

MÔNICA CRISTINA MELQUIADES DUQUE

ALGUNS MÉTODOS PARA O CÁLCULO DO
PROPAGADOR DE FEYNMAN

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-graduação em Física
12 de março de 2013

MÔNICA CRISTINA MELQUÍADES DUQUE

ALGUNS MÉTODOS PARA O CÁLCULO DO
PROPAGADOR DE FEYNMAN

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do título de mestre.

Área de concentração: Teoria de Partículas e Campos.

Orientador: Dr. Wilson Oliveira

12 de março de 2013

Para Bruna e Carolina.

Agradeço à minha família, meus pais e meus irmãos, minhas amigas, todos os amigos e professores do departamento e também àqueles que me propuseram o desafio. Também agradeço muito, de forma incomensurável, ao Dr Wilson Oliveira, pela confiança e paciência. A CAPES pelo auxílio financeiro e a UFJF pelo auxílio financeiro e pelo espaço físico.

Aqui, o mais bobo acende cigarro no relâmpago.
Um pensamento de Joãozinho da Babilônia

Resumo

Apresenta-se aqui uma discussão sobre três métodos para o cálculo do propagador de Feynman para alguns modelos em mecânica quântica não relativística. O formalismo de Feynman é apenas um dos vários existentes para a abordagem de problemas na mecânica quântica. O primeiro método é um cálculo da integral de caminho, que é baseado em uma relação de recorrência para a produção de propagadores infinitesimais. Essa relação de recorrência não tem aparecido em discussões anteriores da integral de caminho do oscilador harmônico unidimensional, embora seja inspirada por uma relação similar em um sistema tridimensional. O segundo método foi desenvolvido por Schwinger em 1951 para tratar ações efetivas na eletrodinâmica quântica baseado na solução das equações de movimento do operador de Heisenberg. Com o uso adequado do operador ordenado e subordinadas as condições iniciais produz o propagador. Por fim, o terceiro método, que usa-se de técnicas algébricas baseadas na fatoração do operador evolução temporal usando a fórmula Baker-Campbell-Hausdorff.

Palavras chaves: Método integral de caminho; Método de Shwinger; Método Algébrico.

Abstract

Here we present a discussion of three methods to calculate the Feynman propagator for some models in non-relativistic quantum mechanics. The formalism of Feynman is just one of several available for addressing problems in quantum mechanics. The first method is a calculation of the integral path, which is based on a recurrence relation for the production of infinitesimal propagators. This recurrence relation has not appeared in previous discussions of the full path of the one-dimensional harmonic oscillator, although inspired by a similar relationship in a three-dimensional system. The second method was developed by Schwinger in 1951 for treating effective action in quantum electrodynamics based on the solution of the equations of motion of the Heisenberg operator. With the proper use of the operator ordained and subordinated the initial conditions produces the propagator. Finally, the third method, which uses the algebraic techniques are based on factorization of the time evolution operator using the formula Baker-Campbell-Hausdorff.

Keywords : Path integral method; Method of Shwinger; Algebraic method.

Sumário

1	Introdução	9
1.1	Considerações iniciais	9
1.2	O propagador quântico	10
1.2.1	O operador evolução temporal	11
1.2.2	Propagador na mecânica quântica	15
1.2.3	O princípio da mínima ação	16
2	Método integral de caminho	20
2.1	Fundamentos da integral de caminho	20
2.2	A integral de caminho	24
2.3	O propagador na mecânica quântica não relativística	26
2.4	Equivalência entre os formalismos de Feynman e Schrödinger	29
2.5	Cálculo do propagador usando integrais de caminho	32
2.5.1	Oscilador harmônico	32
3	Método de Schwinger	37
3.1	O método de Schwinger	37
3.2	Cálculo do propagador usando o método de Schwinger	40
3.2.1	Oscilador harmônico	40
4	Método algébrico	44
4.1	O método algébrico	44
5	Autofunções, autovalores e a função partição	51
5.1	Autofunções e autovalores de energia	51
5.2	Função partição	53
6	Conclusões	55
	Bibliografia	55

A	Integrais especiais	58
A.1	Cálculo de algumas integrais	58
A.2	A integral de Fresnel	60
B	A fórmula de Mehler	63
B.1	Dedução da fórmula de Mehler	63

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações iniciais

Em 1933, Dirac apresenta uma formulação da mecânica quântica usando a lagrangiana do sistema [1]. Ele afirma que, classicamente, as formulações lagrangianas e hamiltonianas são equivalentes, portanto, essa equivalência deve aparecer na mecânica quântica [2]. Além disso, a formulação lagrangiana é covariante, uma vez que a ação é um escalar de Lorentz, enquanto a formulação hamiltoniana não o é. A formulação lagrangiana poderia ser mais facilmente utilizada para tratar sistemas relativísticos [1].

Seguindo a ideia anteriormente desenvolvida por Dirac, em 1948, Feynman propôs uma maneira alternativa de obter o propagador quântico sem necessariamente usar a equação de Schrödinger [3]. Ele imaginou que, quanticamente, uma partícula poderia evoluir entre dois estados seguindo todas as trajetórias possíveis. Então, postulou a seguinte relação:

$$K(\vec{x}, t, \vec{x}_0, t_0) = \sum_{\substack{\text{todas} \\ \text{trajetórias}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (1.1.1)$$

em que S é a ação correspondente a cada uma das trajetórias.

O método de Schwinger foi introduzido em 1951, em seu famoso trabalho *On gauge invariance and vacuum polarization* [4] no contexto da teoria quântica de campos. Schwinger desenvolveu o método para tratar ações efetivas na eletrodinâmica quântica, baseando-se nas soluções das equações de movimento do operador de Heisenberg [5].

A origem do método algébrico remonta ao início da mecânica quântica, com as formulações das matrizes de Jordan, Heisenberg, Pauli, entre outros [5]. Esse método está conectado com a dinâmica dos sistemas de grupos de simetria. Hoje, há muitos trabalhos desenvolvidos para a simetria de

problemas coulombianos não relativísticos descritos por meios de teoria de grupos [6]. O método algébrico pode ser utilizado para a solução problemas interessantes, como por exemplo, o átomo de hidrogênio [7] [8] [9] [10]. Para isso, é suficiente um conhecimento básico da álgebra de Lie.

A proposta deste trabalho é apresentar uma discussão sobre alguns métodos a fim de se obter o cálculo do propagador de Feynman para o oscilador harmônico unidimensional. Escolheu-se o oscilador harmônico, devido à sua importância em praticamente todos os ramos da física. Não há aqui qualquer pretensão de originalidade, trata-se de conhecimento estabelecido e exposto por muitos autores, em particular, apoia-se extensamente na referência principal [5]. Espera-se que este material seja útil a todos os estudantes interessados no assunto, pois esses encontrarão aqui os cálculos detalhados para esse propagador usando três técnicas diferentes.

No primeiro método, encontra-se o propagador para o oscilador harmônico usando-se da integral de caminho, mas sem fazer uso da aproximação semi-clássica, como é frequentemente usado. Apresenta-se um procedimento alternativo e muito simples.

O segundo método consiste em realizar três simples passos a partir da equação diferencial do propagador na representação de Heisenberg. Esse método também pode ser aplicado para o cálculo do propagador de Feynman para o problema de força constante, para uma partícula carregada em um campo magnético uniforme, entre outros.

O terceiro método tem como ideia principal a fatoração do operador evolução temporal. Para obter o operador evolução temporal fatorado, utiliza-se de manipulações dos operadores momento e posição, bem como, da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff.

Visando o desenvolvimento dos métodos, inicia-se o trabalho com uma revisão aos formalismos mais conhecidos da mecânica quântica, que são os formalismo de Schrödinger, Heisenberg e Feynman. No capítulo 2 é apresentado o método integral de caminho, no capítulo 3 desenvolve-se o método de Schwinger, no capítulo 4, faz-se o estudo do método algébrico. Com o objetivo didático, no capítulo 5 obtém-se as autofunções, autovalores e a função partição diretamente da expressão do propagador de Feynman. Para finalizar, no capítulo 6, apresenta-se as conclusões.

1.2 O propagador quântico

O estado de um sistema clássico é perfeitamente determinado a partir do conhecimento da dependência temporal das coordenadas e momenta conjugados associados ao sistema, que são obtidas das equações de Hamilton-Jacobi

ou a partir das equações de Euler-Lagrange. Nos sistemas quânticos são associados operadores definidos no espaço de vetores de estado. O conceito determinista de estado cede lugar a uma formulação probabilística, a partir de amplitudes associadas a esses vetores e estados. A evolução temporal do sistema é agora atribuída a evolução temporal dos vetores de estado, na formulação de Schrödinger, ou aos operadores associados ao espaço de vetores na formulação de Heisenberg. Determinar a evolução temporal do sistema no espaço de vetores implica em calcular o operador evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$ ou propagador do sistema, considerando a representação apropriada. Então o estudo da dinâmica quântica do sistema busca métodos para se determinar esse propagador [11] [12] [13] [14] [15].

1.2.1 O operador evolução temporal

Representação de Schrödinger

De acordo com os postulados da mecânica quântica, o estado de um sistema físico num instante t é completamente especificado pelo estado $|\psi_s(t)\rangle$. Por outro lado, a questão básica da dinâmica quântica é a de saber como evolui um sistema quântico entre um instante t_0 e um instante final t , isto é, como obter $|\psi_s(t)\rangle$ a partir de $|\psi_s(t_0)\rangle$. Essa afirmação de que $|\psi_s(t_0)\rangle$ determina $|\psi_s(t)\rangle$ é a forma na mecânica quântica do *Princípio da Causalidade*, que é assumido aqui como verdadeiro. A atuação de um operador linear - o *operador temporal* $\hat{U}(t, t_0)$ - sobre $|\psi_s(t_0)\rangle$ permite obter o estado da partícula num instante posterior t [13], isto é,

$$|\psi_s(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle, \quad (1.2.1)$$

$$\langle\psi_s(t)| = \langle\psi_s(t_0)| \hat{U}^\dagger(t, t_0). \quad (1.2.2)$$

Como a norma do vetor de estado do sistema não deve ser alterada durante a evolução temporal,

$$\langle\psi_s(t)|\psi_s(t)\rangle = \langle\psi_s(t_0)|\psi_s(t_0)\rangle. \quad (1.2.3)$$

Usando as expressões (1.2.1) e (1.2.2) tem-se que,

$$\begin{aligned} \langle\psi_s(t)|\psi_s(t)\rangle &= \langle\psi_s(t_0)| \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle \\ &= \langle\psi_s(t_0)|\psi_s(t_0)\rangle. \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

Logo,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{1}. \quad (1.2.5)$$

Conclui-se, então, que o operador $\hat{U}(t, t_0)$ é unitário, isto é,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{1}. \quad (1.2.6)$$

Por outro lado, a expressão (1.2.1) indica que

$$\hat{U}(t, t) = \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (1.2.7)$$

Seja

$$\begin{aligned} |\psi_s(t_2)\rangle &= \hat{U}(t_2, t_1)|\psi_s(t_1)\rangle \\ &= \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|\psi_s(t_0)\rangle \\ &= \hat{U}(t_2, t_0)|\psi_s(t_0)\rangle \\ \Rightarrow \hat{U}(t_2, t_0) &= \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0). \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

Agora, para um intervalo de tempo infinitesimal $\epsilon \ll 1$, defini-se o operador $\hat{H}(t)$ da seguinte maneira:

$$\hat{U}(t + \epsilon, t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{H}(t). \quad (1.2.9)$$

Usando-se da expressão (1.2.8), tem-se,

$$\hat{U}(t + \epsilon, t_0) = \hat{U}(t + \epsilon, t)\hat{U}(t, t_0). \quad (1.2.10)$$

Desse modo, a equação diferencial satisfeita por $\hat{U}(t, t_0)$ é

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \epsilon, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \epsilon, t)\hat{U}(t, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{[\hat{U}(t + \epsilon, t) - \hat{1}]\hat{U}(t, t_0)}{\epsilon} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \\ \Rightarrow i\hbar\frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} &= \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0), \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

com a condição inicial dada pela expressão (1.2.7), $\hat{U}(t, t_0) = \hat{1}$ [13] [16] [17].

