Notas - Integração funcional na mecânica quântica

Matheus Pereira Coutinho
Instituto de Física da USP
matheus.coutinho9@usp.br

Postulados da Mecânica Quântica

- O estado de um sistema é inteiramente caracterizado por um vetor de estado no espaço de Hilbert $|\psi\rangle$
- Todo observável físico é representado por um operador hermitiano $\hat{A}$
- Ao medir uma grandeza A, os valores posíveis de serem obtidos são os autovalores do operador associado $A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$
- Dado o sistema em um estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de, ao medir a grandeza A, obter o valor a_n é $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$
- A evolução temporal de um estado quântica é regida pela equação de Schrodinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Evolução temporal em Mecânica Quântica e o Propagador

Quando o operador Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, a equação de Schrodinger tem solução trivial, e o estado do sistema em um intante t é

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(t=0)\rangle$$

Dizemos também que o estado evolui pela atuação do operador de evolução temporal $\hat{U}(t)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(t=0)\rangle$$

$$\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Dada a representação do estado inicial numa base de energia $\{n\}$

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$\hat{U}(t)|\psi(t=0)\rangle = \sum_n |n\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\langle n|\psi(t=0)\rangle$$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\hat{U}(t)|\psi(t=0)\rangle = \sum_n |n\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\langle n|\psi(t=0)\rangle$$

O operador de evolução temporal pode ser representado por uma matriz diagonal na base de energia

$$\hat{U}(t) \quad \longrightarrow \quad \langle n'|\hat{U}(t)|n\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\delta_{nn'}$$

Mas também podemos usar a base de posição $\{|q\rangle\}$

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$$

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q'-q) \qquad \mathbb{1} = \int dq\ |q\rangle\langle q|$$

$$\hat{U}(t) \quad \longrightarrow \quad \langle q'|\hat{U}(t)|q\rangle$$

$$\langle q'|\hat{U}(t)|q\rangle = \langle q'| \left(\sum_n |n\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\langle n| \right) |q\rangle$$

$$\langle q'|\hat{U}(t)|q\rangle = \sum_n \langle q'|n\rangle\langle n|q\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$\langle q|n\rangle$ é simplesmente a função de onda, e está associada à probabilidade de um estado com energia n estar na posição q

$$\langle q'|\hat{U}(t)|q\rangle = \sum_n \phi_n(q')\phi_n^*(q)e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Esse objeto possui uma interpretação física muito clara, ele está associado à amplitude de probabilidade de uma partícula inicialmente na posição q evoluir para a posição q' em um tempo t. Essa amplitude é denominada de propagador, justamente porque está associado a probabilidade de uma partícula propagar de q para q'

$$K(q',t;q,0) \equiv \langle q'|\hat{U}(t)|q\rangle$$

Integral de Caminho

Suponhemos que uma partícula está inicialmente em q e vai para q' passando por algum ponto intermediário q_1 no tempo t_1, então

$$K(q',t;q,0) = K(q',t;q_1,t_1)\cdot K(q_1,t_1;q,0)$$

Mas a equação acima está absolutamente incorreta, pois eu não posso afirmar com certeza que a partícula passou por q_1, o que posso fazer é integrar sobre todos os q_1 possíveis, o que no fundo é multiplicar pela identidade

$$K(q',t;q,0) = \int dq_1\ K(q',t;q_1,t_1)\cdot K(q_1,t_1;q,0)$$

Agora posso pensar não mas em 1 ponto intermediário mas N pontos intermediários, de forma que

$$t > t_{N-1}, t_{N,2}, ..., t_1 > 0 \quad , \ \delta t = \frac{t}{N}$$

$$K(q',t;q,0) = \int dq_{N-1}\ ...\ \int dq_1\ K(q',t;q_{N-1},t_{N-1})\cdot K(q_{N-1},t_{N-1};q_{N-2},t_{N-1})\ ...\ K(q_1,t_1;q,0)$$

Calculemos um desses propagadores

$$K(q_n,t_n;q_{n-1},t_n-\delta t) = \langle q_{n-1}|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|q\rangle$$

Expandindo a exponencial em uma série de Taylor

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t + O(\delta t^2)$$

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \langle q_{n-1}| \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right) |q\rangle$$

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

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \langle q_{n-1}| \left[1 - \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}\right)\delta t\right] |q\rangle$$

Como o potencial é função de q o operador potencial pode potencial pode atuar em $|q\rangle$. Mas ainda temos que lidar com o operador momento, para tanto, usaremos a base de momento

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p' - p) \ \ , \ \ \mathbb{1} = \int dp\ |p\rangle\langle p|$$

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \int dp_n\ \langle q_{n-1}|p\rangle \left[1 - \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}\right)\delta t\right] |\langle p|q\rangle$$

