Anselmo Mariani Neto

Formulação Funcional da Mecânica Quântica

Porto Alegre
2012

Anselmo Mariani Neto

Formulação Funcional da Mecânica Quântica

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Orientador: Dr. Horácio Oscar Girotti

Porto Alegre
2012

Aluno, Anselmo Mariani Neto

Formulação Funcional da Mecânica Quântica

26 páginas

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

1. Mecânica Quântica

2. Formulação Funcional

3. Oscilador Harmônico Simples

I. Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Anselmo Mariani Neto
Aluno

Prof. Dr.
Nome do Orientador

Resumo

Este é um trabalho de revisão da formulação funcional da mecânica quântica. A representação do propagador em termos de uma integral funcional do espaço de fase é obtida utilizando a Transformada Generalizada de Weyl (TGW).

A correspondência entre amplitude e integrais funcionais aparece contaminada por uma falta de unicidade.

Os casos específicos do oscilador harmônico simples e modificado são estudados em detalhes.

Abstract

In this work we review the functional formulation of quantum mechanics. The representation of the propagator in terms of phase space integrals is obtained by invoking the Generalized Weyl Transform.

The correspondence between amplitudes and path integrals does not appear to be unique.

The case of the simple and modified harmonic oscillators are studied in the detail.

Sumário

Introdução

O objeto de interesse é o propagador para um intervalo de tempo finito, o qual, pode ser escrito em termos de uma integral funcional do espaço de fase. Para conseguir este objetivo, a estratégia usual consiste em subdividir o intervalo de tempo em subintervalos iguais o que torna possível expressar o propagador como um produto de amplitudes.

Inicialmente iremos revisar a formulação de operadores da mecânica quântica. Logo após, derivaremos a correspondente expressão para o propagador.

A Transformada Generalizada de Weyl (TGW), é uma regra de correspondência que relaciona funções com operadores e vice-versa. Ela será utilizada na construção do "*short time propagator*"(STP). Veremos que o propagador apresenta uma dependência em termos do parâmetro real α, o qual, parametriza o mapeamento de opradores em funções e vice-versa implicado pela TGW. A consistência da formulação exige que esta dependência desapareça.

Como não existe uma prova geral da independência do propagador com α, deve-se analisar caso a caso. O oscilador harmônico simples e o modificado, são dois casos onde a dependência com α desaparece por razões diversas, como veremos através de um cálculo explícito.

Capítulo 1

Propagador e Regras de Correspondência

Neste capítulo incluímos a especificação do sistema físico e a definição do propagador. Também definimos a Transformada Generalizada de Weyl (TGW) e exemplificamos sua utilização.

1.1 Sistema sob análise

Vamos considerar um sistema físico cujo espaço de fase Γ é descrito pelas variáveis independentes q_i,p_i, $i = 1,2,...,N$, onde $\{q_i|i = 1,2,...,N\}$ é um conjunto de coordenadas Cartesianas e $\{p_i|i = 1,2,...,N\}$ o correspondente momenta canônicos conjugados. A dinâmica do sistema é induzida pelo Hamiltoniano $h(q,p)$. Por hipótese, a função real $h(q,p)$ possui limite inferior em Γ. Os correspondentes operadores da formulação de Schrödinger serão denotados, respectivamente, pelas letras maiúsculas Q_i, P_i, e $H(P,Q)$.

De acordo com o Princípio de Correspondência, o sistema é quantizado abstraindo-se os comutadores básicos dos correspondentes Colchetes de Poisson, isto é[1]:

[1]Aqui I denota a matriz identidade N x N.

$$[Q_i,Q_j] = 0,$$
$$[P_i,P_j] = 0,$$
$$[Q_i,P_j] = i\hbar\delta_{i,j}I \,, \tag{1.1}$$

onde $\hbar$ é a constante de Dirac[2]. A transiao $h(p,q) \longmapsto H(Q,P)$ pode apresentar problemas de ordenamento.

Na sequência, torna-se necessário encontrar uma representação da álgebra na Eq.1.1. Isso exige achar uma base no espaço de estados a qual, por sua vez, permitirá substituir operadores por matrizes ([1] e [2]). O conjunto de autovetores comuns dos operadores posição $Q_i,i = 1,2...,N$,

$$|q\rangle = |q_1,q_2,...,q_N\rangle \equiv |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes ... \otimes |q_N\rangle \ . \tag{1.2}$$

serve para tal propósito. Eles verificam a condição de normalização

$$\langle q|q'\rangle = \delta^{(N)}(q - q')\,, \tag{1.3}$$

onde

$$\delta^{(N)}(q - q') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^N p}{(2\pi\hbar)^N} e^{\frac{i}{\hbar}p.(q-q')} \tag{1.4}$$

e fornecem uma resolução espectral do operador identidade, isto é [3],

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d^N q \, |q\rangle \, \langle q| \ . \tag{1.5}$$

A solução do problema de encontrar as matrizes representativas dos operadores posição e momentum na base $\{|q\rangle\}$ leva a

[2] $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, sendo h a constante de Plank.