O operador $\hat{H}(t)$ é característico do sistema físico em consideração, e é análogo à função introduzida pelo matemático irlandês Sir Willian Ronan Hamilton (1805-1865), em 1835, conhecida como hamiltoniana [13]. Portanto, em mecânica quântica ele é denominado de *operador hamiltoniano*. Agora, se \hat{H} não depende explicitamente do tempo t , a expressão (1.2.11) pode ser integrada, obtendo-se o seguinte resultado:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i\hat{H}}{\hbar} (t - t_0) \right]. \quad (1.2.12)$$

De acordo com a expressão (1.2.5), a expressão (1.2.12) mostra que \hat{H} é hermitiano (isso é necessário a fim de que o autovalor seja obrigatoriamente real) e unitário. Levando-se a expressão (1.2.12) na expressão (1.2.1), tem-se,

$$|\psi_s(t)\rangle = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right] |\psi_s(0)\rangle. \quad (1.2.13)$$

Derivando-se a expressão acima,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t \right] |\psi_s(0)\rangle \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle &= \hat{H} |\psi_s(t)\rangle. \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

A expressão acima, mostra a *equação de movimento de Schrödinger* do estado $|\psi_s(t)\rangle$. Efetuando-se o produto escalar da expressão (1.2.14) com $\langle \vec{r} |$, que representa o operador adjunto do autoestado do operador posição, lembrando-se que sendo $|\psi_s(t)\rangle$ é o autoestado de uma dada partícula no instante t e $|\vec{r}\rangle$ é o autoestado do operador posição \hat{R} então $\langle \vec{r} | \psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$, tem-se,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi_s(\vec{r}, t), \quad (1.2.15)$$

que nada mais é do que a *equação de Schrödinger*. Por essa razão, a expressão (1.2.14) é denominada de *representação de Schrodinger* do estado $|\psi_s(t)\rangle$, pois é o estado que evolui no tempo enquanto o operador \hat{H} permanece constante no tempo.

Representação de Heisenberg

Em 1927, o físico alemão Werner Karl Heisenberg (1901-1976) estudou a evolução temporal dos operadores da seguinte maneira [13]: admite-se que

os *estados de Heisenberg* $|\psi_H\rangle$ coincidam com os *estados de Schrödinger* $|\psi_s\rangle$ no instante $t = 0$, isto é,

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi_s(0)\rangle. \quad (1.2.16)$$

Impondo-se que os valores esperados dos operadores \hat{O} ¹ são os mesmos nas duas expressões e \hat{H} é hermitiano e independente do tempo.

Então,

$$\begin{aligned} \langle \psi_s(t) | \hat{O}_s(t) | \psi_s(t) \rangle &= \langle \psi_H(t) | \hat{O}_H(t) | \psi_H(t) \rangle \\ \Rightarrow \langle \psi_s(0) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{O}_s(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) | \psi_s(0) \rangle &= \\ = \langle \psi_s(0) | \hat{O}_H(t) | \psi_s(0) \rangle \end{aligned}$$

Pode-se, assim, concluir que,

$$\hat{O}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{O}_s(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right). \quad (1.2.17)$$

Derivando-se a expressão acima em relação ao tempo t e usando-se a mesma expressão, tem-se,

¹ \hat{O} é um operador linear definido no espaço de Hilbert.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
&\quad + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{d}{dt}\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
&\quad + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{O}_s(t)\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
&\quad + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{d}{dt}\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
&\quad - \frac{i}{\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{H} \\
\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) &= -\frac{i}{\hbar}\left(\hat{O}_H(t)\hat{H} - \hat{H}\hat{O}_H(t)\right) \\
&\quad + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{d}{dt}\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\
\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) &= -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right] + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{d}{dt}\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right).
\end{aligned} \tag{1.2.18}$$

Admitindo-se que $\hat{O}_s(t)$ dependa explicitamente de t , e considerando-se que, por definição

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\frac{d}{dt}\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \tag{1.2.19}$$

A expressão (1.2.18) toma a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_H(t), \tag{1.2.20}$$

que representa a *equação de movimento de Heisenberg* do operador $\hat{O}_H(t)$. Observa-se que quando \hat{O}_s não depende explicitamente do tempo, tem-se

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{O}_H(t), \hat{H}\right]. \tag{1.2.21}$$

1.2.2 Propagador na mecânica quântica

Segundo Feynman, em seu trabalho de tese, a mecânica quântica deveria ser baseada na formulação lagrangiana da mecânica clássica, que por sua vez

é fundamentada no princípio da mínima ação. O método de quantização de Feynman utiliza-se das chamadas integrais de caminho e foi baseado numa ideia sugerida por Dirac em 1933 [18].

O princípio fundamental dessa formulação é que a probabilidade de transição entre os estados nos instantes t_1 e t_2 é proporcional a:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} L dt\right).$$

E isso vale tanto classicamente quanto quanticamente. No caso clássico, devido as massas serem grandes, qualquer variação da ação é muito maior que \hbar , o que leva à expressão anterior a não dar contribuição significativa fora do valor mínimo de S^2 . É por isso que classicamente o sistema evolui ao longo de uma trajetória bem definida. No caso quântico, sendo as massas envolvidas extremamente pequenas, os valores da ação são da ordem de grandeza de \hbar , assim, outras trajetórias podem contribuir significativamente para a probabilidade de transição entre os dois estados. De fato, a probabilidade de transição corresponde a integração por todas as trajetórias possíveis. Daí o nome da formulação. É essa indeterminação que faz com que o método de quantização por integrais de caminho esteja coerente com o princípio da incerteza de Heisenberg [19] [20] [21].

1.2.3 O princípio da mínima ação

Seja S a ação de um sistema físico qualquer. A sua expressão é dada por:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt, \tag{1.2.22}$$

em que $L = T - V$ é a lagrangiana do sistema, T é a energia cinética do sistema e V a energia potencial que descreve as interações das partículas do sistema. O princípio da mínima ação afirma que de todas as maneiras possíveis para um sistema evoluir entre os instantes t_1 e t_2 , ele segue aquele em que a ação tem um mínimo, essa é uma das formas de expressar a particular trajetória \bar{q} dentre todas as possíveis trajetórias. Isso significa que há uma certa quantidade S que pode ser calculada para cada trajetória e que a trajetória clássica é aquela para qual S tem um valor mínimo. A condição implica, que S assuma um valor extremo o qual não se altera até a 1ª ordem, mesmo quando \bar{q} é ligeiramente modificada [18].

²O funcional S tem um valor mínimo ao longo da trajetória clássica.

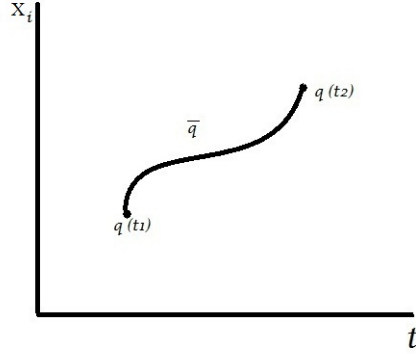


Figura 1.1: Espaço de Configurações [18].

$$\delta S \Big|_{q=\bar{q}} = \delta \int L(q(t), \dot{q}(t), t) dt \Big|_{q=\bar{q}} = 0, \quad (1.2.23)$$

em que $q(t)$ é a n-upla $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$, $\bar{q}(t)$ significa a trajetória clássica e $\delta S \Big|_{q=\bar{q}}$ é a variação do funcional ação em 1ª ordem sob $\delta q(t)$ em torno do seu valor $S \Big|_{q=\bar{q}}$. As variações da trajetória clássica

$$\delta q(t) = q(t) - \bar{q}(t),$$

devem estar sujeitas à condição de extremos fixos

$$\delta q(t_1) = 0 = \delta q(t_2).$$

O objetivo é mostrar que tomando um conjunto particular de infinitas trajetórias que contenham por construção a trajetória clássica, as trajetórias que tornam nula a variação em 1ª ordem da ação são justamente as que satisfazem a equação de Euler-Lagrange [18].

Uma vez que S tem um valor estacionário para a trajetória clássica em relação a quaisquer outras trajetórias vizinhas, a variação deve ser zero em relação a algum conjunto particular de caminhos vizinhos definido por um parâmetro infinitesimal α . Um conjunto de tais caminhos pode ser denotado por $\chi(t, \alpha)$, com $\chi(t, 0)$ representando a trajetória clássica.

$$\chi(t, \alpha) = \bar{q}(t) + \alpha \eta(t), \quad (1.2.24)$$

com

$$\chi(t, \alpha) = (x_1(t, \alpha), x_2(t, \alpha), \dots, x_n(t, \alpha)),$$

em que α é o parâmetro a ser variado a fim de gerar as variações em torno da trajetória clássica e $\eta(t)$ é qualquer função que desaparece em $t = t_1$ e $t = t_2$ ou seja $\eta(t_1) = \eta(t_2) = 0$.

Por simplicidade, está assumido que ambas as trajetórias $q(t)$ e a função auxiliar $\eta(t)$ são funções bem comportadas, contínuas e sem singularidades entre os instantes t_1 e t_2 , com primeira e segunda derivada contínuas no mesmo intervalo.

Usando essa representação paramétrica para as trajetórias, pode-se considerar a ação como uma função ordinária do parâmetro α ,

$$S(\alpha) = \int_{t_1}^{t_2} L(\chi(t, \alpha), \dot{\chi}(t, \alpha), t) dt \quad (1.2.25)$$

e impor que S seja um extremo para $\alpha = 0$, uma vez que $\chi(t, \alpha = 0) = \bar{q}(t)$. Essa imposição para obtenção de um ponto estacionário é matematicamente familiar e expressa-se por:

$$\left. \frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} = 0. \quad (1.2.26)$$

Calculando-se as derivadas em relação a α obtém-se,

$$\frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial \alpha} \right) dt. \quad (1.2.27)$$

Integrando-se por partes o 2º termo do lado direito da equação (1.2.27), tem-se,

$$\sum_{i=1}^n \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x_i} \frac{\partial^2 x_i}{\partial t \partial \alpha} dt = \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \frac{\partial x_i}{\partial \alpha} \right) \Big|_{t_1}^{t_2} - \sum_{i=1}^n \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \frac{\partial x_i}{\partial \alpha} dt. \quad (1.2.28)$$

A condição de extremos fixos elimina o 1º termo do lado direito da equação (1.2.28), pois

$$\left. \frac{\partial \chi(t, \alpha)}{\partial \alpha} \right|_{t=t_1, t_2} = \eta(t) \Big|_{t=t_1, t_2} = 0.$$

Substituindo a equação (1.2.28) na equação (1.2.27) obtém-se,

$$\frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \frac{\partial x_i}{\partial \alpha} \right] dt. \quad (1.2.29)$$

A 1ª variação da ação em torno da trajetória clássica pode ser escrita na forma

$$\delta S \Big|_{\chi=\bar{q}} = \left. \frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} d\alpha. \quad (1.2.30)$$

Assim

$$\delta S \Big|_{\chi=\bar{q}} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \right] \left(\frac{\partial x_i}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} d\alpha dt. \quad (1.2.31)$$

Como as variações funcionais nas coordenadas generalizadas, $\delta x_i(t) = \left. \frac{\partial x_i}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} d\alpha$ são arbitrárias, a imposição de que $\delta S \Big|_{\chi=\bar{q}} = 0$ faz com que todos os seus coeficientes sejam nulos simultaneamente, isto é,

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = 0; \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1.2.32)$$

que são as equações de Euler-Lagrange, como queria-se demonstrar. Embora tenha-se usado um conjunto particular de trajetórias, o resultado é geral devido à arbitrariedade na escolha de $\eta(t)$ [18].

Capítulo 2

Método integral de caminho

2.1 Fundamentos da integral de caminho

A ideia de Feynman foi construir uma expressão para o propagador quântico explorando o princípio de Huygens da ótica ondulatória [18]. Dessa forma, imaginou que $k(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0)$, fosse dado por uma soma de amplitudes de probabilidades em que cada uma delas estava associada a uma possível trajetória no espaço de configuração ligando os pontos (\vec{x}_0, t_0) e (\vec{x}, t) , ou seja,

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \sum_{\substack{\text{todas} \\ \text{trajetórias}}} \Phi[x(t)], \quad (2.1.1)$$

em que $\Phi[x(t)]$ é a amplitude associada à trajetória $x(t)$. A contribuição de cada trajetória tem uma fase proporcional a ação S ,

$$\Phi[x(t)] = \text{const} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right). \quad (2.1.2)$$

Para que a expressão tivesse um limite clássico correto, Feynman escreveu o propagador como:

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (2.1.3)$$

em que $\mathcal{D}[x(t)]$ tem um caráter puramente formal, significa integração sobre todas as trajetórias $x(t)$ (integração funcional) e S é a ação calculada ao longo de cada trajetória $x(t)$ [18]. Observe que na ideia de Feynman, o princípio da incerteza de Heisenberg fica embutido, pelo menos qualitativamente, no fato de haver várias trajetórias possíveis para a evolução do sistema. No caso em que $\frac{S}{\hbar} \gg 1$ devido ao valor extremamente pequeno de

\hbar ($\hbar = 1,055 \times 10^{-34} J.s$), mesmo uma pequena variação no valor da ação clássica (de um objeto macroscópico por exemplo) proporcionará uma enorme variação na fase, causando oscilações muito rápidas em $\Phi[x(t)]$ de tal forma que ocorrerá interferência destrutiva, pois a contribuição de uma determinada trajetória é cancelada pela contribuição de outra em que a fase difere de π . Desse modo, o método da fase estacionária nos diz que a maior contribuição para o propagador é justamente quando $\delta S = 0$, o que ocorre para a trajetória clássica .

