(t, q_f)$ . A contribuição resultante à (2.19) deve ser proporcional a

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_c\right) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S([q_c(\tau)], q_f, q_0; t)\right\}. \quad (3.2)$$

Em geral, pode haver mais de uma trajetória clássica ligando os pontos considerados, sendo de se esperar portanto que a aproximação semiclassical da integral de Feynman seja uma soma de termos deste tipo.

Consideremos a situação análoga para a integral ordinária de uma função de uma única variável,

$$K(h) = \int_a^b \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(q)\right] dq \quad (3.3)$$

onde  $h$  é um parâmetro pequeno ( $h \rightarrow 0$ ), de modo que a integral seja rapidamente oscilante. A contribuição dominante deve vir da vizinhança de um ponto de fase estacionária  $\bar{q}$ ,

$$S'(\bar{q}) = \left(\frac{dS}{dq}\right)_{q=\bar{q}} = 0, \quad (3.4)$$

e suponhamos para simplificar que há precisamente um ponto de fase estacionária interno ao intervalo  $[a, b]$ .

Para aproximar assintoticamente a (3.3), expandimos a fase em torno de  $\bar{q}$ ,

$$S(q) = S(\bar{q}) + (q-\bar{q}) \underbrace{S'(\bar{q})}_{=0} + \frac{1}{2} (q-\bar{q})^2 S''(\bar{q}) + \mathcal{O}((q-\bar{q})^3) \quad (3.5)$$

e substituímos na (3.3):

$$K(h) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{q})\right] \int_a^b \exp\left[\frac{i}{2\hbar} S''(\bar{q})(q-\bar{q})^2 + \mathcal{O}\left(\frac{(q-\bar{q})^3}{h}\right)\right] dq$$

$(q-\bar{q})/\sqrt{h} = x$

$$= \sqrt{h} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{q})\right] \int_{-(\bar{q}-a)/\sqrt{h}}^{(b-\bar{q})/\sqrt{h}} dx \exp\left[\frac{i}{2} S''(\bar{q})x^2 + \mathcal{O}(\sqrt{h})\right]. \quad (3.6)$$

Quando  $h \rightarrow 0$ , os limites de integração tendem a  $\pm\infty$ , e podemos aproximar  $K(h)$  usando a integral de Fresnel (1.22):

$$K(h) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{|S''(\bar{q})|}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{q}) \pm i\frac{\pi}{4}\right] + \mathcal{O}(h),$$

$$\begin{cases} + & \text{para } S''(\bar{q}) > 0 \\ - & \text{para } S''(\bar{q}) < 0 \end{cases}. \quad (3.7)$$

O método pode ser estendido a uma integral múltipla n-di

mensional,

$$K(h) = \int \dots \int \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(q_1, \dots, q_n) \right] dq_1 \dots dq_n \quad (3.8)$$

Se há apenas um ponto de fase estacionária  $(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n)$  dentro do domínio de integração, a expansão análoga à (3.5) é

$$S(q_1, \dots, q_n) = S(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left( \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} \right)_{\bar{q}_i, \bar{q}_j} (q - \bar{q}_i) (q - \bar{q}_j) + \dots \quad (3.9)$$

Substituindo na (3.8), obtemos no expoente uma forma quadrática nas variáveis  $x_i = q - \bar{q}_i$ . Por uma transformação linear, podemos diagonalizá-la e reduzir o resultado<sup>19</sup> a um produto de integrais de Fresnel (1.22). Obtém-se assim (note que  $\det D$  é o produto dos autovalores):

$$K(h) = \frac{(2\pi\hbar)^{n/2}}{|\det D|^{1/2}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n) + i \frac{\pi}{4} \nu \right], \quad (3.10)$$

onde  $D$  é a matriz (cf. (3.9))

$$D = \left\| \left\| \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} \right\| \right\|_{\bar{q}_i, \bar{q}_j}, \quad (3.11)$$

ou seja, a matriz hessiana de  $S$  no ponto de fase estacionária, e  $\nu = P - N$  é a diferença entre o número de autovalores positivos ( $P$ ) e negativos ( $N$ ) da forma quadrática associada a  $D$  ( $\nu =$  "signatura" ou índice de  $D$ ). Como  $P + N = n$ , temos ainda

$$\nu = n - 2N, \quad N = n^\circ \text{ de autovalores } < 0. \quad (3.12)$$

A razão do aparecimento de  $\nu$  é óbvia pela (3.7). Se houver mais de um ponto de fase estacionária dentro do domínio de integração, é preciso levar em conta as contribuições dos diferentes pontos.

Para a integral de Feynman (2.19), o análogo da expansão (3.9) é uma expansão do funcional  $S$  da (2.18) em série de Taylor funcional em torno da função  $q_c(\tau)$  que corresponde a uma trajetória clássica:

$$S = \int_0^t L([q(\tau)], [\dot{q}(\tau)]) d\tau = S_c + \frac{1}{2} \delta^2 S([q_c]) + \dots \quad (3.13)$$

onde o termo em  $\delta S$  é  $= 0$  pela (3.1) e a segunda variação  $\delta^2 S$  é um funcional quadrático na variação

$$\eta(\tau) = \delta q(\tau) = q(\tau) - q_c(\tau) \quad (3.14)$$

em torno da trajetória clássica (Fig. 6):

$$\delta^2 S = \int_0^t \left\{ \left( \frac{\delta^2 L}{\delta q^2} \right)_{q=q_c} \eta^2(\tau) + 2 \left( \frac{\delta^2 L}{\delta q \delta \dot{q}} \right)_{q=q_c} \eta(\tau) \dot{\eta}(\tau) + \left( \frac{\delta^2 L}{\delta \dot{q}^2} \right)_{q=q_c} \dot{\eta}^2(\tau) \right\} d\tau \quad (3.15)$$

e as expressões entre parêntesis são derivadas funcionais<sup>20</sup>.

A aproximação semiclássica da (2.19) será então:

$$K_{sc}(q_f, q_0; t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S([q_c(\tau)], q_f, q_0; t) \right\} \times \underbrace{\int D_F q \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \delta^2 S([q_c]) \right\}}_F \quad (3.16)$$

onde supusemos que apenas uma trajetória clássica contribui. O cálculo do "fator preexponencial"  $F$  requer uma discussão mais detalhada<sup>21</sup>. Entretanto, vamos ver que  $|F|$  tem uma interpretação física muito simples. Note-se que  $F$  representa precisamente o efeito das flutuações quânticas em torno da trajetória clássica, ou seja, das flutuações "brownianas" da (2.21).

Para ver a interpretação física<sup>21</sup> de  $|F|$ , notemos que (voltando ao caso geral de  $l$  graus de liberdade)

$$|F|^2 = |K_{sc}(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t)|^2 \quad (3.17)$$

o que, pela (1.8), dá

$$|F|^2 d\vec{q}_f = P(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) d\vec{q}_f, \quad (3.18)$$

onde o 2º membro é a probabilidade de encontrar o sistema entre  $\vec{q}_f$  e  $\vec{q}_f + d\vec{q}_f$  no espaço de configurações no instante  $t$  partindo de  $\vec{q}_0$  no instante 0, ou seja,  $P$  é a densidade de probabilidade correspondente.