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \int dp_n\ \langle q_{n-1}|p\rangle\langle p|q\rangle \left[1 - \frac{i}{\hbar}H(q_n, p_n)\delta t\right]$$

$$\langle p|q\rangle = \frac{e^{ip_n \cdot q_n}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar}\ e^{ip_n(q_n - q_{n-1})} \left[1 - \frac{i}{\hbar}H(q_n, p_n)\delta t\right]$$

Agora faz sentido escrever o termo entre parênteses novamente como uma exponencial

$$K(q_n, t_n; q_{n-1}, t_n - \delta t) = \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar}\ \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n - q_{n-1})}{\delta t} - H(q_n, p_n)\right]\delta t\right\}$$

Substituindo esse resultado na expressão

$$K(q', t; q, 0) = \int dq_{N-1} \ldots \int dq_1\ K(q', t; q_{N-1}, t_{N-1}) \cdot K(q_{N-1}, t_{N-1}; q_{N-2}, t_{N-1}) \ldots K(q_1, t_1; q, 0)$$

Obtemos

$$K(q', t; q, 0) = \lim_{N\to\infty} \int dq_{N-1} \ldots \int dq_1 \int dp_N \ldots \int dp_1 \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^N \exp\left\{\sum_{n=1}^{N} \frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n - q_{n-1})}{\delta t} - H(q_n, p_n)\right]\delta t\right\}$$

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p_n(q_n - q_{n-1})}{\delta t} - H(q_n, p_n)\right]\delta t = \frac{i}{\hbar}\int dt\ p_n \cdot \dot{q}_n - H(q_n, p_n)$$

$$K(q',t;q,0)=\int dq_{N-1}\ ...\ \int dq_1\ \int dp_N\ ...\ \int dp_1\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^N exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\left[\int dt\ p_n\cdot\dot{q}_n-H(q_n,p_n)\right]\right]\right\}$$

Uma notação comum para compactar todas as integrais é

$$\int dq_{N-1}\ ...\ \int dq_1\ \int dp_N\ ...\ \int dp_1\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^N=\mathcal{D}q\mathcal{D}p$$

$$K(q',t;q,0)=\mathcal{D}q\mathcal{D}p\ exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\left[\int dt\ p_n\cdot\dot{q}_n-H(q_n,p_n)\right]\right]\right\}$$

$$\int dt\ p_n\cdot\dot{q}_n-H(q_n,p_n)\equiv A[q(t),p(t)]$$

$$K(q',t;q,0)=\mathcal{D}q\mathcal{D}p\ e^{(i/\hbar)A}$$

Para fazer aparecer uma lagrangiana na exponencial ainda é necessário manipular a expressão, para tanto, calcularemos a integral em p

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp_n exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n-q_{n-1})}{\delta t}-H(q_n,p_n)\right]\delta t\right\}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp_n\ exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n-q_{n-1})}{\delta t}-\frac{p_n^2}{2m}\right]\delta t\right\}$$

A integral acima é uma integral Gaussiana, cujo valor é

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp_n exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n-q_{n-1})}{\delta t}-H(q_n,p_n)\right]\delta t\right\}=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}}exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{q_n-q_{n-1}}{\delta t}\right)^2\delta t\right]$$

Substituindo em

$$K(q',t;q,0)=lim_{N\to\infty}\int dq_{N-1}\ ...\ \int dq_1\ \int dp_N\ ...\ \int dp_1\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^N exp\left\{\sum_{n=1}^{N}\frac{i}{\hbar}\left[p_n\frac{(q_n-q_{n-1})}{\delta t}-H(q_n,p_n)\right]\delta t\right\}$$

temos

$$K(q',t;q,0)=lim_{N\to\infty}\int dq_{N-1}\ ...\ \int dq_1\ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t}\right)^{N/2} exp\left\{\sum_{n=1}^{N}\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_n-q_{n-1}}{\delta t}\right)^2-V(q_n)\right]\delta t\right\}$$

$$lim_{N\to\infty}\sum_{n=1}^{N}\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_n-q_{n-1}}{\delta t}\right)^2-V(q_n)\right]\delta t=\frac{i}{\hbar}\int dt\ \frac{m}{2}(\dot{q}_n)^2-V(q_n)$$

$$L(q_n,\dot{q}_n)=\frac{m}{2}(\dot{q}_n)^2-V(q_n)$$

$$S[q(t)]=\int_0^t dt'\ L(q,\dot{q})$$

$$K(q',t;q,0)=\mathcal{D}q\ exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\ L(q,\dot{q})\right]$$

$$K(q',t;q,0)=\mathcal{D}q\ e^{(i/\hbar)S}$$