

ALVARO DE SOUZA DUTRA

CÁLCULO DE PROPAGADORES NA
MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA

Tese de

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO

1988

"A arte, como a ciência, não só não precisam de ordens, mas não podem, por sua própria natureza, suportá-las."

L. D. Trotsky

AGRADECIMENTOS

Não poderia deixar de agradecer nesta tese a algumas pessoas que colaboraram, de um modo ou de outro, neste trabalho.

- A Juan Alberto Mignaco pelo seu grande apoio que foi fundamental para a realização desta tese.

- A Carlos Farina de Souza, pela grande amizade, apoio e estímulo em meu trabalho e pelas incontáveis e inestimáveis discussões em física, e por sua grande colaboração nesta tese.

- A Arvind Narayan Vaidya, pelo apoio decisivo num momento crucial de minha vida acadêmica.

- A Bin Kang Cheng, pela sua grande colaboração e indicação de artigos decisivos para o desenvolvimento desta tese.

- A Marcelo Batista Hott e Antonio Soares de Castro, pela amizade e colaboração em parte desta tese.

- A Sonia Regina Nogueira de Sá, pela amizade e ao empréstimo de sua sala, onde esta tese foi realizada.

- A Fatima Dantas, pela grande dedicação e o excelente trabalho de datilografia.

- Aos alunos do CBPF que, como eu, valem menos do que um arquivo morto.

- E, a todos aqueles que, devido apenas ao reduzido espaço, deixei de citar.

RESUMO

Este trabalho objetiva, inicialmente, desenvolver formas de se obter o propagador quântico na mecânica de partículas. Para isso, partimos da equação de Schrödinger, das integrais de trajetória de Feynman e desenvolvemos ainda um método alternativo, baseado em equações diferenciais não-lineares. Aplicamos transformações de variáveis nas coordenadas espaciais e temporal, tanto no formalismo de Feynman, como é mais usual, quanto na equação de Schrödinger. Finalmente fazemos uma análise geral das vantagens e desvantagens de cada técnica em cada um dos formalismos.

SUMÁRIO

	pag.
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	iv
SUMÁRIO	v
LISTA DE FIGURAS	vi
Capítulo I - INTRODUÇÃO	1
Capítulo II - O PROPAGADOR QUÂNTICO COMO UMA INTEGRAL DE TRAJETÓRIA	7
2.1 - Introdução	7
2.2 - Equivalência entre os formalismos de Feynman e Schrödinger	9
2.3 - Convergência das Integrais de Caminho	12
2.4 - Um Método Alternativo de Calcular o Propagador	24
Capítulo III- CÁLCULO DE PROPAGADORES QUÂNTICOS E TRANSFORMAÇÕES DE VARIÁVEIS	31
3.1 - Propagador para uma partícula carregada, harmonicamente ligada, num campo magnético constante e com o potencial vetor de um solenóide	31
3.2 - Propagador de Feynman para uma partícula carregada com massa dependente do tempo num campo eletromagnético dependente do tempo	38
3.3 - Propagador para uma massa dependente do tempo sujeita a um potencial harmônico com frequência dependente do tempo	49
3.4 - Transformação de variáveis na equação de Schrödinger independente do tempo	57
3.5 - Soluções exatas da equação de Schrödinger para átomos coulombianos na presença de certos potenciais de osciladores anarmônicos	60
Capítulo IV - CONCLUSÕES	67
APÊNDICE	70
REFERÊNCIAS	84

LISTA DE FIGURAS

	pag.
1.1 - Analogia com princípio de Huygens	5
2.1 - Procedimento de particionar o tempo	9
2.2 - Neste caso só uma trajetória contribui	15
2.3 - Poligonais que contribuem na aproximação de primeira ordem .	16
2.4 - Poligonais que contribuem em segunda ordem de aproximação ..	18

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Esta tese procura expor de forma concisa e lógica, o trabalho que durante cerca de dois anos foi por nós desenvolvido.

Desde que Feynman introduziu as integrais de caminho em 1948 [1], seu uso tem crescido em muitas áreas da física. Isto, além de ter desenvolvido e ampliado o interesse no cálculo de propagadores quânticos e, a partir daí, das funções de Green que têm importância fundamental na teoria quântica de campos. Embora as primeiras aplicações das integrais de Feynman tenham sido no cálculo de propagadores quânticos de uma partícula, é no formalismo da teoria quântica de campos que elas têm se mostrado como uma ferramenta muito poderosa.

Na atualidade, as integrais de caminho são muito utilizadas em teoria quântica de campos, isto por tornarem os cálculos elegantes e econômicos, dando inclusive uma forma bem natural de se introduzir os gráficos de Feynman, que são de importância fundamental nos cálculos perturbativos de espalhamentos quânticos.

É importante lembrar ainda que os propagadores encerram em si toda a informação da dinâmica de um dado sistema

quântico. Dentre as propriedades dinâmicas dos sistemas descritos pelo propagador, algumas se destacam: a evolução espaço-temporal de um pacote de ondas, que, como veremos mais adiante, é descrita pelo propagador, e tem grande importância no estudo do espalhamento de tais pacotes; a capacidade de fornecer o espectro de auto-valores através dos pólos de sua transformada de Fourier; a possibilidade do cálculo da função espectral e da função de participação do sistema em estudo, etc.

No caso particular dos propagadores não-relativísticos, a equivalência entre o formalismo usual de Schrödinger e o de Feynman pode ser provada [2], pelo menos para lagrangeanas do tipo

$$L = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - V(\vec{r}). \quad (1.1)$$

Portanto, devemos poder reproduzir, no formalismo de Feynman, as expressões de todos os propagadores já obtidos antes via Schrödinger. Entretanto, mesmo estando certos da equivalência entre os formalismos, só um pequeno número de propagadores foram obtidos pelas integrais de trajetória, essencialmente os que derivam de ações quadráticas (partícula livre, oscilador harmônico simples e forçado, etc.), ou ações que depois de algum tipo de transformação se reduzem a elas; por exemplo, o átomo de hidrogênio pode ser reduzido após uma transformação canônica de ponto e uma reparametrização temporal ao problema de um oscilador harmônico em quatro dimensões [3,4] ou então, a um oscilador com potencial do tipo g/x^2 [59].

No capítulo II faremos um breve estudo sobre a con

vergência das integrais de trajetória e, em seguida, apresentaremos um método alternativo para o cálculo do propagador quântico, método esse que não usa integrais de caminho, nem tampouco parte das autofunções obtidas via Schrödinger para, em seguida, construir o propagador. Como iniciamos a trabalhar neste método muito recentemente, por conseguinte só conseguimos calcular propagadores já anteriormente obtidos por outros métodos. Apesar disso, achamos ser ele um método promissor e que em alguns casos, como veremos mais adiante, mostra-se mais simples e rápido para se obter os resultados procurados.

No capítulo III tratamos da técnica, muito utilizada atualmente, de transformação de variáveis. Aplicamos esta técnica tanto ao formalismo de integrais de trajetória quanto à equação de Schrödinger. Nesta última, estudamos transformações que já haviam sido anteriormente usadas, via Feynman, percorrendo assim o caminho inverso do usualmente trilhado nestes casos. Uma vez que esta técnica tem sido aplicada e desenvolvida até hoje, principalmente nas integrais de Feynman, isto devido à dificuldade inerente a esse formalismo, seria desejável estudá-la na equação de Schrödinger e, verificar se problemas novos podem ser resolvidos, e é o que fazemos na última seção deste capítulo.

Por motivos didáticos, vamos começar com uma breve discussão da interpretação física dos propagadores, explorando a analogia existente com o princípio de Huyghens da física ondulatória.

Vamos supor que o estado de um sistema físico formado por apenas uma partícula esteja no instante t' num autoestado do operador de posição X com autovalor x' , isto é,

$$|\psi(t')\rangle = |x'\rangle, \quad (1.2)$$

de onde concluímos facilmente que a função de onda não normalizada associada à partícula na representação de coordenadas no instante t' é uma função delta de Dirac, ou seja,

$$\psi(x, t') = \langle x | \psi(t') \rangle = \langle x | x' \rangle = \delta(x - x'). \quad (1.3)$$

No instante $t > t'$ o estado do sistema é dado por

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t') |\psi(t')\rangle = U(t, t') |x'\rangle \quad (1.4)$$

de modo que a amplitude de probabilidade que no instante t o estado da partícula seja um autoestado do operador de posição X com autovalor x , definida como propagador do sistema, é dada por

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | U(t, t') |x'\rangle \equiv K(x, t; x', t'). \quad (1.5)$$

Com esta definição podemos relacionar as funções de onda da partícula para tempos diferentes de uma forma bastante conveniente

$$\begin{aligned} \psi(x_2, t_2) &= \langle x_2 | \psi(t_2) \rangle = \langle x_2 | U(t_2, t_1) | \psi(t_1) \rangle = \\ &= \int dx_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \end{aligned} \quad (1.6a)$$

onde usamos a identidade $\int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1| = \mathbb{1}$ e a definição de $K(x, t; x', t')$. A fórmula (1.6a) nos sugere uma analogia com o princípio de Huygens da ótica ondulatória. Este nos diz que co

nhecendo-se a frente de onda no instante t_1 , podemos construí-la num instante posterior $t_2 > t_1$ através da interferência das ondas secundárias, geradas por cada um dos pontos da frente original, como aparece na figura abaixo.

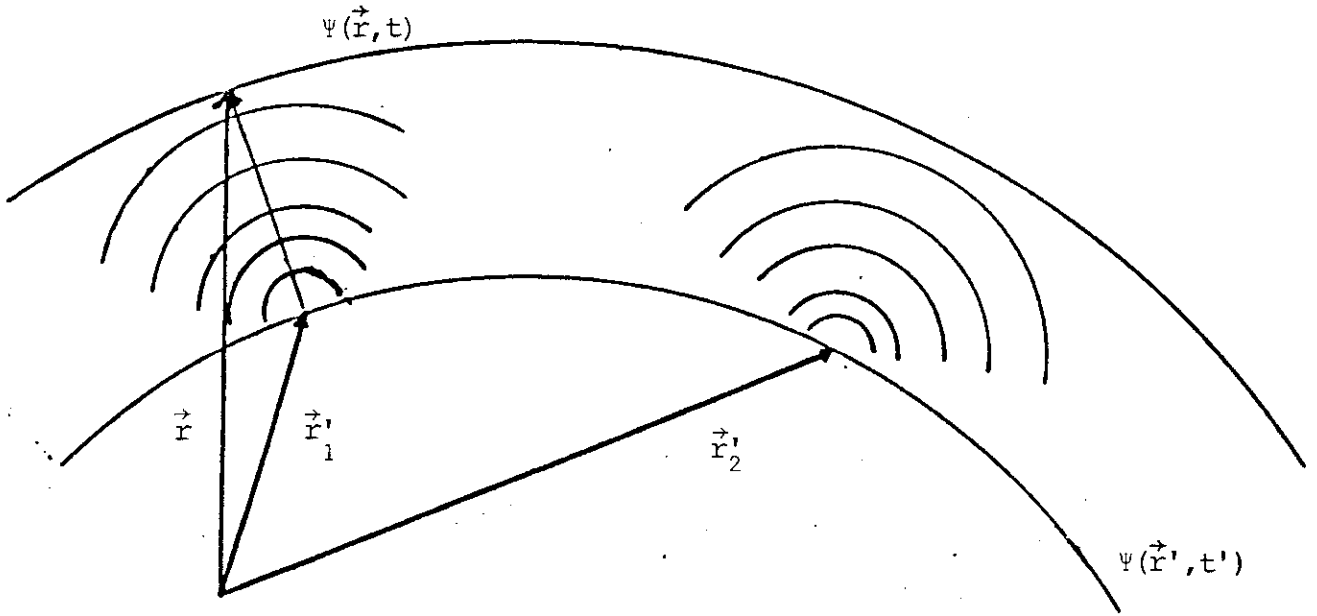


Fig. 1.1- Analogia com princípio de Huyghens.

No nosso caso, a fórmula (1.6a) nos diz que, uma vez conhecida a função de onda $\psi(x, t)$ no tempo t_1 , teremos sua expressão para qualquer instante posterior ($t_2 > t_1$). Esta analogia é mais evidente quando escrevemos a generalização de (1.6 a) para três dimensões, a saber

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \int d\vec{r}_1 K(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1) \psi(\vec{r}_1, t_1). \quad (1.6b)$$

Deve-se observar porém, que a definição rigorosa do propagador quântico exige a presença de uma função degrau, isto é,

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \langle x_2 | U(t_2, t_1) | x_1 \rangle \quad (1.7)$$

preservando com isso o princípio da causalidade, pois a função $\theta(t_2 - t_1)$ "obriga as fontes secundárias a irradiarem só no sentido do futuro".

CAPÍTULO II

O PROPAGADOR QUÂNTICO COMO UMA INTEGRAL DE TRAJETÓRIA

2.1 - Introdução

O formalismo de integrais de trajetória apresentado abaixo, embora sugerido por Dirac em 1933 [1], foi desenvolvido por Feynman e publicado em 1948. Desta forma imaginou ele que $K(x, t; x', t')$ fosse dado por uma soma de amplitudes, onde cada uma delas estava associada a uma possível trajetória no espaço de configuração ligando os pontos (x, t) e (x', t') , ou seja

$$K(x, t; x', t') \sim \sum_{\text{todas as trajetórias}} \Phi[x(\tau)] \quad (2.1)$$

onde $\Phi[x(\tau)]$ seria a amplitude associada à trajetória $x(\tau)$. Querendo ainda que a expressão tivesse o limite clássico correto, Feynman escreveu o propagador como

$$K(x, t; x', t') = \int D[x(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (2.2)$$

onde $D[x(\tau)]$, que por enquanto tem um caráter puramente formal, significa integração sobre todas as trajetórias $x(\tau)$ (integração funcional) e S é a ação calculada ao longo de cada trajetória $x(\tau)$. No caso $\frac{S}{\hbar} \gg 1$ devido ao valor extremamente pequeno de \hbar ($\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ joule-seg), mesmo uma pequena variação no va

lor da ação clássica (de um objeto macroscópico por exemplo) proporcionará uma enorme variação na fase, causando oscilações muito rápidas em $\phi[x(\tau)]$ de tal forma que ocorrerá interferência destrutiva - a contribuição de um determinada trajetória é cancelada pela contribuição de outra cuja fase difere de π . Deste 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 como desejado.

Vejamos o significado da fórmula (2.2). Para cada trajetória $x(\tau)$ está associada a amplitude $e^{\frac{i}{\hbar}S}$. Todas as trajetórias são permitidas, mesmo aquelas que são impossíveis classicamente ("democracia de trajetórias") e devemos somar todas as respectivas amplitudes coerentemente. A medida funcional $D[x(\tau)]$ é definida através da discretização do tempo, subdividindo-se o intervalo em N sub-intervalos de tamanho $\epsilon = \frac{t-t'}{N}$. Neste limite, cada trajetória é representada por uma poligonal, como mostra a figura 2.1. Varrer todas as trajetórias significa varrer todos os valores possíveis das coordenadas $x_i = x(\tau_i)$ onde $\tau_i = t' + i\epsilon$; $i=1, 2, \dots, N$ ($\tau_0=t'; \tau_N=t$). Deste modo, temos que

$$K(x, t; x', t') = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{c} \left[\dots \prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{c} e^{\frac{i}{\hbar} S} \right] \quad (2.3)$$

onde c é uma constante de normalização adequada, e admitindo que $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$, S dever ser dada por (*)

$$S = \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \epsilon V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \right] \quad (2.4)$$

(*) Daqui para frente vamos usar $\hbar = 1$.

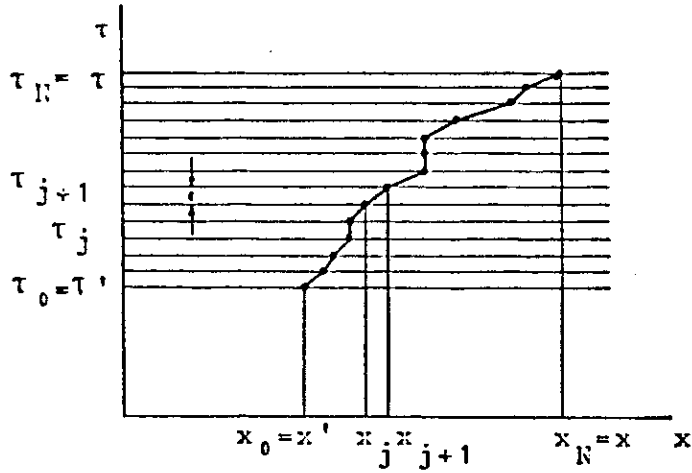


Figura 2.1- Procedimento de particionar o tempo.