Como a posição inicial  $\vec{q}_0$  é perfeitamente definida, o momento inicial é indeterminado, ou seja, temos uma distribuição uniforme no espaço dos momentos, com probabilidade de que o momento inicial esteja num elemento de volume  $d\vec{p}_0$  dada por (cf. (1.21))

$$|\langle \vec{p}_0 | \vec{q}_0 \rangle|^2 d\vec{p}_0 = \left| \frac{\exp(-i\vec{p}_0 \cdot \vec{q}_0)}{(2\pi\hbar)^{\ell/2}} \right|^2 d\vec{p}_0 = \frac{d\vec{p}_0}{(2\pi\hbar)^\ell} \quad (3.19)$$

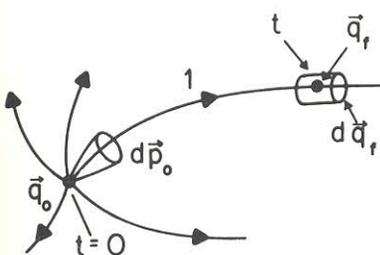


Fig. 7

Admitindo que há somente uma trajetória clássica (designada por 1 na Fig. 7) ligando  $(0, \vec{q}_0)$  a  $(t, \vec{q}_f)$ , temos então apenas um pequeno feixe de trajetórias partindo de  $\vec{q}_0$ , com momentos contidos dentro de um elemento de volume  $d\vec{p}_0$  bem definido, que atingem o elemento de volume  $d\vec{q}_f$  com centro em  $\vec{q}_f$  no instante  $t$ .

A probabilidade de atingir  $d\vec{q}_f$  em torno de  $\vec{q}_f$  coincide então com a probabilidade (3.19) correspondente para o momento inicial, ou seja,

$$P(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) d\vec{q}_f = \frac{d\vec{p}_0}{(2\pi\hbar)^\ell},$$

o que dá

$$P(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell} \frac{d\vec{p}_0}{d\vec{q}_f} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell} \overbrace{\left| \frac{\partial(p_{01}, \dots, p_{0\ell})}{\partial(q_{f1}, \dots, q_{f\ell})} \right|}^{\text{Jacobiano}}, \quad (3.20)$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell} \left| \det \left\| \frac{\partial p_{0i}(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t)}{\partial q_{fj}} \right\| \right|,$$

A relação entre  $\vec{p}_0$  e  $\vec{q}_f$  decorre das equações de movimento clássicas. Sendo  $S_c([q_c(\tau)], q_f, q_0; t)$  a integral de ação clássica (2.18) ao longo da trajetória clássica correspondente, é um resultado bem conhecido<sup>3</sup> da mecânica clássica que

$$p_{0i} = - \frac{\partial S_c}{\partial q_{0i}} \quad (3.21)$$

Logo,

$$\det \left\| \frac{\partial p_{0i}}{\partial q_{fj}} \right\| = \det \left\| - \frac{\partial^2 S_c(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t)}{\partial q_{0i} \partial q_{fj}} \right\| \equiv (-1)^\ell D_{of}, \quad (3.22)$$

onde  $D_{of}$  é o determinante Hessiano associado à ação clássica. Finalmente, as (3.18), (3.20) e (3.22) dão

$$|F|^2 = |D_{of}| / (2\pi\hbar)^\ell \quad (3.23)$$

A interpretação física de  $|F|^2$  é portanto que representa a densidade de trajetórias na posição final  $\vec{q}_f$  associada à família de trajetórias clássicas que deixa a posição inicial  $\vec{q}_0$  de tal forma a atingir um entorno da posição final. Um resultado análogo é bem conhecido para o fator preexponencial no método WKB usual, em uma dimensão. Neste caso, o fator é proporcional a  $1/\sqrt{v}$ , onde  $v$  é a "velocidade local" das partículas, o que corresponde à conservação do fluxo de probabilidade: a densidade numa dada região é diretamente proporcional ao tempo que a partícula passa nessa região, ou seja, inversamente proporcional à velocidade local.

Uma análise mais completa<sup>21</sup> permite obter não só o módulo, mas também a fase do fator preexponencial. O resultado, levando em conta que pode haver mais de uma trajetória clássica ligando  $(0, \vec{q}_0)$  a  $(t, \vec{q}_f)$ , é (cf. (3.16))

$$K_{sc}(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\ell/2}} \sum_r |D_{of,r}|^{1/2} \exp \left\{ i \left[ \frac{S_{c,r}(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t)}{\hbar} - N_r \frac{\pi}{2} \right] \right\}, \quad (3.24)$$

onde o índice  $r$  especifica uma dada trajetória clássica e a soma é estendida a todas as trajetórias clássicas que ligam  $(0, \vec{q}_0)$  a  $(t, \vec{q}_f)$ . O inteiro  $N_r$  associado a cada uma dessas trajetórias é análogo a  $N$  nas (3.10), (3.12) e veremos logo qual é sua interpretação física.

O determinante  $D_{of}$  foi introduzido por Van Vleck<sup>22</sup>, que também discutiu sua interpretação; é frequentemente chamado de determinante de Van Vleck.

A densidade de probabilidade semiclássica,  $P_{sc} = |K_{sc}|^2$  (cf. (1.81)), de acordo com a (3.24), contém em geral termos de interferência entre as contribuições das diferentes trajetórias clássicas  $r$ . Tais termos representam um efeito quântico e são rapidamente oscilantes na escala clássica. Devido ao baixo poder separador de uma observação feita nesta escala, os termos de interferência desaparecem, de forma que no limite clássico obtemos uma soma incoerente de probabilidades associadas às trajetórias clássicas<sup>23</sup>, ou seja, a (3.23) é substituída por uma soma sobre essas trajetórias.

A densidade de trajetórias no entorno de  $\vec{q}_f$  não é necessariamente finita: pode haver uma coalescência de dois ou mais ramos diferentes  $r$  da (3.24) em determinadas regiões de dimensão  $< l$  do espaço de configurações. Neste caso, a dimensionalidade de  $d\vec{q}_f$  sendo  $< l$ , o jacobiano da (3.20) é singular, ou seja,  $|D_{of}| \rightarrow \infty$ . Se  $m$  é a redução de dimensionalidade, dizemos então que  $\vec{q}_f$  está sobre uma cáustica de ordem  $m$ . Uma cáustica é a envoltória de uma família de trajetórias. O nome vem da ótica, onde as trajetórias são raios luminosos (Fig. 8); em 3 dimensões, uma cáustica de ordem 1 é uma superfície cáustica; uma de ordem 2 é uma linha focal, e uma de ordem 3 é um ponto focal ou foco.



Fig. 8

Podemos agora dar o significado físico de  $N_r$  na (3.24). Este inteiro está associado ao índice da forma quadrática definida pelo Jacobiano (3.20), ou seja, à segunda variação  $\delta^2 S$  de  $S$  (cf. (3.12)). Um teorema devido a Morse<sup>24</sup> mostra que  $N_r$  é o número de cáusticas atravessadas ou tocadas pela trajetória clássica  $r$  entre  $\vec{q}_0$  e  $\vec{q}_f$ , cada uma sendo contada com multiplicidade igual a sua ordem (índice de Morse). O avanço de fase de  $\pi/2$  associado à passagem de um raio por uma cáustica de 1ª ordem é um resultado bem conhecido na ótica.

Obviamente, a (3.24) deixa de ser válida na vizinhança de uma cáustica. Isto corresponde ao fato de que o método da fase estacionária deixa de ser válido quando há uma confluência de dois ou mais pontos de fase estacionária (no caso, trajetórias). O caso mais simples em que isto sucede é o do arco-íris<sup>25</sup>. Neste caso é possível u-

tilizar uma generalização do método do ponto de sela que leva a uma aproximação assintótica uniforme, que é um refinamento da aproximação semiclássica e elimina a singularidade na cáustica. O tratamento pode ser estendido a casos mais gerais com o auxílio da teoria das catástrofes de Thom<sup>26</sup>. Um método análogo se aplica para obter a aproximação semiclássica refinada de integrais de trajetória<sup>27</sup>.

Pode acontecer também que não haja nenhuma trajetória clássica real ligando  $(0, \vec{q}_0)$  a  $(t, \vec{q}_f)$ ; neste caso,  $\vec{q}_f$  está numa "região classicamente proibida". Como o propagador quântico não pode ser identicamente nulo, a (3.24) também precisa ser modificada neste caso. A propagação nestas circunstâncias se dá por um efeito de tunelamento, que pode ser descrito em termos de trajetórias complexas<sup>25</sup>. Tais trajetórias podem ser definidas para as integrais de Feynman<sup>27</sup> como prolongamento analítico das trajetórias clássicas reais.

