vii) O propagador de Feynman

Nesta seção vamos introduzir a representação de coordenadas do operador de evolução temporal, também conhecido como o propagador da equação de Schrödinger ou, em sua representação em integrais funcionais, como o propagador de Feynman. Assim, o propagador $K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ é definido como

$$K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') \equiv \langle \mathbf{r}|U(t,t')|\mathbf{r}'\rangle \quad \text{(II.2.78)}$$

que nos permite escrever $|\psi(t)\rangle = U(t,t')|\psi(t')\rangle$ na representação de coordenadas como

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r},t) &= \int d^3r' \langle \mathbf{r}|U(t,t')|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\psi(t')\rangle \\ &= \int d^3r' K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')\,\psi(\mathbf{r},',t') \quad \text{(II.2.78')}\end{aligned}$$

Portanto, conhecendo-se $\psi(\mathbf{r}',t')$ podemos, através de uma convolução, determinar $\psi(\mathbf{r},t)$. Para tal, precisamos conhecer a função $K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$.

Se $H \neq H(t)$ esta função pode ser escrita como

$$\begin{aligned}K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') &= \langle \mathbf{r}|e^{-iH(t-t')/\hbar}|\mathbf{r}'\rangle \\ &= \sum_n \varphi_n(\mathbf{r})\,\varphi_n^*(\mathbf{r}')\,e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t')}\end{aligned}$$

onde $\langle \mathbf{r}|\varphi_n\rangle = \varphi_n(\mathbf{r})$ e $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. Esta expressão pode ou não ter uma forma simples, dependendo das autofunções de H.

Em geral, podemos dizer que $K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ obedece a

$$i\hbar\frac{dU(t,t')}{dt} = H(t)\,U(t,t')$$

ou, se $H = p^2/2m + V(\mathbf{r},t)$,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') + V(\mathbf{r},t)\,K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$$

sujeita à condição de contorno $K(\mathbf{r},t';\mathbf{r}',t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ pois

$$\psi(\mathbf{r},t') = \int \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r}',t')\,d^3r'$$

Uma função relacionada com K que é de grande utilidade na evolução temporal do estado físico é a função de Green $G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ da equação de Schrödinger, definida como

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') \equiv K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')\,\theta(t-t')$$

que obedece a

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial G}{\partial t} &= i\hbar\delta(t-t')\,K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') + i\hbar\theta(t-t')\frac{\partial K}{\partial t} \\ &= i\hbar\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + i\hbar\theta(t-t')\,HK \\ &= i\hbar\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + HG\end{aligned}$$

ou

$$i\hbar\frac{\partial G}{\partial t} - HG = i\hbar\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Esta expressão é de grande utilidade pois se pudermos escrever $H = H_0 + V(\mathbf{r},t)$ de tal forma que G_0, solução de

$$i\hbar\frac{\partial G_0}{\partial t} - H_0 G_0 = i\hbar\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

seja uma função fácil de ser determinada, a solução $K(\mathbf{r},t';\mathbf{r}',t')$ de

$$i\hbar\frac{\partial K}{\partial t} = HK$$

pode ser obtida da seguinte forma:

Como

$$V(\mathbf{r},t) = \frac{1}{i\hbar}\int i\hbar\delta(t-t')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,V(\mathbf{r}',t')\,d^3r'dt'$$

temos

$$i\hbar\frac{\partial K}{\partial t} - H_0 K = \frac{1}{i\hbar}\int d^3r''dt''\,i\hbar\,\delta(t-t'')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\,V(\mathbf{r}'',t'')\,K(\mathbf{r}'',t'';\mathbf{r}',t')$$

que tem como solução

$$K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = K_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') + \frac{1}{i\hbar}\int G_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}'',t'')\,V(\mathbf{r}'',t'')\,K(\mathbf{r}'',t'';\mathbf{r}',t')\,dt''d^3r''.$$

Como para $t > t'$ $K(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ podemos escrever

$$G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = G_0(\mathbf{r},t';\mathbf{r}',t') + \frac{1}{i\hbar}\int G_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}'',t'')\,V(\mathbf{r}'',t'')\,G(\mathbf{r}'',t'';\mathbf{r}',t')\,d^3r''dt' \quad \text{(II.2.79)}$$

que, dependendo do potencial $V(\mathbf{r},t)$, pode ser resolvida via transformadas de Fourier ou Laplace ou iterativamente como descrevemos abaixo.