[3] Escreveremos $d^N q \equiv \prod_{i-1}^{N} dq_i$ e $d^N p \equiv \prod_{i-1}^{N} dp_i$.

$$\langle q|Q_i|q'\rangle = q_i\delta^N(q-q')\,,$$
$$\langle q|P_i|q'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}\delta^N(q-q')\,. \tag{1.6}$$

No que diz respeito aos autovetores do momentum linear, cabe lembrar que:

$$\langle q|p\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}q.p}}{(2\pi\hbar)^{\frac{N}{2}}}\,. \tag{1.7}$$

1.2 O Propagador

Na formulação funcional da Mecânica Quântica as amplitudes são representadas por integrais funcionais. Nesta seção focamos em encontrar a integral funcional associada com o **propagador**,

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) \equiv \left\langle q_f \left| e^{-\frac{i}{\hbar}H(Q,P)(t_f-t_i)} \right| q_i \right\rangle\,. \tag{1.8}$$

Para $t > t_i$, $K(q_t,t;q_i,t_i)$ satisfaz a equação de Schrödinger e a condição inicial

$$\lim_{t_f\downarrow t_i} K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \delta^N(q_f-q_i)\,. \tag{1.9}$$

Um sistema cujo operador Hamiltoniano independe do tempo verifica

$$\Psi(q_f,t_f) = \int d^N q_i K(q_f,t_f;q_i,t_i)\Psi(q_i,t_i)\,, \tag{1.10}$$

onde

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \left\langle q_f \left| e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_f-t_i)} \right| q_i \right\rangle\,, \tag{1.11}$$

$$\Psi(q_f,t_f) \equiv \langle q_f|\Psi(t_f)\rangle \tag{1.12}$$

e

$$\Psi(q_i,t_i) \equiv \langle q_i|\Psi(t_i)\rangle\,. \tag{1.13}$$

Claramente, o kernel $K(q_f,t_f;q_i,t_i)$ propaga o sistema físico do estado inicial, descrito pela função de onda $\Psi(q_i,t_i)$, para o estado final descrito pela função de onda $\Psi(q_f,t_f)$.

1.3 Regras de Correspondência

A Transformada Generalizada de Weyl (TGW) é um caso especial das regras de correspondência formuladas por Cohen ([3] e [4]) e Agarwal e Wolf [5]. Ela mapeia uma função do espaço fase $a(p,q)$ em uma classe de operadores quânticos $A_\alpha(Q,P)$ e vice-versa, isto é,

$$a(q,p) \stackrel{\alpha}{\to} A_\alpha(Q,P)\,, \tag{1.14}$$

$$a_\alpha(q,p) \stackrel{\alpha}{\leftarrow} A(Q,P)\,. \tag{1.15}$$

Sucintamente

$$A_\alpha(Q,P) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d^N p \int_{-\infty}^{\infty} d^N q a(q,p)\Delta_\alpha(Q-q,P-p)\,, \tag{1.16}$$

onde

$$\Delta_\alpha(Q-q,P-p) \equiv (2\pi\hbar)^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} d^N\tau e^{-\frac{i}{\hbar}\tau.p}\left|q-\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\tau\right\rangle\left\langle q+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\tau\right| \tag{1.17}$$

e

$$a_\alpha(q,p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d^N\tau e^{\frac{i}{\hbar}\tau.p}\left\langle q-\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\tau\right| A(Q,P)\left|q+\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\tau\right\rangle\,. \tag{1.18}$$

Aqui, α é um parâmetro real que varia no intervalo

$$-\frac{1}{2} \le \alpha \le +\frac{1}{2}\,. \tag{1.19}$$

A seguir, mencionaremos algumas propriedades da TGW que serão utilizadas no decorrer do trabalho. Para $\alpha = 0$ a TGW se reduz à transformada ordinária de Weyl [6]. Além do mais

$$A \overset{\alpha}{\to} a_\alpha \overset{\beta}{\to} A_{\alpha,\beta}\,. \tag{1.20}$$

Este tipo de mapeamento duplo possui as seguintes propriedades (Apêndice A):

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = A_{\beta,\alpha}(Q,P)\,, \tag{1.21}$$

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = A_{0,\alpha+\beta}(Q,P) = A_{\alpha+\beta,0}(Q,P)\,, \tag{1.22}$$

$$A_{\alpha,-\alpha}(Q,P) = A_{-\alpha,\alpha}(Q,P) = A_{0,0}(Q,P) = A(Q,P)\,, \tag{1.23}$$

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = A_{\alpha+\gamma,\beta-\gamma}(Q,P)\,. \tag{1.24}$$

Similarmente

$$a \overset{\alpha}{\to} A_\alpha \overset{\beta}{\to} a_{\alpha,\beta}\,, \tag{1.25}$$

leva em

$$a_{\alpha,\beta}(q,p) = a_{\beta,\alpha}(q,p)\,, \tag{1.26}$$

$$a_{\alpha,\beta}(q,p) = a_{0,\alpha+\beta}(q,p) = a_{\alpha+\beta,0}(q,p)\,, \tag{1.27}$$

$$a_{\alpha,-\alpha}(q,p) = a_{-\alpha,\alpha}(q,p) = a_{0,0}(q,p) = a(q,p)\,, \tag{1.28}$$

$$a_{\alpha,\beta}(q,p) = a_{\alpha+\gamma,\beta-\gamma}(q,p)\,. \tag{1.29}$$

No caso em que A(Q,P) é da forma

$$A(Q,P) = cF(Q) + dG(P)\,, \tag{1.30}$$

onde c e d são constantes complexas, o mapeamento $a_\alpha(q,p)$ resulta em:

$$a_\alpha(q,p) = cf(q) + dg(p)\,. \tag{1.31}$$

Assim, quando A(Q,P) não apresenta produto de operadores não comutativos a correspondente TGW independe de α.