A soma sobre as trajetórias

Embora esteja clara, qualitativamente, a noção da soma das contribuições de cada uma das trajetórias, é necessário que seja feita uma definição mais rigorosa, matematicamente, desta soma [16]. A quantidade de trajetórias é, em alta ordem, infinita, e não é evidente qual medida de integração deva ser associada ao espaço dessas trajetórias. Para iniciar, considere a integral de Riemann usual. Pode-se dizer, a grosso modo, que a área A sob uma curva é igual à soma de todas as suas ordenadas. Melhor ainda, pode-se dizer que é proporcional a essa soma. Para tornar a ideia precisa, toma-se um subconjunto de todas as ordenadas (aquele em que o espaçamento entre elas é constante e igual a h). Somando-as, obtém-se que

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

em que a soma é calculada sobre o conjunto finito de pontos x_i , como mostrado na figura.

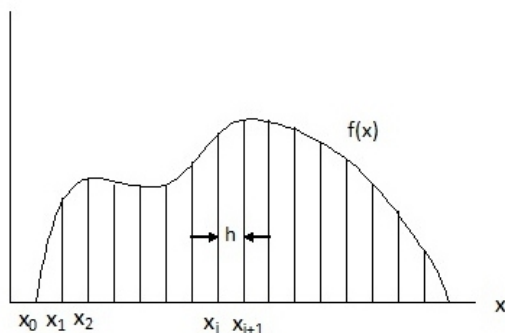


Figura 2.1:

Na definição usual da integral de Riemann, um conjunto de ordenadas é traçado a partir da abscissa da curva. As ordenadas são espaçadas a uma distância h . A integral é aproximada pela soma de h vezes as ordenadas [16].

Essa aproximação tende ao valor exato quando h se aproxima de zero. Então pode-se escrever a expressão

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

Uma definição análoga pode ser usada para integral de trajetória. Para fazer isso, divide-se o intervalo de tempo $t - t_0$ em um número muito grande N de intervalos infinitesimais ϵ .

$$\epsilon = \frac{t - t_0}{N}. \quad (2.1.4)$$

Nesse limite cada trajetória é representada por uma poligonal, como mostrado na figura 2.2.

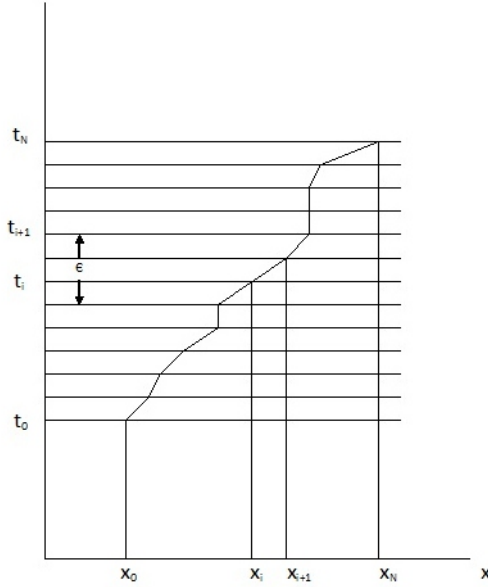


Figura 2.2: Procedimento de particionar o tempo [16]

"Varrer" todas as trajetórias significa "varrer" todos os valores possíveis das coordenadas $x_i = x(t_i)$ em que $t_i = t' + i\epsilon; i = 1, 2, \dots, N$ ($t_0 = t'$) e ($t_N = t$) [18].

A equação resultante é:

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) \sim \int \int \Phi[x(t)] dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}. \quad (2.1.5)$$

A integral não abrange as extremidades fixas, no caso presente, tornando ϵ cada vez menor, pode-se obter uma amostra mais representativa do conjunto completo de todas as trajetórias possíveis entre os pontos (\vec{x}, t) e (\vec{x}_0, t_0) . Entretanto, o limite não existe, para que haja o limite, precisa-se definir um fator de normalização que dependa de ϵ . Com esse fator, o limite existe e usando a equação (2.1.3) pode-se escrever,

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A^N \int \prod_{j=1}^{N-1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) d^3 x_j, \quad (2.1.6)$$

em que A é o fator de normalização a ser determinado e a ação S deve ser dada por

$$S = \sum_{k=1}^N \left[\frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right) \right], \quad (2.1.7)$$

para uma lagrangiana do tipo $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$.

2.2 A integral de caminho

Há muitas maneiras de se definir um subconjunto de todas as trajetórias ente a e b [16]. A definição particular usada aqui poderá não ser a melhor para certos propósitos matemáticos. Por exemplo, suponha que a lagrangiana dependa da aceleração de x . Da maneira a qual foi construída a trajetória, a velocidade é descontínua nos vários pontos (x_i, t_i) , uma vez que a aceleração é infinita nesses pontos. Essa é uma possível situação em que se teria problema. Entretanto, nos exemplos que serão apresentados aqui, a substituição $\ddot{x} = \frac{1}{\epsilon^2}(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1})$ será suficiente. Podem haver outros casos em que essa substituição não seja adequada, ou mesmo possível, e essa definição de soma sobre todas as trajetórias seja simplesmente muito complicada de se usar. Essa situação ocorre na integral em que a definição usual de Riemann não se aplica e precisa-se recorrer a alguma outra definição.

A necessidade de redefinir o método de integração não destrói o conceito de integração. Portanto, pode-se escrever a soma sobre todas as trajetórias [16], usando uma notação menos restrita,

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \int \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (2.2.1)$$

que será chamado de *Kernel da integral de caminho*.

Eventos que ocorrem em sucessão

Esta seção tem como objetivo mostrar a obtenção de uma lei importante para a composição de amplitudes para eventos que ocorrem sucessivamente no tempo [16]. Sejam $a = (\vec{x}_0, t_0)$ e $b = (\vec{x}, t)$ e ainda suponha t_c um determinado tempo entre t_0 e t . Então a ação ao longo de uma trajetória qualquer entre a e b pode ser escrita como [16]:

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a]. \quad (2.2.2)$$

Isso segue do resultado da definição de ação como uma integral no tempo e também do fato de L só depender da derivada de primeira ordem de x . Usando a expressão (2.2.1) em que se definiu o Kernel, pode-se escrever,

$$K(b, a) = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[b, c] + \frac{i}{\hbar} S[c, a]\right] \mathcal{D}[x(t)]. \quad (2.2.3)$$

Sempre é possível dividir uma trajetória em duas partes, a primeira com as extremidades x_a e $x_c = x(t_c)$, e a segunda com extremidades x_c e x_b como mostra a figura.

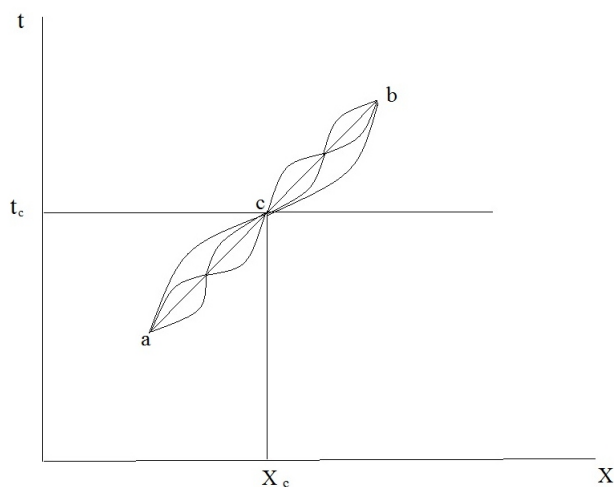


Figura 2.3:

A amplitude de cada caminho que vai de a para b via c é um produto da amplitude que vai de a para c com a amplitude que vai de c para b [16].

Também é possível integrar sobre todas as trajetórias de a para c , em seguida sobre todas as trajetórias de c para b , e finalmente integrar o resultado sobre todos os valores possíveis de x_c . Na primeira etapa da integração, $S[b, c]$ é constante. Assim, o resultado pode ser escrito como:

$$K(b, a) = \int_{x_c} \int_c^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[b, c]\right) K(c, a) \mathcal{D}[x(t)] dx_c. \quad (2.2.4)$$

E agora as integrações devem ser efetuadas não somente entre as trajetórias c e b , mas também sobre a variável intermediária x_c . Na etapa seguinte, será efetuada a integração sobre todas as trajetórias entre um ponto arbitrário x_c e o ponto b , e tudo o que resta é uma integral sobre todos os valores possíveis de x_c . Assim,

$$K(b, a) = \int_{x_c} K(b, c) K(c, a) dx_c, \quad (2.2.5)$$

esse resultado, pode ser resumido da seguinte maneira: todas as trajetórias alternativas de a para b podem ser identificadas especificando a posição x_c através da qual elas passam no tempo t_c . Então o Kernel para uma partícula que vai de a para b pode ser calculado das seguintes regras:

1. O Kernel para ir de a para b é a soma, sobre todos s valores possíveis de x_c das amplitudes, para uma partícula ir de a para c e em seguida para b .

2. A amplitude para ir de a para c e em seguida para b é o Kernel para ir de a para c multiplicado pelo Kernel para ir de c para b .

Isso significa que *Amplitudes para eventos que ocorrem sucessivamente no tempo se multiplicam*. Pode-se continuar esse processo até que a escala de tempo seja dividida em N intervalos. O resultado é:

$$K(b, a) = \int_{x_1} \int_{x_2} \dots \int_{x_{N-1}} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \dots K(i+1, i) \dots K(1, a) dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}, \quad (2.2.6)$$

o que significa, que pode-se definir o Kernel de uma maneira diferente da que foi dada na equação (2.1.6). Nessa definição alternativa o Kernel para uma partícula ir entre dois pontos separados por um intervalo de tempo infinitesimal ϵ para uma primeira ordem nesse intervalo infinitesimal é:

$$K(i+1, i) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon L \left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{t_{i+1} + t}{2} \right) \right], \quad (2.2.7)$$

em que A é uma constante de integração. Assim, pelas regras de multiplicação das amplitudes de eventos que ocorrem sucessivamente no tempo, tem-se,

$$\Phi[x(t)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i), \quad (2.2.8)$$

para a amplitude de um caminho completo.

2.3 O propagador na mecânica quântica não relativística

Seja $|\psi(t_0)\rangle$ o vetor de estado de uma partícula medido no instante t_0 [18]. A atuação do operador evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$ sobre $|\psi(t_0)\rangle$ permite obter o estado da partícula em um instante posterior t , isto é,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.3.1)$$

Seja \hat{X} um operador posição. Considera-se que $|\vec{x}_0\rangle$ seja um autoestado desse operador com autovalor x_0 . Assim,

$$\hat{X}|\vec{x}_0\rangle = x_0|\vec{x}_0\rangle. \quad (2.3.2)$$

Pode-se, então, escrever a função de onda

$$\psi(\vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x}_0 | \psi(t_0) \rangle, \quad (2.3.3)$$

em que $|\psi(\vec{x}_0, t_0)|^2$ está relacionado à probabilidade de uma partícula ser localizada em \vec{x}_0 no instante t_0 .

De forma semelhante, temos que a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ é,

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle, \quad (2.3.4)$$

em que $|\vec{x}\rangle$ é autoestado de \hat{X} com autovalor \vec{x} .