2.2 - Equivalência entre os formalismos de Feynman e Schroedinger

Feynman descobriu que, com esta prescrição para o cálculo da integral de trajetória (2.2), o propagador $K(x,t;x',t')$ obedecia à equação de Schroedinger. Vamos ver como este resultado pode ser obtido. De (2.3) e (2.4) escrevemos que

$$K(x,t;x',t') \cong \frac{1}{c} \int \dots \int \prod_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{c} \exp \left\{ i \sum_{j=2}^N \left[\frac{m}{2} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{\epsilon} - \epsilon V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \right] \right\} \quad (2.5)$$

Note que esta fórmula impõe a restrição $x_j - x_{j-1} \leq$

$\leq \sqrt{\epsilon}$, já que para $x_j - x_{j-1} \gg \sqrt{\epsilon}$, devido a rápidas oscilações na fase, ocorrerá interferência destrutiva. Este argumento, torna de certo modo justificável a identificação $\dot{x}_j = \frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon}$.

Acrescentando em (2.5) um intervalo ϵ a mais, e definindo $Z = x_{N+1}$, temos que

$$\begin{aligned}
 K(Z, t+\epsilon; x', t') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_N}{c} \exp \left\{ \frac{im}{2\epsilon} (Z-x_N)^2 - i\epsilon V\left(\frac{Z+x_N}{2}\right) \right\} \frac{1}{c} \dots \int_{i=1}^{N-1} \frac{dx_i}{c} \\
 &\cdot \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \epsilon V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \right] \right\} = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_N}{c} \exp \left\{ \frac{im}{2\epsilon} (Z-x_N)^2 - i\epsilon V\left(\frac{Z+x_N}{2}\right) \right\} \cdot K(x_N=x, t; x', t') \quad (2.6)
 \end{aligned}$$

utilizando as expansões

$$e^{-i\epsilon V\left(\frac{Z+x_N}{2}\right)} = 1 - i\epsilon V(Z) + O(\epsilon^{3/2}) \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned}
 K(x_N, t; x', t') &= K(Z, t; x', t') + (x_N - Z) \frac{\partial}{\partial Z} K(Z, t; x', t') + \\
 &+ \frac{1}{2} (x_N - Z)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} K(Z, t; x', t') + O((x_N - Z)^3) \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

na fórmula (2.6), obtemos que

$$K(Z, t+\epsilon; x', t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_N}{c} e^{\frac{im}{2\epsilon}(Z-x_N)^2} [1 - i\epsilon V(Z)].$$

$$\cdot [K(Z, t; x', t') + (x_N - Z) \frac{\partial}{\partial Z} K(Z, t; x', t') + \frac{1}{2}(x_N - Z)^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} K(Z, t; x', t')] \quad (2.9)$$

A constante de normalização c é obtida impondo-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_N}{c} e^{\frac{im}{2\epsilon}(Z-x_N)^2} = \frac{\sqrt{\frac{2\pi i\epsilon}{m}}}{c} = 1 \Rightarrow c = \sqrt{\frac{2\pi i\epsilon}{m}} \quad (2.10)$$

Utilizando ainda os resultados

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-a\xi^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \xi e^{-a\xi^2} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 e^{-a\xi^2} = -\frac{\partial}{\partial a} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-a\xi^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{1}{2a}\right) \quad (2.11)$$

na equação (2.9) obtemos

$$K(Z, t+\epsilon; x', t') \approx K(Z, t; x', t') - i\epsilon V(z)K(Z, t; x', t') +$$

$$\frac{i\epsilon}{2m} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} K(Z, t; x', t') \quad (2.12)$$

Expandindo-se o lado esquerdo de (2.8) até a ordem ϵ e igualando-se os coeficientes de mesma ordem em ϵ de ambos os lados, chega-se finalmente ao resultado desejado

$$i \frac{\partial}{\partial t} K(Z, t; x', t') = \left[\frac{-1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} + V(Z) \right] K(Z, t; x', t') \quad (2.13)$$

2.3 - Convergência das Integrais de Caminho [8]

Como vimos no início deste capítulo (eq. 2.1), dos postulados de Feynman podemos escrever, em uma dimensão [2]

$$K(a, b) = \int D[x(t)] \exp (iS(a, b) / \hbar) \quad (2.14)$$

onde $K(a, b) = \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle$ é o propagador usual.

Se não estivermos interessados em resultados quânticos exatos, mas somente nas primeiras correções à teoria clássica, ou mesmo em obter o limite clássico, o formalismo de Feynman fornece um meio muito simples de fazê-lo.

Vamos propor aqui um outro método de calcular explicitamente integrais de caminho. Pode também ser usado em cálculos aproximados em problemas mais difíceis e colocar a questão da convergência das integrais de caminho numa forma mais transparente.

A relação formal (2.14), na prática significa

$$K(a, b) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 - \epsilon V \left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2} \right) \right] \right\}$$

onde

$$\begin{aligned} X_a &= X_0, & t_a &= t_0 \\ X_b &= X_{N+1}, & t_b &= t_{N+1} \end{aligned} \quad (t_b - t_a)/(N+1) = \epsilon \quad (2.16)$$

A técnica usual de calcular explicitamente o propagador via integrais de caminho é calcular a primeira das integrais em (2.15) e tentar obter uma fórmula de recorrência para os sucessivos resultados destas integrais, sem analisar a expressão para o propagador a cada etapa; mas somente após feitas todas as integrações obtém-se a expressão para o propagador. Desta forma a convergência da integral de caminho não fica transparente.

O método que vamos expor nos permite avaliar de que modo a integral de caminho converge para o resultado final. Vamos calcular, para isso, a expressão total para $K(a,b)$ quando $N=0$, que chamaremos de aproximação de ordem zero $K^{(0)}$; $N=1$, chamada de primeira aproximação $K^{(1)}$, etc. Com isso, tentaremos encontrar a expressão para o caso geral $K^{(N)}$. Certamente o propagador exato será dado por

$$K(a,b) = \lim_{N \rightarrow \infty} K^{(N)}(a,b) \quad (2.17)$$

Observe que em nosso método, procuramos fórmulas de recorrência entre as expressões encontradas sucessivamente aproximadas para o propagador, ou seja, $K^{(j)}$ e $K^{(j+1)}$. Vamos ilustrar o nosso método calculando explicitamente a integral de trajetória para o propagador de uma partícula, movendo-se sob a ação de uma força constante f . Existem muitos outros métodos de se calcular este propagador [2,5,6]. Neste caso particular a equação (2.15) se reduz a:

$$K(x, x_{N+1}; \tau = t_{N+1} - t_0) \underset{\epsilon \rightarrow 0}{\lim_{N \rightarrow \infty}} \left(\frac{1}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \cdot$$

$$\cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{j=0}^N \frac{1}{2\epsilon} (x_{j+1} - x_j)^2 - \frac{1}{2} \epsilon f(x_j + x_{j+1}) \right) \right] \quad (2.18)$$

onde usamos $m=1$ por conveniência.

Em aproximação zero temos:

$$K^{(0)}(x_0, x_{N+1} = x_1; \tau = \epsilon) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{(x_1 - x_0)^2}{2\tau} - \frac{1}{2} \tau f(x_1 + x_0) \right) \right] \quad (2.19)$$

Neste caso, somente uma trajetória contribui para o propagador, uma vez que não existe integração a ser feita (ver figura 2.2). Esta aproximação torna-se exata somente para o caso particular da partícula livre; isto é, neste caso apresentado o propagador tem a mesma forma, independentemente do tamanho do intervalo temporal.

A razão é que a trajetória que contribui na aproximação zero coincide com a clássica e, como já é sabido, para ações quadráticas, os propagadores podem sempre ser escritos como

$$K = F(\tau) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{clas.}} \right) \quad (2.20)$$

onde $F(\tau)$ é o fator pré-exponencial [2].

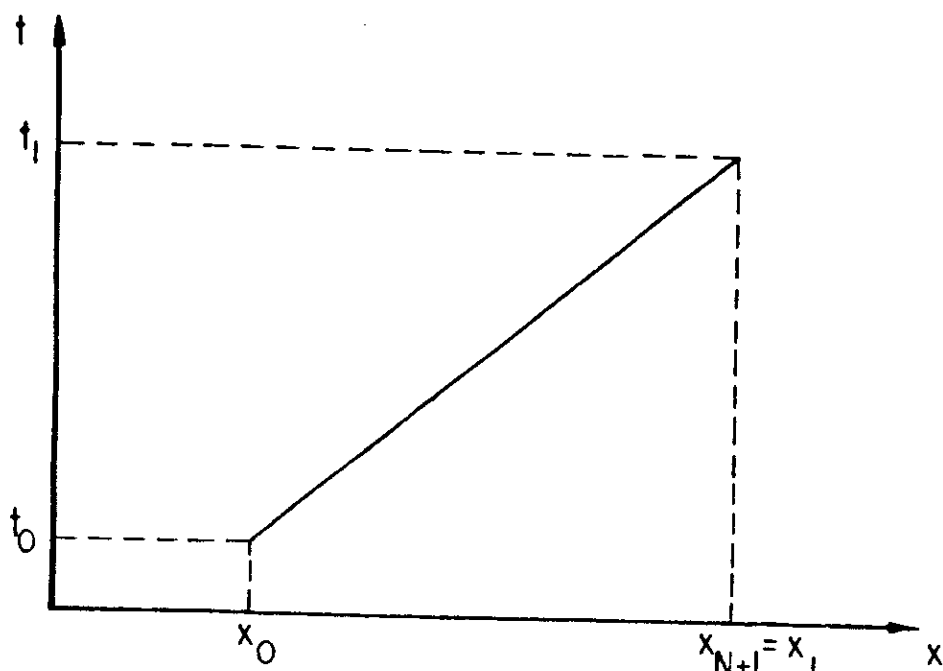


Fig. 2.2- Neste caso só uma trajetória contribui.

Em primeira aproximação escrevemos:

$$K^{(1)}(x_0, x_{N+1}=x_2, \tau=2\varepsilon) = \left\{ \frac{1}{\pi i \hbar \tau} \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left[\frac{(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2}{\varepsilon} - \varepsilon f(x_0 + x_1) - \varepsilon f(x_1 + x_2) \right] \right\} \quad (2.21)$$

Aqui, infinitas trajetórias contribuem, mas todas elas são do mesmo tipo. Elas são poligonais com apenas um "vértice" porque ainda temos que integrar sobre a variável intermediária x_1 (veja fig. 2.3). Completando quadrados em (2.21) obtemos

$$K^{(1)} = \left\{ \frac{1}{\pi i \hbar \tau} \right\} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} [x_0^2 + x_2^2] - \varepsilon^2 f(x_0 + x_2) \right\} - \frac{2}{\varepsilon} (c_1^1)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \exp \frac{i}{\hbar} \frac{2}{\varepsilon} (x_1 - c_1^1)^2. \quad (2.22)$$

onde

$$C_1^1 = \frac{1}{2} (x_2+x_0) + \frac{\varepsilon^2 f}{2} \quad (2.23)$$

Usaremos uma nomenclatura particular para as constantes $C_i^{(N)}$ que aparecerão de agora em diante no processo de completar quadrados nas integrais de Fresnel; nesta notação o índice superior indica o número de integrações intermediárias e o inferior significa que esta constante foi introduzida para completar quadrados na i -ésima integração.

Efetuada a integral de Fresnel em (2.22) e rearranjando termos, obtemos

$$K^{(1)} = \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \tau} \right\}^{1/2} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{(x_2-x_0)^2}{2\tau} - \frac{\tau}{2} f(x_0+x_2) - \frac{\tau^3 f^2}{32} \right] \right\} \quad (2.24)$$

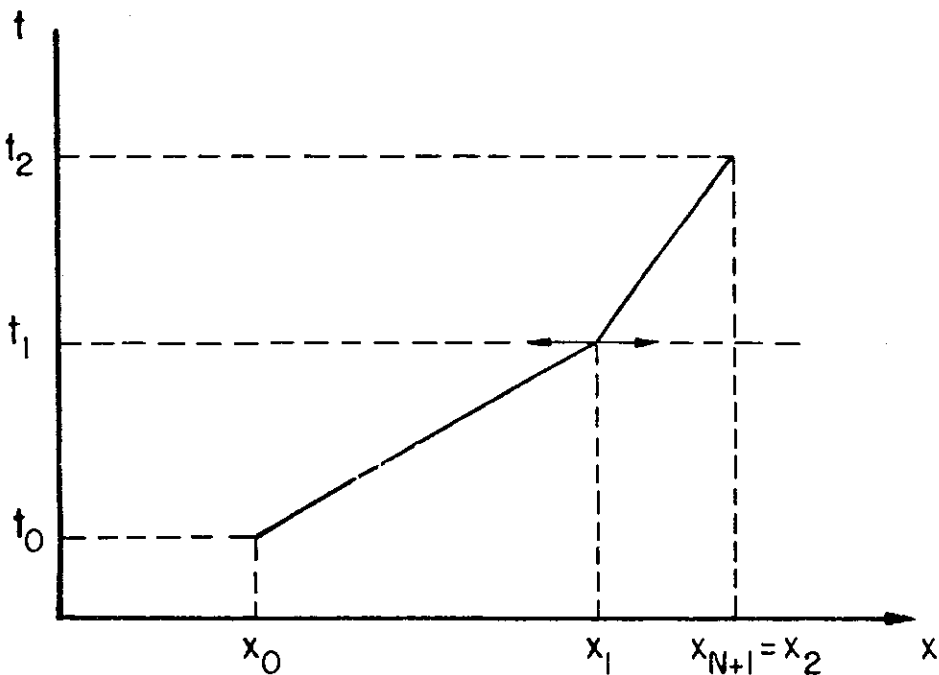


Fig. 2.3- Poligonais que contribuem na aproximação de primeira ordem.

Na segunda aproximação teremos

$$K^{(2)}(x_0, x_{N+1}=x_3; \tau=3\varepsilon) = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \exp \frac{i}{2\hbar \varepsilon} [(x_3-x_2)^2 + (x_2-x_1)^2 + (x_1-x_0)^2 - \varepsilon^2 f(x_0+2x_1+2x_2+x_3)] \quad (2.25)$$

aqui, todas as trajetórias que contribuem para K têm dois vértices porque existem duas integrações intermediárias (veja figura 2.4).