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') &= G_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') + \frac{1}{i\hbar}\int G_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}'',t'')\,V(\mathbf{r}'',t'')\,G_0(\mathbf{r}'',t'';\mathbf{r}',t')\,d^3rdt' \\ &+ \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \iint d^3r''d^3r'''dt''dt'''G_0(\mathbf{r},t;\mathbf{r}''',t''')\,V(\mathbf{r}'''',t'''')\,G_0(\mathbf{r}''',t''';\mathbf{r}'',t'') \\ &\times V(\mathbf{r}'',t'')\,G_0(\mathbf{r}'',t'';\mathbf{r}',t') \\ &+ \ldots \end{aligned}$$

que é muito útil no caso de $V(\mathbf{r},t)$ depender de um parâmetro pequeno.

Apêndice I

Neste apêndice, nossa intenção é introduzir a representação de integrais funcionais para o propagador $K(x,t;x',0)$ quando $H \neq H(t)$. Como sabemos,

$$K(x,t;x',0) = \langle x|e^{-iHt/\hbar}|x'\rangle \quad \text{(AI.1)}$$

onde $H = p^2/2m + V(q)$.

Se agora subdividirmos o intervalo de tempo $[0,t]$ em $[0,t_1]\cup[t_1,t_2]\cup\ldots\cup[t_{N-1},t]$ podemos escrever (AI.1) como

$$K(x,t;x',0) = \langle x|e^{-iH(t-t_{N-1})/\hbar}\ldots e^{-iH(t_k-t_{k-1})/\hbar}\ldots e^{-iHt_1/\hbar}|x'\rangle \quad \text{(AI.2)}$$

onde temos N exponenciais. Se introduzirmos a relação de completeza

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_k|x_k\rangle\langle x_k| = \mathbb{1} \quad (1 \leq k \leq N-1)$$

entre cada exponencial temos

$$K(x,t;x',0) = \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty} dx_1\ldots dx_{N-1}\langle x|e^{-iH(t-t_{N-1})/\hbar}|x_{N-1}\rangle\langle x_{N-1}|\ldots|x_1\rangle\langle x_1|e^{-iHt_1/\hbar}|x'\rangle. \quad \text{(AI.3)}$$

Fazendo o comprimento ϵ de cada um dos intervalos $[t_k,t_{k-1}]$ tender a zero ($N\to\infty$), podemos escrever para o k-ésimo intervalo,

$$K(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}) \approx \langle x_k|1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}H|x_{k-1}\rangle \quad \text{(AI.4)}$$

com $x_N = x$ e $x_0 = x'$, ou ainda

$$K\left(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}\right)\approx\langle x_k|x_{k-1}\rangle-\frac{i\epsilon}{\hbar}\langle x_k|\frac{p^2}{2m}|x_{k-1}\rangle-\frac{i\epsilon}{\hbar}\langle x_k|V\left(q\right)|x_{k-1}\rangle \quad \text{(AI.5)}$$

Usando, então, que $\int dp_k|p_k\rangle\langle p_k|=\mathbb{1}$ temos

$$K\left(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}\right)\approx\int dp_k\langle x_k|p_k\rangle\langle p_k|x_{k-1}\rangle-\frac{i\epsilon}{\hbar}\int dp_k\frac{p_k^2}{2m}\langle x_k|p_k\rangle\langle p_k|x_{k-1}\rangle-\frac{i\epsilon}{\hbar}\int dp_kV\left(x_k\right)\langle x_k|p_k\rangle\langle p_k|x_{k-1}\rangle \quad \text{(AI.6)}$$