Tomando o produto escalar da equação (2.3.1) pelo vetor $\langle \vec{x} |$ e tendo em conta a equação (2.3.4), obtém-se,

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

Considerando-se, que os autoestados do operador \hat{X} formam um conjunto completo, tem-se,

$$\int d^3 \vec{x}_0 |\vec{x}_0\rangle \langle \vec{x}_0| = \hat{1}. \quad (2.3.6)$$

Introduzindo, convenientemente, essa identidade na equação (2.3.5), segue

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) \int d^3 \vec{x}_0 |\vec{x}_0\rangle \langle \vec{x}_0 | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int d^3 \vec{x}_0 \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle \psi(\vec{x}_0, t_0) \\ &= \int d^3 \vec{x}_0 K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) \psi(\vec{x}_0, t_0), \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

em que o Kernel $K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x}_0 \rangle$ é o *propagador quântico* do estado $\psi(\vec{x}_0, t_0)$ para o estado $\psi(\vec{x}, t)$.

Com essa definição, pode-se relacionar as funções de onda da partícula para tempos diferentes de forma bastante conveniente,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}_2, t_2) &= \langle \vec{x}_2 | \psi(t_2) \rangle \\ &= \langle \vec{x}_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | \psi(t_1) \rangle \\ &= \int d^3 \vec{x}_1 K(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1) \psi(\vec{x}_1, t_1). \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

A equação (2.3.8) sugere uma analogia com o princípio de Huygens da ótica ondulatória. Esse diz que conhecendo-se a frente de onda no instante

t_1 , pode-se construí-la no instante posterior $t_2 > t_1$ através da interferência das ondas secundárias, gerada por cada um dos pontos da frente original. No caso, a equação (2.3.8) diz que conhecida a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ no tempo t_1 , terá sua expressão para qualquer instante posterior ($t_2 > t_1$).

A definição do propagador quântico exige a presença de uma função de grau, isto é,

$$K(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \langle \vec{x}_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | \vec{x}_1 \rangle, \quad (2.3.9)$$

em que

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t_2 - t_1)}{\hbar}\right)$$

e

$$\theta(t_2 - t_1) = \begin{cases} 1, & \text{se } (t_2 - t_1) \geq 0 \\ 0, & \text{se } (t_2 - t_1) < 0 \end{cases}$$

Dessa forma, o princípio da causalidade fica preservado, pois a função $\theta(t_2 - t_1)$ "obriga as fontes secundárias a irradiarem só no sentido do futuro"[18].

O propagador pode também ser escrito em termos das autofunções do operador hamiltoniano. Esse conjunto de autofunções é completo. Considera-se que seja ortonormal, assim,

$$\int d^3\vec{x} \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) = \delta_{nm}. \quad (2.3.10)$$

A relação de completeza pode ser obtida multiplicando-se ambos os lados da equação (2.3.10) por $\phi_n(\vec{y})$ (somando-se em n). Logo, tem-se,

$$\sum_n \int d^3\vec{x} \phi_n(\vec{y}) \phi_n^*(\vec{x}) \phi_m(\vec{x}) = \phi_m(\vec{y}) \quad (2.3.11)$$

Para que essa igualdade seja satisfeita, deve-se ter

$$\sum_n \phi_n(\vec{y}) \phi_n^*(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad (2.3.12)$$

que é a relação de completeza.

Para expressar o propagador em termos desse conjunto completo de funções, começa-se por escrever a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ através dessa base, da seguinte maneira:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \quad (2.3.13)$$

Pode-se notar a consistência desse resultado verificando que $\psi(\vec{x}, t)$ satisfaz a equação de Schrödinger.

Para um certo instante t_0 , tem que a $\psi(\vec{x}, t_0)$ é uma função apenas de \vec{x} . Assim, escrevendo-se também, em termos do conjunto completo acima mencionado, tem-se

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \sum_n a_n \phi_n(\vec{x}). \quad (2.3.14)$$

Fazendo-se $t = t_0$ na equação (2.3.13), segue,

$$\psi(\vec{x}, t_0) = \sum_n c_n(t) \phi_n(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t_0\right). \quad (2.3.15)$$

Comparando-se as equações (2.3.14) e (2.3.15) pode-se concluir que,

$$c_n(t) = a_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t_0\right). \quad (2.3.16)$$

Voltando-se com esse resultado na equação (2.3.13),

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n a_n \phi_n(\vec{x}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right]. \quad (2.3.17)$$

Das expressões (2.3.10) e (2.3.14), pode-se obter:

$$a_n = \int d^3\vec{x}_0 \psi(\vec{x}_0, t_0) \phi_n^*(\vec{x}_0). \quad (2.3.18)$$

Introduzindo-se essa quantidade na equação (2.3.17), segue,

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3\vec{x}_0 \sum_n \phi_n(\vec{x}) \phi_n^*(\vec{x}_0) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right] \psi(\vec{x}_0, t_0). \quad (2.3.19)$$

E finalmente, comparando-se esse resultado com a equação (2.3.18), obtém-se a expressão do propagador em termos das autofunções $\phi_n(\vec{x})$,

$$K(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \sum_n \phi_n(\vec{x}) \phi_n^*(\vec{x}_0) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_n (t - t_0)\right] \quad (2.3.20)$$

2.4 Equivalência entre os formalismos de Feynman e Schrödinger

O objetivo é demonstrar que pode-se obter a equação de Schrödinger a partir da formulação de Feynman. Para facilitar, considera-se o caso unidimensional. Toma-se dois instantes de tempo muito próximos t e $t + \epsilon$. De

acordo com a expressão (2.2.7) o Kernel pode ser escrito como,

$$K(x, t + \epsilon; x_0, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon L \left(\frac{x + x_0}{2}, \frac{x - x_0}{\epsilon}, t \right) \right]$$

Assim, a expressão (2.3.7) toma a seguinte forma:

$$\psi(x, t + \epsilon) = A \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon L \left(\frac{x + x_0}{2}, \frac{x - x_0}{\epsilon}, t \right) \right] \psi(x_0, t). \quad (2.4.1)$$

Seja, a função lagrangiana dada por, $L = m \frac{\dot{x}^2}{2} - V(x, t)$, tem-se

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) = & A \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} m \frac{(x - x_0)^2}{\epsilon} \right. \right. \\ & \left. \left. - \epsilon V \left(\frac{x + x_0}{2}, t \right) \right) \right\} \psi(x_0, t). \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

A quantidade $\frac{(x-x_0)^2}{\epsilon}$ é muito grande quando x_0 é muito diferente de x e a exponencial oscila muito rapidamente com x_0 . Assim, a integral sobre x_0 dá um valor muito pequeno. Somente quando x_0 for próximo de x , haverá uma contribuição importante. Por essa razão, faz-se uma substituição $x_0 = x + \eta$,

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) = & A \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m \frac{\eta^2}{\epsilon} - \epsilon V \left(\frac{2x + \eta}{2}, t \right) \right] \right\} \psi(x + \eta, t) \\ = & A \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) \times \\ & \exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(\frac{2x + \eta}{2}, t \right) \right] \psi(x + \eta, t). \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Agora, a contribuição significativa do propagador é para valores de η^2 da ordem de ϵ . Então, expande-se a expressão (2.4.3) do lado esquerdo até a primeira ordem em ϵ e do lado direito até a primeira ordem em ϵ e segunda ordem em η . Utilizando a expansão,

$$\exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(\frac{2x + \eta}{2}, t \right) \right] = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) + \mathcal{O}(\epsilon).$$

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} &= A \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x, t)\right] \times \\
&\quad \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right] \\
&= A \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x, t)\right] \psi(x, t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) + \\
&\quad A \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x, t)\right] \frac{\partial \psi}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) + \\
&\quad A \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x, t)\right] \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right)
\end{aligned} \tag{2.4.4}$$

As integrais acima são bem conhecidas (veja apêndice A),

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) &= \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \\
\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) &= 0 \\
\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \eta^2 \exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right) &= \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}
\end{aligned}$$

Substituindo-se os resultados das integrais, segue que,

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} &= A \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon V(x, t)\right] \times \\
&\quad \left[\psi(x, t) \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{i\hbar\epsilon}{m} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}\right] \\
&= A \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \psi(x, t) - A \frac{i\epsilon}{\hbar} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} V(x, t) \psi(x, t) + \\
&\quad \frac{A i\hbar\epsilon}{2} \frac{1}{m} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{A \epsilon^2}{2} \frac{1}{m} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}} V(x, t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.
\end{aligned} \tag{2.4.5}$$

Para que os lados direito e esquerdo da expansão acima sejam consistentes, o fator de normalização A deve ser:

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}}.$$

Substituindo-se na equação (2.4.5), obtém-se

$$\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \psi(x, t) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Logo

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t), \quad (2.4.6)$$

que é a equação de Schrodinger, como queria-se demonstrar!

Para o caso tridimensional, o fator de normalização A é dado por

$$A = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

2.5 Cálculo do propagador usando integrais de caminho

Calcula-se a integral de caminho baseada em uma relação de recorrência para o produto de propagadores infinitesimais. Este tipo de cálculo direto já existe na literatura, apresenta-se então, um procedimento alternativo e muito simples [5].

2.5.1 Oscilador harmônico

De acordo com (2.1.3), a expressão da integral de caminho para o propagador quântico é:

$$K(x_N, t; x_0, t_0) = \int_{x_0}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x)\right), \quad (2.5.1)$$

em que S é o funcional ação,

$$S(x) = \int_{t_0}^t \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2(t) - V(x(t)) \right] dt. \quad (2.5.2)$$

Assim,

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left(\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} dx_j \right) \times \\ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left[\frac{m(x_k - x_{k-1})^2}{2\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right) \right] \right\}, \quad (2.5.3)$$

em que $N\epsilon = t - t_0 = \tau$. Calcular uma integral de caminho significa calcular um número infinito de integrais simples, o que requer algum tipo de relação de recorrência [5].

Quando não há potenciais eletromagnéticos, como nesse caso, não é necessário adotar a regra do ponto médio para o potencial V , como dado pela expressão (2.5.3), pode-se fazer uma outra escolha. Assim, escolhe-se uma versão discreta da ação,

$$S \simeq \sum_{k=1}^N \frac{m(x_k - x_{k-1})^2}{2\tau_k} - \tau_k \frac{1}{2} (V(x_k) + V(x_{k-1})), \quad (2.5.4)$$

em que τ_k é o k -ésimo intervalo de tempo, tal que $\tau = \sum_{k=1}^N \tau_k$. Então, o propagador de Feynman pode ser escrito,

$$K(x, x_0; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{k=1}^N K(x_k, x_{k-1}, \tau_k) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, \quad (2.5.5)$$

e o propagador para um intervalo de tempo infinitesimal,

$$K(x_k, x_{k-1}; \tau_k) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\tau_k}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x_k - x_{k-1})^2}{2\tau_k} - \tau_k \frac{1}{2} (V(x_k) + V(x_{k-1})) \right] \right\}. \quad (2.5.6)$$

A lagrangiana para o oscilador harmônico é dada por:

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.5.7)$$

Logo, o propagador infinitesimal dado pela expressão (2.5.6), toma a seguinte forma:

$$K(x_k, x_{k-1}, \tau_k) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\omega\tau_k}} \times \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2\hbar} \frac{1}{\omega\tau_k} \left[\left(1 - \frac{\omega^2 \tau_k^2}{2} \right) (x_k^2 + x_{k-1}^2) - 2x_k x_{k-1} \right] \right\}. \quad (2.5.8)$$

Para calcular esse propagador infinitesimal, define-se novas variáveis, tal que,

$$\text{sen } \phi_k = \omega \tau_k. \quad (2.5.9)$$

O que implica que $\phi_k \simeq \omega \tau_k$ e $\cos \phi_k \simeq 1 - \omega^2 \tau_k^2 / 2$. Na verdade, pode-se tentar encontrar outras transformações de variáveis, mas essa permite uma iteração mais fácil através de uma fórmula similar a de convolução. Também é útil introduzir uma função F ,

$$F(\eta, \eta'; \phi) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } \phi}} \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\text{sen } \phi} (\cos \phi (\eta^2 + \eta'^2) - 2\eta\eta') \right]. \quad (2.5.10)$$

Com o uso das expressões (2.5.8), (2.5.9) e (2.5.10), pode-se reescrever o propagador do oscilador harmônico (2.5.5) como,

$$K(x, x_0; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{k=1}^N F(x_k, x_{k-1}; \phi_k) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j. \quad (2.5.11)$$

A função F tem uma propriedade interessante,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = F(\eta'', \eta'; \phi'' + \phi'). \quad (2.5.12)$$