A última questão a ser abordada é a determinação da restrição na estrutura de $a_\alpha(q,p)$ imposta pela condição $A^\dagger(Q,P) = A(Q,P)$ bem como aquela imposta por $a^*(q,p) = a(q,p)$ em $A_\alpha(Q,P)$. Pode-se mostrar que:

$$A^\dagger(Q,P) = A(Q,P) \Rightarrow a_\alpha^*(q,p) = a_{-\alpha}(q,p)\,, \tag{1.32}$$

implicando em que, apenas no caso $\alpha = 0$, operadores Hermitianos são mapeados em funções reais. Por outro lado,

$$a^*(q,p) = a(q,p) \Rightarrow A_\alpha^\dagger(Q,P) = A_{-\alpha}(Q,P)\,, \tag{1.33}$$

o que nos leva a concluir que apenas para $\alpha = 0$, funções reais são mapeadas em operadores Hermitianos.

Capítulo 2

Integrais Funcionais

2.1 Integral Funcional do espaço de fase

Inicialmente começaremos dividindo o intervalo de tempo(t_f,t_i) em $(m+1)$ sub-intervalos de tempo iguais, isto é,

$$t_i = t_0 < t_1 < t_2 < ... < t_{m-1} < t_m < t_{m+1} = t_f \,. \tag{2.1}$$

Introduzimos a seguir o "short time propagator"(STP)

$$K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) \equiv \left\langle q_{j+1} \left| e^{-\frac{i}{\hbar}H(Q,P)(t_{j+1}-t_j)} \right| q_j \right\rangle \,. \tag{2.2}$$

Após inserir m vezes a resolução espectral do operador identidade em termos dos autovetores comuns dos observáveis posição (Eq.(1.5)) na estrutura do propagador (Eq.(1.8)) chega-se a:

$$\begin{aligned} K(q_f,t_f;q_i,t_i) &= \int_{-\infty}^{\infty} d^N q_1 ... d^N q_m \, \langle q_f| \, e^{-\frac{i}{\hbar}H(Q,P)(t_{m+1}-t_m)} \, |q_m\rangle \qquad (2.3) \\ &\quad \times \langle q_m| \, ...X... \, |q_1\rangle \, \langle q_1| \, e^{-\frac{i}{\hbar}H(Q,P)(t_1-t_i)} \, |q_i\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d^N q_1 .... d^N q_m \prod_{j=0}^{m} K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) \,. \qquad (2.4) \end{aligned}$$

Visando simplificar a escrita introduziremos

$$\epsilon \equiv t_{j+1} - t_j \, . \tag{2.5}$$

Assumimos ϵ pequeno o suficiente para garantir a convergência da expansão em série do STP. No final dos cálculos será tomado o limite $\epsilon \to 0$. Retendo termos da primeira ordem em ϵ, encontra-se que:

$$K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) = \left\langle q_{j+1} \left| e^{-\frac{i}{\hbar}H(Q,P)(t_{j+1}-t_j)} \right| q_j \right\rangle \tag{2.6}$$

$$\cong \left\langle q_{j+1} \left| \left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P) \right) \right| q_j \right\rangle \, . \tag{2.7}$$

É neste momento que faremos uso da TGW. Da Eq.(1.23), segue-se que

$$\left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P) \right) = \left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P) \right)_{\alpha,-\alpha} \, , \tag{2.8}$$

a qual junto com as equações (1.16) e (1.18) conduz a

$$\left(I - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P) \right)_{\alpha,-\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} d^N p \int_{-\infty}^{\infty} d^N q \left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon h_\alpha(q,p) \right) \Delta_{-\alpha}(Q-q,P-p) \, , \tag{2.9}$$

onde

$$h_\alpha(q,p) = \int_{-\infty}^{\infty} d^N \tau e^{\frac{i}{\hbar}\tau . p} \left\langle q - \left(\frac{1}{2} - \alpha \right) \tau \right| H(Q,P) \left| q + \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) \tau \right\rangle \, , \tag{2.10}$$

é a TGW do operador Hamiltoniano. Substituindo a equação (2.9) na (2.6) obtemos

$$K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) \cong \int_{-\infty}^{\infty} d^N p \int_{-\infty}^{\infty} d^N q \left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon h_\alpha(q,p) \right) \times \langle q_{j+1} | \Delta_{-\alpha}(Q-q,P-p) | q_j \rangle \, . \tag{2.11}$$