Mas, como

$$\langle x_k|p_k\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_kx_k/\hbar} \quad \text{(AI.7)}$$

a equação (AI.6) pode ser reescrita como

$$K\left(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp_k\exp i\frac{p_k}{\hbar}\left(x_k-x_{k-1}\right)\left(1-\frac{i\epsilon}{\hbar}\left(\frac{p_k^2}{2m}+V\left(x_k\right)\right)\right), \quad \text{(AI.8)}$$

que quando tem o seu integrando exponenciado nos dá

$$K\left(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp_k\exp i\frac{p_k}{\hbar}\left(x_k-x_{k-1}\right)\exp-\frac{i\epsilon}{\hbar}\left(\frac{p_k^2}{2m}+V\left(x_k\right)\right). \quad \text{(AI.9)}$$

A integral em p_k pode ser resolvida trivialmente, tendo como resultado

$$K\left(x_k,t_k;x_{k-1},t_{k-1}\right)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{1/2}\exp i\frac{\epsilon}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\frac{\left(x_k-x_{k-1}\right)^2}{\epsilon^2}-V\left(x_k\right)\right) \quad \text{(AI.10)}$$

Substituindo (AI.10) em (AI.3), temos, finalmente

$$K\left(x,t;x',0\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\cdots\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx_1\ldots dx_{N-1}\left\{\prod_{k=1}^{N}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{1/2}\right\}\exp\sum_k\frac{i\epsilon}{\hbar}\left(\frac{m}{2}\frac{\left(x_k-x_{k-1}\right)^2}{\epsilon^2}-V\left(x_k\right)\right) \quad \text{(AI.11)}$$

Tomando o limite $\epsilon\to0$ e lembrando que $\epsilon=\Delta t_k\equiv t_k-t_{k-1}$ podemos escrever (AI.11) da seguinte forma simbólica:

$$K\left(x,t;x',0\right)=\prod_{t'=0}^{t}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dx\left(t'\right)}{\mathcal{N}}\exp\frac{i}{\hbar}S\left[x\left(t'\right)\right], \quad \text{(AI.12)}$$

onde

$$S\left[x\left(t'\right)\right]=\int_0^t\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V\left(x\right)\right)dt',$$

ou ainda

$$K\left(x,t;x',0\right)=\int\limits_{x'}^{x}\mathcal{D}x\left(t'\right)\exp\frac{i}{\hbar}S\left[x\left(t'\right)\right] \quad \text{(AI.13)}$$

que já tem em $\mathcal{D}x\left(t'\right)$ o fator de normalização $\mathcal{N}$ de (AI.12). Portanto, conseguimos escrever o propagador como uma soma das exponenciais das ações sobre cada trajetória ligando os pontos x' e x. Esta é a famosa representação de "integrais de trajetórias" que é devida a Feynman.

Nosso próximo passo será resolver dois exemplos específicos; a partícula livre e a Lagrangiana quadrática.

i) Partícula livre:

Neste caso, $V\left(q\right)=0$, o que implica em

$$K\left(x,t;x',0\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\cdots\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx_1\ldots dx_{N-1}\prod_{k=1}^{N}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}\exp\frac{i}{\hbar}\frac{m}{\epsilon}\left(x_k-x_{k-1}\right)^2 \quad \text{(AI.14)}$$