#### 4. APLICAÇÕES

##### (a) Integrais de Feynman Gaussianas

Suponhamos<sup>5</sup> que se tenha um sistema descrito pela Lagrangiana

$$L = a(t)\dot{q}^2 + b(t)\dot{q}q + c(t)q^2 + d(t)\dot{q} + e(t)q + f(t), \quad (4.1)$$

que é a forma quadrática mais geral em  $q$  e  $\dot{q}$ . Seja  $q_c(\tau)$  a trajetória clássica correspondente e façamos a mudança de variável (3.14) na integral de ação correspondente:

$$\begin{aligned} S([q(\tau)], q_f, q_0; t) &= S([q_c(\tau) + \eta(\tau)], q_f, q_0; t) \\ &= \underbrace{S([q_c(\tau)], q_f, q_0; t)}_{S_c(q_f, q_0; t)} + \int_0^t [a(\tau)\dot{\eta}^2 + b(\tau)\dot{\eta}\eta + c(\tau)\eta^2] d\tau, \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde este resultado é exato. Com efeito, os termos lineares têm de anular-se por estarmos expandindo em torno da trajetória de fase estacionária (cf. (3.13)) e não há termos de ordem superior porque a (4.1) é quadrática.

Por outro lado, a mudança de variável (3.14), em que  $q_c(\tau)$  é uma "função constante" para cada instante intermediário  $t_k$  na (2.17), implica

$$dq_k = d\eta_k, \quad \forall k, \quad \therefore D_F q = D_F \eta \quad (4.3)$$

na (2.20) a (3.14) é uma "translação paralela" no espaço funcional<sup>28</sup>. Logo,

$$K(q_f, q_0; t) = F(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_C(q_f, q_0; t)\right], \quad (4.4)$$

onde

$$F(t) = \int_0^0 \mathcal{D}_F \eta \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t [a(\tau)\dot{\eta}^2 + b(\tau)\dot{\eta}\eta + c(\tau)\eta^2] d\tau\right\} \quad (4.5)$$

é estendida somente a trajetórias tais que (cf. (3.14))

$$\eta(0) = \eta(t) = 0, \quad (4.6)$$

(donde a notação  $\int_0^0$ ), de modo que não depende explicitamente de  $q_f$  e  $q_0$ .

Comparando este resultado com a (3.16), vemos que  $F$  representa precisamente o fator preexponencial calculado na Seção anterior, o que dá, finalmente,

$$K(q_f, q_0; t) = K_{SC}(q_f, q_0; t), \quad (4.7)$$

ou seja, a aproximação semiclássica é exata para uma integral de Feynman gaussiana. Este é um resultado extremamente importante, porque as integrais de Feynman gaussianas são as únicas que sabemos calcular exatamente de forma genérica.

Note-se que os coeficientes  $d(t)$ ,  $e(t)$  e  $f(t)$  na (4.1) não afetam o fator preexponencial. Se, como geralmente acontece, só estivermos interessados na dependência de  $K$  de  $q_f$  e  $q_0$ , a (4.4) mostra que nem é preciso calcular  $F$  explicitamente.

Exemplo: Partícula livre: neste caso, a (única) trajetória clássica que liga  $(0, \vec{q}_0)$  a  $(t, \vec{q}_f)$  é

$$\vec{q}_C(\tau) = \vec{q}_0 + (\vec{q}_f - \vec{q}_0)\tau/t \quad (4.8)$$

e

$$S_C = \int_0^t \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}_C^2(\tau) d\tau = \frac{m}{2t} (\vec{q}_f - \vec{q}_0)^2, \quad (4.9)$$

o que dá

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_{0i} \partial q_{fj}} = \frac{m}{t} \delta_{ij} \left\{ |D_{of}| = \left| \det \left\| \frac{m}{t} \delta_{ij} \right\| \right| \right\} = \left(\frac{m}{t}\right)^{\mathcal{L}}, \quad (4.10)$$

e a (3.24) dá

$$K(\vec{q}_f, \vec{q}_0; t) = \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{\mathcal{L}/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{\mathcal{L}/2} \exp\left[\frac{i m}{2 \hbar t} (\vec{q}_f - \vec{q}_0)^2\right],$$

o que coincide com a (1.23).

### (b) O Oscilador Harmônico Unidimensional

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \quad (4.11)$$

é quadrática, de modo que podemos usar a (4.7). Para  $\omega t \neq N\pi$ , a (única) trajetória clássica ligando  $(0, q_0)$  a  $(t, q_f)$  é

$$q_C(\tau) = \frac{1}{\sin(\omega t)} \{q_0 \sin[\omega(t-\tau)] + q_f \sin(\omega\tau)\} \quad (\omega t \neq N\pi). \quad (4.12)$$

Temos, integrando por partes o 1º termo,

$$S_C = \frac{m}{2} \int_0^t [\dot{q}_C^2(\tau) - \omega^2 q_C^2(\tau)] d\tau = \frac{m}{2} \{q_C(\tau) \dot{q}_C(\tau)\Big|_0^t - \int_0^t q_C(\tau) \underbrace{[\ddot{q}_C(\tau) + \omega^2 q_C(\tau)]}_{=0} d\tau\} = \frac{m}{2} [q_C(\tau) \dot{q}_C(\tau)]_0^t \quad (4.13)$$

e, substituindo a (4.12), obtemos, para  $\omega t \neq N\pi$ ,

$$S_C(q_f, q_0; t) = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(q_f^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2q_f q_0] \quad (4.14)$$

o que dá

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_0 \partial q_f} = \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} \{|D_{of}| = \frac{m\omega}{|\sin(\omega t)|}\}, \quad (4.15)$$

Para  $\omega t = N\pi$ , temos necessariamente  $q_f = (-1)^N q_0$  para qualquer trajetória clássica, ou seja, esses pontos são focos (Fig.9). Se  $t$  é tal que

$$N\pi < \omega t < (N+1)\pi, \quad (4.16)$$

a (4.12) atravessa  $N$  focos, de modo que a (3.24) dá, com a (4.15),

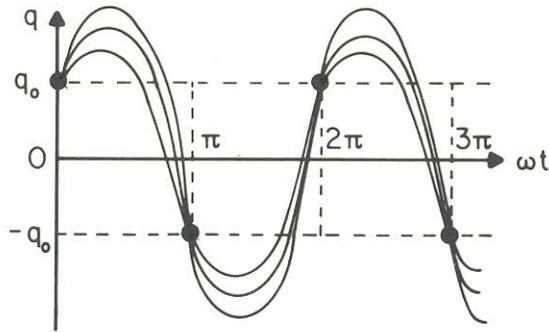


Fig. 9

$$F(t) = \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar |\sin(\omega t)|} \right]^{1/2} e^{-iN\frac{\pi}{2}} \equiv \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right]^{1/2}, \quad (4.17)$$

onde o fator de fase, determinado pela (4.16), elimina a ambiguidade da raiz quadrada no último membro, ou seja, define a determinação correspondente. Logo,

$$K(q_f, q_0; t) = \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right]^{1/2} \exp \left\{ \frac{i m \omega [(q_f^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2q_f q_0]}{2\hbar \sin(\omega t)} \right\}$$

(4.18)

Para  $t \rightarrow 0$ , obtemos, com  $\omega t \ll 1$ ,

$$K(q_f, q_0; t) \approx \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2}$$

$$\times \exp \left\{ \frac{it}{\hbar} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_f - q_0}{t} \right)^2 - \frac{m}{2} \omega^2 \left( \frac{q_f + q_0}{2} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(t^2) \right\},$$

$$L \left( \frac{q_f - q_0}{t}, \frac{q_f + q_0}{2} \right) \quad (4.19)$$

o que concorda com as aproximações (2.17), (2.42).