Completando quadrado para integrar x_2 , escrevemos

$$K^{(2)} = \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right\}^{3/2} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \varepsilon} (x_0^2 + x_3^2 - \varepsilon^2 f(x_0+x_3)) \right\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \exp \frac{i}{2\hbar \varepsilon} \{-2c_1^2 + 2[x_1^2 - x_1(x_0 + \varepsilon^2 f)]\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \exp \frac{i}{\hbar \varepsilon} (x_2 - c_1^2)^2 \quad (2.26)$$

onde

$$c_1^2 = \frac{1}{2} (x_1+x_3) + \frac{\varepsilon^2 f}{2} \quad (2.27)$$

Utilizando a integral de Fresnel em (2.26) e completando quadrados para integrar em x_1 teremos

$$K^{(2)} = \left\{ \frac{1}{2\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon}} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \varepsilon} \left[(x_0^2 + \frac{x_3^2}{2}) - \varepsilon^2 f(x_0+2x_3) - \frac{\varepsilon^4 f^2}{2} - \frac{3}{2} (c_2^2)^2 \right] \right\} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \exp \left\{ \left(\frac{i}{2\hbar \varepsilon} \right) \frac{3}{2} (x_1 - c_2^2)^2 \right\} \quad (2.28)$$

onde

$$c_2^2 = \frac{1}{3}(2x_0 + x_3) + \varepsilon^2 f \quad (2.29)$$

integrando em (2.28) e rearrumando termos na exponencial, obtemos para esta aproximação o resultado

$$K^{(2)} = \left(\frac{1}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{(x_3 - x_0)^2}{2\tau} - \frac{1}{2} f \cdot \tau (x_0 + x_3) - \frac{\tau^3 f^2}{27} \right] \right\} \quad (2.30)$$

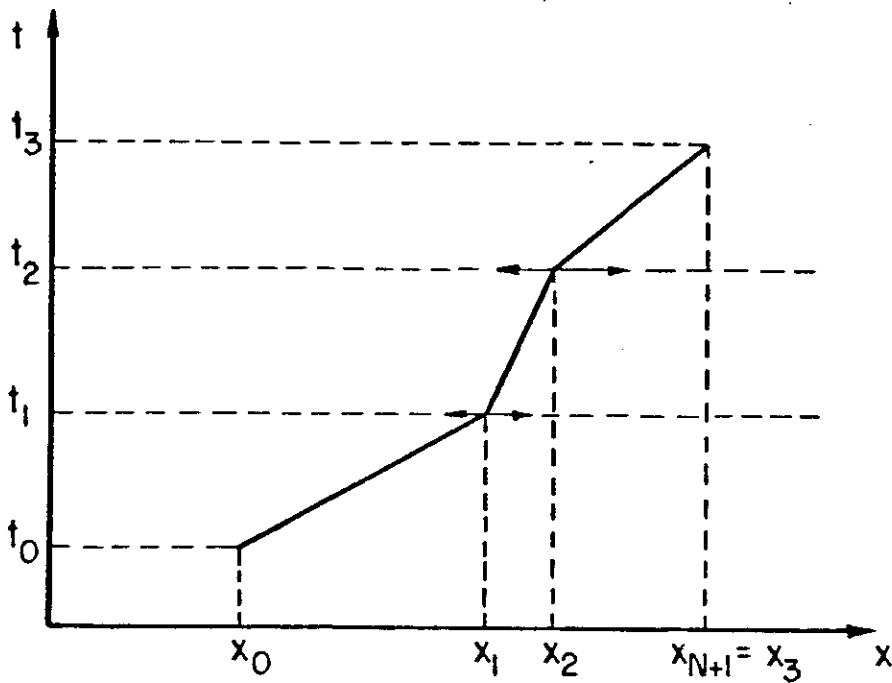


Fig. 2.4- Poligonais que contribuem em segunda ordem de aproximação.

Em terceira aproximação temos que

$$K^{(3)}(x_0, x_{N+1} = x_4; \tau = 4\varepsilon) = \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right\}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 \exp \frac{i}{2\hbar \varepsilon} \left[(x_4 - x_3)^2 + \dots \right. \\ \left. \dots + (x_1 - x_0)^2 - \varepsilon f \cdot (x_0 + 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 + x_4) \right] \quad (2.31)$$

Neste caso, todas as trajetórias que contribuem para o propagador são poligonais com três vértices, porque existem três integrações intermediárias.

Com procedimento completamente análogo ao usado antes, obtemos depois da primeira integração em x_3 :

$$K^{(3)} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\pi i \hbar \epsilon} \right)^{3/2} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left[(x_4^2 + x_0^2) - \epsilon^2 f \cdot (x_0 + x_4) \right] \right\} \cdot$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \exp \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left\{ \left[-2(c_1^3)^2 + 2(x_2^2 - x_2(x_1 + \epsilon^2 f)) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + 2(x_2^2 - x_1(x_0 + \epsilon^2 f)) \right] \right\} \quad (2.32)$$

onde

$$c_1^3 = \frac{1}{2} (x_4 + x_2 + \epsilon^2 f) \quad (2.33)$$

completando quadrados em x_2 e integrando nesta variável, obtemos

$$K^{(3)} = \left(\frac{1}{3} \right)^{1/2} \frac{1}{2\pi i \hbar \epsilon} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left[(x_0^2 + \frac{x_4^2}{2}) + \epsilon^2 f \cdot (x_0 + 2x_4) - \frac{\epsilon^4 f^2}{2} \right] \right\} \cdot$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left[-\frac{3}{2}(c_2^3)^2 + 2(x_1^2 - x_1(x_0 + \epsilon^2 f)) \right] \right\} \quad (2.34)$$

onde

$$c_2^3 = \frac{1}{3} (2x_1 + x_4 + 3\epsilon^2 f) \quad (2.35)$$

Para realizar a última integração, reescrevemos (2.

34) na forma

$$K^{(3)} = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \epsilon} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left[(x_0^2 + \frac{x_4^2}{3}) - \epsilon^2 f (x_0 + 3x_4) - 2\epsilon^4 f^2 \right] - \frac{4}{3} (c_3^3)^2 \right\} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon} \left[\frac{4}{3} (x_1 - c_3^3)^2 \right] \right\} \quad (2.36)$$

onde

$$c_3^3 = \frac{1}{4} (3x_0 + x_4) + \frac{3}{2} \epsilon^2 f \quad (2.37)$$

Calculando a integral em (2.36) e usando (2.37) obtemos finalmente

$$K^{(3)} = \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \tau} \right\}^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{(x_4 - x_0)^2}{2\tau} - \frac{\tau}{2} f (x_0 + x_4) - \frac{\tau^3 f^2}{25,6} \right] \right\} \quad (2.38)$$

Poderíamos seguir com a aproximação seguinte, mas não é necessário realmente. Como veremos, com os resultados já obtidos, estaremos aptos a conseguir a expressão para enésima aproximação para o propagador.

Vejamos as expressões para o propagador antes da última integração ser feita na variável x_1 . A fim de fazê-lo, iremos escrever as respectivas expressões que aparecem nos argumentos das exponenciais em (2.22) (2.28) e (2.36) (a menos do fator $(i/2\hbar\epsilon)$), ou seja,

$$N=1; \left[(x_0^2 + x_2^2) - \epsilon^2 f \cdot (x_0 + x_2) - a_1 \epsilon^4 f^2 \right] - 2(x_1 - c_1^1)^2 - 2(c_1^1)^2; a_1 = 0 \quad (2.39a)$$

$$N=2; \left(x_0^2 + \frac{x_4^2}{3} - \epsilon^2 f \cdot (x_0 + 2x_3) - a_2 \epsilon^4 f^2 + \frac{3}{2} (x_1 - c_2^2)^2 - \frac{3}{2} (c_2^2)^2 \right); a_2 = \frac{1}{2} \quad (2.39b)$$

$$N=3; \left[(x_0^2 + \frac{x_4^2}{3}) - \epsilon^2 f \cdot (x_0 + 3x_4) - a_3 \epsilon^4 f^2 \right] + \frac{4}{3} (x_1 - c_3^3)^2 - \frac{4}{3} (c_3^3)^2; a_3 = 2 \quad (2.39c)$$

onde introduzimos os coeficientes a_j por conveniência.

Generalizando as equações (2.39) escrevemos

$$N \text{ geral: } \left[\left(x_0^2 + \frac{x_{N+1}^2}{N} \right) - \epsilon^2 f \cdot (x_0 + Nx_{N+1}) - a_N \epsilon^4 f^2 \right] + \frac{(N+1)}{N} \cdot (x_1 - c_N^N)^2 - \left(\frac{N+1}{N} \right) (c_N^N)^2 \quad (2.40)$$

note que em (2.40) ainda temos que identificar as expressões para c_N^N e os coeficientes a_N .

Olhando as equações (2.23), (2.29) e (2.37) vemos claramente que

$$c_N^N = \frac{1}{N+1} (Nx_0 + x_{N+1}) + \frac{N}{2} \epsilon^2 f \quad (2.41)$$

com o intuito de achar c_N^N , observe que este é o coeficiente total do termo $\epsilon^4 f^2$ no argumento da exponencial para $K^{(N)}$ antes da última integração na variável x_1 ser feita. Quando fizemos a última integração, completando quadrados na variável x_1 , novos termos em $\epsilon^4 f^2$ aparecerão e que estão presentes em $\left(\frac{(N+1)}{N} \right) (c_N^N)^2$ (veja por exemplo as equações (2.39)). O coeficiente destes novos termos serão chamados de α_N e usando (2.41) encontramos

$$\alpha_N = \frac{N(N+1)}{4} \quad (2.42)$$

Então, no resultado final para $K^{(N)}$, o coeficiente total do termo $\epsilon^4 f^2$ será $a_N + \alpha_N$. Portanto, esperamos algum tipo de relação entre a_{N+1} , a_N e α_N .

Da equação (2.42) podemos escrever os primeiros α_N :

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} ; \alpha_2 = \frac{3}{2} ; \alpha_3 = 3 ; \dots \quad (2.43)$$

e assim por diante. Comparando (2.43) com os valores para a_1, a_2, a_3 , escritos em (2.39a), (2.39b), (2.39c) respectivamente, concluimos que

$$a_{N+1} = a_N + \alpha_N \quad (2.44)$$

Em outras palavras, temos que

$$a_{N+1} = \sum_{i=0}^N \alpha_i \quad (2.45)$$

sendo $\alpha_0 = 0$ porque na aproximação de ordem zero não temos qualquer integração a fazer. Substituindo (2.42) em (2.45) teremos

$$a_{N+1} = \frac{1}{4} \sum_{i=0}^N i(i+1) \quad (2.46)$$

Agora estamos prontos para calcular o propagador exato. Como vimos na equações (2.19), (2.24), (2.30) e (2.38), o fator pré-exponencial e os dois primeiros termos do argumento da exponencial para o propagador são sempre os mesmos. Logo, quando $N \rightarrow \infty$, eles permanecerão inalterados (isto pode ser confirmado por integração direta usando (2.40)). O problema em questão torna-se essencialmente como encontrar o valor limite do último termo do argumento da exponencial de $K^{(N)}$.

Para obter este valor limite, vejamos a equação (2.40). Tudo que devemos fazer é calcular o coeficiente total do termo $\varepsilon^4 f^2$ que é dado, após a última integração na variável x_1 , por $(a_N + \alpha_N) = a_{N+1}$, a menos de um sinal negativo. Portanto,

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right) \frac{a_{N+1}}{2\varepsilon} \varepsilon^4 f^2 = \left(\frac{i}{\hbar}\right) \frac{\tau^3 f^2}{8(N+1)^3} \cdot \sum_{i=0}^N i(i+1) \quad (2.47)$$

onde usamos (2.46) e $\tau = (N+1)\varepsilon$. Tomando o limite $N \rightarrow \infty$ em ambos os lados de (2.47) temos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(N+1)^3} \cdot \sum_{i=0}^N i(i+1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left(\frac{1}{N+1}\right)^3 \left[\sum_{i=0}^N i^2 + \sum_{i=0}^N i \right] \right\} \quad (2.48)$$

Usando os resultados bem conhecidos para estas séries [5]

$$\sum_{i=0}^N i^2 = \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} ; \quad \sum_{i=0}^N i = \frac{N(N+1)}{2} \quad (2.49)$$

teremos então que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N+1}\right)^3 \sum_{i=0}^N i(i+1) = \frac{1}{3} \quad (2.50)$$

Substituindo (2.50) em (2.47) obtemos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{i}{\hbar} \frac{a_{N+1}}{2\varepsilon} \varepsilon^4 f^2 = \frac{i}{\hbar} \frac{\tau^3 f^2}{24} \quad (2.51)$$

Portanto, o propagador exato é dado por

$$\begin{aligned} K(x_0, x_N; t_0, t_N) &= \lim_{N \rightarrow \infty} K^{(N)} = \\ &= \left\{ \frac{1}{2\pi i \hbar \tau} \right\}^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{(x_{N+1} - x_0)^2}{2\tau} - \frac{\tau f \cdot (x_0 + x_{N+1})}{2} + \frac{\tau^3 f^2}{24} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.52)$$

que é o resultado exato para o propagador de uma partícula sob a ação de uma força constante. Uma interessante propriedade desta técnica é que a cada etapa temos uma expressão aproximada explícita para o propagador. No caso tratado acima, esta sucessão converge rapidamente (veja as equações (2.19), (2.24), (2.30), e (2.38)). Imaginamos que isto ocorra sempre que tivermos uma ação quadrática, onde o propagador é dado exatamente por (2.15), isto porque neste caso (Ação Quadrática) a convergência deve depender essencialmente de quão bem a trajetória clássica pode ser aproximada por uma poligonal. Naturalmente, este método não é prático para ações quadráticas porque a aproximação semi-clássica (2.14) fornece um resultado exato. Mas ele não só ilustra o procedimento de convergência no método de integrais de caminho, mas dá também procedimento alternativo para cálculos aproximados. Seria muito interessante comparar este método com a aproximação semi-clássica em problemas onde ações não-quadráticas estiverem envolvidas.

2.4 - Um Caminho Alternativo para Calcular o Propagador [9]

A solução estacionária da equação de Schrödinger para uma partícula livre é

$$\psi_k(x, t) \propto e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \quad (2.53)$$

o caminho aqui proposto é baseado na suposição de que possamos, como uma generalização do caso da partícula livre, utilizar o ansatz abaixo, caso tenhamos potenciais

$$\psi_k(x, t) = e^{i[kx - f_k(x, t)]} \quad (2.54)$$

Substituindo o ansatz acima na equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t) \psi_k(x, t) \quad (2.55)$$

Verificamos que $f_k(x, t)$ deve obedecer à equação

$$i \frac{\partial^2 f_k(x, t)}{\partial x^2} + \left[\frac{\partial f_k(x, t)}{\partial x} - k \right]^2 - \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial f_k(x, t)}{\partial t} + \frac{2m}{\hbar^2} V(x, t) = 0 \quad (2.56)$$

Equação esta que a princípio aparenta ser mais complicada que a (2.55), pelo fato de ser não-linear, mas como no caso da aproximação WKB [7] também não nos preocuparemos com as aparências e, verificaremos mais adiante que podemos reduzi-la a um conjunto de equações diferenciais não-lineares de primeira ordem e de fácil resolução. Usando o ansatz (2.54) podemos construir facilmente o pacote de onda na presença de um potencial

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \phi(k) e^{i[kx - f_k(x, t)]} \quad (2.57)$$

onde impusemos a condição de contorno

$$f_k(x, 0) = 0 \quad (2.58)$$

a fim de obtermos $\phi(k)$ como sendo a transformada de Fourier de $\psi(x, 0)$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx} \quad (2.59)$$

Substituindo (2.59) em (2.57) e comparando com a expressão da função de onda escrita, em termos do propagador, temos:

$$K(x, x', t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{i[k(x-x') - f_k(x, t)]} \quad (2.60)$$

Para exemplificar, vamos primeiramente tratar o caso de uma partícula se movendo em um campo homogêneo dependente do tempo. Neste caso o potencial $V(x, t)$ será

$$V(x, t) = - F(t)x \quad (2.61)$$

de modo que, se escolhermos

$$\frac{\partial f_k(x, t)}{\partial x} - k = \alpha(t), \quad (2.62)$$

poderemos expressar $f_k(x, t)$ como

$$f_k(x, t) = (\alpha(t) + k)x + \beta(t), \quad (2.63)$$

e a equação (2.56) será simplificada, assumindo a forma

$$\left(\dot{\alpha} + \frac{F}{\hbar}\right)x + \left(\dot{\beta} - \frac{\hbar\alpha^2}{2m}\right) = 0. \quad (2.64)$$

Podemos entender a expressão acima como um par de equações ordinárias

$$\dot{\alpha} = - \frac{F}{\hbar}, \quad (2.65a)$$

$$\dot{\beta} = \frac{\hbar\alpha^2}{2m}, \quad (2.65b)$$

cujas soluções são dadas por

$$\alpha(t) = - \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' F(t') + C_1 \quad (2.66a)$$

$$\beta(t) = \frac{\hbar}{2m} \int_0^t dt' \alpha^2(t') + C_2 \quad (2.66b)$$

onde C_1 e C_2 são constantes de integração. A condição de contorno (2.58) implica que $C_1 = -k$ e $C_2 = 0$. O pacote de onda pode ser expresso agora como

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i[\xi(t)x + \frac{\hbar}{2m} \int_0^t dt' \xi^2(t')]} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk \phi(k) e^{i[kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m} + \frac{\hbar k}{m} \int_0^t dt' \xi(t')]} \quad (2.67)$$

onde

$$\xi(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' F(t') \quad (2.68)$$

O propagador é dado então por

$$K(x, x'; t) = \frac{1}{2\pi} e^{-i[\xi(t)x + \frac{\hbar}{2m} \int_0^t dt' \xi^2(t')]} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i[k(x-x') - \frac{\hbar k^2 t}{2m} + \frac{\hbar k}{m} \int_0^t dt' \xi(t')]} \quad (2.69)$$