Usando o resultado conhecido de integrais gaussianas,

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp -a\left(x-u\right)^2 \times \sqrt{\frac{b}{\pi}} \exp -b\left(u-y\right)^2 = \sqrt{\frac{ab}{\pi\left(a+b\right)}} \exp -\frac{ab}{a+b}\left(x-y\right)^2 \quad \text{(AI.15)}$$

temos, por exemplo,

$$\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \int dx_1 \exp \frac{im}{2\hbar\epsilon}\left(x_2-x_1\right)^2 \exp \frac{im}{2\hbar\epsilon}\left(x_1-x'\right)^2 = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(2\epsilon\right)}} \exp \frac{im}{2\hbar\left(2\epsilon\right)}\left(x_2-x'\right)^2 \quad \text{(AI.16)}$$

Efetuando a integral em x_3 e assim sucessivamente até x_N é simples mostrar que

$$K\left(x,t;x',0\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp \frac{im}{2\hbar}\frac{\left(x-x'\right)^2}{t} \quad \text{(AI.17)}$$

ii) Lagrangiana quadrática:

Consideremos um sistema cuja dinâmica seja regida por uma lagrangiana da forma

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + b\left(t\right)x\dot{x} - \frac{1}{2}c\left(t\right)x^2 - e\left(t\right)x \quad \text{(AI.18)}$$

Queremos computar o propagador quântico deste sistema através da integral funcional

$$K\left(x,t;x',0\right) = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x\left(t'\right) \exp \frac{i}{\hbar} S\left[x\left(t'\right)\right] \quad \text{(AI.19)}$$

Para tal, vamos fazer uma mudança de variáveis

$$y\left(t'\right) = x\left(t'\right) - \bar{x}\left(t'\right) \quad \text{(AI.20)}$$

onde $\bar{x}\left(t'\right)$ é a solução da equação de Euler-Lagrange de (AI.18):

$$m\ddot{\bar{x}} + \Big(c(t) + \dot{b}(t)\Big)\bar{x} + e(t) = 0 \quad \text{(AI.21)}$$

Substituindo (AI.20) em $S = \int_0^t L dt$, integrando por partes e usando (AI.21), tem-se

$$K\left(x,t;x',0\right) = G\left(t\right) \exp \frac{i}{\hbar}\bar{S}\left(x,x',t\right), \quad \text{(AI.22)}$$

onde $\bar{S}\left(x,x',t\right)$ é a ação ao longo da trajetória clássica $\bar{x}\left(t\right)$ e

$$G\left(t\right) \equiv \int_0^0 \mathcal{D}y\left(t'\right) \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left\{\frac{1}{2}m\dot{y}^2 - \frac{1}{2}\widetilde{c}\left(t'\right)y^2\right\} dt';\ \widetilde{c} = c + \dot{b} \quad \text{(AI.23)}$$

é uma integral sobre trajetórias $y\left(t'\right)$ tais que $y\left(t\right) = y\left(0\right) = 0$. Esta integral funcional pode ser resolvida em sua versão discretizada como veremos no que segue.

Com o auxílio de (AI.11) a (AI.23) se reduz a

$$G\left(t\right) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0 \\ N\epsilon = t}} \int\cdots\int dy_1\ldots dy_{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \exp \frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2}\frac{\left(y_j-y_{j-1}\right)^2}{\epsilon} - \frac{1}{2}\epsilon\,\widetilde{c}_{j-1}\,y_{j-1}^2\right\}, \quad \text{(AI.24)}$$

onde $\widetilde{c}_j \equiv \widetilde{c}\left(t_{j-1}\right)$. Definindo então o vetor

$$\eta = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix} \quad \text{(AI.25)}$$

e a matriz

$$\sigma = \frac{m}{2i\hbar\epsilon}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ 0 & -1 & 2 & & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix} + \frac{i\epsilon}{2\hbar}\begin{bmatrix} \widetilde{c}_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \widetilde{c}_{N-1} \end{bmatrix} \quad \text{(AI.26)}$$

pode-se escrever (AI.24) como

$$G(t) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0 \\ N\epsilon = t}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int d^{N-1}\eta \exp -\eta^T\sigma\eta \quad \text{(AI.27)}$$