A partir da definição (2.5.10),

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta &= \frac{m\omega}{2i\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } \phi'' \text{sen } \phi'}} \times \\ &\exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\text{sen } \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\text{sen } \phi'} \eta'^2 \right) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} (\alpha \eta^2 - 2\eta\beta) \right], \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

em que,

$$\alpha = \frac{\text{sen } (\phi'' + \phi')}{\text{sen } \phi'' \text{sen } \phi'} \quad e \quad \beta = \frac{\eta'' \text{sen } \phi' + \eta' \text{sen } \phi''}{\text{sen } \phi'' \text{sen } \phi'}. \quad (2.5.14)$$

Completando-se quadrado no integrando da expressão (2.5.13),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = \frac{m\omega}{2i\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } \phi'' \text{ sen } \phi'}} \times$$

$$\exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\text{sen } \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\text{sen } \phi'} \eta'^2 \right) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \left[\alpha \left(\eta - \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 - \frac{\beta^2}{\alpha} \right] \right\}$$
(2.5.15)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = \frac{m\omega}{2i\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } \phi'' \text{ sen } \phi'}} \times$$

$$\exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\text{sen } \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\text{sen } \phi'} \eta'^2 - \frac{\beta^2}{\alpha} \right) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \alpha \left(\eta - \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 \right].$$
(2.5.16)

Calculando-se a integral de Fresnel da expressão (2.5.16),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = \frac{m\omega}{2i\pi\hbar} \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\omega\alpha}} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } \phi'' \text{ sen } \phi'}} \times$$

$$\exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\frac{\cos \phi''}{\text{sen } \phi''} \eta''^2 + \frac{\cos \phi'}{\text{sen } \phi'} \eta'^2 - \frac{\beta^2}{\alpha} \right) \right].$$
(2.5.17)

Usando-se as definições das expressões (2.5.14) e com algumas manipulações das funções trigonométricas, pode-se mostrar que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(\eta'', \eta; \phi'') F(\eta, \eta'; \phi') d\eta = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar}} \sqrt{\frac{1}{\text{sen } (\phi'' + \phi')}} \times$$

$$\exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\text{sen } (\phi'' + \phi')} [(\eta''^2 + \eta'^2) \cos(\phi'' + \phi') - 2\eta''\eta'] \right\},$$
(2.5.18)

que é, precisamente a expressão (2.5.12). Defini-se então $x'' = x$ e $x' = x_0$, utiliza-se também o fato de que $\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \phi_k = \omega\tau$ e o resultado da expressão (2.5.11), obtém-se então, o propagador desejado,

$$K(x'', x'; \tau) = F(x'', x'; \omega\tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin \omega\tau}} \times \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\pi \sin \omega\tau} [\cos \omega\tau (x''^2 + x'^2) - 2x''x'] \right\}, \quad (2.5.19)$$

que é a expressão para o oscilador harmônico unidimensional.

No capítulo 5 mostrar-se-á que é possível obter diretamente da expressão do propagador de Feynman a função partição, as autofunções e os autovalores de energia.

Capítulo 3

Método de Schwinger

Neste capítulo, apresenta-se o método desenvolvido por Schwinger no contexto da teoria quântica de campos [4]. Esse método é baseado na solução das equações de movimento do operador de Heisenberg. O uso do operador, ordenado convenientemente e subordinadas às condições iniciais, produz o propagador. Este método tem sido aplicado principalmente em problemas relativísticos, tais como o cálculo de funções de Green bosônicas e fermiônicas em campos externos. No entanto, esse poderoso método é também bem adequado para problemas não relativísticos [5].

3.1 O método de Schwinger

O propagador de Feynman é dado pela expressão (2.3.9),

$$K(\vec{x}_2, t_2; \vec{x}_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \langle \vec{x}_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | \vec{x}_1 \rangle,$$

em que

$$\theta(t_2 - t_1) = \begin{cases} 1, & \text{se } (t_2 - t_1) \geq 0 \\ 0, & \text{se } (t_2 - t_1) < 0 \end{cases}$$

Por simplicidade, considere o caso unidimensional para um hamiltoniano H independente do tempo e o correspondente propagador de Feynman não relativístico. Defini-se $\tau = t_2 - t_1$, observe que para $\tau > 0$, a equação diferencial para o propagador de Feynman toma a seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} K(x'', x'; \tau) = \langle x'' | \hat{H} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau\right) | x' \rangle, \quad (3.1.1)$$

em que $|x''\rangle, |x'\rangle$ são os autoestados do operador posição \hat{X} , na representação de Schrödinger, com autovalores x'' e x' , respectivamente.

A relação entre os operadores na representação de Heisenberg e Schrödinger é dada pela expressão (1.2.17),

$$\hat{O}_H(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{O}_s(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \quad (3.1.2)$$

Quando O_s não depende explicitamente do tempo, obtém-se diretamente a expressão (1.2.21),

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{O}_H(t) = [\hat{O}_H(t), \hat{H}]. \quad (3.1.3)$$

Se $|x\rangle$ é um autoestado do operador \hat{X} com autovalor x , como discutido no primeiro capítulo,

$$|x, t\rangle = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)|x\rangle, \quad (3.1.4)$$

$$\hat{X}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)\hat{X}\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right), \quad (3.1.5)$$

$$\hat{X}(t)|x, t\rangle = x|x, t\rangle. \quad (3.1.6)$$

Usando essas notações, o propagador de Feynman pode ser escrito,

$$K(x'', x'; \tau) = \langle x'', \tau | x', 0 \rangle, \quad (3.1.7)$$

em que,

$$\begin{cases} \hat{X}(\tau)|x'', \tau\rangle = x''|x'', \tau\rangle & (3.1.7a) \\ \hat{X}(0)|x', 0\rangle = x'|x', 0\rangle & (3.1.7b) \end{cases}$$

Conseqüentemente, a equação diferencial para o propagador de Feynman dada pela expressão (3.1.1), toma a seguinte forma:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\langle x'', \tau | x', 0 \rangle = \langle x'', \tau | \hat{H} | x', 0 \rangle. \quad (3.1.8)$$

Essa equação é bastante sugestiva e é o ponto de partida de um método operatorial que é chamado de *Método de Schwinger*. A ideia essencial desse método é calcular o elemento de matriz do lado direito da expressão (3.1.8) escrevendo \hat{H} em termos dos operadores $\hat{X}(\tau)$ e $\hat{X}(0)$, apropriadamente ordenados. Aplicar esse método consiste em realizar os seguintes passos [5]:

1. Resolver as equações de Heisenberg para os operadores $\hat{X}(t)$ e $\hat{P}(t)$,

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{X}(t) = [\hat{X}(t), \hat{H}], \quad (3.1.9)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{P}(t) = [\hat{P}(t), \hat{H}]. \quad (3.1.10)$$

2. Usar a solução obtida no passo (1) para reescrever o operador hamiltoniano \hat{H} em termos do operador $\hat{X}(0)$ e $\hat{X}(\tau)$, ordenados convenientemente para que não haja problemas de causalidade, de tal maneira que em cada termo de \hat{H} , os operadores $\hat{X}(\tau)$ devam aparecer à esquerda, enquanto que os operadores $\hat{X}(0)$, à direita. Esse ordenamento pode ser feito com o auxílio do comutador $[\hat{X}(0), \hat{X}(\tau)]$. Assim, o elemento de matriz do lado direito da expressão (3.1.8) pode ser facilmente calculado,

$$\begin{aligned} \langle x'', \tau | \hat{H} | x', 0 \rangle &= \langle x'', \tau | \hat{H}_{ord}(\hat{X}(\tau), \hat{X}(0)) | x', 0 \rangle \\ &\equiv \mathcal{F}(x'', x'; \tau) \langle x'', \tau | x', 0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

em que, $\hat{H}_{ord}(\hat{X}(\tau), \hat{X}(0))$, é o operador hamiltoniano ordenado e \mathcal{F} é uma função e não um operador. Substituindo-se a expressão (3.1.11) em (3.1.8), obtém-se,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \langle x'', \tau | x', 0 \rangle = \mathcal{F}(x'', x'; \tau) \langle x'', \tau | x', 0 \rangle, \quad (\tau > 0), \quad (3.1.12)$$

cuja integração fornece,

$$\langle x'', \tau | x', 0 \rangle = C(x'', x') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau \mathcal{F}(x'', x'; \tau') d\tau'\right), \quad (3.1.13)$$

em que $C(x'', x')$ é uma constante arbitrária de integração.

3. Este último passo é determinar $C(x'', x')$. Isso é feito impondo-se, inicialmente as condições,

$$\langle x'', \tau | \hat{P}(\tau) | x', 0 \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \langle x'', \tau | x', 0 \rangle, \quad (3.1.14)$$

$$\langle x'', \tau | \hat{P}(0) | x', 0 \rangle = +i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'', \tau | x', 0 \rangle. \quad (3.1.15)$$

Essas equações vem das definições na expressão (3.1.7) que devem ser satisfeitas para que não haja violação das relações de comutação,

$$[\hat{X}(\tau), \hat{P}(\tau)] = [\hat{X}(0), \hat{P}(0)] = i\hbar. \quad (3.1.16)$$

Após a imposição de (3.1.14) e (3.1.15), ainda há um fator multiplicativo a ser determinado em $C(x'', x')$. Isso pode ser feito simplesmente impondo-se a condição inicial,

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \langle x'', \tau | x', 0 \rangle = \delta(x'' - x'). \quad (3.1.17)$$

Aqui termina a discussão dos principais passos a serem seguidos para aplicar o método de Schwinger.

3.2 Cálculo do propagador usando o método de Schwinger

Nesta seção, aplica-se o método de Schwinger, resolvendo detalhadamente o propagadores não relativístico para o oscilador harmônico unidimensional.

3.2.1 Oscilador harmônico

O operador hamiltoniano para o oscilador harmônico pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2(\tau)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2(\tau), \quad (3.2.1)$$

ou

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2(0)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2(0), \quad (3.2.2)$$

embora os operadores $\hat{P}(\tau)$ e $\hat{X}(\tau)$ sejam explicitamente dependentes do tempo, o operador hamiltoniano é independente do tempo. Por simplicidade, escolhe-se trabalhar com a expressão (3.2.1).

Como estabelecido no passo (1), inicia-se por escrever as correspondentes equações de Heisenberg,

$$\frac{d}{dt} \hat{X}(t) = \frac{\hat{P}(t)}{m}, \quad (3.2.3)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{P}(t) = -m\omega^2 \hat{X}(t), \quad (3.2.4)$$

cujas soluções no instante $t = \tau$, podem ser escritas como:

$$\hat{X}(\tau) = \hat{X}(0) \cos \omega\tau + \frac{\hat{P}(0)}{m\omega} \text{sen } \omega\tau, \quad (3.2.5)$$

$$\hat{P}(\tau) = -m\omega\hat{X}(0)\text{sen}\omega\tau + \hat{P}(0)\text{cos}\omega\tau. \quad (3.2.6)$$

Para implementar o passo (2), deve-se expressar $\hat{P}(0)$ em termos dos operadores $\hat{X}(\tau)$ e $\hat{X}(0)$, que pode ser feito diretamente a partir da expressão (3.2.5),

$$\hat{P}(0) = \frac{m\omega}{\text{sen}\omega\tau} \left[\hat{X}(\tau) - \hat{X}(0)\text{cos}\omega\tau \right]. \quad (3.2.7)$$

Substituindo-se esse resultado na expressão (3.2.2) para \hat{H} , obtém-se

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{m\omega^2}{2\text{sen}^2\omega\tau} \left[\hat{X}^2(\tau) + \hat{X}^2(0)\text{cos}^2\omega\tau - \hat{X}(0)\hat{X}(\tau)\text{cos}\omega\tau - \right. \\ & \left. \hat{X}(\tau)\hat{X}(0)\text{cos}\omega\tau + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2(0) \right]. \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

observa-se, que o terceiro termo do lado direito na expressão (3.2.8), não está ordenado apropriadamente. Através da relação de comutação,

$$\begin{aligned} \left[\hat{X}(0), \hat{X}(\tau) \right] &= \left[\hat{X}(0), \hat{X}(0)\text{cos}\omega\tau + \frac{\hat{P}(0)}{m\omega}\text{sen}\omega\tau \right] \\ &= \frac{i\hbar}{m\omega}\text{sen}\omega\tau, \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

obtém-se que,

$$\hat{X}(0)\hat{X}(\tau) = \hat{X}(\tau)\hat{X}(0) + \frac{i\hbar}{m\omega}\text{sen}\omega\tau. \quad (3.2.10)$$