Após efetuar algumas operações algébricas encontramos:

$$K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) \tag{2.12}$$
$$\cong (2\pi\hbar)^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} d^N p \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p\frac{q_{j+1}-q_j}{t_{j+1}-t_j} - h_\alpha(q_j(\alpha),p)\right](t_{j+1}-t_j)\right\},$$

onde

$$q_j(\alpha) \equiv \left(\frac{1}{2}-\alpha\right)q_j + \left(\frac{1}{2}+\alpha\right)q_{j+1}\,. \tag{2.13}$$

Note que o fator $\left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon h_\alpha(q,p)\right)$, que aparece no lado direito da Eq. (2.11), foi substituído pela exponencial $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon h_\alpha(q,p)\right)$. Qualitativamente esse é o processo inverso daquele que foi utilizado no início do cálculo do STP, onde o operador $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P)\right)$ foi aproximado por $\left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon H(Q,P)\right)$. A equação (2.12) é a versão final do STP.

Substituindo o STP na equação do propagador (1.8) e tomando a operação de limite:

$$\epsilon \to 0,\ \ m \to \infty,\ \ \sum_{j=0}^{m}, \tag{2.14}$$

chegamos a

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}(2\pi\hbar)^{-N(m+1)}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{m} d^N q_j \int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=0}^{m} d^N p_j \tag{2.15}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\left[p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{t_{j+1}-t_j} - h_\alpha(q_j(\alpha),p)\right](t_{j+1}-t_j)\right\}.$$

Existem m × N integrais de posição e (m+1) × N integrais de momento. O problema de estabelecer a existência do limite $m \to \infty$ não é trivial. Quando isto acontece o integrando tende a uma funcional bem definida

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \int_\alpha \frac{[Dq]\,[Dp]}{(2\pi\hbar)^N} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\left[p(t)\frac{dq(t)}{dt} - h_\alpha(q(t),p(t))\right]}, \tag{2.16}$$

onde

$$[Dq] \equiv \prod_{j=1}^{m} d^N q_j \,, \tag{2.17}$$

e

$$[Dp] \equiv \prod_{j=0}^{m} d^N p_j \,, \tag{2.18}$$

são medidas de integração funcional [1] .

Antes de prosseguirmos enfatizamos que:

a) o lado direito da Eq. (2.16) toma significado matemático após especificar o procedimento a ser usado para definir a integral funcional;

b) a dependência em α sinaliza uma falta de unicidade na formulação funcional. Essa dependência tem duas origens ($h_\alpha(q,p)$ e $q_j(\alpha)$). Não existe uma prova geral que assegure o cancelamento em α. Cada caso deve ser analisado separadamente;

c) O expoente na Eq. (2.15) não é puramente imaginário, já que a TGW não mapeia, em geral, um operador Hermitiano em uma função real. O que sabemos é que $h^*_\alpha(q,p) = h_\alpha(q,p)$ para $\alpha = 0$, e quando H(Q,P) não tem problema de ordenamento. Quando $h_\alpha(q,p)$ é real, a sua contribuição na integral funcional, decorrente de uma configuração diversa, difere por um fator de fase.

[1] A derivação original da integral funcional do espaço de fase foi feita por Garrod [7]. A introdução de integrais funcionais na mecânica quântica foi feita por Dirac [8] e posteriormente desenvolvida por Feynman[9].

Capítulo 3

Oscilador Harmônico

Neste capítulo vamos ilustrar o cancelamento da dependência em α no caso do oscilador harmônico. [10]

3.1 Oscilador Harmônico Simples

O oscilador harmônico é um sistema físico cujo propagador $K(q_f,t_f;q_i,t_i)$ pode ser calculado com exatidão, de maneira que serve como um teste para a formulação funcional. Para simplificar os cálculos, vamos trabalhar com o caso unidimensional $N = 1$. O operador Hamiltoniano é dado por:

$$H(Q,P) = \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 Q^2\,, \tag{3.1}$$

onde M é a massa da partícula e ω é a frequência do oscilador. Como esse operador não apresenta produtos de operadores não-comutantes a transformada de Weyl não depende de α,

$$h_\alpha(q,p) = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2\,. \tag{3.2}$$

Usando esse resultado na Eq. (2.15) chegamos a

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}(2\pi\hbar)^{-(m+1)}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{m}dq_j\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=0}^{m}dp_j \tag{3.3}$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\epsilon\left[p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{\epsilon}-\frac{p_j^2}{2M}-\frac{1}{2}M\omega^2q_j^2(\alpha)\right]\right\}.$$

As integrais do momentum não estão emaranhadas, assim podemos calculá-las separadamente. Por exemplo:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp_je^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\frac{p_j^2}{2M}+\frac{i}{\hbar}p_j(q_{j+1}-q_j)} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar M}{i\epsilon}}e^{\frac{iM}{\hbar}\frac{(q_{j+1}-q_j)^2}{2\epsilon}}, \tag{3.4}$$

que quando substituído na Eq. (3.3) leva em

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}\left(\frac{M}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{m}dq_j \tag{3.5}$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\epsilon\left[\frac{1}{2}M\left(\frac{q_{j+1}-qj}{\epsilon}\right)^2-\frac{1}{2}M\omega^2q_j^2(\alpha)\right]\right\},$$

onde

$$q_j(\alpha)\equiv\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)q_{j+1}+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)q_j\,. \tag{3.6}$$