Completando quadrado e fazendo a integral de Fresnel que surge, obtemos

$$K(x, x'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \exp \left\{ -i \left[\xi(t)x + \frac{\hbar}{2m} \int_0^t dt' \xi^2(t') + \frac{m}{2\hbar t} \left((x-x') - \frac{\hbar}{m} \int_0^t dt' \xi(t') \right)^2 \right] \right\} \quad (2.70)$$

No caso particular de $F=\text{constante}$, a equação (2.70) se reduz ao resultado já deduzido, dado pela equação (2.52)

$$K(x, x'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(x-x')^2}{2t} - \frac{Ft}{2}(x+x') - \frac{F^2 t^3}{24m} \right] \quad (2.71)$$

Em seguida, vamos analisar o caso do potencial de uma partícula ligada harmonicamente, ou seja

$$V(x, t) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (2.72)$$

Escolhendo

$$\frac{\partial f_k(x, t)}{\partial x} - k = \alpha(t)x + \beta(t) \quad (2.73)$$

encontramos que

$$f_k(x, t) = \frac{1}{2} \alpha(t)x^2 + [\beta(t) + k]x + \gamma(t) \quad (2.74)$$

Assim, a equação (2.56) adquire a forma

$$\left(\alpha^2 - \frac{m}{\hbar} \dot{\alpha} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2}\right)x^2 + 2(\alpha\beta - \frac{m}{\hbar} \dot{\beta})x + \left(i\alpha + \beta^2 - \frac{2m}{\hbar} \dot{\gamma}\right) = 0 \quad (2.75)$$

que é equivalente a

$$\dot{\alpha} - \frac{\hbar}{m} \alpha^2 - \frac{m\omega^2}{\hbar} = 0 \quad (2.76a)$$

$$\dot{\beta} - \frac{\hbar}{m} \alpha\beta = 0 \quad (2.76b)$$

$$\dot{\gamma} - \frac{\hbar}{2m} (i\alpha + \beta^2) = 0 \quad (2.76c)$$

Integrando as últimas equações (2.76) obtemos

$$\alpha(t) = \frac{m\omega}{\hbar} \tan(\omega t + C_1) \quad (2.77a)$$

$$\beta(t) = C_2 \sec(\omega t + C_1) \quad (2.77b)$$

$$\gamma(t) = -\frac{i}{2} \ln[\cos(\omega t + C_1)] + \frac{\hbar C_2^2}{2m\omega} \tan(\omega t + C_1) + C_3 \quad (2.77c)$$

onde C_1 , C_2 e C_3 são constantes de integração. A condição de fronteira (2.58) determina que $C_1 = C_3 = 0$ e $C_2 = -k$. O pacote de onda para este problema pode ser expresso como

$$\psi(x, t) = \left(\frac{1}{2\pi \cos(\omega t)} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{im\omega \tan(\omega t) x^2}{2\hbar}\right]$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dk \phi(k) e^{i\left[k \sec(\omega t) x - \hbar k^2 \frac{\tan(\omega t)}{2m\omega}\right]} \quad (2.78)$$

e o propagador, após um cálculo completamente análogo ao feito para o caso anterior, terá a forma já bem conhecida [1,2]

$$K(x, x'; t) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \cos(\omega t)} \right]^{1/2} \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m\omega}{2 \cos(\omega t)} \cdot [(x^2 + x'^2) \cos(\omega t) - 2xx'] \right\} \quad (2.79)$$

Se no lugar de (2.73) escolhêssemos por simplicidade

$$\frac{\partial f_k(x, t)}{\partial x} - k = \alpha(t)x \quad (2.80)$$

teríamos, então,

$$f_k(x, t) = \frac{1}{2} \alpha(t)x^2 + \beta(t) + kx \quad (2.81)$$

Após alguns cálculos bem simples e diretos, chegariamos às equações

$$\dot{\alpha} - \frac{\hbar}{m} \alpha^2 = \frac{m\omega^2}{\hbar} \quad (2.82a)$$

$$\dot{\beta} = \frac{i\hbar}{2m} \alpha^2 \quad (2.82b)$$

escolhendo agora como solução particular (2.82a) uma constante ,
teremos que

$$\alpha_p = \pm i \frac{m\omega}{\hbar} \quad (2.83a)$$

$$\beta(t) = \pm \frac{1}{2} \omega t + c \quad (2.83b)$$

onde c é a constante de integração; ficaremos neste caso com a
fase

$$f_k(x, t) = \pm \frac{im\omega}{2\hbar} x^2 + kx \pm \frac{1}{2} \omega t + c \quad (2.84)$$

e é fácil ver daí que obtivemos, desta forma, rapidamente a função
de onda e a energia do estado fundamental para o oscilador
harmônico

$$\psi(x, t) = N e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar}} \cdot e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} \quad (2.85)$$

sendo N uma constante de normalização, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ e escolhemos a solu
ção positiva em (2.83a) para satisfazer a condição de contorno
em $\pm\infty$.

CAPÍTULO III

CÁLCULO DE PROPAGADORES QUÂNTICOS E TRANSFORMAÇÕES DE VARIÁVEIS

Nos últimos anos tem crescido o interesse pelo uso de transformações de variáveis para o cálculo do propagador quântico. Embora venha sendo utilizada principalmente nas integrais de trajetória devido a sua dificuldade intrínseca, pode também ser aplicada à equação de Schrödinger.

Pretendemos explorar esta técnica na resolução de problemas até então em aberto, desta forma, aplicamos as transformações de variáveis em tais casos, obtendo resultados positivos e encorajadores para uma futura ampliação do uso desta técnica.

- 3.1 - Propagador para uma partícula carregada, harmonicamente ligada, num campo magnético constante e com o potencial vetor de um solenóide [10]

Para uma partícula carregada de carga q e massa μ , ligada harmonicamente, num campo magnético constante \vec{B} ao longo da direção z e com o potencial vetor de um solenóide de espessura zero, contendo o fluxo magnético Φ , a lagrangeana tem a forma

$$L=L_{\parallel}(\dot{z}, z)+L_{\perp}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}), \quad (3.1)$$

com

$$L_{\parallel}(\dot{z}, z)=\frac{1}{2}\mu(\dot{z}^2-w_z^2 z^2) \quad (3.2)$$

e

$$L_{\perp}(\dot{\vec{r}}, r)=\frac{1}{2}\mu[(\dot{x}^2+\dot{y}^2)-w_0^2(x^2+y^2)]+(q/c)(\phi/2\pi r^2+\frac{1}{2}B)(x\dot{y}-\dot{x}y) \quad (3.3)$$

onde w_0 e w_z são, respectivamente, as frequências dos osciladores em x (e y) e na direção z . Supomos aqui ter um solenóide longo de diâmetro nulo estando na origem e a partícula carregada se move num espaço multiplamente conexo com a origem removida. Uma vez que a coordenada z está completamente separada das coordenadas x e y , o propagador da lagrangeana (3.1) terá a forma $(t=t''-t')$

$$K=K_{\parallel}(z'', z'; t)K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) \quad (3.4)$$

com $K_{\parallel}(z'', z'; t)$ sendo o propagador de um oscilador harmônico com frequência w_z .

Seguindo o trabalho de Edwards [11] podemos reescrever (3.3) em coordenadas polares como

$$L_{\perp}(\dot{\vec{r}}, \vec{r})=\frac{1}{2}\mu[\dot{r}^2+(2w_0\dot{\theta}-w_0^2)r^2]+f\dot{\theta} \quad (3.5)$$

onde $w=qB/2\mu c$ e $f=q\phi/2\pi\hbar c$ são, respectivamente, a frequência de Larmor e o número quântico de fluxo da partícula carregada. Introduzindo uma nova variável angular

$$\phi = \theta + wt \quad (3.6)$$



a equação (3.5) torna-se

$$L_{\perp}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}) = \frac{1}{2}\mu[\dot{r}^2 + (\dot{\phi}^2 - \Omega^2)r^2] + f\hbar(\dot{\phi} - w) \quad (3.7)$$

com $\Omega^2 = w_0^2 + w^2$, que é a lagrangeana de um oscilador harmônico bidimensional com potenciais dependentes da velocidade angular. Substituindo o vínculo angular

$$\int_0^t \dot{\theta} d\tau = \int_0^t \dot{\phi} d\tau - wt = \theta + 2n\pi \quad (0 \leq \theta < 2\pi) \quad (3.8)$$

no propagador [1,2,12], temos que

$$K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_0^t \dots \int_0^t \delta(\sigma - \int_0^t \dot{\phi} d\pi + wt) \cdot \exp \int_0^t L_{\perp}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}) d\tau \right] D\vec{r}(t) d\sigma \quad (3.9)$$

onde a delta de Dirac é inserida para distinguir diferentes trajetórias homotópicas. Usando o método de Peak e Inomata [13], obtemos nosso principal resultado após alguns cálculos diretos (vide apêndice)

$$K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \left(\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right) e^{-ifwt} \exp\left(\frac{i\mu\Omega}{2\hbar}(r'^2 + r''^2) \cot(\Omega t)\right) \cdot$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[i m(\theta'' - \theta' + wt)] I_{|m-f|} \left(\frac{\mu\Omega r' r''}{i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right) \quad (3.10)$$

onde $I_{|m-f|}(u)$ são as funções de Bessel modificadas. Nossa derivação da expressão (3.10), segue Bernido e Inomata [14] para $\Omega=0$ e Cheng [15] para $\Omega=w$. Cada termo em (3.10) é a contribuição das trajetórias de uma mesma classe homotópica como deve-

riam ser [16-20]. Além disso, pode-se mostrar facilmente que a troca de f por $f+j$, onde j é um inteiro, deixará (3.10) inalterada exceto por uma nova rotulação do inteiro m . Portanto, só precisaremos estudar o caso em que $0 < f < 1$ [21] neste problema. Considerando $f=0$ ($\phi=0$), podemos reescrever (3.10) como

$$K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \left(\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \sin(\Omega t)} \right) \exp \left(\frac{i\mu\Omega}{2\hbar} (r'^2 + r''^2) \cot(\Omega t) \right) \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m \exp[im(\theta'' - \theta' + \omega t)] J_m \left(\frac{\mu\Omega r' r''}{\hbar \sin(\Omega t)} \right) \quad (3.11)$$

com $J_m(u)$ sendo as funções de Bessel. Usando a identidade [12]

$$\exp(-iu \cos \gamma) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m e^{-im\gamma} J_m(u) \quad (3.12)$$

com $\gamma = -(\theta'' - \theta' + \omega t)$ e $u = \mu\Omega r' r'' / \hbar \sin(\Omega t)$, a equação (3.11) reduz-se a

$$K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \left(\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \sin(\Omega t)} \right) \exp \left(\frac{i\mu\Omega}{2\hbar \sin(\Omega t)} \cdot [(r'^2 + r''^2) \cos(\Omega t) - 2r' r'' \cos(\theta'' - \theta' + \omega t)] \right) \quad (3.13)$$

que, no caso em que $\Omega = \omega$, está em acordo com a equação (63) da referência [13].

A fim de obter os autovalores de energia, vamos calcular a função espectral [23,24] definida por

$$Y_{\perp}(t) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} K_{\perp}(\vec{r}, \vec{r}; t) r dr \quad (3.14)$$

em coordenadas polares. Substituindo (3.10) com $r'=r''=r$ e $\theta'=\theta''$ em (3.14) e integrando sobre θ , obtemos

$$Y_{\perp}(t) = \frac{e^{-ifwt}}{2i} \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{imwt} e^{-i\pi(m-f)/2} \int_0^{\infty} \exp[iu \cos(\Omega t)] J_{m-f}(u) du \right. \\ \left. + \sum_{m=-\infty}^0 e^{imwt} e^{-i\pi(f-m)/2} \int_0^{\infty} \exp[iu \cos(\Omega t)] J_{f-m}(u) du \right) \quad (3.15)$$

com $u = \mu \Omega r^2 / \hbar \sin(\Omega t)$ desde que $J_{|m \pm f|}(u) = e^{-i\pi|m \pm f|/2} J_{|m \pm f|}(iu)$ para $-\pi < \arg u < \pi/2$. Usando a integral [22]

$$\int_0^{\infty} e^{-i\alpha u} J_{\nu}(\gamma u) u^{p+1} du = (-1)^{p+1} \gamma^{-\nu} \frac{d^{p+1}}{d\alpha^{p+1}} \cdot \\ \cdot \left(\frac{(\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2} + \alpha)^{\nu}}{\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}} \right) \quad (\gamma > 0, \text{Re } \nu > -p-2) \quad (3.16)$$

com $\alpha = -i \cos(\Omega t)$, $\gamma = 1$, $p = -1$ e $\nu = m-f$ ou $f-m$, obtemos finalmente

$$Y(t) = \left(\frac{1}{2i \sin(\omega_z t/2)} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{2i \sin(\Omega t)} \right) \cdot \\ \cdot \left\{ e^{if(\Omega-w)t} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-im(\Omega-w)t} + e^{-if(\Omega+w)t} \sum_{m=-\infty}^0 e^{im(\Omega+w)t} \right\} \quad (3.17)$$

pela combinação da bem conhecida função espectral do oscilador harmônico com frequência ω_z . Temos portanto o espectro discreto de autovalores de energia da forma

$$E_{n,m,k} = \left[(2n+1) + |m-f| \right] \hbar \Omega - (m-f) \hbar \omega + \left(k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_z \quad (3.18)$$

que é mais geral que a de Lewis [21] e Cheng [15] já que inclui um campo magnético homogêneo e o potencial de um oscilador harmônico isotrópico. Deduzimos imediatamente que os níveis de energia são afastados por $\hbar\omega(\omega+\Omega)$ e $\hbar\omega(\omega-\Omega)$ do nível de energia com $f=0$ para os estados ligados com $m < f$ e $m > f$ respectivamente.

Para obter as autofunções de energia, reescrevemos (3.10) na seguinte forma

$$\begin{aligned}
 K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) &= \left(\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}\right) e^{-i(f\omega+\Omega)t} \exp\left(-\frac{\mu\Omega(r'^2+r''^2)}{2\hbar}\right) \cdot \\
 &\cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{im(\theta''-\theta'+\omega t)}}{1-e^{-2i\Omega t}} \exp\left(-\frac{\mu\Omega(r'^2+r''^2)e^{-2i\Omega t}}{\hbar(1-e^{-2i\Omega t})}\right) \cdot \\
 &\cdot I_{|m-f|}\left(\frac{2\mu\Omega r' r'' e^{-i\Omega t}}{\hbar(1-e^{-2i\Omega t})}\right) \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

uma vez que $2i \sin(\Omega t) = e^{i\Omega t}(1-e^{-2i\Omega t})$ e $2\cos(\Omega t) = e^{i\Omega t}(1 + e^{-2i\Omega t})$. Usando a relação [22]

$$\begin{aligned}
 (1-q)^{-1} \exp(-q \frac{u+v}{1-q}) I_{\nu}\left(\frac{2uvq}{1-q}\right) &= (uvq)^{\nu/2} \cdot \\
 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! L_n(u) L_n(v) q^n}{\Gamma(n+\nu+1)} \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

com $u = \mu\Omega r'^2/\hbar$, $v = \mu\Omega r''^2/\hbar$, $q = e^{-2i\Omega t}$ e $\nu = |m-f|$, (3.19) torna-se

$$\begin{aligned}
 K_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) &= \left(\frac{\mu\Omega}{\pi\hbar}\right) e^{-i(f\omega+\Omega)t} \exp\left(-\frac{\mu\Omega(r'^2+r''^2)}{2\hbar}\right) \cdot \\
 &\cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[e^{im(\theta''-\theta'+\omega t)} e^{-i|m-f|\Omega t} \left(\sqrt{\frac{\mu\Omega}{\hbar}} r'\right)^{|m-f|} \left(\sqrt{\frac{\mu\Omega}{\hbar}} r''\right)^{|m-f|} \cdot \right. \\
 &\cdot \left. \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! L_n^{|m-f|}(\mu\Omega r'^2/\hbar) L_n^{|m-f|}(\mu\Omega r''^2/\hbar) e^{-2in\omega t}}{\Gamma(n+|m-f|+1)} \right) \right] \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

onde $L_n^{|m-f|}(u)$ são as funções associadas de Laguerre[22]. Com ajuda das equações (3.18) e (3.19), obtemos as autofunções de energia

$$\begin{aligned} \psi_{n,m,k}(\vec{r}, z, t) &= \left(\frac{\mu\Omega n!}{2^k k! \hbar \Gamma(n+|m-f|+1)} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu w_z}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \\ &\cdot \left(\sqrt{\frac{\mu\Omega}{\hbar}} r \right)^{|m-f|} \exp\left(-\frac{\mu w_z z^2}{2\hbar}\right) \exp\left(-\frac{\mu\Omega r^2}{2\hbar}\right) H_k\left(\sqrt{\frac{\mu w_z}{\hbar}} z\right) \\ &\cdot L_n^{|m-f|}\left(\frac{\mu\Omega r^2}{\hbar}\right) e^{im\theta} \exp(-iE_{n,m,k} t/\hbar) \end{aligned} \quad (3.22)$$

com $H_k(u)$ sendo os polinômios de Hermite. Devemos frisar que a dependência azimutal deve ser $e^{im\theta}$ com m sendo inteiro para manter as funções de onda unívocas.