A função espectral se obtém da (1.13):

$$Y(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(q, q, t) dq = \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right]^{1/2} \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{i m \omega}{2\hbar} \operatorname{tg} \left( \frac{\omega t}{2} \right) q^2 \right] dq = \frac{1}{2i \sin(\omega t/2)},$$

onde utilizamos a (1.22). Lembrando que  $Y(t)$  na (1.13) converge para  $\operatorname{Im} t < 0$ , obtemos

$$Y(t) = \frac{e^{-i\omega t/2}}{1 - e^{-i\omega t}} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -i \left( n + \frac{1}{2} \right) \omega t \right] \quad (\operatorname{Im} t < 0), \quad (4.20)$$

o que pela (1.13), implica que os níveis de energia do oscilador harmônico unidimensional são não-degenerados e dados por

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (4.21)$$

conforme deveria ser. Pela (1.15),  $Z(\beta) = Y(-i\hbar\beta) = \exp(-\beta\hbar\omega/2) / [1 - \exp(-\beta\hbar\omega)]$  é a bem conhecida função de partição do oscilador harmônico.

Para  $t \rightarrow -i\infty$ , temos  $\sin(\omega t) \approx -\frac{i}{2} e^{i\omega t}$ ,  $\cos(\omega t) \approx \frac{1}{2} e^{i\omega t}$ , e a

(4.18) dá

$$K(q_f, q_0; t) \underset{t \rightarrow -i\infty}{\approx} \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar} (q_0^2 + q_f^2) - i \frac{\omega t}{2} \right], \quad (4.22)$$

o que, comparando com a (1.12), dá a função de onda normalizada do estado fundamental:

$$\psi_0(q) = \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 \right]. \quad (4.23)$$

Pela (4.21), a (1.12) fica, neste caso,

$$K(q_f, q_0; t) = e^{-i \frac{\omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(q_f) \psi_n^*(q_0) e^{-in\omega t}, \quad (4.24)$$

de modo que as funções de onda normalizadas dos estados excitados do oscilador harmônico podem ser obtidas expandindo a (4.18) em série de Fourier. É interessante notar que a (4.24) dá, para  $j$  inteiro,

$$K(q_f, q_0; t + \frac{2\pi}{\omega} j) = e^{-i\pi j} K(q_f, q_0; t) \quad (4.25)$$

o que concorda com a definição (4.17) do fator de fase.

(c) Cálculo por expansão em série de Fourier

Vamos ilustrar outro método<sup>5</sup> para o cálculo de integrais de trajetória, aplicando-o ao cálculo do fator preexponencial para o oscilador harmônico. Pela (4.5), este fator é (cf. (4.1), (4.11))

$$F = \int_0^t \mathcal{D}_F \eta \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \int_0^t [\dot{\eta}^2(\tau) - \omega^2 \eta^2(\tau)] d\tau \right\}. \quad (4.26)$$

Como todas as trajetórias são tais que  $\eta(0) = \eta(t) = 0$  (cf. (4.6)), podemos expandi-las em série de Fourier de senos no intervalo  $[0, t]$ :

$$\eta(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \left[ \frac{n\pi}{t} \tau \right]. \quad (4.27)$$

A transformação das variáveis  $\eta(\tau)$  às variáveis  $a_n$  é linear, e é por conseguinte permitida (Seção 2). O Jacobiano  $J$  é independente de  $(m, \omega, \hbar)$ : não será preciso calculá-lo. Temos

$$\int_0^t [\dot{\eta}^2(\tau) - \omega^2 \eta^2(\tau)] d\tau = \frac{t}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{n\pi}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2. \quad (4.28)$$

Utilizar a (2.17) com  $t=N\epsilon$  equivale a tomar só um conjunto discreto de  $N$  variáveis  $\eta(t_k)$ , ou, o que é equivalente (cf. (4.27)), de variáveis  $a_n$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ), de modo que a (4.26) fica

$$F = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \underbrace{J_N}_{\text{Jacobiano}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} t \sum_{n=1}^N \left[ \left( \frac{n\pi}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \times \frac{da_1}{A} \dots \frac{da_N}{A} \right\}, \quad (4.29)$$

onde os fatores de normalização  $A$  são independentes de  $\omega$ . A (4.29) se fatora num produto de  $N$  integrais do tipo (cf. (1.22))

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{imt}{2\hbar} \left[ \left( \frac{n\pi}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} da_n = \frac{b_n}{\left( 1 - \frac{\omega^2 t^2}{n^2 \pi^2} \right)^{1/2}} \quad (4.30)$$

onde  $b_n$  é independente de  $\omega$ .

Finalmente, lembrando que

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left( 1 - \frac{z^2}{n^2} \right) = \frac{\sin(\pi z)}{\pi z}, \quad (4.31)$$

obtemos (a menos da ambiguidade da raiz quadrada)

$$F = C \left( \frac{\omega t}{\sin(\omega t)} \right)^{1/2}, \quad (4.32)$$

onde  $C$  (que inclui o Jacobiano) é independente de  $\omega$ . Mas, para  $\omega=0$ , a (4.26) é o fator preexponencial para uma partícula livre, dado por (cf. (1.23))

$$F \Big|_{\omega=0} = C = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \quad (4.33)$$

Logo, substituindo na (4.32),

$$F(t) = \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)} \right]^{1/2}, \quad (4.34)$$

o que concorda com a (4.17) (esta fixa o fator de fase).

Tomar  $N$  finito na (4.27) significa desprezar flutuações  $\eta(\tau)$  que variam mais rapidamente do que  $t/N$ , de modo que este método pode ser mais interessante que o das aproximações poligonais. O método pode ser estendido a expansões em termos de um conjunto ortonormal mais geral<sup>27, 29, 30</sup>. Também foram desenvolvidos métodos de cálculo de integrais funcionais em termos<sup>31</sup> de representações contínuas, ou seja, em termos de estados coerentes generalizados<sup>32</sup>.

(d) O Oscilador Harmônico Forçado

A Lagrangiana é

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 q^2 + J(t)q \quad (4.35)$$

onde  $J(t)$  representa uma força externa dependente do tempo. A trajetória clássica que liga  $(0, q_0)$  a  $(t, q_f)$  é a seguinte generalização da (4.12):

$$q_c(\tau) = \frac{1}{\sin(\omega t)} \left\{ \left[ q_0 - \frac{1}{m\omega} \int_0^\tau \sin(\omega \tau') J(\tau') d\tau' \right] \times \sin[\omega(t-\tau)] + \left[ q_f - \frac{1}{m\omega} \int_\tau^t \sin[\omega(t-\tau')] J(\tau') d\tau' \right] \times \sin(\omega \tau) \right\}. \quad (4.36)$$

e obtemos facilmente, em lugar da (4.13),

$$S_C = \frac{m}{2} \left[ q_C(\tau) \dot{q}_C(\tau) \right]_0^t + \frac{1}{2} \int_0^t q_C(\tau) J(\tau) d\tau, \quad (4.37)$$

o que dá

$$S_C(q_f, q_0; t; [J(\tau)]) = \frac{m\omega}{2\sin(\omega t)} \left\{ (q_f^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2q_f q_0 \right. \\ \left. + \frac{2}{m\omega} q_f \int_0^t J(\tau) \sin(\omega\tau) d\tau + \frac{2}{m\omega} q_0 \int_0^t J(\tau) \sin[\omega(t-\tau)] d\tau \right. \\ \left. - \frac{2}{m^2\omega^2} \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' J(\tau) J(\tau') \sin(\omega\tau) \sin[\omega(t-\tau')] \right\}. \quad (4.38)$$

Notemos, por outro lado, que a (4.35) sô difere da (4.11) por um termo linear em  $q$ . Como vimos no caso da (4.1), tais termos não afetam o cálculo do fator preexponencial, que continua sendo da do pela (4.17). Juntando as (4.17) e (4.38), e restabelecendo a notação  $t_0$  para o instante inicial, obtemos, finalmente,

$$K(q_f, q_0; t, t_0; [J(\tau)]) = \left[ \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin[\omega(t-t_0)]} \right]^{1/2} \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2\sin[\omega(t-t_0)]} \left\{ (q_f^2 + q_0^2) \cos[\omega(t-t_0)] - 2q_f q_0 \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{m\omega} q_f \int_{t_0}^t J(\tau) \sin[\omega(\tau-t_0)] d\tau + \frac{2}{m\omega} q_0 \int_{t_0}^t J(\tau) \sin[\omega(t-\tau)] d\tau \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2}{m^2\omega^2} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau d\tau' J(\tau) J(\tau') \sin[\omega(\tau-t_0)] \sin[\omega(t-\tau')] \right\} \right\} \quad (4.39)$$

Tanto  $S_C$  como  $K$  são funcionais da força externa  $J(\tau)$  no intervalo  $[t_0, t]$ .