A matriz σ pode ser diagonalizada através de uma transformação de similiridade

$$\sigma = U^\dagger \sigma_D U \quad \text{(AI.28)}$$

onde U é tal que $U^\dagger U = \mathbb{1}$. Seja $\xi = U\eta$; então,

$$\begin{aligned} \int d^{N-1}\eta \, \exp -\eta^T\sigma\eta &= \int d^{N-1}\xi \, \exp -\xi^T\sigma_D\xi \\ &= \prod_{\alpha=1}^{N-1}\sqrt{\frac{\pi}{\sigma_\alpha}} \\ &= \frac{\pi^{\frac{(N-1)}{2}}}{\sqrt{\det\sigma}} \quad \text{(AI.29)} \end{aligned}$$

desde que $\det\sigma \neq 0$.

Substituindo (AI.29) em (AI.27) obtém-se

$$G(t) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0 \\ N\epsilon = t}} \left(\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)\frac{1}{\epsilon}\frac{1}{\left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m}\right)^{N-1}\det\sigma}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{(AI.30)}$$

e o nosso problema passa a ser o cálculo de

$$f(t) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \epsilon\to 0}} \left(\epsilon\left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m}\right)^{N-1}\det\sigma\right) \quad \text{(AI.31)}$$

que, por sua vez, nos obriga a efetuar o seguinte determinante:

$$\begin{aligned} \left(\frac{2i\hbar\epsilon}{m}\right)^{N-1}\det\sigma &= \det\left\{\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{bmatrix} - \frac{\epsilon^2}{m}\begin{bmatrix} c_1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \widetilde{c}_{N-1} \end{bmatrix}\right\} \\ &\equiv \det\widetilde{\sigma}_{N-1} \\ &\equiv p_{N-1} \quad \text{(AI.32)} \end{aligned}$$

Usando a expressão de $\widetilde{\sigma}_{j+1}$ em menores pode-se mostrar que

$$p_{j+1} = \left(2 - \frac{\epsilon^2}{m}\widetilde{c}_{j+1}\right) p_j - p_{j-1}; \;\; j = 1, \ldots, N-2 \quad \text{(AI.33)}$$

onde $p_1 = 2 - \frac{\epsilon^2 \widetilde{c}_1}{m}$ e $p_0 \equiv 1$. Reescrevendo (AI.33) como

$$\frac{p_{j+1} - 2p_j + p_{j-1}}{\epsilon^2} = \frac{\widetilde{c}_{j+1} p_j}{m} \quad \text{(AI.34)}$$

e definindo $\varphi(t) \equiv \epsilon p_j$, vemos facilmente que quando $\epsilon \to 0$ esta equação de diferenças finitas tranforma-se em

$$\frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} = -\frac{\widetilde{c}(t)\,\varphi(t)}{m} \quad \text{(AI.35)}$$

com condições iniciais que podem ser obtidas através de

$$\varphi(0) = \epsilon p_0 \to 0 \quad \text{(AI.36)}$$

$$\left.\frac{d\varphi}{dt}\right|_{t=0} = \epsilon\left(\frac{p_1 - p_0}{\epsilon}\right) = 2 - \frac{\epsilon^2 c_1}{m} - 1 \to 1 \quad \text{(AI.37)}$$

Consequentemente, a função $f(t)$ definida em (AI.31) é solução de

$$m\frac{d^2 f(t)}{dt^2} + \widetilde{c}(t)\, f(t) = 0 \quad \text{(AI.38)}$$

com $f(0) = 0$ e $\frac{df(t)}{dt} = 1$ e, finalmente, podemos escrever o propagador (AI.22) como

$$K(x, t; x', 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar f(t)}} \exp \frac{i}{\hbar}\bar{S}(x, x', t) \quad \text{(AI.39)}$$

No caso particular de um oscilador harmônico, $c(t) = m\omega^2$ e, portanto, $f(t)$ é tal que