É claro que

$$\frac{1}{2\epsilon}[(q_{j+1}-q_j)^2-\omega^2\epsilon^2q_j^2(\alpha)] = \tag{3.7}$$
$$\frac{1}{2\epsilon}\left\{(q_{j+1}-q_j)^2-\omega^2\epsilon^2\left[\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)q_{j+1}+\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)q_j\right]^2\right\}$$
$$= Rq_{j+1}^2+2Gq_jq_{j+1}+Hq_j^2 \tag{3.8}$$

onde

$$R \equiv \frac{1-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)^2}{2\epsilon}\,, \tag{3.9}$$

$$G \equiv \frac{-1-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{1}{4}-\alpha^2\right)}{2\epsilon}\,, \tag{3.10}$$

$$H \equiv \frac{1-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)^2}{2\epsilon}\,, \tag{3.11}$$

$$t_j \equiv 2Gq_i,\; t_2 = ... = t_{m-1} \equiv 0,\; t_m \equiv 2Gq_f\,, \tag{3.12}$$

$$a_{jk} \equiv [R+H]\delta_{jk} + G(\delta_{j-1,k}+\delta_{j,k-1}) = a_{kj}\,. \tag{3.13}$$

Logo

$$\sum_{j=0}^{m}[Rq_{j+1}^2 + 2Gq_jq_{j+1} + Hq_j^2] = Rq_f^2 + Hq_i^2 + \sum_{j=1}^{m} t_jq_j + \sum_{j,k=1}^{m} q_ja_{jk}q_k\,. \tag{3.14}$$

A matriz A é simétrica m $\times$ m, dada por:

$$\|A\| = \begin{bmatrix} R+H & G & 0 & 0 & ... & 0 & 0 & 0 & 0 \\ G & R+H & G & 0 & ... & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & G & R+H & G & ... & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & G & R+H & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 & G & R+H & G \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & 0 & 0 & G & R+H \end{bmatrix}. \tag{3.15}$$

Assim temos que

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}\left(\frac{M}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[R.q_f^2+Hq_i^2]} \tag{3.16}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{m} dq_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{j=1}^{m} t_j q_j + \sum_{j,k=1}^{m} a_{jk}q_j q_k\right)\right]$$

$$= \lim_{m\to\infty}\left(\frac{M}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[R.q_f^2+Hq_i^2-\frac{c^2}{4}]}(i\pi\hbar)^{\frac{m}{2}}(detA)^{-\frac{1}{2}}\,, \tag{3.17}$$

onde

$$c^2 = \langle T|A^{-1}|T\rangle = \sum_{j,k=1}^{m} t_j g_{jk} t_k\,, \tag{3.18}$$

e

$$t_1 \equiv 2Gq_i,\ t_2 = ... = t_{m-1} = 0,\ t_m = 2Gq_f\,. \tag{3.19}$$

Segue que

$$detA = (-G)^m D_m^m = (-G)^m \frac{\sin[(m+1)\phi]}{\sin(\phi)}\,, \tag{3.20}$$

com ϕ dado por

$$\phi = \cos^{-1}\left(-\frac{R+H}{2G}\right)\,, \tag{3.21}$$

e R, G e H dados pelas equações (3.9), (3.10) e (3.11). A Eq. (3.18), fornece

$$c^2 = [(a^{-1})_{11}t_1^2 + 2(a^{-1})_{1m}t_1 t_m + (a^{-1})_{mm}t_m^2] \tag{3.22}$$

$$= 4G^2[(a^{-1})_{11}q_i^2 + 2(a^{-1})_{1m}q_f q_i + (a^{-1})_{mm}q_f^2]\,. \tag{3.23}$$

Seguindo que

$$(a^{-1})_{11} = (a^{-1})_{mm} = (-G)^{-1}\frac{D^m_{m-1}}{D^m_m}\,, \tag{3.24}$$

$$(a^{-1})_{1m} = \frac{(-G)^{-1}}{D^m_m}\,, \tag{3.25}$$

logo

$$c^2 = 4G^2\frac{(q_i^2+q_f^2)D^m_{m-1}+2q_fq_i}{D^m_m}\,. \tag{3.26}$$

com isso a Eq. (3.16) fica:

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}\left(\frac{M}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}}(G)^{-\frac{m}{2}}(D^m_m)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.27}$$
$$\times e^{\frac{i}{\hbar}\left[\left(R+\frac{GD^m_{m-1}}{D^m_m}\right)q_f^2+\left(H+\frac{GD^m_{m-1}}{D^m_m}\right)q_i^2+2\frac{G}{D^m_m}q_fq_i\right]}\,.$$

Usando as seguintes definições:

$$g\equiv 2\epsilon G, h\equiv 2\epsilon H, r\equiv 2\epsilon R\,, \tag{3.28}$$

passamos a ter

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}[2\pi\hbar i(-g)^m\epsilon D^m_m]^{-\frac{1}{2}} \tag{3.29}$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{2\hbar\epsilon D^m_m}\left[(rD^m_m+gD^m_{m-1})q_f^2+(hD^m_m+gD^m_{m-1})q_i^2+2gq_fq_i\right]\right\}\,.$$