#### (e) Elementos de Matriz

Com vistas à aplicação em teoria de campos<sup>33</sup>, vamos adotar daqui por diante a representação de Heisenberg e tomar  $\hbar=1$ . Vamos indicar por  $|q, t\rangle_H$  o vetor de estado na representação de Heisenberg que é um autoestado de  $\hat{q}_H(t)$  com autovalor  $q$  no instante  $t$ :

$$\hat{q}_H(t) |q, t\rangle_H = q |q, t\rangle_H, \quad \hat{q}_H(t) = e^{iHt} \hat{q}_S e^{-iHt}, \quad (4.40)$$

onde o índice  $S$  se refere à representação de Schrödinger. Temos então, tomando

$$|q\rangle = e^{-i\hat{H}t} |q, t\rangle_H \quad (|q, t\rangle_H = e^{i\hat{H}t} |q\rangle) \quad (4.41)$$

que

$$\hat{q}_S |q\rangle = q |q\rangle, \quad (4.42)$$

ou seja (cf. (1.6), (1.9)),

$$K(q, q_0; t, t_0) = \langle q | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | q_0 \rangle = {}_H \langle q, t | q_0, t_0 \rangle_H. \quad (4.43)$$

Nesta notação (omitiremos daqui por diante o índice  $H$ ), a (2.2) fica

$$K(q, t; q_0, t_0) = \int \dots \int \langle q, t | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle \\ \times dq_1(t_1) \dots dq_{N-1}(t_{N-1}). \quad (4.44)$$

Consideremos agora o elemento de matriz do operador de Heisenberg  $\hat{q}(t_k)$  entre os estados inicial e final, onde  $t_k$  é um dos instantes intermediários:

$$\langle q, t | \hat{q}(t_k) | q_0, t_0 \rangle_H = \int \dots \int \langle q, t | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle q_{k+1}, t_{k+1} | \hat{q}(t_k) | q_k, t_k \rangle \\ \dots \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle dq_1(t_1) \dots dq_{N-1}(t_{N-1}). \quad (t_0 < t_k < t)$$

$\underbrace{\langle q_{k+1}, t_{k+1} | \hat{q}(t_k) | q_k, t_k \rangle}_{\substack{\uparrow \\ = q(t_k)}}$

Passando ao limite em que  $N \rightarrow \infty$  e utilizando a (2.13), obtemos

$$\langle q, t | \hat{q}(t_1) | q_0, t_0 \rangle = \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \ q(t_1) \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [p\dot{q} - H(p, q)] d\tau \right\}. \quad (t_0 < t_1 < t). \quad (4.45)$$

Analogamente, se  $t_0 < t_j < t_k < t$ ,

$$\langle q, t | \hat{q}(t_k) \hat{q}(t_j) | q_0, t_0 \rangle = \int \dots \int \langle q | t \rangle \langle q_{N-1}, t_{N-1} \rangle.$$

$$\dots \underbrace{\langle q_{k+1}, t_{k+1} | \hat{q}(t_k) | q_k, t_k \rangle}_{q(t_k) \langle q_{k+1}, t_{k+1} | q_k, t_k \rangle} \dots \underbrace{\langle q_{j+1}, t_{j+1} | \hat{q}(t_j) | q_j, t_j \rangle}_{q(t_j) \langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle} \dots$$

$$\times \langle q_1, t_1 | q_0, t_0 \rangle dq_1(t_1) \dots dq_{N-1}(t_{N-1}),$$

o que dá (note que os operadores só podem ser inseridos em ordem cronológica):

$$\begin{aligned} \langle q, t | T[\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)] | q_0, t_0 \rangle &= \\ &= \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \ q(t_1)q(t_2) \exp\left\{ i \int_{t_0}^t [p\dot{q} - H(p,q)] d\tau \right\}, \end{aligned}$$

onde T indica o produto cronológico, ou seja, em ordem de tempo decrescente.

A generalização é imediata:

$$\begin{aligned} \langle q, t | T[\hat{q}(t_1) \dots \hat{q}(t_n)] | q_0, t_0 \rangle &= \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \cdot \\ &\times q(t_1) \dots q(t_n) \exp\left\{ i \int_{t_0}^t [p\dot{q} - H(p,q)] d\tau \right\}. \end{aligned}$$

(4.46)

#### (e) Amplitude de Transição com Força Externa

Consideremos um sistema descrito por uma Lagrangiana  $L(p,q)$  que não depende explicitamente do tempo e suponhamos que ele seja perturbado por uma força externa dependente do tempo, que acrescenta um termo  $J(\tau)q$  à Lagrangiana, como no caso da (4.35). Supomos  $J(\tau) \neq 0$  somente no intervalo  $(t_0, t)$ . Num instante inicial  $T_0$  no passado remoto ( $T_0 < t_0$ ), o sistema está no estado fundamental  $\psi_0(q)$ . Qual a amplitude de probabilidade de que esteja novamente no estado fundamental num instante final  $T$  no futuro remoto ( $T > t$ )?. (Cf. Fig.10).

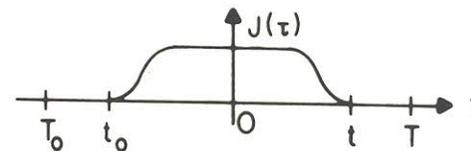


Fig.10

Para calculá-la, consideremos (cf. (4.39), (4.43))

$$\begin{aligned} K(Q, Q_0; T, T_0; [J]) &\equiv \langle Q, T | Q_0, T_0 \rangle^J \\ &= \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \ \exp\left\{ i \int_{T_0}^T [p\dot{q} - H(p,q) + Jq] d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Temos

$$\langle Q, T | Q_0, T_0 \rangle^J = \int dq \int dq_0 \langle Q, T | q, t \rangle \langle q, t | q_0, t_0 \rangle^J \times \langle q_0, t_0 | Q_0, T_0 \rangle, \quad (4.48)$$

pois  $J$  só é  $\neq 0$  em  $(t_0, t)$ . Logo, pela (1.12),

$$\begin{aligned} \langle Q, T | q, t \rangle &= \sum_n \psi_n(Q) \psi_n^*(q) e^{-iE_n(T-t)} \\ \langle q_0, t_0 | Q_0, T_0 \rangle &= \sum_n \psi_n(q_0) \psi_n^*(Q_0) e^{-iE_n(t_0-T_0)} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Por analogia com a (1.18), vemos que

$$\begin{aligned} \langle Q, T | q, t \rangle &\xrightarrow[T \rightarrow -i\infty]{} \psi_0(Q) \psi_0^*(q, t) e^{-iE_0 T} \\ \langle q_0, t_0 | Q_0, T_0 \rangle &\xrightarrow[T_0 \rightarrow i\infty]{} \psi_0(q_0, t_0) \psi_0^*(Q_0) e^{iE_0 T_0} \end{aligned} \quad (4.50)$$

onde admitimos que  $Q$  e  $Q_0$  tendem a limites finitos e

$$\psi_0(q, t) = \psi_0(q) e^{-iE_0 t} \quad (4.51)$$

A (4.48) dá então

$$W([J]) \equiv \int dq \int dq_0 \psi_0^*(q, t) \langle q, t | q_0, t_0 \rangle^J \psi_0(q_0, t_0)$$

$$= \lim_{\substack{T \rightarrow -i\infty \\ T_0 \rightarrow +i\infty}} \frac{\langle Q, T | Q_0, T_0 \rangle^J}{e^{-iE_0(T-T_0)}} \psi_0(Q) \psi_0^*(Q_0) \quad (4.52)$$

onde o 2º membro é a amplitude de probabilidade procurada; podemos tomar  $t$  arbitrariamente grande positivo e  $t_0$  arbitrariamente grande negativo.