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + \omega^2 f = 0 \quad \text{(AI.40)}$$

com as condições iniciais de (AI.38), o que nos leva a

$$f(t) = \frac{\sin \omega t}{\omega} \quad \text{(AI.41)}$$

A representação do elemento de matriz $\langle x| \exp -i\frac{Ht}{\hbar}|x'\rangle$ por uma integral funcional (AI.13) pode ser também usada para o operador densidade, $\rho(x, x', \beta)$, do sistema em equilíbrio. Definindo $Z \equiv \operatorname{tr} \exp -\beta H$, a função de partição do sistema, podemos escrever

$$\langle x|\rho|x'\rangle = Z^{-1}\langle x|e^{-\beta H}|x'\rangle \quad \text{(AI.42)}$$

o que nos permite visualisar o elemento de matriz do operador densidade como sendo o propagador do mesmo sistema para tempos complexos, ou seja,

$$t = -i\beta\hbar \quad \text{(AI.43)}$$

Usando, então, a equação (AI.13) e efetuando a mudança de variáveis $t' = -i\hbar\tau$ onde $\tau \in [0, \hbar\beta]$, tem-se

$$\rho(x, x', \beta) = Z^{-1} \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x(\tau) \exp -\frac{1}{\hbar} S_E[x(\tau)] \quad \text{(AI.44)}$$

onde

$$S_E[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left\{\frac{1}{2} m\dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau))\right\} d\tau \quad \text{(AI.45)}$$

é a chamada "ação Euclideana" do sistema.

Finalmente, devemos enfatizar que ambas as representações podem ser generalizadas nas formas (AI.13) e (AI.44,45) para um número arbitrário de componentes e/ou dimensões do sistema.

A aproximação semi-clássica

Como vimos antes, o propagador K admite a representação

$$K(x,t;x',0) = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}q(t') \exp \frac{i}{\hbar} S[q(t')] \quad \text{(II.2.80)}$$

onde

$$S = \int_0^t L dt' \text{ e } L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q)$$

No limite $\hbar \to 0$ o integrando oscila rapidamente fazendo com que a contribuição dominante para a integral venha dos pontos (caminhos) estacionários da ação.

Expandindo $S[q]$ em torno de $q_c(t')$ temos

$$\begin{aligned} S[q] &= S[q_c] + \int_0^t dt' \delta q(t') \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' dt'' \delta q(t') \left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial q^2} \delta(t''-t') - \frac{d}{dt'} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot{q}} \right) \delta(t'-t'') - \frac{d}{dt'} \left[\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2} \right) \frac{d}{dt'} \delta(t'-t'') \right] \right\} \delta q(t'') \\ &+ \ldots \quad \text{(II.2.81)} \end{aligned}$$

Se q_c é tal que

$$\left. \frac{\delta S}{\delta q} \right|_{q_c} = \left. \frac{\partial L}{\partial q} \right|_{q_c} - \frac{d}{dt} \left. \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right|_{q_c} = 0$$

temos $m\ddot{q}_c + V'(q_c) = 0$ que é a equação obedecida pela trajetória clássica. No nosso caso particular temos

$$\frac{\partial^2 L}{\partial q^2} = V''(q), \quad \frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot{q}} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^2} = m,$$

o que nos leva a reescrever (I.2.81) como

$$S[q] = S[q_c] + \frac{1}{2} \int_0^t dt' \delta q(t') \left\{ -m \frac{d^2}{dt'^2} + V''(q_c) \right\} \delta q(t') + \ldots$$

Mas, como $\delta q(t') = 0$ se $t' = 0$ ou t podemos escrever

$$\delta q(t') = \sum_n c_n \varphi_n(t'),$$

onde $\varphi_n(t) = \varphi_n(0) = 0$. Desta forma,

$$\begin{aligned} S[q] &= S[q_c] + \frac{1}{2} \int_0^t dt' \delta q(t') \left\{ -m \frac{d^2}{dt'^2} + V''(q_c) \right\} \delta q(t') \\ &= S[q_c] + \frac{1}{2} \sum_{nm} c_m c_n \int_0^t \varphi_m(t') \left\{ -m \frac{d^2}{dt'^2} + V''(q_c) \right\} \varphi_n(t'). \end{aligned}$$