Introduzindo-se a expressão (3.2.10) em (3.2.8), obtém-se o hamiltoniano ordenado,

$$\hat{H}_{ord} = \frac{m\omega^2}{2\text{sen}^2\omega\tau} \left[\hat{X}^2(\tau) + \hat{X}^2(0) - 2\hat{X}(\tau)\hat{X}(0)\text{cos}\omega\tau \right] - \frac{i\hbar\omega}{2}\text{cot}\omega\tau. \quad (3.2.11)$$

De posse do operador hamiltoniano apropriadamente ordenado, pode-se encontrar a função $\mathcal{F}(x'', x'; \tau)$ diretamente da definição, dada pela expressão (3.1.11),

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(x'', x'; \tau) &= \frac{\langle x'', \tau | \hat{H} | x', 0 \rangle}{\langle x'', \tau | x', 0 \rangle} \\
&= \frac{m\omega^2}{2} [(x''^2 + x'^2) \csc^2 \omega\tau - 2x''x' \cot \omega\tau \csc \omega\tau] - \frac{i\hbar\omega}{2} \cot \omega\tau.
\end{aligned} \tag{3.2.12}$$

Diante desse resultado, a expressão (3.1.13) para o propagador, toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\langle x'', \tau | x', 0 \rangle &= C(x'', x') \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau d\tau' \left[\frac{m\omega^2}{2} \left((x''^2 + x'^2) \csc^2 \omega\tau' - \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. 2x''x' \cot \omega\tau' \csc \omega\tau' \right) - \frac{i\hbar\omega}{2} \cot \omega\tau' \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.2.13}$$

A integração sobre τ' nessa última expressão pode ser calculada diretamente, obtendo-se,

$$\langle x'', \tau | x', 0 \rangle = \frac{C(x'', x')}{\sqrt{\sin \omega\tau}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega\tau} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega\tau - 2x''x'] \right\}, \tag{3.2.14}$$

em que $C(x'', x')$ é uma constante arbitrária a ser determinada de acordo com o passo (3).

A determinação de $C(x'', x')$ é feita com o auxílio das expressões (3.1.14), (3.1.15) e (3.1.17). Entretanto, precisa-se reescrever os operadores $\hat{P}(0)$ e $\hat{P}(\tau)$ em termos dos operadores $\hat{X}(\tau)$ e $\hat{X}(0)$, ordenados apropriadamente.

Para $\hat{P}(0)$ tem-se a expressão (3.2.7) e para $\hat{P}(\tau)$, basta introduzir a expressão (3.2.7) na (3.2.6). Assim,

$$\hat{P}(0) = \frac{m\omega}{\sin \omega\tau} \left[\hat{X}(\tau) - \hat{X}(0) \cos \omega\tau \right],$$

$$\hat{P}(\tau) = m\omega \cot \omega\tau \left[\hat{X}(\tau) - \hat{X}(0) \cos \omega\tau \right] - m\omega \hat{X}(0) \sin \omega\tau. \tag{3.2.15}$$

Inserindo essas expressões em (3.1.14) e (3.1.15), pode-se mostrar facilmente que,

$$\frac{\partial C(x'', x')}{\partial x''} = 0 = \frac{\partial C(x'', x')}{\partial x'}. \quad (3.2.16)$$

A última relação diz que $C(x'', x') = C$, ou seja, é uma constante independente de x'' e x' . A fim de determinar a constante C , primeiro toma-se o limite $\tau \rightarrow 0^+$ em $\langle x'', \tau | x', 0 \rangle$. Através da expressão (3.2.14), tem-se que,

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \langle x'', \tau | x', 0 \rangle &= \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \frac{C}{\sqrt{\omega\tau}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\tau} (x'' - x')^2 \right] \\ &= C \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{m\omega}} \delta(x'' - x'). \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

Comparando-se esse resultado com a condição inicial dada pela expressão (3.1.17), obtém-se $C = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar}}$. Substituindo esse valor na expressão do propagador (3.2.14), obtém-se, finalmente, o propagador de Feynman para o oscilador harmônico unidimensional,

$$\begin{aligned} K(x'', x'; \tau) &= \langle x'', \tau | x', 0 \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin \omega\tau}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega\tau} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega\tau - 2x''x'] \right\}. \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

Capítulo 4

Método algébrico

Explora-se aqui, uma versão do método algébrico para o cálculo do propagador de Feynman, cuja ideia geral é a fatoração do operador evolução temporal. Para tal, usa-se de manipulações dos operadores momento e posição, bem como a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff.

4.1 O método algébrico

O operador hamiltoniano \hat{H} para um sistema não relativístico, pode, usualmente, ser escrito como a soma dos termos envolvendo os operadores \hat{P} e \hat{X} , os quais não comutam. Por isso, a fatoração do operador evolução temporal $\hat{U}(\tau) = \exp\left(-\frac{i\tau\hat{H}}{\hbar}\right)$ em um produto de simples operadores exponenciais envolve alguma álgebra. Essa álgebra lida, basicamente, com a relação de comutação entre esses operadores que não comutam, usa-se a fórmula genericamente conhecida como Baker-Campbell-Hausdorff. Então, com uso dessa fórmula fica mais fácil calcular a ação dessas simples exponenciais de operadores nos estados $|x\rangle$ ou $|p\rangle$, do que ação do operador evolução temporal original nesses mesmos estados.

Começa-se reescrevendo o operador evolução temporal $\hat{U}(\tau)$ como um produto de exponenciais dos operadores \hat{X} , \hat{P} e $\hat{P}\hat{X}$. A fatoração pode ser feita com a ajuda da fórmula Baker-Campbell-Hausdorff,

$$\exp(\hat{A})\hat{B}\exp(-\hat{A}) = \hat{C}, \quad (4.1.1)$$

em que \hat{A} , \hat{B} e \hat{C} são operadores e

$$\hat{C} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (4.1.2)$$

válido para qualquer \hat{A} e \hat{B} . Essa expressão pode ser iterada como:

$$\begin{aligned}\hat{C}^2 &= \left[\exp(\hat{A}) \hat{B} \exp(-\hat{A}) \right] \left[\exp(\hat{A}) \hat{B} \exp(-\hat{A}) \right] \\ &= \exp(\hat{A}) \hat{B}^2 \exp(-\hat{A}) \\ &\vdots \\ \hat{C}^n &= \exp(\hat{A}) \hat{B}^n \exp(-\hat{A}).\end{aligned}\quad (4.1.3)$$

Expandindo-se a $\exp(\hat{C})$, pode-se identificar cada potência \hat{C}^n na expressão (4.1.3),

$$\exp(\hat{C}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp(-\hat{A}).\quad (4.1.4)$$

Que pode ser invertida,

$$\exp(\hat{B}) = \exp(-\hat{A}) \exp(\hat{C}) \exp(\hat{A}).\quad (4.1.5)$$

Então, identifica-se $\hat{B} = -\frac{i\tau\hat{H}}{\hbar}$ e encontra-se uma forma fatorada do operador evolução para uma escolha conveniente do operador \hat{A} . A escolha específica para \hat{A} depende da forma explícita do hamiltoniano. Essa fatoração pode ser repetida quantas vezes forem necessárias. Em geral, o operador \hat{C} na expressão (4.1.2), que é uma série infinita com \hat{B} e múltiplos comutadores de \hat{A} e \hat{B} , é mais complicado que o operador \hat{B} sozinho, que é proporcional ao hamiltoniano. Porém, escolhendo-se convenientemente o operador \hat{A} , essa série pode truncar e os demais termos dos comutadores podem cancelar com alguns termos originalmente presente em \hat{B} .

Com isso, substitui-se o hamiltoniano fatorado na definição do propagador de Feynman $K(x'', x'; \tau)$ e calcula-se a ação da exponencial dos operadores \hat{X} , \hat{P} e $\hat{P}\hat{X}$ no estado $|x\rangle$. Para o operador \hat{X} esse cálculo é trivial e para \hat{P} , precisa-se apenas usar a relação de completude $\int dp |p\rangle \langle p| = \hat{1}$ e o elemento de matriz $\langle x|p\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}xp\right)$. Para o operador misto $\hat{P}\hat{X}$ precisa-se usar a expressão

$$\langle p'| \exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right) |p\rangle = \exp(-\gamma) \delta(p' - \exp(-\gamma)p),\quad (4.1.6)$$

em que γ é um parâmetro arbitrário a ser escolhido depois. A expressão (4.1.6) vem da relação

$$\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle = \exp(-\gamma)|\exp(-\gamma)p\rangle. \quad (4.1.7)$$

Antes de aplicar o método algébrico a um problema específico, deseja-se deduzir a expressão (4.1.7). Primeiro, observa-se que

$$\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)\hat{P}|p\rangle = p \exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle. \quad (4.1.8)$$

Essa última expressão pode ser reescrita como:

$$\left[\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)\hat{P}\exp\left(\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)\right]\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle = p \exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle, \quad (4.1.9)$$

então, pode-se usar a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (4.1.1) para reescrever o termo entre parênteses,

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)\hat{P}\exp\left(\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right) &= \left(1 + \gamma + \frac{1}{2!}\gamma^2 + \frac{1}{3!}\gamma^3 + \dots\right)\hat{P} \\ &= \exp(\gamma)\hat{P}. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Substitui-se o resultado acima na expressão (4.1.9), tem-se

$$\hat{P}\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle = \exp(-\gamma)p \exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle, \quad (4.1.11)$$

isso mostra que, $\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle$ é um autoestado do operador \hat{P} com autovalor $p \exp(-\gamma)$. Esse autoestado pode ser escrito como $|\exp(-\gamma)p\rangle$, até uma constante C_γ , de modo que,

$$\exp\left(-\frac{i\gamma\hat{P}\hat{X}}{\hbar}\right)|p\rangle = C_\gamma|\exp(-\gamma)p\rangle. \quad (4.1.12)$$

Para determinar a constante C_γ , escreve-se

$$\langle p'|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{X}\hat{P}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{P}\hat{X}\right)|p\rangle = |C_\gamma|^2\langle \exp(-\gamma)p'|\exp(-\gamma)p\rangle. \quad (4.1.13)$$

Com o uso da relação $[\hat{X}\hat{P}, \hat{P}\hat{X}] = 0$ e a expressão (4.1.5), tem-se

$$\langle p' | \exp \left(\frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{X}, \hat{P}] \right) | p \rangle = |C_\gamma|^2 \delta(\exp(-\gamma)(p' - p)), \quad (4.1.14)$$

de modo que,

$$\exp(-\gamma)\delta(p - p') = |C_\gamma|^2 \exp(\gamma)\delta(p' - p). \quad (4.1.15)$$

Essa expressão determina $C_\gamma = \exp(-\gamma)$ e finalmente encontra-se a expressão (4.1.7), como queria-se.