A importância de  $W[J]$  é que funciona como funcional gerador de quantidades que desempenharão o papel de funções de Green na extensão à teoria quântica dos campos. Para ver isto, notemos que a derivada funcional pode ser definida por

$$\frac{\delta}{\delta J(t)} W([J(\tau)]) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{W([J(\tau) + \epsilon \delta(t-\tau)]) - W([J(\tau)])}{\epsilon} \right\} \quad (4.53)$$

Decorre desta definição que

$$\frac{\delta}{\delta J(t)} \left\{ \exp \left[ i \int_{T_0}^T q(\tau) J(\tau) d\tau \right] \right\} = i q(t) \exp \left[ i \int_{T_0}^T q(\tau) J(\tau) d\tau \right] \quad (4.54)$$

Como  $\langle q, t | q_0, t_0 \rangle^J$  na (4.52) é dado por uma expressão análoga à (4.47), isto implica

$$\frac{\delta^n W([J])}{\delta J(t_1) \delta J(t_2) \dots \delta J(t_n)} \Big|_{J=0} = i^n \int dq \int dq_0 \psi_0^*(q, t) \psi_0(q_0, t_0) \cdot$$

$$\times \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \ q(t_1) q(t_2) \dots q(t_n) \exp \left\{ i \int_{t_0}^t [p\dot{q} - H(p, q)] d\tau \right\} \quad (4.55)$$

Lembrando a (4.46), obtemos, finalmente,

$$\frac{\delta^n W([J])}{\delta J(t_1) \dots \delta J(t_n)} \Big|_{J=0} = i^n \int dq \int dq_0 \psi_0^*(q, t) \psi_0(q_0, t_0) \cdot$$

$$\times \langle q, t | T[\hat{q}(t_1) \dots \hat{q}(t_n)] | q_0, t_0 \rangle = \quad (4.56)$$

$$= i^n (\psi_0(t), T[\hat{q}(t_1) \dots \hat{q}(t_n)] \psi_0(t_0))$$

o que dá o elemento de matriz entre o estado fundamental em  $t_0$  e o estado fundamental em  $t$  de um produto cronológico de operadores  $\hat{q}$ . Expressões deste tipo aparecem nas funções de Green da teoria quântica dos campos.

Exemplo: Oscilador Harmônico Forçado: Neste caso,  $\langle q, t | q_0, t_0 \rangle^J$  é dado pela (4.39) e (cf. (4.21), (4.23))

$$\psi_0(q, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi}\right)^{1/4} e^{-m\omega q^2/2} e^{-i\omega t/2} \quad (4.57)$$

de modo que as integrais em  $q$  e  $q_0$  na (4.52) são gaussianas, o que permite calcular  $W([J])$  explicitamente. O cálculo é um pouco trabalhoso, mas o resultado<sup>5,33,34</sup> é muito simples:

$$W([J]) = \exp \left[ -\frac{1}{2m\omega} \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau' J(\tau) J(\tau') e^{-i\omega(\tau-\tau')} \right]$$

$$= \exp \left\{ -\frac{1}{4m\omega} \int_{t_0}^t d\tau \left[ \int_{t_0}^{\tau} d\tau' J(\tau) J(\tau') e^{-i\omega(\tau-\tau')} + \int_{\tau}^t d\tau' J(\tau) J(\tau') e^{i\omega(\tau-\tau')} \right] \right\} \quad (4.58)$$

onde a 2ª integral foi obtida da 1ª invertendo a ordem de integração e trocando  $\tau \leftrightarrow \tau'$ .

Como foi mencionado após a (4.52), podemos agora passar ao limite  $t_0 \rightarrow -\infty$ ,  $t \rightarrow +\infty$ , o que leva a

$$W([J]) = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' J(\tau) D_+(\tau-\tau') J(\tau') \right\} \quad (4.59)$$

onde

$$D_+(t) = \frac{1}{2i\omega} \left[ \theta(t) e^{-i\omega t} + \theta(-t) e^{i\omega t} \right], \quad (4.60)$$

$\theta(t)$  sendo a função de Heaviside. Temos (cf. (4.54), (4.56)).

$$D_+(t-t') = i \frac{\delta^2 W([J])}{\delta J(t) \delta J(t')} \Big|_{J=0}$$

$$= -i (\psi_0(\infty), T[\hat{q}(t)\hat{q}(t')] \psi_0(-\infty)), \quad (4.61)$$

o que vai corresponder à função de dois pontos na teoria de campos.

## 5. EXTENSÃO A TEORIA DOS CAMPOS

A extensão da formulação funcional à teoria dos campos pode ser obtida<sup>33</sup> partindo do caso (2.27) de um sistema com  $\ell$  graus de liberdade, para o qual podemos escrever

$$\langle q_{f_1}, \dots, q_{f_\ell}; t | q_{01}, \dots, q_{0\ell}; t_0 \rangle$$

$$= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int \prod_{\alpha=1}^{\ell} \prod_{k=1}^{N-1} dq_{\alpha}(t_k) \prod_{k=1}^N \frac{dp_{\alpha}(t_k)}{2\pi}$$

$$\times \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \left[ \sum_{\alpha=1}^{\ell} p_{\alpha}(t_j) (q_{\alpha}(t_j) - q_{\alpha}(t_{j-1})) \right. \right.$$

$$\left. \left. - \epsilon H \left( \vec{p}(t_j), \frac{\vec{q}(t_j) + \vec{q}(t_{j-1})}{2} \right) \right] \right\}, \quad \epsilon = t_j - t_{j-1}. \quad (5.1)$$

Para passar deste caso à teoria dos campos, basta usar a técnica bem conhecida<sup>35</sup> de discretizar as variáveis de campo, dividindo o espaço em células e tomando como variável de campo associada a uma célula o valor médio do campo nessa célula. Tomemos, para simplificar, um campo escalar neutro  $\phi(\vec{x}, t)$  e subdividamos o espaço em cubos de volume  $\epsilon^3$  (podemos inicialmente tomar um volume total finito e passar depois ao limite de volume infinito).

O que vai desempenhar o papel de coordenada  $q_{\alpha}(t)$  é o valor médio do campo na célula designada pelo índice  $\alpha$ :

$$\phi_{\alpha}(t) = \frac{1}{\epsilon^3} \int_{V_{\alpha}} d^3x \phi(\vec{x}, t) = \langle \phi(\vec{x}, t) \rangle_{\alpha}. \quad (5.2)$$

Seja  $\dot{\phi}_{\alpha}(t) = \langle \dot{\phi}(\vec{x}, t) \rangle_{\alpha}$ . A Lagrangiana do campo depende também de  $\vec{\nabla}\phi$ ; na versão discreta, isto implica que temos uma dependência adicional<sup>35</sup> de

$$\phi_{\alpha\pm s}(t) = \langle \phi(\vec{x}, t) \rangle_{\alpha\pm s} \quad (5.3)$$

onde o índice  $\alpha\pm s$  designa todas as células vizinhas mais próximas de  $\alpha$  (as diferenças finitas correspondentes serão as componentes de  $\vec{\nabla}\phi$  quando  $\epsilon \rightarrow 0$ ). Logo, a Lagrangiana discretizada será

$$L = \int L d^3x + \sum_{\alpha} \epsilon^3 L_{\alpha}(\dot{\phi}_{\alpha}(t), \phi_{\alpha}(t), \phi_{\alpha\pm s}(t)), \quad (5.4)$$

onde  $L$  é a densidade de Lagrangiana.