Substituindo t por $-i\hbar\beta$ em (3.10), teremos a matriz de densidade de Bloch

$$\begin{aligned} C(\vec{r}'', z'', \vec{r}', z'; \beta) &= \left(\frac{\mu w_z}{2\pi \hbar \sinh(\beta \hbar w_z)} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu\Omega}{2\pi \hbar \sinh(\beta \hbar \Omega)} \right) e^{-\beta \hbar f w} \\ &\cdot \exp\left(-\frac{\mu\Omega}{2\hbar} [(r'')^2 + (r')^2] \coth(\beta \hbar \Omega)\right) \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\theta'' - \theta')} e^{\beta \hbar m w} \\ &\cdot I_{|m-f|} \left(\frac{\mu\Omega r' r''}{\hbar \sinh(\beta \hbar \Omega)} \right) \exp\left(-\frac{\mu w_z}{2\hbar \sinh(\beta \hbar w_z)} [(z'')^2 + (z')^2] \right) \\ &\cdot \cosh(\beta \hbar w_z - 2z' z''). \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde foi usada a bem conhecida matriz de densidade de Bloch para o oscilador harmônico com frequência w_z . Para efeito de comparação, trocamos t por $-i\hbar\beta$ em (3.13) e obtemos

$$C_{\perp}(\vec{r}'', \vec{r}'; \beta) = \left(\frac{\mu\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\beta\hbar\Omega)} \right) \exp \left(- \frac{\mu\Omega}{2\hbar \sinh(\beta\hbar\Omega)} \{ (r''^2 + r'^2) \cdot \right. \\ \left. \cdot \cosh(\beta\hbar\Omega) - 2r'r'' [\cos(\theta'' - \theta') \cosh(\beta\hbar w) + i \sin(\theta'' - \theta') \sinh(\beta\hbar w)] \} \right) \quad (3.24)$$

que está de acordo com a equação (3.15) da referência [24]. Finalmente, obtemos a função de partição pela troca de t por $-i\hbar\beta$ em (3.17)

$$Z(\beta) = [2 \sinh(\beta\hbar w_z/2)]^{-1/2} \{ 8 \sinh(\beta\hbar\Omega) \sinh[\beta\hbar(\Omega+w)/2] \cdot \\ \cdot \sinh[\beta\hbar(\Omega-w)/2] \}^{-1} [e^{\beta\hbar f(\Omega-w)} (e^{\beta\hbar w} - e^{-\beta\hbar\Omega}) + \\ + e^{-\beta\hbar f(\Omega+w)} (e^{\beta\hbar\Omega} - e^{\beta\hbar w})] \quad (3.25)$$

isso após cálculos diretos.

Os resultados obtidos em (3.10), (3.18), (3.22) e (3.23) são mais gerais que os resultados conhecidos [13-15, 18-21, 24, 25], pois nossos resultados incluem, além do efeito Aharonov-Bohm, um campo magnético homogêneo e o potencial de um oscilador harmônico tridimensional. Entretanto, é importante mencionar que este método é inadequado para calcular o propagador de um oscilador anisotrópico carregado [26-28].

3.2 - Propagador de Feynman para uma partícula carregada com massa dependente do tempo num campo eletromagnético dependente do tempo [29]

Nos últimos anos tem aumentado o interesse em quantizar o oscilador harmônico com massa variável [30-32] e a partícula carregada num campo eletromagnético dependente do tempo

[33-35]. Certamente, deve ser interessante pesquisar a mecânica quântica do sistema dinâmico que combina estes dois problemas. Nesta seção, estamos prontos para quantizar o sistema de uma partícula carregada, harmonicamente ligada, e de massa variável num campo eletromagnético cruzado e dependente do tempo. Usamos para isso o método das integrais de caminho de Feynman.

- O Propagador e as Funções de Onda -

Vamos considerar uma lagrangeana da forma ($c=1$ ao longo desta seção)

$$L = \frac{m(t)}{2} [\dot{\vec{r}}^2 + \frac{2e}{m(t)} \vec{A}(t) \cdot \dot{\vec{r}} - \frac{2e}{m(t)} \phi(r, t)] \quad (3.26)$$

com

$$\vec{A}(t) = \frac{B(t)}{2} \hat{z} \times \vec{r} \quad (3.27)$$

e

$$\phi(r, t) = \frac{m(t)}{2} \sigma^2(t) r^2 + \vec{E}(t) \cdot \vec{r} \quad (3.28)$$

que é mais geral que a de Sökmen[35], pois estamos considerando dependência temporal da massa da partícula e um campo elétrico variável cruzado. Com esses potenciais, os campos elétrico e magnético serão:

$$\vec{B}(t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(t) = B(t) \hat{z} \quad (3.29)$$

e

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \phi(r, t) - \frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t} = m(t) \sigma^2(t) \vec{r} - \vec{E}(t) - \frac{\dot{B}(t) \hat{z} \times \vec{r}}{2} \quad (3.30)$$

podemos separar a lagrangeana (3.26) em duas independentes

$$L_{\perp} = \frac{m(t)}{2} [\dot{\vec{r}}_{\perp}^2 - e\sigma^2(t)r_{\perp}^2 - \frac{e}{2m(t)} B(t)(y\dot{x} - x\dot{y}) - \frac{2e}{m(t)} \vec{E}_{\perp}(t) \cdot \dot{\vec{r}}_{\perp}] \quad (3.31)$$

onde $r_{\perp}^2 = x^2 + y^2$ e $\vec{E}_{\perp}(t) = E_x(t)\hat{x} + E_y(t)\hat{y}$, e

$$L_{\parallel} = \frac{m(t)}{2} [\dot{r}_{\parallel}^2 - e\sigma^2(t)r_{\parallel}^2 - \frac{2e}{m(t)} \vec{E}_{\parallel}(t) \cdot \dot{r}_{\parallel}] \quad (3.32)$$

onde $r_{\parallel} = z$ e $\vec{E}_{\parallel}(t) = E_z(t)\hat{z}$. Para desacoplar as coordenadas x e y faremos uma rotação $\vec{r}_{\perp} = \mathbb{R} \vec{r}'_{\perp}$ com

$$\vec{r}_{\perp} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}; \quad \mathbb{R} = \begin{pmatrix} \cos \alpha(t) & \sin \alpha(t) \\ -\sin \alpha(t) & \cos \alpha(t) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \vec{r}'_{\perp} = (x' y') \quad (3.33)$$

onde $\alpha(t) = \int^t w(s) ds$ e escolhemos $w(t)$ como sendo igual a $\frac{eB(t)}{2m(t)}$. Usando a transformação acima e depois de cálculos diretos, embora tediosos, podemos mostrar que a lagrangeana transformada torna-se

$$L'_{\perp} = \frac{m(t)}{2} [\dot{\vec{r}}'_{\perp}^2 - \Omega^2(t) \cdot r'_{\perp}{}^2 - \frac{2e}{m(t)} \vec{E}'_{\perp}(t) \cdot \dot{\vec{r}}'_{\perp}] \quad (3.34)$$

com $\Omega^2(t) = e\sigma^2(t) + w^2(t)$ e os novos campos eletromagnéticos escritos em termos dos antigos são dados por

$$E'_{x'}(t) = E_x(t) \cos \alpha(t) - E_y(t) \sin \alpha(t) \quad (3.35a)$$

e

$$E'_{y'}(t) = E_x(t) \sin \alpha(t) + E_y(t) \cos \alpha(t) \quad (3.35b)$$

Portanto, conseguimos separar a lagrangeana (3.26) em (3.32) e (3.34), de modo que podemos reduzir o problema a três lagrangeanas do tipo

$$L_{x'_i} = \frac{m(t)}{2} [\dot{x}'_i{}^2 - w_i^2 x'_i{}^2 - \frac{2e}{m(t)} E'_i(t) x'_i]; x'_i = x', y', z' \equiv z \quad (3.36)$$

onde $w_{x'}^2(t) = w_{y'}^2(t) = \Omega^2(t)$ e $w_z^2(t) = e\sigma^2(t)$.

A fim de simplificar ainda mais a lagrangeana (3.36) faremos uma transformação de Galileu generalizada [36,37]

$$X_i = x'_i + \eta_i(t) \quad (3.37)$$

aplicando esta transformação e lembrando que

$$m(t)\dot{\eta}_i(t)\dot{X}_i = \frac{d}{dt} [m(t)\dot{\eta}_i(t)X_i] - (\dot{m}(t)\dot{\eta}_i(t) + m(t)\ddot{\eta}_i(t))X_i \quad (3.38)$$

onde os pontos representam derivada temporal, a lagrangeana (3.36) transforma-se em

$$L_i = \frac{m(t)}{2} [\dot{X}_i^2 - w_i^2(t) X_i^2] + \frac{d}{dt} \Lambda_i(X_i, t) \quad (3.39)$$

que é a lagrangeana do oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo. Entretanto, a lagrangeana acima é válida somente quando Λ_i é dado por

$$\Lambda_i(X_i, t) = \frac{1}{2} \int^t \{m(\lambda) [\dot{\eta}_i^2(\lambda) - w_i^2(\lambda) \eta_i^2(\lambda)] + 2e\eta_i(\lambda) E'_i(\lambda)\} d\lambda - m(t)\dot{\eta}_i(t)X_i \quad (3.40)$$

e $\eta_i(t)$ satisfaz a seguinte equação

$$\ddot{\eta}_i + \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \dot{\eta}_i + w_i^2(t) \eta_i = \frac{e}{m(t)} E_i'(t) \quad (3.41)$$

Note que (3.41) é a equação para um oscilador harmônico amortecido e forçado clássico. Usando agora a transformação usada por Cheng [38] que seguia a idéia de Junker e Inomata [39],

$$Q_i = X_i \left(\frac{\xi(t)}{\xi} \right) \mu_i^{1/2} \sec[\mu_i(t)], \quad u_i = \tan[\mu_i(t)] \quad (3.42)$$

sendo que $\xi(t) = \sqrt{m(t)}$, $\xi' = \xi(t') = \text{constante}$, e $\mu_i(t)$ e $s_i(t)$ satisfazem as equações

$$s_i^2 \dot{\mu}_i = 1, \quad \ddot{s}_i + [w_i^2(t) - \frac{\ddot{\xi}(t)}{\xi(t)}] s_i = \frac{1}{s_i} \quad (3.43)$$

então, a lagrangeana (3.39) adquire a forma

$$L_i = \frac{1}{2} M' \dot{Q}_i^2 + \frac{d}{dt} [\Lambda_i(Q_i, t) - F_i(Q_i, t)], \quad (Q_i = \frac{dQ_i}{du_i} = \frac{\dot{Q}_i}{\dot{u}_i}) \quad (3.44)$$

onde

$$F_i(Q_i, t) = \frac{1}{4} M' \{ \text{sen}[2\mu_i(t)] - 2(\dot{s}_i \xi - s_i \dot{\xi}) / s_i \xi \dot{u}_i \} \quad (3.45)$$

Vemos da lagrangeana (3.44) que, nestas novas variáveis, conseguimos reduzir o problema original ao de três partículas livres em espaços unidimensionais com massa M' . Usando agora a fórmula de Van Vleck-Pauli, obtemos a relação [2]

$$K_i(X_i'', X_i'; \tau) = \left[\left(\frac{\partial Q_i'}{\partial X_i'} \right) \left(\frac{\partial Q_i''}{\partial X_i''} \right) \right]^{1/2} K_0(Q_i'', Q_i'; U_i) \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\Lambda_i(Q_i, U_i) - F_i(Q_i, U_i)] \Big|_{u_i'}^{u_i''} \right\} \quad (3.46)$$

onde definimos $\tau = t'' - t'$; $U_i = u_i'' - u_i'$ e K_0 é o propagador para uma partícula livre. O propagador total será dado por

$$K(R'', R'; \tau) = \prod_{i=1}^3 K_i(X_i'', X_i'; \tau) \quad (3.47)$$

onde cada propagador individual tem a forma

$$K_i(X_i'', X_i'; \tau) = \left(\frac{\xi' \xi'' (\dot{\mu}_i' \dot{\mu}_i'')^{1/2}}{2\pi i \hbar \text{sen}(\mu_i'' - \mu_i')} \right)^{1/2} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \left[m(t) X_i^2 \left(\frac{\dot{s}_i \xi - s_i \dot{\xi}}{\xi s_i} \right) + 2\Lambda_i(X_i, t) \right] \Big|_{t'}^{t''} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \text{sen}(\mu_i'' - \mu_i')} [(m'' \dot{\mu}_i'' X_i'' + m' \dot{\mu}_i' X_i') \cos(\mu_i'' - \mu_i') - 2\xi' \xi'' (\dot{\mu}_i' \dot{\mu}_i'')^{1/2} X_i' X_i''] \right\} \quad (3.48)$$

Escrevendo os senos e cosenos em (3.48) em termos de exponenciais imaginários, e usando a fórmula de Mehler [40],

$$\frac{\exp[-(p^2 + q^2 - 2pqr)/(1-r^2)]}{(1-r^2)^{1/2}} = \exp\{-(p^2 + q^2)\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r^n}{2^n n!} H_n(p) H_n(q) \quad (3.49)$$

com

$$r = \exp[-i(\mu_i'' - \mu_i')] , \quad p = X_i' \xi' (\dot{\mu}_i')^{1/2} \quad \text{e} \quad q = X_i'' \xi'' (\dot{\mu}_i'')^{1/2} \quad (3.50)$$

podemos escrever (3.48) na seguinte forma:

$$K_i(X_i'', X_i'; \tau) = \sum_{n_i=0}^{\infty} \psi_{n_i}^*(X_i', t') \psi_{n_i}(X_i'', t'') \quad (3.51)$$

onde as funções de onda são dadas por

$$\psi_{n_i}(X_i, t) = \exp\{-i(n_i + 1/2)\mu_i(t)\} \phi_{n_i}(X_i, t) \quad (3.52)$$

e

$$\begin{aligned} \phi_{n_i}(X_i, t) = & \left[\frac{1}{(2^{n_i} n_i!)} \left(\frac{m(t) \dot{\mu}_i}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar} \left[\frac{m(t) X_i^2 \dot{\mu}_i (s_i \dot{\xi} - s_i' \dot{\xi})}{\xi s_i \dot{\mu}_i} \right. \right. \\ & \left. \left. - m(t) \dot{\mu}_i X_i^2 \right] \right\} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \Lambda_i(X_i, t) \right\} H_{n_i} \left(\left[\frac{m(t) \dot{\mu}_i}{\hbar} \right]^{1/2} X_i \right) \quad (3.53) \end{aligned}$$

com $H_n(\cdot)$ sendo o enésimo polinômio de Hermite. Com ajuda de

$$\begin{aligned} X &= \cos(\alpha(t))x - \sin(\alpha(t))y + \eta_x(t) \\ Y &= \sin(\alpha(t))x + \cos(\alpha(t))y + \eta_y(t) \\ Z &= z + \eta_z(t) \end{aligned} \quad (3.54)$$

podemos obter facilmente o propagador e as funções de onda em termos das coordenadas iniciais.