Como o limite de um produto é o produto dos limites, e

$$\phi(0)=0, \phi^{'}(0)=\omega, \phi^{''}(0)=0\,, \tag{3.30}$$

chegamos em [11]:

$$\lim_{m\to\infty}(-g)^m \epsilon D_m^m = \lim_{m\to\infty}(-g)^m \frac{\epsilon \sin[(m+1)\phi]}{\sin(\phi)} \tag{3.31}$$
$$= \frac{\sin[\omega(t_f - t_i)}{\omega},$$
$$\lim_{m\to\infty}[D_m^m - D_{m-1}^m] = \cos[\omega(t_f - t_i)]\,. \tag{3.32}$$

De acordo com a Eq. (3.9),

$$\lim_{\epsilon\to 0} r = 1,\ \lim_{\epsilon\to 0} g = -1,\ \lim_{\epsilon\to 0} h = 1\,. \tag{3.33}$$

Usando os resultados dessas equações (3.31), (3.33), juntamente com $(m+1)\epsilon = t_f - t_i$ resulta que:

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \left[\frac{M\omega}{2\pi\hbar i \sin[\omega(t_f - t_i)]}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.34}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{M\omega}{2\sin[\omega(t_f - t_i)]}\left[(q_f^2 + q_i^2)\cos[\omega(t_f - t_i)] - 2q_f q_i\right]\right\},$$

sendo esta a expressão conhecida para o propagador do oscilador harmônico simples. A dependência em α foi efetivamente eliminada pelo processo de limite.

3.2 Oscilador Harmônico Modificado

Para o oscilador harmônico simples a dependência em α foi eliminada pelo processo de limite. Agora vamos ver como essa dependência é eliminada quando o oscilador harmônico é descrito pelo Hamiltoniano:

$$H(Q,P) = \frac{1}{2}P^2 + \omega^2 Q^2 + \frac{\omega}{2}(QP + PQ)\,, \tag{3.35}$$

que deriva daquele da Eq. (3.1), através da transformação canônica:

$$P = \sqrt{2}P^{'} \,, \tag{3.36}$$
$$Q = \frac{1}{2}\left(Q^{'} - \frac{P^{'}}{\omega}\right) .$$

Tal característica já seria suficiente para assegurar a unicidade do propagador. Porém, mostraremos o cálculo direto para verificarmos o mecanismo de cancelamento de α. Temos

$$h_\alpha(q,p) = \frac{1}{2}p^2 + \omega^2 q^2 + \omega pq - i\hbar\omega\alpha \,. \tag{3.37}$$

O propagador fica

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty} (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^{m} dq_j \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=0}^{m} dp_j \tag{3.38}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\left[p_j\frac{q_{j+1}-q_j}{t_{j+1}-t_j} - \frac{1}{2}p^2 - \omega^2 q^2 - \omega pq + i\hbar\omega\alpha\right]\right\} .$$

As integrais em p são gaussianas da forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_j e^{i(ap_j^2 + bp_j)} \tag{3.39}$$

com

$$a \equiv -\frac{\epsilon}{2\hbar},\ b \equiv \frac{(q_{j+1}-q_j) - \omega q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon}{\hbar} \,. \tag{3.40}$$

De forma que as (m + 1) integrais, nos fornecem

$$\left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\frac{1}{2\epsilon}\left[(q_{j+1}-q_j) - \omega q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon\right]^2\right\} . \tag{3.41}$$

De maneira que o STP, fica:

$$K(q_{j+1},t_{j+1};q_j,t_j) = \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar}\left(\frac{\Delta_j^2}{2\epsilon^2} - \frac{\omega^2 q_j^{'2}}{2} - \frac{\omega q_j^{'}\Delta_j}{\epsilon} - i\hbar\alpha\omega\right)\right\} \tag{3.42}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[-\epsilon^2\left(\alpha\omega^2 q_j^{'}\frac{\Delta_j}{\epsilon} + \alpha\omega\frac{\Delta_j^2}{\epsilon^2}\right) - \epsilon^3\left(\frac{\omega^2\alpha^2\Delta_j^2}{2\epsilon^2}\right)\right]\right\},$$

onde

$$\Delta_j \equiv q_{j+1} - q_j,\ q_j^{'} \equiv \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)\,. \tag{3.43}$$

Inspecionando-se a Eq. (3.42), segue que o fator $\exp(-\alpha\epsilon\omega)$, não pode ser mais compensado pelos outros fatores de α. O cancelamento entre termos dependentes de α na Eq. (3.38) só poderá ocorrer depois de se efetuar as integrais em q. Tomando a Eq. (3.42) em (3.38) temos,

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i) = \lim_{m\to\infty}\left(\frac{1}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} e^{-\alpha\omega\epsilon(m+1)}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{j=1}^{m} dq_j \tag{3.44}$$
$$\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{m}\left[\frac{[(q_{j+1}-q_j) - \omega q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon]^2}{2\epsilon} - \omega^2 q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon\right]\right\}.$$