O momento  $p_{\alpha}(t)$  canonicamente conjugado a  $\phi_{\alpha}(t)$  é

$$p_{\alpha}(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}_{\alpha}(t)} = \epsilon^3 \frac{\partial L_{\alpha}}{\partial \dot{\phi}_{\alpha}(t)} \equiv \epsilon^3 \pi_{\alpha}(t). \quad (5.5)$$

A Hamiltoniana é

$$H = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{\phi}_{\alpha} - L \equiv \sum_{\alpha} \epsilon^3 H_{\alpha}, \quad (5.6)$$

onde

$$H_{\alpha} = \pi_{\alpha} \dot{\phi}_{\alpha} - L_{\alpha} = H_{\alpha}(\pi_{\alpha}, \phi_{\alpha}, \phi_{\alpha\pm s}). \quad (5.7)$$

O análogo da (5.1) será então

$$\begin{aligned}
& \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int \prod_{\alpha} \prod_{k=1}^{N-1} d\phi_{\alpha}(t_k) \prod_{k=1}^N \frac{\epsilon^3}{2\pi} d\pi_{\alpha}(t_k) \cdot \\
& \times \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \epsilon \sum_{\alpha} \epsilon^3 \left[ \pi_{\alpha}(t_j) \cdot \frac{\phi_{\alpha}(t_j) - \phi_{\alpha}(t_{j-1})}{\epsilon} \right. \right. \\
& \left. \left. - H_{\alpha} \left( \pi_{\alpha}(t_j), \frac{\phi_{\alpha}(t_j) + \phi_{\alpha}(t_{j-1})}{2}, \frac{\phi_{\alpha \pm s}(t_j) + \phi_{\alpha \pm s}(t_{j-1})}{2} \right) \right] \right\} \\
& \equiv \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ i \int_{t_0}^t d\tau \int d^3x \left[ \pi(\vec{x}, \tau) \frac{\partial \phi(\vec{x}, \tau)}{\partial \tau} \right. \right. \\
& \left. \left. - H(\vec{x}, \tau) \right] \right\}, \tag{5.8}
\end{aligned}$$

onde

$$\mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{\alpha} \prod_{k=1}^{N-1} d\phi_{\alpha}(t_k) \prod_{k=1}^N \frac{\epsilon^3}{2\pi} d\pi_{\alpha}(t_k), \tag{5.9}$$

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}(\vec{x}, t)}. \tag{5.10}$$

Conforme foi mostrado por Schwinger<sup>36,37</sup>, as funções de Green da teoria quântica dos campos podem ser obtidas a partir de um funcional gerador  $W([J])$  que é o análogo da (4.52), representando a amplitude de transição vácuo  $\rightarrow$  vácuo na presença de fontes externas (estas "fontes" clássicas desempenham o papel de um corpo de prova):

$$\begin{aligned}
W([J]) = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi \exp \left\{ i \int d^4x \left[ \pi(x) \dot{\phi}(x) \right. \right. \\
\left. \left. - H(x) + \frac{i}{2} \epsilon \phi^2 + J(x) \phi(x) \right] \right\}, \quad x \equiv \begin{pmatrix} \vec{x} \\ ct \end{pmatrix} \tag{5.11}
\end{aligned}$$

onde o termo adicional  $\frac{i}{2} \epsilon \phi^2$  ( $\epsilon > 0$ ) é uma representação simbólica do fato de que devemos empregar tempos imaginários, como na (4.52), ou seja, uma "rotação de Wick" para passar da métrica de Minkowski à métrica euclídeana (ver abaixo).

Como no caso da (4.56), obtemos a função de Green de  $n$  pontos, ou seja, o valor esperado no vácuo do produto cronológico

de  $n$  operadores de campo (funções<sup>35</sup>  $\tau$ ), tomando derivadas funcionais de  $W([J])$  (o valor esperado no vácuo, como na (4.52), resulta da rotação de Wick):

$$\begin{aligned}
\frac{\delta^n W}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} \Big|_{J=0} &= i^n \langle 0 | T[\hat{\phi}(x_1) \dots \hat{\phi}(x_n)] | 0 \rangle \\
&= i^n \tau(x_1, \dots, x_n). \tag{5.12}
\end{aligned}$$

Em termos de teoria de perturbações (cf., p/ex., referência 35, Cap.17), as funções  $\tau$  assim definidas contêm diagramas de Feynman desconexos. Pode-se mostrar<sup>35,37</sup> que o funcional gerador  $Z([J])$  das funções de Green conexas  $G_c(x_1, \dots, x_n)$  é dado por

$$W([J]) = \exp\{i Z([J])\}, \tag{5.13}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
G_c(x_1, \dots, x_n) \\
= (-i)^{n-1} \frac{\delta^n Z([J])}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} \Big|_{J=0} \tag{5.14}
\end{aligned}$$

Quando a densidade de Hamiltoniana só depende quadraticamente dos momentos, ou seja, é da forma

$$H(x) = \frac{1}{2} \pi^2(x) + V[\phi(x), \vec{\nabla}\phi(x)], \tag{5.15}$$

as integrais funcionais sobre  $\pi$  na (5.11) são gaussianas e podem ser efetuadas explicitamente, como fizemos na (2.15). O resultado é análogo à (2.19):

$$W([J]) = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ i \int d^4x \left[ L(x) + J(x) \phi(x) \right] \right\}, \tag{5.16}$$

onde a definição de  $\mathcal{D}\phi$  inclui um fator de normalização, e

$$L(x) = \frac{1}{2} (\partial_0 \phi)^2 - V[\phi(x), \vec{\nabla}\phi(x)] \tag{5.17}$$

é a densidade de Lagrangiana.

Tomemos o caso bem conhecido em que

$$L = L_0 + L_I, \quad L_0 = \frac{1}{2} \left[ \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m^2 \phi^2 \right], \quad L_I = L_I(\phi), \quad (5.18)$$

onde  $L_0$  é a Lagrangiana livre e  $L_I$  a de interação. Para definir a (5.16) neste caso, é preciso considerá-la como prolongamento analítico à região de Minkowski do funcional gerador correspondente na região Euclideana, obtido formalmente da (5.16) por uma "rotação de Wick" de  $(-\infty, \infty)$  em  $t$  para  $(i\infty, -i\infty)$  (cf. (4.52)):

$$W_E([J]) = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ - \int d^4x \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} \right)^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{m^2 \phi^2}{2} - L_I(\phi) - J\phi \right] \right\}, \quad (5.19)$$

que é bem definido, admitindo ser  $-L_I(\phi)$  limitada inferiormente. A teoria de campos Euclideana foi formulada por Symanzik<sup>38</sup> e, do ponto de vista axiomático, por Osterwalder e Schrader<sup>39</sup>. O termo  $\frac{i}{2} \epsilon \phi^2$  na (5.11), que também introduz amortecimento exponencial na integral, é uma representação simbólica deste procedimento (equivale a substituir  $m^2$  por  $m^2 - i\epsilon$  na (5.19)). Vimos no final da Seção 2 que as formulações mais rigorosas das integrais de trajetória utilizam procedimentos análogos.

O funcional gerador  $W_0([J])$  associado à Lagrangiana livre (5.18) é dado (a menos de um fator de normalização sem maior importância) por uma expressão análoga à (4.59):

$$W_0([J]) = \exp \left\{ - \frac{i}{2} \int d^4x \int d^4y J(x) \Delta_F(x-y) J(y) \right\}, \quad (5.20)$$

onde

$$\Delta_F(x-y) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ik(x-y)}}{k^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (5.21)$$

é o propagador de Feynman do campo escalar neutro livre (o termo em  $i\epsilon$  seleciona a condição de contorno correta para a definição desse propagador). Este resultado pode ser obtido<sup>33</sup> pelo cálculo da integral funcional como limite da versão discretizada, mas também ser verificado imediatamente com o auxílio das (4.61), (5.12), (5.14), que dão

$$- \frac{\delta^2 W_0}{\delta J(x) \delta J(y)} \Big|_{J=0} = \langle 0 | T[\hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y)] | 0 \rangle = i \Delta_F(x-y), \quad (5.22)$$

conforme deveria ser.