- O Propagador na Cústica e Além Dela -

Para obter o propagador completo, aplicamos a fórmula estendida de Feynman [41,42] em (3.48) e obtemos o propagador

além da cônica pela inclusão do fator de correção de Maslov.

$$\begin{aligned}
 K_i(X_i'', X_i'; \phi_i > \pi) &= \left(\frac{\xi' \xi'' (\dot{\mu}_i' \dot{\mu}_i'')^{1/2}}{2\pi\hbar |\sin\phi_i|} \right)^{1/2} \exp\left\{-i \frac{\pi}{2} [\text{Int}(\phi_i/\pi) + \frac{1}{2}]\right\} \cdot \\
 &\cdot \exp\left\{\frac{i}{2\hbar \sin\phi_i} [(m'' \dot{\mu}_i'' X_i''^2 + m' \dot{\mu}_i' X_i'^2) \cos\phi_i - 2\xi' \xi'' (\dot{\mu}_i' \dot{\mu}_i'')^{1/2} X_i' X_i'']\right\} \\
 &\cdot \exp\left\{\frac{i}{2\hbar} [m \dot{\mu}_i X_i^2 \left(\frac{\dot{s}_i \xi - s_i \dot{\xi}}{\xi s_i}\right) + 2\Lambda_i(X_i, t)] \frac{t''}{t'}\right\} \quad (\phi_i = \mu_i'' - \mu_i' \neq k_i \pi; k_i = 1, 2, \dots)
 \end{aligned}
 \tag{3.55}$$

onde $\text{Int}(\phi_i/\pi)$ representa o maior número inteiro que é menor ou igual a ϕ_i/π . Para o propagador na cônica, introduzimos a propriedade modificada de semi-grupo do propagador [42].

$$\begin{aligned}
 K_i(X_i'', X_i'; \phi_i = k_i \pi) &= \exp\left\{-i \frac{k_i \pi}{2}\right\} |K_i(X_i'', X_i; t''-t)| |K_i(X_i, X_i'; t-t')| \cdot \\
 &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} [S_{cl}(X_i'', X_i; t''-t) + S_{cl}(X_i, X_i'; t-t')]\right\} dX_i
 \end{aligned}
 \tag{3.56}$$

sendo que o fator de correção de Maslov "salta" na fase a cada meio período da cônica e $S_{cl}(\cdot)$ é a ação funcional clássica. Calculando a integral acima (3.56) e usando (3.55) chegamos, após alguns cálculos trabalhosos mas diretos, a

$$\begin{aligned}
 K_i(X_i'', X_i'; \phi_i = k_i \pi) &= [\xi' \xi'' (\dot{\mu}_i' \dot{\mu}_i'')^{1/2}]^{1/2} \exp\{-ik_i \frac{\pi}{2}\} \cdot \\
 &\cdot \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar} [m \dot{\mu}_i' X_i'^2 \left(\frac{\dot{s}_i \xi - s_i \dot{\xi}}{\xi s_i} \right) + 2\Lambda_i(X_i, t)] \frac{t''}{t'} \right\} \cdot \\
 &\cdot \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar} [m'' \dot{\mu}_i'' X_i''^2 \cot(\mu_i'' - \mu_i) + m' \dot{\mu}_i' X_i'^2 \cot(\mu_i - \mu_i')] \right\} \cdot \\
 &\cdot \delta \left[\xi'' \dot{\mu}_i''^{1/2} \text{sen}(\mu_i - \mu_i') X_i'' + \xi' \dot{\mu}_i'^{1/2} \text{sen}(\mu_i'' - \mu_i) X_i' \right] \quad (3.57)
 \end{aligned}$$

obtemos finalmente de (3.47) o propagador usando (3.48), (3.55), ou (3.57) para cada coordenada x, y e z.

Nossos resultados acima são mais gerais que os conhecidos anteriormente [35, 2, 23, 43-47] no sentido de que: (i) o campo eletromagnético cruzado dependente do tempo mais geral foi considerado, (ii) a dependência temporal da massa foi levada em conta, (iii) a correção de Maslov (ou índice de Morse) foi incluída no propagador além da cônica e (iv) a função delta de Dirac apareceu, como deveria, no propagador na cônica. Em outras palavras, para o sistema de lagrangeanas quadráticas existe um número infinito de caminhos clássicos quando o argumento da função delta de Dirac se anula.

Vamos tratar agora de aplicar o que foi desenvolvido acima, em um caso particular, no qual temos

$$m(t) = m_0 e^{\lambda_0 t}, \vec{A}(t) = \frac{B_0}{2} e^{\lambda_0 t} \hat{z} \times \vec{r} \quad \text{e} \quad \phi(r, t) = \frac{m_0 e^{\lambda_0 t}}{2} [\sigma_0^2 \vec{r}^2 + \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}] \quad (3.58)$$

com

$$\vec{\epsilon} = \epsilon_x \hat{x} + \epsilon_z \hat{z} \quad (\epsilon_x = \text{cte}, \quad \epsilon_z = \text{cte}) \quad (3.59)$$

onde escolhemos $\epsilon_y = 0$ por simplicidade pois sempre pode-se fazer uma rotação de eixos e se recair no caso acima.

Teremos como lagrangeana

$$L = \frac{m_0}{2} e^{\lambda_0 t} \left[\dot{\vec{r}}^2 - e\sigma_0^2 \vec{r}^2 - \frac{eB_0}{m_0} (y\dot{x} - x\dot{y}) - e \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} \right] \quad (3.60)$$

de modo que a rotação (3.33) ficará sendo

$$R = \begin{pmatrix} \cos w_0 t & \text{sen } w_0 t \\ -\text{sen } w_0 t & \cos w_0 t \end{pmatrix} ; \vec{r}'_{\perp} = R \vec{r}_{\perp} \quad (3.61)$$

com $w_0 = eB_0/2m_0$. Seguindo o procedimento do caso geral, as lagrangeanas L_{\parallel} e L_{\perp} ficarão tendo a forma

$$L_{\parallel} = \frac{m_0}{2} e^{\lambda_0 t} \left[\dot{r}_{\parallel}^2 - e\sigma_0^2 r_{\parallel}^2 - e\epsilon_{\parallel} r_{\parallel} \right] \quad (3.62)$$

e

$$L_{\perp} = \frac{m_0}{2} e^{\lambda_0 t} \left[\dot{\vec{r}}'_{\perp}{}^2 - \Omega^2 r'_{\perp}{}^2 - \vec{\epsilon}'_{\perp} \cdot \vec{r}'_{\perp} \right] \quad (3.63)$$

com $\Omega^2 = e\sigma_0^2 + w_0^2$ e os novos campos elétricos serão dados por

$$\epsilon'_{x'}(t) = \epsilon_x \cos w_0 t, \quad \epsilon'_{y'}(t) = \epsilon_x \text{sen } w_0 t \quad (3.64)$$

e a lagrangeana geral (3.36) adquire a forma

$$L'_j = \frac{m_0}{2} e^{\lambda_0 t} \left[\dot{x}'_j{}^2 - w_j^2 x'_j{}^2 - e \epsilon'_j x'_j \right] \quad (3.65)$$

fazendo agora a transformação (3.37) reescrevemos a lagrangeana

(3.39) com a massa dada em (3.58) e as equações diferenciais a serem resolvidas para η_i serão:

$$\ddot{\eta}_z + \lambda_0 \dot{\eta}_z + e\sigma_0^2 \eta_z^2 = e \varepsilon_z \quad (3.66a)$$

$$\ddot{\eta}_x + \lambda_0 \dot{\eta}_x + \Omega^2 \eta_x = e \varepsilon_x \cos w_0 t \quad (3.66b)$$

$$\ddot{\eta}_y + \lambda_0 \dot{\eta}_y + \Omega^2 \eta_y = e \varepsilon_x \sin w_0 t \quad (3.66c)$$

cujas soluções são

$$\eta_z = \frac{\varepsilon_z}{\sigma_0^2} + \exp\left\{\frac{1}{2}[-\lambda_0 \pm \sqrt{\lambda_0^2 - 4e\sigma_0^2}]t\right\} \quad (3.67a)$$

$$\eta_x = \eta_x \text{ hom} + \frac{e \varepsilon_x \cos(w_0 t + \delta)}{\sqrt{(\Omega^2 - w_0^2)^2 - \lambda_0^2 w_0^2}}, \text{ com } \delta = \text{arc tg}\left(\frac{\lambda_0 w_0}{\Omega^2 - w_0^2}\right) \quad (3.67b)$$

$$\eta_y = \eta_y \text{ hom} + \frac{e \varepsilon_x \cos(w_0 t + \delta')}{\sqrt{(\Omega^2 - w_0^2)^2 - \lambda_0^2 w_0^2}}, \text{ com } \delta' = \delta - \pi/2 \quad (3.67c)$$

podemos ainda simplificar η_x e η_y , se lembrarmos que $\Omega^2 = w_0^2 + e\sigma_0^2$. Na prática, resta apenas calcular o propagador devido à lagrangeana

$$L_j = \frac{m_0}{2} e^{\lambda_0 t} [X_j^2 - w_j^2 X_j^2] \quad (3.68)$$

Acompanhando ainda o caminho anterior, verificamos que as transformações (3.42) vão ter neste caso a forma

$$Q_j = x_j e^{\frac{1}{2} \lambda_0 t} \mu_j^{1/2} \sec [\mu_j(t)] \quad \text{e} \quad u_j = \text{tg} [\mu_j(t)] \quad (3.69)$$

e precisamos resolver portanto as equações

$$\ddot{s}_j + (w_j^2 - \frac{1}{4} \lambda_0^2) s_j = \frac{1}{s_j^3} \quad \text{e} \quad s_j^2 \dot{\mu}_j = 1 \quad (3.70)$$

Escolhendo a solução $s_j = \text{cte}$ e chamando $\bar{w}_j^2 = w_j^2 - \frac{1}{4} \lambda_0^2$, vem que

$$s_j = (\bar{w}_j)^{-1/2} \quad \text{e} \quad \mu_j = \bar{w}_j t \quad (3.71)$$

onde escolhemos convenientemente a constante de integração da equação para μ_j . Teremos finalmente como transformações:

$$Q_j = x_j e^{\frac{\lambda_0 t}{2}} \bar{w}_j^{1/2} \sec[\bar{w}_j t] \quad \text{e} \quad u_j = \text{tg}[\bar{w}_j t] \quad (3.72)$$

Utilizando as transformações obtidas em (3.71) e (3.67a,b,c) poderemos obter explicitamente as expressões para o propagador desse exemplo, bastando para isso fazer as devidas substituições em (3.48), (3.55) e (3.57).

3.3 - Propagador para uma massa dependente do tempo sujeita a um potencial harmônico com frequência dependente do tempo [48]

O interesse em resolver problemas envolvendo osciladores harmônicos com massa e/ou frequência com dependência no

tempo tem crescido nos anos recentes [31,32,38,49-53]. Uma das razões para que isto ocorra é a relação entre esses problemas e muitos outros pertencentes a diferentes áreas da física tais como: química quântica, física de plasma, ótica quântica, etc. Um exemplo específico é dado no trabalho de Colegrave e Abdalla [30], no qual se estuda o oscilador harmônico com frequência constante e massa dependente do tempo, com o objetivo de descrever as intensidades de um campo eletromagnético no interior da cavidade de um interferômetro de Fabry-Perot.

Vamos tratar aqui do problema de um oscilador harmônico com massa e frequência dependentes do tempo. Vários métodos têm sido usados para tratar esse problema, tais como a aplicação de invariantes dependentes do tempo no cálculo via integral de caminho [54]. Foi mostrado neste trabalho como o propagador de Feynman para uma lagrangeana com dependência temporal explícita pode ser obtido de um propagador associado que é independente do tempo, desde que seja conhecido um invariante com dependência temporal. Uma outra técnica foi recentemente usada por Nassar e outros [53]; neste trabalho eles fazem uso da lei de superposição não-linear de Ray e Reid [55] para obter transformações do espaço e do tempo, as quais modificam as ações clássicas de lagrangeanas quadráticas e dependentes do tempo para outras lagrangeanas quadráticas, mas independentes do tempo, ou mesmo para lagrangeanas de partículas livres. De fato, a transformação de uma integral de caminho quadrática geral na de uma partícula livre foi originalmente feita por Junker e Inomata [39]. Idéias semelhantes foram recentemente mais utilizadas por Cheng [38]. Para a transformação do oscilador harmônico na partícula livre,

pode-se reportar às referências [57-58].

Entretanto, iremos atacar este problema de modo diferente. Resolveremos diretamente a equação de Schrödinger através de uma mudança adequada de variável e reparametrização temporal. A idéia essencial do nosso método é introduzir duas funções arbitrárias, digamos, $s(\tau)$ e $\mu(\tau)$ onde τ é o novo parâmetro temporal, que nos permitirão reduzir a equação original de Schrödinger à usual de um oscilador harmônico com massa e frequência constantes. Isto será feito através de uma escolha conveniente de $s(\tau)$ e $\mu(\tau)$. Certamente, depois dos cálculos feitos, devemos voltar para as variáveis originais x e t .

A equação de Schrödinger para o nosso problema é

$$-\frac{1}{2m(t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) - \frac{1}{2} m(t) w^2(t) x^2 \psi(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (3.73)$$

onde $m(t)$ e $w(t)$ são funções dadas do tempo e usamos $\hbar=1$. Façamos agora a seguinte transformação:

$$x = s(\tau) \bar{x} \quad (3.74)$$

onde τ é uma função unívoca e relaciona-se com t por

$$\tau(t) = \int^t \mu(\xi) d\xi, \quad (d\tau(t)/dt = \mu(t)). \quad (3.75)$$

Para escrever a equação de Schrödinger em termos das novas variáveis \bar{x} e τ , devemos usar também as mudanças nas derivadas parciais, que são

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{x}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} = \mu \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{s'}{s} \bar{x} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right) \quad (3.76a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \tau}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{x}}} = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{x}}} \quad (3.76b)$$

sendo que a "linha" representa a derivação com respeito ao parâmetro τ . Usando (3.74) e (3.76) escrevemos a equação (3.73) na forma

$$(i\mu \frac{\partial}{\partial \tau} - i\mu \frac{s'}{s} \bar{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{x}}} + \frac{1}{2ms^2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\mathbf{x}}^2} - \frac{1}{2} ms^2 w^2 \bar{\mathbf{x}}^2) \phi(\mathbf{x}, \tau) = 0 \quad (3.77)$$

onde definimos que $\psi(\mathbf{x}(\bar{\mathbf{x}}, \tau), t(\bar{\mathbf{x}}, \tau)) \equiv \phi(\bar{\mathbf{x}}, \tau)$. A função $\phi(\bar{\mathbf{x}}, \tau)$ pode ser vista como sendo a função de onda do problema original escrita em termo das novas variáveis. Se acharmos $\phi(\bar{\mathbf{x}}, \tau)$, tudo que teremos que fazer é substituir $\bar{\mathbf{x}} = [s(\tau)]^{-1} \mathbf{x}$ e $\tau(t)$ para obtermos a solução do problema.