Agora, aplica-se o método algébrico para resolver alguns problemas de mecânica quântica. Para o oscilador harmônico o operador evolução temporal é dado por:

$$\hat{U}(\tau) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \tau \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 \right) \right]. \quad (4.1.16)$$

Começa-se por escolher $A = \alpha \hat{X}^2$ em que α é um parâmetro arbitrário e $B = -\frac{i\tau}{\hbar} \hat{H}$. Usando a expressão (4.1.2), tem-se,

$$\hat{C} = -\frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} + \alpha \left(-\frac{i}{\hbar} \tau \right) [\hat{X}^2, \hat{H}] + \frac{1}{2!} \left[\alpha \hat{X}^2, \left[\alpha \hat{X}^2, -\frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right] \right]. \quad (4.1.17)$$

Embora, a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff tenha um número infinito de termos, o número de comutadores não nulos entre \hat{H} e \hat{X}^2 é finito. Resolvendo-se, então, esses comutadores, chega-se a,

$$\hat{C} = -\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{i\hbar\alpha}{m} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}) + \frac{m}{2} \left[\omega^2 - \left(\frac{2\alpha\hbar}{m} \right)^2 \right] \hat{X}^2 \right]. \quad (4.1.18)$$

Para eliminar o termo \hat{X}^2 da expressão (4.1.18), deve-se ter $\left(\frac{2\alpha\hbar}{m} \right)^2 = \omega^2$, ou seja, $\alpha = \frac{\omega m}{2\hbar}$. Logo,

$$\hat{C} = -\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{i\hbar\alpha}{m} (\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}) \right]. \quad (4.1.19)$$

Usando-se a relação de comutação $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ e o valor de α , tem-se

$$\hat{C} = \frac{i\omega\tau}{2} - \frac{i\tau}{\hbar} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X} \right). \quad (4.1.20)$$

De acordo com a expressão (4.1.5), chega-se a

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i\tau}{\hbar}\hat{H}\right) &= \exp\left(\frac{i\omega\tau}{2}\right) \\ &\exp\left(-\alpha\hat{X}^2\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\tau\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right)\right] \exp\left(\alpha\hat{X}^2\right). \end{aligned} \quad (4.1.21)$$

Para reduzir o operador acima, que contém \hat{P}^2 entre parênteses, em um produto de termos simples, repete-se o procedimento anterior. Identifica-se, então,

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \beta\hat{P}^2, \\ \hat{B} &= -\frac{i\tau}{\hbar}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right). \end{aligned}$$

Assim,

$$\hat{C} = -\frac{i\tau}{\hbar}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right) + \left[\beta\hat{P}^2, -\frac{i\tau}{\hbar}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right)\right]. \quad (4.1.22)$$

Resolve-se a relação de comutação da expressão anterior e, tem-se

$$\hat{C} = -\frac{i\tau}{\hbar}\left[i\omega\hat{P}\hat{X} + \hat{P}^2\left(\frac{1}{2m} + 2\hbar\omega\beta\right)\right]. \quad (4.1.23)$$

Para eliminar o termo \hat{P}^2 em (4.1.23), deve-se ter,

$$\beta = -\frac{1}{4m\omega\hbar}$$

Assim,

$$\hat{C} = -\frac{i\tau}{\hbar}\left(i\omega\hat{P}\hat{X}\right). \quad (4.1.24)$$

De acordo com (4.1.5),

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\tau\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + i\omega\hat{P}\hat{X}\right)\right] = \exp\left(-\beta\hat{P}^2\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}\right] \exp\left(\beta\hat{P}^2\right). \quad (4.1.25)$$

Substituindo esse resultado em (4.1.21), obtém a expressão para o operador evolução temporal, escrito como um produto de operadores simples,

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}\right) &= \exp\left(\frac{i\omega\tau}{2}\right) \exp\left(-\alpha\hat{X}^2\right) \exp\left(-\beta\hat{P}^2\right) \times \\ &\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}\right] \exp\left(\beta\hat{P}^2\right) \exp\left(\alpha\hat{X}^2\right). \end{aligned} \quad (4.1.26)$$

Agora, substitui-se essa expressão na definição do propagador de Feynman, e encontra-se,

$$\begin{aligned} K(x'', x'; \tau) &= \exp\left[-\alpha(x''^2 - x'^2) + \frac{i\omega\tau}{2}\right] \times \\ &\int \frac{dpdp'}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'x'' - px') - \beta(p'^2 - p^2)\right] \langle p' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}\right] | p \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.27)$$

De acordo com (4.1.6),

$$\langle p' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(i\omega\tau)\hat{P}\hat{X}\right] | p \rangle = \exp(-\gamma) \delta(P' - \exp(-\gamma)P).$$

Identifica-se $\gamma = i\omega\tau$ e com as definições de α e β , chega-se a

$$\begin{aligned} K(x'', x'; \tau) &= \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\left[(x''^2 - x'^2) + 2\frac{[\exp(-i\omega\tau)x'' - x']^2}{1 - \exp(-2i\omega\tau)}] - \frac{i\omega\tau}{2}\right\} \times \\ &\int dp \exp\left\{-\left[\frac{1 - \exp(-2i\omega\tau)}{4m\omega\hbar}\right]\left[p - 2im\omega\frac{[\exp(-i\omega\tau)x'' - x']^2}{1 - \exp(-2i\omega\tau)}\right]^2\right\}. \end{aligned} \quad (4.1.28)$$

Essa integral tem uma forma gaussiana e pode ser facilmente resolvida, obtendo-se o propagador para o oscilador harmônico,

$$K(x'', x'; \tau) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar\sin\omega\tau}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega\tau} [(x''^2 + x'^2) \cos\omega\tau - 2x''x']\right\}, \quad (4.1.29)$$

em que usou-se $[1 - \exp(-2i\omega\tau)] = 2i \exp(i\omega\tau) \operatorname{sen} \omega\tau$ e a fórmula de Euler, $\exp(i\omega\tau) = \cos \omega\tau + i \operatorname{sen} \omega\tau$. Esse resultado concorda com os resultados obtidos nos capítulos anteriores.

Capítulo 5

Autofunções, autovalores e a função partição

O objetivo central deste capítulo é mostrar como obter os estados estacionários e os correspondentes níveis de energia, bem como a função partição do oscilador harmônico quântico, diretamente da expressão do propagador de Feynman.

5.1 Autofunções e autovalores de energia

Para obter os autoestados e os autovalores de energia, precisa-se recalculer o propagador (4.1.29) na forma que permita uma comparação direta com a representação espectral para o propagador de Feynman dada por:

$$K(x, x', \tau) = \Theta(\tau) \sum_n \phi_n(x) \phi_n^*(x') \exp\left(-\frac{iE_n\tau}{\hbar}\right), \quad (\tau > 0). \quad (5.1.1)$$

Defini-se uma variável $z = \exp(-i\omega\tau)$, então, pode-se escrever,

$$\text{sen}(\omega\tau) = \frac{1}{2i} \frac{1 - z^2}{z} \quad (5.1.2)$$

e

$$\text{cos}(\omega\tau) = \frac{1 + z^2}{2z}. \quad (5.1.3)$$

Ainda, define-se $\xi' \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'$ e $\xi'' \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x''$, e expressa-se o propagador do oscilador harmônico na forma,

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; \tau) &= \\
&\sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1-z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{1-z^2} \left[2\xi'\xi''z - (\xi'^2 + \xi''^2) \left(\frac{1+z^2}{2} \right) \right] \right\} \\
&= \sqrt{\frac{m\omega z}{\pi\hbar}} (1-z^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\xi'^2 + \xi''^2) \right] \exp \left[\frac{2\xi'\xi''z - (\xi'^2 + \xi''^2) z^2}{1-z^2} \right],
\end{aligned} \tag{5.1.4}$$

em que usou-se a identidade,

$$\frac{1+z^2}{2(1-z^2)} = \frac{1}{2} + \frac{z^2}{1-z^2}. \tag{5.1.5}$$

Agora, considera-se a fórmula de Mehler,

$$\frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp \left[\frac{2z\xi\xi' - z^2(\xi^2 + \xi'^2)}{1-z^2} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) H_n(\xi') \frac{z^n}{2^n n!}, \quad (|z| < 1). \tag{5.1.6}$$

No entanto, alguns cuidados devem ser tomados para utilizar a expressão (5.1.6), porque $|z| = 1$ e a fórmula de Mehler (5.1.6) requer que $|z| < 1$. Esse problema pode ser contornado se adicionar uma parte imaginária a ω , isto é, $\omega \rightarrow i\epsilon$ e tomar $\epsilon \rightarrow 0$ após os cálculos.

Assim, com o uso da expressão (5.1.6), a equação (5.1.4) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; \tau) &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x''^2 + x'^2) \right] \times \\
&\sum_{n=0}^{\infty} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x'' \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x' \right) \frac{\exp \left[-i\omega\tau \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]}{2^n n!}.
\end{aligned} \tag{5.1.7}$$

Compara-se essa última expressão com a representação espectral (5.1.1), finalmente, obtém-se resultados bem conhecidos para as autofunções da energia (a menos de um fator de fase) e níveis de energia, respectivamente:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \tag{5.1.8}$$

e

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega. \tag{5.1.9}$$

5.2 Função partição

O objetivo é encontrar a função partição para o oscilador harmônico. Estando um sistema descrito pelo hamiltoniano \hat{H} em equilíbrio térmico com um reservatório, a probabilidade do sistema ser encontrado no estado quântico $|n\rangle$, em que $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ é,

$$P_n = \frac{1}{A} \exp(-\beta E_n), \quad (5.2.1)$$

em que $\beta = \frac{1}{KT}$, sendo K a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta do reservatório em que o sistema está em equilíbrio térmico. A é a constante de normalização.

Defini-se a função partição do sistema como sendo [16]

$$Z \equiv \sum_{|n\rangle} \exp(-\beta E_n), \quad (5.2.2)$$

em que $|n\rangle$ são todos os autoestados do hamiltoniano \hat{H} do sistema quântico.

A função partição, no geral, pode ser escrita como,

$$Z(\beta) = \sum_{|n\rangle} \langle n | \exp(-\beta E_n) | n \rangle = Tr \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right]. \quad (5.2.3)$$

O traço pode ser tomado sobre uma base discreta, as autofunções do hamiltoniano, ou, mais conveniente aqui, sobre um conjunto contínuo dos autoestados do operador posição, denotado por $|x\rangle$. Logo,

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | \exp(-\beta \hat{H}) | x \rangle. \quad (5.2.4)$$

Comparando a integral com o propagador de Feynman, observa-se que β faz o papel de um tempo imaginário, ou seja, $\beta = i\hbar\tau$ com a diferença de que, no caso da função partição, os estados inicial e final são os mesmos, assim, tem-se os pontos $x' = x'' = x$ e

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx K(x, x; -i\hbar\beta). \quad (5.2.5)$$

Então, do propagador do oscilador harmônico (4.1.26), obtém-se,

$$K(x, x; -i\hbar\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(-i\omega\beta\hbar)}} \times \exp \left[-\frac{im\omega}{\hbar \sin(-i\omega\beta\hbar)} (\cos(-i\omega\beta\hbar) - 1) x^2 \right] \quad (5.2.6)$$

Mas, $\sin(-i\alpha) = -i \sinh \alpha$ e $\cos(i\alpha) = \cosh \alpha$; logo,

$$K(x, x; -i\hbar\beta) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega\beta\hbar)}} \times \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar \sinh(\omega\beta\hbar)} (\cosh(\omega\beta\hbar) - 1) x^2\right]. \quad (5.2.7)$$

Substituindo essa expressão em (5.2.5),

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh(\omega\hbar\beta)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\left(\frac{m\omega}{\hbar} \tanh\left(\frac{\omega\beta\hbar}{2}\right) x^2\right)\right] dx. \\ &= \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{1}{2}\omega\beta\hbar\right)}, \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

em que usou-se as identidades $\cosh \alpha - 1 = 2 \sinh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ e $\sinh \alpha = 2 \sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cosh\left(\frac{\alpha}{2}\right)$.

Expandindo-se a função hiperbólica, tem-se,

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\beta \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\right], \quad (5.2.9)$$

que é a função partição para o oscilador harmônico unidimensional [5].

Capítulo 6

Conclusões

O método algébrico é muito poderoso, uma vez que é diretamente ligado a álgebra de Lie, ele pode ser utilizado para a solução de uma gama de problemas. Para o cálculo do propagador do oscilador harmônico unidimensional essa técnica exibe uma simplicidade matemática. Porém, esse cálculo é extenso e isso não é tão eficiente.

O método de Schwinger é de fato muito eficaz, envolve a realização de três passos simples, a partir da forma diferencial do propagador de Feynman na representação de Heisenberg. Mostrando que pode ser muito útil na mecânica quântica não relativística.

O método integral de caminho apresentado aqui, com o intuito de obter o propagador para o oscilador harmônico, utiliza da definição de novas variáveis, o que torna mais fácil introduzir também uma função F , de forma similar a fórmula de convolução e chegar diretamente ao propagador desejado, sem ter que resolver as primeiras integrações em busca de uma relação de recorrência, como é feito em grande parte da literatura. E ainda, o método de integral de caminho, fornece a ideia mais clara do conceito probabilístico da teoria quântica. Contudo, esse método, é mais vantajoso para o cálculo do propagador do oscilador harmônico em relação aos outros dois métodos apresentados.