O funcional gerador na presença da interação pode ser re-

presentado formalmente em termos do funcional gerador livre por

$$\begin{aligned} W([J]) &= \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ i \int d^4x \left[ L_0 + J\phi + L_I(\phi) \right] \right\} \\ &= \exp \left[ i \int d^4x L_I \left[ \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right] \right] \underbrace{\int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ i \int d^4x \left[ L_0 + J\phi \right] \right\}}_{W_0([J])}, \end{aligned} \quad (5.23)$$

onde a exponencial nas derivadas funcionais pode ser interpretada em termos de sua expansão em série de potências, lembrando que  $i^{-1} \delta/\delta J(x)$  aplicado a  $W_0$  equivale a  $\phi(x)$  dentro da integral funcional (cf. (4.54)). Finalmente, substituindo a (5.20) na (5.23) e efetuando a expansão da exponencial em série de potências, obtemos

$$\begin{aligned} W([J]) &= \exp \left[ i \int d^4x L_I \left[ \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right] \right] \cdot \\ &\times \exp \left\{ - \frac{i}{2} \int d^4x \int d^4y J(x) \Delta_F(x-y) J(y) \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \left[ \int d^4x L_I \left[ \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right] \right]^n \\ &\times \exp \left\{ - \frac{i}{2} \int d^4x \int d^4y J(x) \Delta_F(x-y) J(y) \right\}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Esta expansão em série de potências, combinada com a expressão (5.12) das funções de Green, corresponde à expansão perturbativa de Feynman-Dyson da teoria, ou seja, à expansão em termos de diagramas de Feynman, e permite obter imediatamente as regras de Feynman a eles associadas. Um exemplo explícito simples, incluindo o tratamento euclideano, foi dado por Yeung<sup>40</sup>.

A construção do funcional gerador e sua utilização para obter as regras de Feynman em casos mais complicados (particularmente nas teorias de calibre) é uma das aplicações mais importantes das integrais de trajetória à teoria quântica dos campos. No caso das teorias de calibre, a formulação funcional é dificultada por se tratar de sistemas dinâmicos com vínculos. A solução deste problema para o campo de Yang-Mills foi proposta por Faddeev e Popov<sup>41</sup> e Faddeev<sup>9</sup> discutiu de forma mais geral a formulação em termos de integrais de trajetória para sistemas vinculados. O método de Faddeev-Popov é discutido nos cursos sobre quantização e renormalização de teorias de campo e sobre teorias de calibre dados nesta Escola.

REFERÊNCIAS

1. R.P.Feynman, Rev.Mod.Phys. 20, 267 (1948).
2. P.A.M.Dirac, Physik. Zeits. Sowjetunion 3, 64 (1933); The Principles of Quantum Mechanics, 3rd ed. (Oxford, 1947), § 32.
3. Veja, p/ex., H.Goldstein, Classical Mechanics (Addison-Wesley, 1950), § 9-8.
4. Cf. M.S.Marinov, Phys. Rep. 60, 1 (1980).
5. R.P.Feynman e A.R.Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, N.Y., 1965).
6. R.P.Feynman, Phys.Rev. 84, 108 (1951), Apêndice B. Cf.W. Tobocman, N.Cimento 3, 1213 (1956); H.Davies, Proc.Camb.Phil.Soc. 59, 147 (1963); C.Garrood, Rev.Mod.Phys, 38, 483 (1966).
7. W.Pauli, Selected Topics in Field Quantization (M.I.T. Press, 1973), Cap. 7.
8. J.S.Dowker, J.Math.Phys. 17, 1873 (1976).
9. L.D.Faddeev, Theor.Math.Phys. (USSR) 1, 3 (1969).
10. D.Peak e A.Inomata, J.Math.Phys. 10, 1422(1969); cf. também A. Inomata e V. Singh, J.Math.Phys. 19, 2318 (1978).
11. B.S.De Witt, Rev.Mod.Phys. 29, 377 (1957).
12. M.Kac, Probability and Related Topics in Physical Sciences (Interscience, London, 1959), cap.4.
13. R.H.Cameron, J.Math. and Phys. 39, 126 (1960).
14. E.Nelson, J.Math.Phys. 5, 332 (1964). Cf. também D.Babbitt, J.Math. Phys. 4, 36 (1963).
15. Cf. B.Simon and M.Reed, Methods of Modern Mathematical Physics (Academic Press, N.Y.), vol. I (1972), § VIII 8, vol. II (1975) § X.11.
16. J.B.Keller e D.W.Mac Laughlin, Amer.Math.Monthly 82, 457 (1975).
17. S.A.Albeverio e R.J.Høegh-Krohn, Mathematical Theory of Feynman Path Integrals (Springer, Berlin, 1976).
18. C.De Witt-Morette, A.Maheshwari e B.Nelson, Phys.Reports 50, 255(1979).
19. R.Bellman, Introduction to Matrix Analysis (McGraw-Hill, N.Y., 1960), p.96; M.V.Fedoryuk, USSR Comput. Math.Math.Phys. 2 (1), 152 (1963).
20. Cf.L.L.Schiff, Quantum Mechanics, 2nd ed. (McGraw-Hill, N.Y., 1955).
21. M.V.Berry e K.E.Mount, Rep.Progr.Phys. 35, 315 (1972).
22. J.H.Van Vleck, Proc.Nat.Acad.Sci. (U.S.) 14, 178 (1928).
23. K.W.Ford e J.A.Wheeler, Ann.Phys. (N.Y.) 7, 259, 287 (1959).
24. M.Morse, The Calculus of Variations in the Large, (Am.Math. Soc. , Providence, 1935), p.61.
25. Cf. H.M.Nussenzveig, J.Opt.Soc.Am. 69, 1068 (1979) e outras referências ali citadas.
26. M.V.Berry, Singularities in Waves and Rays, curso dado na Escola

- de Verão de Les Houches, 1980 (a ser publicado pela North-Holland Publishing Co.)
27. G.Danglemayr e W.Weit, Ann.Phys.(N.Y.) 118, 108 (1979).
  28. I.M.Gelfand e A.M.Yaglom, J.Math.Phys. 1, 48 (1960).
  29. B.Davison, Proc.Roy.Soc. A225, 252 (1954).
  30. S.Levit e U.Smilansky, Ann.Phys. (N.Y.) 103, 198 (1977).
  31. J.R.Klauder, em Path Integrals, eds. G.J. Papadopoulos e J.T. Devreese (Plenum, N.Y., 1978), p.5.
  32. Cf.H.M.Nussenzveig, Introduction to Quantum Optics (Gordon & Breach, N.Y., 1973).
  33. E.S.Abers e B.W.Lee, Phys. Reports 9, 1 (1973).
  34. R.P.Feynman, Phys.Rev. 80, 440 (1950).
  35. Veja, p.ex., J.D.Bkorken e S.D.Drell, Relativistic Quantum Fields (McGraw-Hill, N.Y., 1965), p.15.
  36. J.Schwinger, Proc.Nat.Acad.Sci. 37, 452, 455 (1951).
  37. Cf. H.M.Fried, Functional Methods and Models in Quantum Field Theory (MIT Press, Cambridge, 1972).
  38. Cf. K.Symanzik, em Local Quantum Theory, ed. R.Jost, (Academic Press, N.Y., 1969), p.152.
  39. Cf.K.Osterwalder, em Constructive Quantum Field Theory, eds. G. Velo e A.S.Wightman (Springer, Berlin, 1973), p.71.
  40. W.B.Yeung, J.Phys. A 11, 991 (1978).
  41. L.D.Faddeev e V.N.Popov, Phys. Lett. B 25, 29 (1967).