Façamos o ansatz

$$\phi(\bar{\mathbf{x}}, \tau) = \exp [if(\bar{\mathbf{x}}, \tau)] \chi(\bar{\mathbf{x}}, \tau) \quad (3.78)$$

substituindo (3.78) em (3.77) obtemos

$$(i\mu \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2ms^2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\mathbf{x}}^2} - \frac{1}{2} ms^2 w^2 \bar{\mathbf{x}}^2) \chi(\bar{\mathbf{x}}, \tau) + i \frac{\partial \chi}{\partial \bar{\mathbf{x}}}(\bar{\mathbf{x}}, \tau) \left(\frac{1}{ms^2} \frac{\partial f}{\partial \bar{\mathbf{x}}} - \mu \frac{s'}{s} \bar{\mathbf{x}} \right) + \left\{ \frac{1}{2ms^2} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\mathbf{x}}^2} - \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{\mathbf{x}}} \right)^2 \right] + \mu \frac{s'}{s} \bar{\mathbf{x}} \frac{\partial f}{\partial \bar{\mathbf{x}}} - \mu \frac{\partial f}{\partial \tau} \right\} \chi(\bar{\mathbf{x}}, \tau) = 0 \quad (3.79)$$

escolheremos $f(\bar{\mathbf{x}}, \tau)$ para fazer o termo proporcional a $\partial \chi(\bar{\mathbf{x}}, \tau) / \partial \bar{\mathbf{x}}$ desaparecer. Com esta escolha teremos

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{\mathbf{x}}} = \mu s s' \bar{\mathbf{x}} \quad (3.80)$$

que tem como solução

$$f(\bar{x}, \tau) = \frac{1}{2} m\mu s s' \bar{x}^2 + f_1(\tau) \quad (3.81)$$

onde $f_1(\tau)$ é uma função arbitrária de τ que deve ser determinada. Inserindo (3.81) e (3.79) e rearranjando termos, obtemos

$$\begin{aligned} & (i\mu \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2ms^2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} - \frac{1}{2} ms^2 w^2 \bar{x}^2) \chi(\bar{x}, \tau) \\ &= - \left(\frac{1}{2} i\mu \frac{s'}{s} - \mu \frac{df_1}{d\tau} + \frac{1}{2} \mu^2 ms' \bar{x}^2 - \frac{1}{2} \mu \frac{d}{d\tau} (m\mu s s') \bar{x}^2 \right) \chi(\bar{x}, \tau) \end{aligned} \quad (3.82)$$

agora, tentaremos encontrar $f_1(\tau)$ de tal forma que o lado direito de (3.82) possa ser escrito na forma conveniente abaixo

$$\left(\frac{1}{2} i\mu \frac{s'}{s} - \mu \frac{df_1}{d\tau} + \frac{1}{2} \mu^2 ms' \bar{x}^2 - \frac{1}{2} \mu \frac{d}{d\tau} (m\mu s s') \bar{x}^2 \right) = -\frac{1}{2} ms^2 \gamma^2(\tau) \bar{x}^2 \quad (3.83)$$

onde $\gamma(\tau)$ é uma função somente de τ que deve ser determinada posteriormente. Observando que os dois primeiros termos do lado esquerdo de (3.83) dependem somente de τ , nosso objetivo pode ser atingido fazendo

$$\frac{df_1}{d\tau} = \frac{1}{2} i \frac{s'}{s} \quad (3.84a)$$

e

$$\gamma^2(\tau) = -\left(\mu \frac{s'}{s}\right)^2 + \frac{\mu}{ms^2} \frac{d}{d\tau} (m\mu s s') \quad (3.84b)$$

a integração de (3.84a) leva a

$$f_1(\tau) = i \ln(s^{1/2}) \quad (3.85)$$

onde escolhemos apropriadamente a constante de integração. Tendo em mente os resultados (3.84) e (3.85) podemos substituir (3.83) em (3.82) e escrever a equação de Schrödinger na forma compacta

$$(i\mu \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2ms^2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} - \frac{1}{2} ms^2 (w^2 + \gamma^2) \bar{x}^2) \chi(\bar{x}, \tau) = 0 \quad (3.86)$$

estamos prontos agora para escolher as funções arbitrárias $s(\tau)$ e $\mu(\tau)$ a fim de tornar mais simples esta complicada equação diferencial, ou seja, sem termos com dependência temporal. Então, façamos

$$ms^2 \mu = M_0, \quad M_0 = \text{const}; \quad w^2 + \gamma^2 = (M_0 w_0^2 / ms^2) \mu, \quad w_0^2 = \text{const} \quad (3.87)$$

substituindo (3.87) em (3.86) obtemos

$$\mu (i \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2M_0} \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} - \frac{1}{2} M_0 w_0^2 \bar{x}^2) \chi(\bar{x}, \tau) = 0 \quad (3.88)$$

ou seja, fatorizamos a dependência no tempo de todos os termos; isto reduz o problema original ao do bem conhecido oscilador harmônico com massa e frequência constantes, dadas respectivamente por M_0 e w_0 . Portanto, a solução desejada é dada por

$$\psi(x, t) = \{ \exp[i f(\bar{x}, \tau)] \chi(\bar{x}, \tau) \}_{\bar{x}=x/s(\tau), \tau=\tau(t)} \quad (3.89)$$

Entretanto, vamos obter explicitamente o propagador $K(x, t; x_0, t_0)$ do nosso problema, ao invés de escrever a função de onda $\psi(x, t)$. O propagador é simplesmente uma solução especial da equação de

Schrödinger para $t > t_0$, sujeita à condição

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x, t; x_0, t_0) = \delta(x - x_0) \quad (3.90)$$

que nos leva à solução geral do oscilador harmônico em termos de um estado inicial $\chi(\bar{x}_0, \tau_0)$, ou seja

$$\chi(\bar{x}, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} K_{Oh}(\bar{x}, \tau; \bar{x}_0, \tau_0) \chi(\bar{x}_0, \tau_0) d\bar{x}_0 \quad (3.91)$$

sendo $K_{Oh}(\bar{x}, \tau; \bar{x}_0, \tau_0)$ o propagador do oscilador harmônico. Com esses resultados em mente, podemos escrever

$$K(x, t; x_0, t_0) = \{ \exp[i f(\bar{x}, \tau) K_{Oh}(\bar{x}, \tau; \bar{x}_0, \tau_0)] \cdot \exp[-i f^*(\bar{x}_0, \tau_0)] \}_{\bar{x}=x/s(\tau), \tau=\tau(t)} \quad (3.92)$$

O asterisco denota conjugação complexa. Substituindo (3.81), (3.85) em (3.92) obtemos finalmente

$$K(x, t; x_0, t_0) = \left(\frac{M_0 w_0}{2\pi i \hbar s s_0 \sin[w_0(\tau - \tau_0)]} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{m \dot{s} \bar{x}^2}{s} - \frac{m \dot{s}_0}{s_0} \bar{x}_0^2 \right) \right] \cdot \exp\left(\frac{i M_0 w_0}{2\hbar \sin[w_0(\tau - \tau_0)]} \{ (\bar{x}^2 + \bar{x}_0^2) \cos[w_0(\tau - \tau_0)] - 2\bar{x}\bar{x}_0 \} \right)_{\bar{x}=x/s(\tau), \tau=\tau(t)} \quad (3.93)$$

onde trouxemos de volta \hbar . Usamos o bem conhecido resultado para $K_{Oh}(\bar{x}, \tau; \bar{x}_0, \tau_0)$ [2] e fizemos a identificação $\mu s' = \mu \left(\frac{ds}{dt} \right) \frac{dt}{d\tau} = \dot{s}$ (o ponto aqui significa diferenciação com respeito a t). Assume-se que em (3.93) s e $\tau(t) = \int^t \mu(\xi) d\xi$ são dadas por (3.87) e (3.84).

É interessante notar que $f_1(\tau)$ é imaginário e portanto, $\exp[if_1(\tau)]$ não é uma fase, mas assume um valor real, contribuindo para o fator pré-exponencial; em outras palavras, este termo é exatamente o jacobiano que surge da mudança de variável na medida da integral de caminho quando se trabalha com o formalismo de Feynman; no nosso cálculo ele aparece como a solução de uma equação diferencial simples (veja as fórmulas (3.84) e (3.85)). Finalmente, é interessante comentar que se em (3.87) escolhermos $w_0=0$, o problema reduz-se à partícula livre, e a solução é dada simplesmente fazendo $w_0=0$ em (3.92); este resultado está contido também no belo trabalho de Junker e Inomata [39].

Vamos considerar agora um caso particular do que foi feito acima. Neste problema particular vamos escolher w constante, $w_0=0$ e M_0 constante, ou seja, estamos na verdade, procurando reduzir o problema do oscilador harmônico simples ao da partícula livre; poderemos neste caso testar o método acima exposto pois este problema já foi resolvido anteriormente por outro método por R. Jackiw [57]. Neste caso, as equações (3.87) ficam

$$\gamma^2 = -\left(\mu \frac{s'}{s}\right)^2 + \frac{\mu}{s^2} (\mu s s')' = -w^2 \quad (3.94)$$

e

$$s^2 \mu = 1 \quad (3.95)$$

se substituirmos (3.95) em (3.94), colocando s em função de μ e após algumas simples manipulações, chegaremos a

$$\mu'' - \frac{\mu'}{2\mu} = \frac{2w^2}{\mu} \quad (3.96)$$

fazendo agora a transformação $\mu = r^2$, obtemos que

$$r'' = \frac{w^2}{r^3} \quad (3.97)$$

cuja solução, escolhendo apropriadamente as constantes de integração, é dada por

$$r = \sqrt{1+(w\tau+\beta)^2} \quad (3.98)$$

de modo que temos

$$\frac{d\tau}{dt} = \mu = 1+(w\tau+\beta)^2 \quad (3.99)$$

que integrada nos leva finalmente a

$$\text{tg}(w\tau+\theta_0) = w\tau+\beta \quad (3.100)$$

lembrando que $\bar{x} = x/s = \mu^{1/2}x$, teremos ainda que

$$\bar{x} = \sec(w\tau+\theta_0)x \quad (3.101)$$

podemos verificar facilmente que as transformações (3.100) e (3.101) são as esperadas transformações de Jackiw [57].

3.4 - Transformação de variáveis na equação de Schrödinger independente do tempo

A equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial genérico $V(r)$ é dada por

$$\left\{ \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + E - V(r) \right\} \sigma(r) = 0, \text{ com } \psi(r,t) = \sigma(r) e^{-iEt} \quad (3.102)$$

onde usamos por simplicidade $\hbar=1$. Faremos agora uma transformação na variável r , de forma a tentar recair em uma equação transformada que simplifique o problema estudado. Vejamos:

$$r=f(u) \quad . \quad (3.103)$$

Obviamente, devemos também transformar as derivadas

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial u}{\partial r} \frac{\partial}{\partial u} = \frac{1}{f'(u)} \frac{\partial}{\partial u} \quad , \quad f'(u) = \frac{df(u)}{du} \quad . \quad (3.104a)$$

Conseqüentemente, teremos

$$\frac{\partial^2}{\partial u^2} = \frac{1}{(f'(u))^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{f''(u)}{f'(u)} \frac{\partial}{\partial u} \right] \quad , \quad (3.104b)$$

de modo que a equação (3.102) fica escrita em termos da nova coordenada u como:

$$\left\{ \frac{1}{2m} \frac{1}{(f')^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{f''}{f'} \frac{\partial}{\partial u} \right] + E - V(f(u)) \right\} \sigma(f(u)) = 0 \quad . \quad (3.105)$$

Esta equação não tem a forma de uma equação de Schrödinger, ou seja, não estava na forma normal, e por isso vamos fazer o ansatz abaixo

$$\sigma(u) = e^{ig(u)} \chi(u) \quad . \quad (3.106)$$

substituindo (3.106) em (3.105) e rearrumando convenientemente os termos que aparecem, chegamos facilmente a

$$\left\{ \frac{1}{2m} \frac{1}{(f')^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} - V(u) + E \right\} \chi(u) + \frac{1}{2m(f')^2} \left[2i \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right) - \frac{f''(u)}{f'(u)} \right] \frac{\partial \chi(u)}{\partial u} + \left\{ \frac{1}{2m(f'(u))^2} \left[i \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} \right) - \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right)^2 - i \left(\frac{f''(u)}{f'(u)} \right) \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right) \right] \right\} \chi(u) = 0 \quad (3.107)$$

Como estamos procurando obter uma equação do tipo da de Schrödinger, devemos procurar eliminar o termo de derivada primeira de $\chi(u)$, para isso devemos impor

$$\frac{dg}{du} = -\frac{i}{2} \frac{f''(u)}{f'(u)} = -\frac{i}{2} \frac{df'(u)/du}{f'(u)}, \quad (3.108)$$

que integrando nos conduz a

$$g(u) = -\frac{i}{2} \ln(f'(u)), \quad (3.109)$$

onde escolhemos convenientemente a constante de integração. Dessa forma o "coeficiente" de χ que depende de $g(u)$ ficará sendo

$$\frac{1}{2m(f')^2} \left[i \left(\frac{\partial^2 g}{\partial u^2} \right) - \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right)^2 - i \left(\frac{f''}{f'} \right) \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right) \right] = \frac{1}{m(f')^2} \left[\frac{1}{4} \left(\frac{f'''}{f'} \right) - \frac{3}{8} \left(\frac{f''}{f'} \right)^2 \right], \quad (3.110)$$

de modo que podemos finalmente reescrever a nova equação de Schrödinger na variável u como

$$\left\{ \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial u^2} - U(u) \right\} \chi(u) = 0, \quad (3.111)$$

onde $U(u)$ será dado por:

$$U(u) = (f')^2 [V(u) - E] + \Delta V \quad (3.112)$$

com

$$\Delta V = \frac{1}{m} \left[\frac{3}{8} \left(\frac{f''}{f'} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{f'''}{f'} \right) \right]. \quad (3.113)$$

Podemos verificar facilmente que este resultado está de acordo com o cálculo anterior feito no formalismo de integrais de cami

nho [59]. O resultado obtido acima parece indicar uma relação entre a separação de variáveis no formalismo de Schrödinger, e certas reparametrizações temporais no formalismo de integrais de trajetória. Vemos ainda que a função de onda na nova variável será dada pela substituição de (3.109) em (3.106) e (3.102) o que nos leva a:

$$\psi(u, t) = \sqrt{f'(u)} \chi(u) e^{-iEt} \quad (3.114)$$

sendo $\chi(u)$ a solução da equação de Schrödinger transformada em (3.111). Podemos portanto, reproduzir os resultados obtidos pelas integrais de caminho e, além disso tentar aplicar este formalismo para solucionar outros problemas e na equação de Schrödinger por ter esta menores dificuldades de se trabalhar. Uma importante referência que mostra os potenciais que podem se relacionar na equação de Schrödinger via transformações do tipo de potência é dada em [60]. Vamos em seguida desenvolver o que foi visto acima num caso particular.

3.5 - Soluções exatas da equação de Schrödinger para átomos coulombianos na presença de certos potenciais de osciladores anarmônicos [61]

O problema do oscilador anarmônico quântico tem sido assunto de interesses diversos, da física molecular [62] à teoria de campo [63,64]. Seu estudo tem assumido várias formas, mas duas linhas principais têm sido investigadas, a mais desenvolvida delas é a que trata de métodos de aproximação [65-67] e, mais recentemente a procura por soluções exatas para o problema.

Nos últimos anos o interesse em obter soluções exatas para a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador anarmônico tem sido intensa [68-73]. Nosso propósito é investigar uma classe mais geral de potenciais que possam ser resolvidos exatamente. Usaremos o método de mudança de variável que foi usado para resolver o problema de um oscilador com massa e frequência dependentes do tempo (seção 3.3) [48]. Onde, depois que uma mudança de variável é feita, um ansatz para a função de onda é tentado com o objetivo de obter uma equação do tipo da de Schrödinger nas novas variáveis.