Da Eq. (3.44) vemos que, para que ocorra um cancelamento as integrais devem gerar um fator $\exp(\alpha\omega\epsilon)$. Como veremos, esse é o caso. Para

$$R \equiv \frac{1 - 2\epsilon\omega\left(\frac{1}{2}+\alpha\right) - \omega^2\epsilon^2(\frac{1}{2}+\alpha)^2}{2\epsilon}, \tag{3.45}$$
$$G \equiv \frac{-1 + 2\epsilon\omega\alpha - \omega^2\epsilon^2\left(\frac{1}{4}+\alpha^2\right)}{2\epsilon}, \tag{3.46}$$
$$H \equiv \frac{1 + 2\epsilon\omega(\frac{1}{2}-\alpha) - \omega^2\epsilon^2\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)^2}{2\epsilon}, \tag{3.47}$$

podemos comprovar que

$$\frac{[(q_{j+1}-q_j)-\omega q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon]^2}{2\epsilon}-\omega^2 q_{j,j+1}(\alpha)\epsilon = Rq_{j+1}^2+2Gq_jq_{j+1}+Hq_j^2\,. \quad (3.48)$$

No problema em questão, podemos fazer uma analogia ao oscilador harmônico simples de maneira que, com R,G,H dados pelas equações (3.45), (3.46) e (3.47), com o uso de Eq. (3.28) e (3.48) chegamos a

$$K(q_f,t_f;q_i,t_i)=\lim_{m\to\infty}\left(\frac{1}{2\pi\hbar i\epsilon(-g)^m D_m^m}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha\omega\epsilon(m+1)} \quad (3.49)$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{2\hbar\epsilon D_m^m}\left[(rD_m^m+gD_{m-1}^m)q_f^2+(hD_m^m+gD_{m-1}^m)q_i^2+2gq_fq_i\right]\right\}\,.$$

Procedemos com a análise dos limites:

$$\phi(\epsilon)=\cos^{-1}\left[\frac{1-2\omega\alpha\epsilon-\epsilon^2\omega^2\left(\frac{1}{4}+\alpha^2\right)}{1-2\omega\alpha\epsilon+\epsilon^2\omega^2\left(\frac{1}{4}+\alpha^2\right)}\right]\,, \quad (3.50)$$

para a expansão de MacLaurin

$$\phi(\epsilon)=\phi(0)+\epsilon\phi^{'}(0)+\frac{\epsilon^2}{2!}\phi^{''}(0)\,, \quad (3.51)$$

obtemos

$$\phi(\epsilon)=0+\epsilon\left[2\omega\left(\frac{1}{4}+\alpha^2\right)+2\omega\left(\frac{1}{4}-\alpha^2\right)\right]+\frac{\epsilon^2}{2}(2\alpha\omega^2)=\omega\epsilon+\alpha\omega^2\epsilon^2\,. \quad (3.52)$$

Vemos na Eq. (3.52) que ocorreu um cancelamento em α, de maneira que agora a dependência está associada a termos de ϵ^2, com isso

$$\lim_{\epsilon\to 0}\sin(\phi)=\omega\epsilon,\ \lim_{\epsilon\to 0}\sin[(m+1)\phi]=\sin[\omega(t_f-t_i)]\,. \quad (3.53)$$

A diferença essencial em relação ao oscilador harmônico simples ocorre no limite do termo $(-g)^m$. Esse termo é o responssável pelo concelamento de α que aparece na Eq. (3.49). Tomando-se o limite:

$$(-g)^{-\frac{m}{2}} = \left[1 - 2\omega\alpha + \omega^2\epsilon^2\left(\frac{1}{4} - \alpha^2\right)\right]^{-\frac{m}{2}} \to [1 - 2\epsilon\omega\alpha] \to \\ [e^{-2\epsilon\omega\alpha}]^{-\frac{m}{2}} = e^{\alpha\omega\epsilon m}\,. \tag{3.54}$$

É claro que

$$\epsilon(m+1) \to (t_f - t_i) \tag{3.55}$$

então

$$\epsilon m \to (t_f - t_i)\,. \tag{3.56}$$

Assim, o termo da (3.54), previsto pelo Det(A) cancela com o termo de sinal oposto da Eq. (3.49). Os demais limites são:

$$\epsilon D_m^m \to \frac{\sin[\omega(t_f - t_i)]}{\omega}\,, \tag{3.57}$$

$$r \to 1,\ g \to -1,\ h \to 1\,, \tag{3.58}$$

$$\left[D_m^m - D_{m-1}^m\right] \to \cos[\omega(t_f - t_i)]\,. \tag{3.59}$$

Dessa forma, obtemos a mesma amplitude do propagador para o caso do oscilador harmônico simples (Eq. (3.34)), como mencionado no início da seção. A diferença para o caso anterior foi a maneira como ocorreu o cancelamento de α.

Considerações Finais

Introduzimos o propagador utilizando a formulação de operadores da mecânica quântica.

Derivamos a expressão do propagador na formulação funcional pelo método da divisão do intervalo finito em subintervalos infinitesimais.

Na sua forma final o propagador exibe uma dependência com um parâmetro real α o que, em princípio, compromete a unicidade da formulação. O reestabelecimento da unicidade foi verificado no caso do oscilador harmônico unidimensional.