Referências Bibliográficas

- [1] Thomaz , M. T. *Integrais de Trajetória*,(Notas de aula, CBPF, 1997).
- [2] Rodrigues, A. F. *A integral de Feynman das origens às teorias de campos a temperaturas finitas*, (CBPF, 2010).
- [3] Oliveira, F. *Integrais de Caminho: aplicação para a partícula livre e para o oscilador harmônico e cálculo da função partição para o oscilador harmônico*, (Monografia, UFJF, 2012).
- [4] Schwinger, J. *Gauge invariance and vacuum polarization*, Phys. Rev.**82**, 664-679 (1951).
- [5] Barone, F. A., Boschi-Filho, H. & Farina, C. *Three Methods for Calculating the Feynman Propagator*, Am.J.Phys **71**, 483-491, (2003).
- [6] Neto, J. B. *Matemática para físicos com aplicações: vetores, tensores e spinores, volume I*, (Livraria da Física, São Paulo, 2010).
- [7] Gilmore, R. *Lie Groups, Lie Algebras and Some Applications*,(Wiley, New York, 1974).
- [8] Truax, D. R. *Baker-Campbell-Hausdorff relations and unitary of $SU(2)$ and $SU(1,1)$ squeeze operators*, Phys. Rev. D. **31**, 1988-1991, (1985).
- [9] Yonei, K. *An operator method of evaluating the Bloch density matrix for an oscillator in a constant magnetic field*, J. Phys. **A 22**, 2415-2426(1989).
- [10] Quijas, P. C. G & Aguilar, L.M.A. *Factorizing the time evolution operator*, Phys. Scr. **75**, 185-194 (2007).
- [11] Perepelitsa, D. V. *Path Integrals in Quantum Mechanics* MIT Department of Physics, Cambridge, MA 02142.
- [12] Lemos, N. A. *Mecânica Analítica*, (Livraria da Física, São Paulo, 2007).

- [13] Bassalo, J. M. F. *Eletrodinâmica Quântica*,(Livraria da Física, São Paulo, 2006).
- [14] Cohen-Tannoudji, C. *Quantum Mechanics*,(Published by Hermann and John Wiley, Paris, 1977).
- [15] Dirac, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics-4ª edição revisado (The International series of monographs on physics;27)*, (Oxford Science Publications, New York, 2007).
- [16] Feynman, R. P. & Hibbs, A. R. *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (Emended ed. McGraw-Hill, New York, 1965).
- [17] Sakurai, J. J. *Modern Quantum Mechanics-Revised Edition*, (San Fu Tuan, Califórnia,1994).
- [18] Dutra, A. S., Hott, M. B. & Farina, C. *Propagadores na Mecânica Quântica Não Relativístico e Integrais de Trajetória*, (IF/UFRJ/Monografia/88/02).
- [19] Oliveira, W. *Teoria Quântica de campos I. Notas de aula* , (Manuscrito, Universidade Federal de Juiz de Fora).
- [20] Mackenzie, R. *Path Integral Methods and Applications*, (2000). arXiv:quant-ph/0004090v1.
- [21] Neto, J. B. *Eletrodinâmica Quântica*, (notas de curso, IF/UFRJ, 1988).

Apêndice A

Integrais especiais

A.1 Cálculo de algumas integrais

Já é bem conhecida a integral,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad a > 0. \quad (\text{A.1.1})$$

Utilizar-se-á esse resultado para resolver a integral n-dimensional,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp\left(-\frac{1}{2}(x, Ax)\right), \quad (\text{A.1.2})$$

em que, A é uma matriz simétrica e positiva. A quantidade (x, Ax) representa um produto escalar.

$$(x, Ax) = A_{ij}x_i x_j \quad (x_i \text{ real}). \quad (\text{A.1.3})$$

Seja uma transformação ortogonal R

$$x' = Rx,$$

é claro, que o produto escalar é invariante para essa transformação. Isto é,

$$(x', A'x') = (x, Ax). \quad (\text{A.1.4})$$

Assim, escolhe-se uma transformação R tal que diagonalize A e o produto escalar seja, em consequência, dado por

$$(x', A'x') = \sum_{i=1}^n a_i x_i'^2. \quad (\text{A.1.5})$$

Tem-se, agora, que escrever $d^n x$ em termos de $d^n x'$, o que é feito através da Jacobiano da transformação.

$$d^n x = (\det R) d^n x'. \quad (\text{A.1.6})$$

Como sabe-se, nas transformações ortogonais, $\det R = \pm 1$. Considerando-se, apenas, transformações próprias, tem-se

$$d^n x = d^n x'.$$

Assim,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp\left(-\frac{1}{2}(x, Ax)\right) = \int_{-\infty}^{\infty} d^n x' \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^n a_i x_i'^2\right). \quad (\text{A.1.7})$$

Usando o resultado (A.1.1), tem-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp\left(-\frac{1}{2}(x, Ax)\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{a_1}} \sqrt{\frac{2\pi}{a_2}} \dots \sqrt{\frac{2\pi}{a_n}}. \quad (\text{A.1.8})$$

Mas, $a_1, a_2, \dots, a_n = \det A$. Portanto,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp\left(-\frac{1}{2}(x, Ax)\right) = (2\pi)^{\frac{n}{2}} (\det A)^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.1.9})$$

Passa-se, agora, à resolução de

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp\left[-\frac{1}{2}(x, Ax) - (b, x)\right], \quad (\text{A.1.10})$$

em que b representa um vetor constante e A continua sendo uma matriz simétrica. O objetivo é reduzir essa integral ao caso anterior, usando um mecanismo parecido com o de completar quadrado. Seja então,

$$Q = \frac{1}{2}(x, Ax) + (b, x),$$

procura-se o que falta a $Q(x)$, para se ter algo como $\frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x}))$, sendo \bar{x} um vetor constante a ser determinado.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})) &= \frac{1}{2}(x, Ax) - \frac{1}{2}(x, A\bar{x}) - \frac{1}{2}(\bar{x}, Ax) + \frac{1}{2}(\bar{x}, A\bar{x}) \\ &= \frac{1}{2}(x, Ax) - (A\bar{x}, x) + \frac{1}{2}(\bar{x}, A\bar{x}). \end{aligned} \quad (\text{A.1.11})$$

Assim, fazendo-se $b = -A\bar{x}$, tem-se

$$Q(x) = \frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})) - \frac{1}{2}(b, A^{-1}b). \quad (\text{A.1.12})$$

A integral considerada fica, então, dada por:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp \left[-\frac{1}{2}(x, Ax) - (b, x) \right] = \\ &= \exp \left[\frac{1}{2}(b, A^{-1}b) \right] \int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp \left[-\frac{1}{2}(x - \bar{x}, A(x - \bar{x})) \right] \\ &= (2\pi)^{\frac{n}{2}} (\det A)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{2}(b, A^{-1}b) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.1.13})$$

Com esse resultado, é possível calcular um tipo mais geral de integral através da relação:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x P(x_i) \exp \left[-\frac{1}{2}(x, Ax) - (b, x) \right] = P \left(-\frac{\partial}{\partial b_i} \right) \times \int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp \left[-\frac{1}{2}(x, Ax) - (b, x) \right], \quad (\text{A.1.14})$$

em que $P(x_i)$ é um polinômio qualquer em x_i .

A.2 A integral de Fresnel

Seja a integral,

$$I_F = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(iax^2) dx. \quad (\text{A.2.1})$$

Considere a função complexa $f(z)$,

$$f(z) = \exp(-z^2), \quad (\text{A.2.2})$$

em que z na forma polar é escrito como

$$z = r \exp(i\theta). \quad (\text{A.2.3})$$

Aplica-se o teorema de resíduos à integral $\int_{\Gamma} f(z) dz$ em que o caminho Γ está indicado na figura, obtém-se

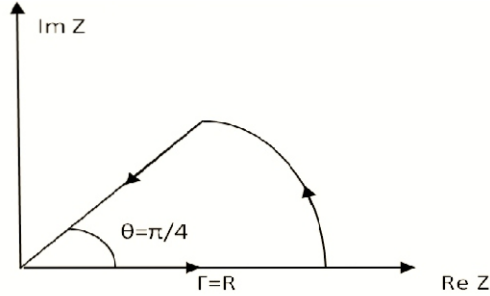


Figura A.1:

Caminho Γ da integral $\int_{\Gamma} f(z) dz$ para o teorema de resíduos [18].

$$\begin{aligned}
 0 = & \int_0^R \exp(-r^2) dr + \int_0^{\pi/4} \exp(-R^2(\cos 2\theta + i \operatorname{sen} 2\theta)) iR \exp(i\theta) d\theta + \\
 & \int_{R \exp(i\pi/4)}^0 \exp(-z^2) dz,
 \end{aligned}
 \tag{A.2.4}$$

uma vez que não há polos no caminho fechado Γ .

No limite de $R \rightarrow \infty$ a segunda integral em (A.2.4) se anula, observa-se também que a terceira integral nessa equação é feita ao longo de $\theta = \frac{\pi}{4}$, pode-se fazer a seguinte transformação de variável,

$$\begin{aligned}
 z &= \xi \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \\
 &= \xi \left(\cos \frac{\pi}{4} + i \operatorname{sen} \frac{\pi}{4}\right) \\
 &= \xi \left(\frac{\sqrt{2}}{2} + i \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \\
 &= \xi \sqrt{i}.
 \end{aligned}
 \tag{A.2.5}$$

Logo,

$$z^2 = i\xi^2, \tag{A.2.6}$$

com ξ real.

Assim, obtém-se

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R \exp(-r^2) dr + \lim_{R \rightarrow \infty} \sqrt{i} \int_R^0 \exp(-i\xi^2) d\xi &= 0 \\ \sqrt{i} \int_0^\infty \exp(-i\xi^2) d\xi &= \int_0^\infty \exp(-r^2) dr = \sqrt{\pi}, \end{aligned} \quad (\text{A.2.7})$$

ou seja,

$$\int_0^\infty \exp(-i\xi^2) d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{i}} \quad (\text{A.2.8})$$

$$\int_0^\infty \exp(+i\xi^2) d\xi = \sqrt{i\pi}. \quad (\text{A.2.9})$$

No caso de $\int_0^\infty \exp\left(i\frac{ax^2}{2}\right) dx$ basta fazer $\xi = \sqrt{\frac{a}{2}}x$,

$$d\xi = \sqrt{\frac{a}{2}} dx$$

e obtém-se,

$$\int_0^\infty \exp\left(i\frac{ax^2}{2}\right) dx = \sqrt{\frac{2i\pi}{a}}. \quad (\text{A.2.10})$$

Apêndice B

A fórmula de Mehler

B.1 Dedução da fórmula de Mehler

A fórmula de Mehler é dada por:

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) H_n(y) \frac{t^n}{2^n n!} = (1-t^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{2xyt - t^2(x^2 + y^2)}{1-t^2} \right], \quad (\text{B.1.1})$$

em que $H_n(x)$ e $H_n(y)$ são os polinômios de Hermite.

A representação integral para tais polinômios é:

$$H_n(x) = \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x+iu)^n \exp(-u^2) du, \quad (\text{B.1.2})$$

$$H_n(y) = \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (y+is)^n \exp(-s^2) ds. \quad (\text{B.1.3})$$

Tem-se que,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) H_n(y) \frac{t^n}{2^n n!} = \\ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-u^2) \exp(-s^2) \left[\sum_{n=0}^{\infty} (x+iu)^n (y+is)^n \frac{2^n t^n}{n!} \right] du ds. \end{aligned} \quad (\text{B.1.4})$$

Identifica-se

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n [(x + iu)(y + is)t]^n}{n!} = \exp(2(x + iu)(u + is)t). \quad (\text{B.1.5})$$

Assim, a expressão (B.1.4) pode ser reescrita como,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) H_n(y) \frac{t^n}{2^n n!} &= \\ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-u^2) \exp(-s^2) \exp[2(x + iu)(u + is)t] \, du \, ds. \end{aligned} \quad (\text{B.1.6})$$

Completando-se quadrado, pode-se resolver inicialmente a integração em u , ou seja,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-u^2 + 2ti(y + is)u) \, du &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-[u - it(y + is)]^2 + t^2(y + is)^2] \, du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) \, d\xi \exp[t^2(s - iy)^2] \\ &= \sqrt{\pi} \exp[t^2(s - iy)^2]. \end{aligned} \quad (\text{B.1.7})$$

Substituindo-se o resultado na expressão (B.1.6), obtém-se,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) H_n(y) \frac{t^n}{2^n n!} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-s^2 + t^2(s - iy)^2 + 2x(y + is)t) \, ds \\ &= \frac{\exp(-t^2 y^2 + 2xyt)}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[(1 - t^2)s^2 + 2it(x - ty)s] \, ds \\ &= \frac{\exp(-t^2 y^2 + 2xyt)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\pi}{1 - t^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{-t^2(x - ty)^2}{1 + t^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.1.8})$$

Na última passagem para obter (B.1.8) completa-se quadrado de forma análoga ao que foi feito em (B.1.7). Rearranjando-se os termos em (B.1.8), finalmente obtém-se ,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) H_n(y) \frac{t^n}{2^n n!} = (1 - t^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{2xyt - t^2(x^2 + y^2)}{1 - t^2} \right]. \quad (\text{B.1.9})$$