Se escolhermos $\varphi_n(t')$ tal que

$$-m \frac{d^2 \varphi_n(t')}{dt'^2} + V''(q_c) \varphi_n(t') = \lambda_n \varphi_n(t')$$

teremos

$$S[q] = S[q_c] + \sum_n \frac{\lambda_n}{2} c_n^2$$

pois

$$\int_0^t \varphi_n(t')\,\varphi_m(t')\,dt' = \delta_{mn}$$

Então,

$$\begin{aligned} K(x,t;x',0) &\approx e^{\frac{i}{\hbar}S[q_c]} \int \cdots \int \frac{J}{\mathcal{N}} dc_1 dc_2 \ldots dc_n \ldots \exp \frac{i}{2\hbar} \sum_n \lambda_n c_n^2 \\ &= \lim_{n\to\infty} \left[\frac{J}{\mathcal{N}} (2\pi i\hbar)^{\frac{n}{2}} \right] \frac{1}{\sqrt{\det\left[-m\partial_t^2 + V''(q_c)\right]}} e^{\frac{i}{\hbar}S[q_c]}, \end{aligned}$$

onde J é o Jacobiano da transformação $\delta q(t') \to dc_n$ e $\mathcal{N}$ o fator de normalização.

Baseados nos resultados das integrais quadráticas podemos reduzir todo o pré-fator na seguinte expressão

$$\text{pré-fator} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar f(t)}}$$

onde

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + \widetilde{c}(t)\, f(t) = 0 \quad \text{(II.2.82)}$$

com $f(0) = 0$ e $\left.\frac{df}{dt}\right|_0 = 1$.

Uma outra forma de se escrever o pré-fator é baseada no raciocínio desenvolvido abaixo.

Consideremos todas as trajetórias extremas que saem de x' em $t = 0$ com diferentes momentos; $x(p,t)$ tal que $x(p,0) = x_i$.

Seja $J(p,t) \equiv \partial x(p,t)/\partial p$, então

$$x(p+\Delta p, t) - x(p,t) = \Delta p J(p,t).$$

Como $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$ e $x = x(p,t)$ podemos tomar $\frac{\partial}{\partial p}$ da equação de movimento que resulta em

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{J}\right) + \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right] J = 0,$$

com as condições de contorno $J(p,0) = \frac{\partial x(p,0)}{\partial p} = 0$ e

$$\dot{J}(p,0) = \frac{\partial \dot{x}(p,0)}{\partial p} = \frac{1}{m}\frac{\partial p}{\partial p} = \frac{1}{m},$$

o que nos permite identificar $mJ = f$ em (II.2.82). Mas, usando que $S[q_c] \equiv S_c(x,x',t)$ temos $p = p(0) = -\frac{\partial S_c}{\partial x'} \Rightarrow \frac{1}{J} = \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\partial^2 S_c}{\partial x \partial x'}$ o que implica em

$$\left.\begin{aligned} K(x,t;x',0) &= \sqrt{\tfrac{i}{2\pi\hbar}\tfrac{\partial^2 S_c}{\partial x \partial x'}} \exp \tfrac{i}{\hbar} S_c(x,x') \\ &\text{que pode ser generalizada para} \\ K(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',0) &= \sqrt{\tfrac{i}{2\pi\hbar}\det\left(\tfrac{\partial^2 S_c}{\partial x_i \partial x'_j}\right)} \exp \tfrac{i}{\hbar} S_c(\mathbf{x},\mathbf{x}') \end{aligned}\right\} \text{(II.2.83)}$$