Apêndice A

Mapeamento Duplo

Mostraremos nesse apêndice a dedução das propriedades dadas pelas equações (1.21), (1.22), (1.23) e (1.24). Como vimos, essas propriedades decorrem de um mapeamento duplo

$$A \overset{\alpha}{\to} a_\alpha \overset{\beta}{\to} A_{\alpha,\beta}\,. \tag{A.1}$$

Das equações (1.16) e (1.17) obtem-se:

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = (2\pi\hbar)^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} d^N q \int_{-\infty}^{\infty} d^N k a_\alpha(q,k)\Delta_\beta(Q-q,K-k) \tag{A.2}$$

$$= (2\pi\hbar)^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} d^N q \int_{-\infty}^{\infty} d^N k \int_{-\infty}^{\infty} d^N u \int_{-\infty}^{\infty} d^N v e^{\frac{i}{\hbar}k(v-u)} \left| q - \left(\frac{1}{2}+\beta\right) u \right\rangle$$
$$\times \left\langle q - \left(\frac{1}{2}-\alpha\right) v \right| A(Q,P) \left| q + \left(\frac{1}{2}+\alpha\right) v \right\rangle \left\langle q + \left(\frac{1}{2}-\beta\right) u \right| . \tag{A.3}$$

As integrais em k resultam em $\delta^{(N)}(v-u)$, assim obtemos

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = \int_{-\infty}^{\infty} d^N q \int_{-\infty}^{\infty} d^N u \left| q - \left(\frac{1}{2}+\beta\right) u \right\rangle \tag{A.4}$$
$$\times \left\langle q - \left(\frac{1}{2}-\alpha\right) u \right| A(Q,P) \left| q + \left(\frac{1}{2}+\alpha\right) u \right\rangle \left\langle q + \left(\frac{1}{2}-\beta\right) u \right| .$$

Como

$$\left\langle q - \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) u \right| = \left\langle q - \left(\frac{1}{2} + \beta\right) u \right| e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)u.P} , \tag{A.5}$$

$$\left| q + \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) u \right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)u.P} \left| q + \left(\frac{1}{2} - \beta\right) u \right\rangle , \tag{A.6}$$

$A_{\alpha,\beta}(Q,P)$ passa a

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = \int_{-\infty}^{\infty} d^N q \int_{-\infty}^{\infty} d^N u \left| q - \left(\frac{1}{2} + \beta\right) u \right\rangle \left\langle q - \left(\frac{1}{2} + \beta\right) u \right| \tag{A.7}$$
$$\times e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)u.P} A(Q,P) e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)u.P} \left| q + \left(\frac{1}{2} - \beta\right) u \right\rangle \left\langle q + \left(\frac{1}{2} - \beta\right) u \right| .$$

Mudando as variáveis de integração conforme:

$$q_i \rightarrow q_i^{'} = q_i - \left(\frac{1}{2} + \beta\right) u_i , \tag{A.8}$$

$$u_i \rightarrow q_i^{''} = q_i + \left(\frac{1}{2} - \beta\right) u_i , \tag{A.9}$$

de forma que

$$d^N q d^N u = d^N q^{'} d^N q^{''} . \tag{A.10}$$

Assim, o mapeamento duplo toma a seguinte forma:

$$A_{\alpha,\beta}(Q,P) = \int_{-\infty}^{\infty} d^N q^{'} \int_{-\infty}^{\infty} d^N q^{''} \tag{A.11}$$
$$\times \left| q^{'} \right\rangle \left\langle q^{'} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)(q^{'}-q^{''}).P} A(Q,P) e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha+\beta)(q^{'}-q^{''}).P} \left| q^{''} \right\rangle \left\langle q^{''} \right| .$$

Dessa equação, é possível verificada as propriedades dadas pelas equações (1.21), (1.22), (1.23) e (1.24).

Referências Bibliográficas

[1] J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley, Revised Edition, 1994.

[2] H. O. Girotti, *An introduction to the functional formulation of nonrelativistic quantum mechanics*, (2012).

[3] L. Cohen, Journal of Mathematical Physics 7, 781 (1966).

[4] L. Cohen, Journal of Mathematical Physics 17, 597 (1976).

[5] G. S. Agarwal and E. Wolf, Physical Review D **2**, 2161 (1970).

[6] H. Weyl, *Quantum mechanics and path integrals* (Dove publications, Princeton 1950).

[7] C. Garrod, Reviews of Modern Physics **38**, 483 (1966).

[8] P. A. M. Dirac, The Lagrangian in Quantum Mechanics, (1933).

[9] R. P. Feynman, Reviews of Modern Physics 20, 367 (1948).

[10]T. J. M. Simões, *Análise da formulação funcional da Mecânica Quântica não-relativística*, Master Dissertation (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil 1980); <http://.lume.ufrgs.br/>.

[11] H. O. Girotti Th. A. J. Maris, Gereralized Weyl Transforms and Path Integrals (Preprint IFUFRGS 1977. Apresentado no I Encontro Nacional de Física de Partículas e Campos, Cambuquira, MG, 1979)