Pelo o que sabemos, as soluções exatas estão restritas a potenciais da forma

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \sum_{k=1}^n a_k r^{2k} \quad (3.115)$$

onde $V_{\text{eff}}(r)$ é o potencial efetivo para o problema. Neste método estamos aptos a estender o potencial citado acima pela inclusão de termos ímpares de anarmonicidade, um potencial do tipo g/r^2 e o Coulombiano, ou seja,

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{[g+\ell(\ell+1)]}{r^2} + \frac{\alpha}{r} + \sum_{k=1}^n a_k r^k \quad (3.116)$$

A equação radial associada para a equação de Schrödinger independente do tempo ($\hbar=m=1$ nesta seção) é dada por

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + 2[E - \frac{[g+\ell(\ell+1)]}{r^2} - \frac{\alpha}{r} - \sum_{k=1}^n a_k r^k] \chi(r) = 0 \quad (3.117)$$

Agora, fazendo a mudança de variáveis $r=u^2$, obtemos

a seguinte equação transformada

$$\frac{d^2 \chi(u)}{du^2} - \frac{1}{u} \frac{d\chi(u)}{du} + 8u^2 \left[E - \frac{[g+\ell(\ell+1)]}{u^4} - \frac{\alpha}{u^2} + \sum_{k=1}^n a_k u^{2k} \right] \chi(u) = 0 \quad (3.118)$$

fazendo o ansatz

$$\chi(u) = e^{ig(u)} \sigma(u) \quad (3.119)$$

substituindo (3.119) em (3.118) obtemos

$$\left\{ \frac{d^2}{du^2} + 8u^2 [E - V_{\text{eff}}(u)] \right\} \sigma(u) + \left[2i \frac{dg}{du} - \frac{1}{u} \right] \frac{d\sigma(u)}{du} + \left\{ i \frac{d^2 g}{du^2} - \left(\frac{dg}{du} \right)^2 - \frac{i}{u} \frac{dg}{du} \right\} \sigma(u) = 0 \quad (3.120)$$

Escolheremos $g(u)$ a fim de fazer o termo proporcional a $d\sigma(u)/du$ desaparecer. Com esta escolha temos

$$\frac{dg}{du} = -\frac{i}{2} \cdot \frac{1}{u} \quad (3.121)$$

que, com uma escolha apropriada da constante de integração, leva à solução

$$g(u) = -\frac{1}{2} \ln u \quad (3.122)$$

Inserindo (3.122) em (3.120) e rearranjando termos, obteremos

$$\frac{d^2 \sigma(u)}{du^2} - \left\{ \frac{[8(g+\ell(\ell+1))+3/4]}{u^2} + 8\alpha - 8Eu^2 + 8 \sum_{k=1}^n a_k u^{2(k+1)} \right\} \sigma(u) = 0 \quad (3.123)$$

e

$$\chi(u) = \sqrt{u} \sigma(u) \quad (3.124)$$

A título de ilustração do método, calcularemos as soluções exatas para o potencial particular

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{e}{r} + \lambda r + \frac{1}{2} m w^2 r^2 + \alpha r^3 + \beta r^4 \quad (3.125)$$

O caso onde $w=\alpha=\beta=0$ foi estudado por outros métodos como sendo um modelo da interação quark-antiquark do charmonium [74-76]. No nosso caso, o potencial (3.125) produzirá a equação transformada de Schrödinger

$$\frac{d^2 \sigma(u)}{du^2} - \left\{ \frac{[8\ell(\ell+1)+3/4]}{u^2} + 8e + 8Eu^2 - 8\lambda u^4 - 4w^2 u^6 - 8\alpha u^8 - 8\beta u^{10} \right\} \sigma(u) = 0 \quad (3.126)$$

nesta forma, a equação pode ser resolvida usando o ansatz de Flessas [69]

$$\sigma(u) = u^p \cdot \exp\{-b_1 u^2 - b_2 u^4 - b_3 u^6\} \quad (3.127)$$

onde p, b_1, b_2, b_3 são constantes arbitrárias a serem determinadas. Substituindo (3.127) em (3.126) obtemos a solução para $\sigma(u)$, desde que as relações (3.128) a (3.134) sejam mantidas

$$p(p-1) - 8\ell(\ell+1) - \frac{3}{4} = 0 \quad (3.128)$$

$$8e = 2b_1(2p+1) \quad (3.129)$$

$$4[b_1^2 - b_2(2p+3)] = -8E \quad (3.130)$$

$$16b_1 b_2 - 6b_3(2p+5) = 8\lambda \quad (3.131)$$

$$24b_1 b_3 + 16b_2^2 = 4w^2 \quad (3.132)$$

$$48b_2 b_3 = 8\alpha \quad (3.133)$$

$$36b_3^3 = 8\beta \quad (3.134)$$

Resolvendo as equações acima, encontramos

$$p = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1+8\ell(\ell+1)} \quad (3.135)$$

$$b_3 = \sqrt{2\beta} / 3 \quad (3.136)$$

$$b_2 = \alpha/2 \sqrt{2\beta} \quad (3.137)$$

$$b_1 = w^2 / 2 \sqrt{2\beta} - \alpha^2 / 2(2\beta)^{3/2} \quad (3.138)$$

Consequentemente, obtivemos as soluções para as autofunções e os autovalores

$$\chi_p(u) = u^{(p+1/2)} \exp\left\{-\left(\frac{w^2}{2\sqrt{2\beta}} - \frac{\alpha^2}{2(2\beta)^{3/2}}\right)u^2 - \frac{\alpha}{2\sqrt{2\beta}}u^4 - \frac{\sqrt{2\beta}}{3}u^6\right\} \quad (3.139)$$

$$E_p = -\frac{1}{2} [b_1^2 - b_2(2p+3)] \quad (3.140)$$

Portanto, uma solução exata para a equação (3.126) foi obtida, desde que os parâmetros $\lambda, w, \alpha, e, \beta$ satisfaçam as seguintes relações:

$$8e = \left(\frac{w^2}{\sqrt{2\beta}} - \frac{\alpha^2}{(2\beta)^{3/2}}\right) (2p+1) \quad (3.141)$$

$$8\lambda = \frac{2\alpha w^2}{\beta} - \frac{\alpha^2}{\beta^3} - 2\sqrt{2\beta} (2p+5) \quad (3.142)$$

com $\beta > 0$. Vemos que dos cinco parâmetros, três são livres ($\beta > 0$) e os outros dois são determinados pelas relações (3.141) e (3.142).

A solução final é dada por

$$\psi_p(r, \theta, \phi, t) = r^{\frac{1}{2}(p+1/2)} Y_{\ell, m}(\theta, \phi) \cdot \exp\{-[b_1 r + b_2 r^2 + b_3 r^3 + iEpt]\} \quad (3.143)$$

Para potenciais mais gerais o processo para obter a solução para a equação de Schrödinger independente do tempo é o mesmo usado acima; sempre chegaremos a um conjunto de relações para os parâmetros, e as soluções exatas para a equação

$$\frac{d^2 \sigma(u)}{du^2} + 8\{Eu^2 - \alpha - \frac{1}{2}w^2 u^4 - a_3 u^6 - \dots - a_{(2n+1)} u^{2(2n+1)} + \frac{[g+\ell(\ell+1)+3/32]}{u^2}\} \sigma(u) = 0 \quad (3.144)$$

são dadas por

$$\sigma(u) = u^p \cdot \exp\{-b_1 u^2 - b_2 u^4 - \dots - b_{n+1} u^{2(n+1)}\} \quad (3.145)$$

Teremos também sempre n equações do tipo (3.141) e (3.142) para os 2n parâmetros $w^2, a_3, \dots, a_{2n+1}$.

Temos, como casos particulares, aquelas obtidas por Flessas [68-71,73] e outros [72]. Em particular se fizermos $e=\ell=0$, as soluções para o potencial (3.125) são as de um oscilador anarmônico unidimensional com termos até quarta ordem, incluindo o cúbico. Uma interessante observação é que o potencial no qual os termos em (3.126) até o quadrático, pode ser interpretado como sendo um átomo Coulombiano submetido a um campo eletromagnético, com intensidade arbitrária do tipo

$$\vec{E} = \lambda \hat{r} + w^2 \vec{z} \quad (3.146a)$$

$$\vec{B} = B\hat{z} \quad (3.146b)$$

onde $w = eB/2c$. Usando esta técnica, podemos resolver exatamente este problema somente se certas relações entre os campos forem mantidas.

A técnica que aqui desenvolvemos pode ser utilizada para fornecer soluções exatas de outros tipos de potencial, incluindo casos de potenciais sem simetria esférica.

CAPITULO IV

CONCLUSÕES

Desenvolvemos ao longo deste trabalho, o cálculo de vários propagadores usando técnicas variadas nos formalismos de Schrödinger e Feynman. Cabe agora comparar a aplicação das técnicas que foram utilizadas em ambos os formalismos, verificando as vantagens e desvantagens de cada uma delas quando aplicadas num ou noutro. A técnica de transformações de variáveis, que foi a principal técnica aplicada por nós aos dois formalismos, pode ser subdividida em duas classes, uma que só envolve transformações lineares no espaço, como ocorre por exemplo com as mudanças entre referenciais [77]. Verificamos que elas são muito mais simples e rápidas no formalismo de Feynman; outra classe seria a de transformações não-lineares na coordenada espacial, essas como tem jacobianos não triviais ficam com seu cálculo dificultado no formalismo de Feynman [57,59], enquanto na visão de Schrödinger vimos que o jacobiano surge da solução de uma equação diferencial bem simples (3.84a) e (3.108). Uma outra característica interessante aparece quando do estudo destas transformações não-lineares. Observamos aí que os resultados obtidos no formalismo de integrais de trajetória, que necessitam de transformações das variáveis espaciais e temporal, na visão de Schrödinger

necessitam apenas de transformações espaciais, além da separação de variáveis na função de onda, o que nos leva a suspeitar que haja alguma ligação entre tal separação de variáveis na função de onda e a reparametrização temporal no formalismo de Feynman [59].

Ainda a título de comparação, nos parece que o cálculo de propagadores pelo método alternativo aqui apresentado seja mais econômico e simples, ao menos no que se refere aos propagadores mais conhecidos (força constante, oscilador harmônico simples e forçado, partícula livre com massa dependente do tempo, etc...), além de nos dar oportunidade de trabalhar com equações diferenciais não-lineares. Finalmente, seria interessante notar que a técnica desenvolvida para o estudo da convergência das integrais de trajetória foi muito conveniente e clara.

Passamos agora à avaliação das possíveis extensões do trabalho aqui desenvolvido. No estudo das integrais de Feynman, podemos aprofundar ainda nossas investigações aplicando o método ao caso do oscilador harmônico, fazendo em seguida um estudo comparativo com a solução exata, isto com ajuda de microcomputador; seria interessante tratar de estudar um caso não-quadrático com solução analítica, o que ocorre com o potencial g/x^2 . Finalmente, pode-se verificar como se dá a convergência no caso de dimensões negativas, já que neste caso a integral se reduz a uma soma de expressões polinomiais algébricas [78].

Ao estudarmos nosso método alternativo, só apresentamos resultados preliminares e, portanto, várias extensões e aplicações podem ainda ser tentadas, por exemplo, a aplicação do método a casos com um maior número de dimensões, o que acontece

com uma partícula carregada em um campo magnético homogêneo. Já estamos trabalhando também na sua utilização em potenciais de osciladores anarmônicos e Coulombianos em campos eletromagnéticos de intensidade arbitrária, procurando generalizar os resultados conhecidos [61,68-71] para potenciais com dependência temporal explícita. Na técnica de transformações de variáveis, procuramos ampliar os resultados obtidos tanto na equação de Schrödinger quanto na integral de caminho. Para isso, procuramos descobrir quais os potenciais que poderiam ser "atingidos" por transformações mais gerais que as com que trabalhamos aqui. Transformações do tipo $u=f(r,t)$ e $\tau=g(r,t)$. Finalmente, estamos trabalhando na solução da equação de Schrödinger para potenciais sem simetria central.

APÊNDICE

- Método de Peak e Inomata:

Vamos partir da definição da integral de Feynman

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \int \exp[i \sum_{j=1}^N S(\vec{r}_j; \vec{r}_{j-1})] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-1} \quad (\text{A.1})$$

sendo $\vec{r}_j = \vec{r}(t_j)$, $\vec{r}_0 = \vec{r}'$, $\vec{r}_N = \vec{r}''$, $t_j - t_{j-1} = \tau/N = \varepsilon$, e A_N é o fator de normalização da N-ésima aproximação. A ação principal no intervalo de tempo ε pode ser aproximada por

$$S(\vec{r}_j, \vec{r}_{j-1}) \approx \frac{1}{2} m \frac{(\Delta \vec{r}_j)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(r_j), \quad (\text{A.2})$$

onde usamos $V(r_j)$ ao invés de $V(\frac{r_j + r_{j-1}}{2})$ para simplificar os cálculos, mas em geral a prescrição do ponto médio é a mais correta por se aplicar sempre. Em coordenadas polares, a distância ao quadrado entre os pontos $\vec{r}_j(r_j, \theta_j, \phi_j)$ e $\vec{r}_{j-1}(r_{j-1}, \theta_{j-1}, \phi_{j-1})$ é

$$(\Delta \vec{r}_j)^2 = r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \theta_j, \quad (\text{A.3})$$

onde

$$\cos \theta_j = \cos \theta_j \cos \theta_{j-1} + \sin \theta_j \sin \theta_{j-1} \cos(\phi_j - \phi_{j-1}), \quad (\text{A.4})$$

assim sendo, a ação (A.2) pode ser escrita em coordenadas polares como

$$S(\vec{r}_j, \vec{r}_{j-1}) = \frac{1}{2} m \frac{(r_j^2 + r_{j-1}^2)}{\varepsilon} - \left(\frac{m}{\varepsilon}\right) r_j r_{j-1} \cos \theta_j - \varepsilon V(r_j). \quad (\text{A.5})$$

Podemos agora, escrever a exponencial que aparece em (A.1) como

$$\exp\left[i \sum_{j=1}^N S(\vec{r}_j, \vec{r}_{j-1})\right] = \exp\left\{ \sum_{j=1}^N \left[\frac{im}{2\epsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - i\epsilon V(r_j) - \left(\frac{im}{\epsilon}\right) r_j r_{j-1} \cos \theta_j \right] \right\} \quad (A.6)$$

se usarmos agora a relação

$$\exp(u \cos \theta) = \left(\frac{\pi}{2u}\right)^{1/2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta) I_{\ell+1/2}(u), \quad (A.7)$$

poderemos reescrever (A.6) tomando como variável $u = \left(\frac{m}{i\epsilon}\right) r_j r_{j-1}$, como

$$\exp\left\{i \sum_{j=1}^N S(\vec{r}_j, \vec{r}_{j-1})\right\} = \prod_{j=1}^N \left[\sum_{\ell_j=0}^{\infty} (2\ell_j+1) P_{\ell_j}(\cos \theta_j) R_{\ell_j}(r_j, r_{j-1}) \right], \quad (A.8)$$

onde

$$R_{\ell_j}(r_j, r_{j-1}) = \left\{ \frac{i\pi\epsilon}{2mr_j r_{j-1}} \right\}^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\epsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - i\epsilon V(r_j) \right] \cdot I_{\ell_j+1/2}\left(\frac{m}{i\epsilon} r_j r_{j-1}\right). \quad (A.9)$$

Usando o resultado (A.8), podemos escrever o propagador (A.1) como

$$K(r'', r'; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N \sum_{\ell_1} \sum_{\ell_2} \dots \sum_{\ell_N} \int \prod_{j=1}^N (2\ell_j+1) P_{\ell_j}(\cos \theta_j) \times$$

$$\times R_{\ell_j}(r_j, r_{j-1}) \prod_{j=1}^{N-1} (r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j) . \quad (\text{A.10})$$

A integração da parte angular pode ser feita facilmente, desde que façamos a expansão de $P_{\ell_j}(\cos(\theta_j))$ em termos dos harmônicos esféricos

$$P_{\ell_j}(\cos \theta_j) = \frac{4\pi}{(2\ell_j+1)} \sum_{n_j=-\ell_j}^{\ell_j} Y_{\ell_j}^{n_j}(\theta_{j-1}, \phi_{j-1}) Y_{\ell_j}^{n_j*}(\theta_j, \phi_j) \quad (\text{A.11})$$

Neste caso, teremos para a parte angular da integração que

$$\begin{aligned} & \iint \prod_{j=1}^N \left\{ (2\ell_j+1) \left(\frac{4\pi}{2\ell_j+1} \right) \sum_{n_j=-\ell_j}^{\ell_j} Y_{\ell_j}^{n_j*}(\theta_j, \phi_j) Y_{\ell_j}^{n_j}(\theta_{j-1}, \phi_{j-1}) \right\} \\ & \cdot \prod_{j=1}^{N-1} (\sin \theta_j d\theta_j d\phi_j), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

lembrando ainda a relação de ortogonalidade para os harmônicos esféricos,

$$\iint Y_{\ell}^{n*}(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{n'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{nn'} \quad (\text{A.13})$$

obtemos o seguinte

$$\begin{aligned} & \iint \prod_{j=1}^N (2\ell_j+1) P_{\ell_j}(\cos \theta_j) \prod_{j=1}^{N-1} (\sin \theta_j d\theta_j d\phi_j) = \\ & = (4\pi)^N \delta_{\ell\ell_N} \prod_{j=1}^{N-1} \delta_{\ell_{j+1}\ell_N} \sum_{n=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{n*}(\theta'', \phi'') Y_{\ell}^n(\theta', \phi'). \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Desta forma, podemos concluir que o propagador pode ter suas partes radial e angular, separadas para um dado momentum angular ℓ , ou seja,

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; \tau) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=-\ell}^{\ell} K_{\ell}(r'' , r' ; \tau) Y_{\ell}^{n*}(\theta'' , \phi'') Y_{\ell}^n(\theta , \phi) , \quad (\text{A.15})$$

sendo que o propagador radial da onda ℓ se escreve como

$$K_{\ell}(r'' , r' ; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} (4\pi)^N A_N \int \prod_{j=1}^N \{R_{\ell}(r_j , r_{j-1})\} \prod_{j=1}^{N-1} (r_j^2 , dr_j) . \quad (\text{A.16})$$

Este último propagador deve ser calculado de acordo com o potencial escolhido. O fator de normalização, que escolhemos para tornar unitário o propagador total (A.15) é

$$A_N = \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{3N/2} . \quad (\text{A.17})$$

- EXEMPLOS:

i - Oscilador Harmônico:

Neste caso, o potencial $V(r)$ será tal que teremos como lagrangeana

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{\vec{r}}^2 - w^2 r^2) . \quad (\text{A.18})$$

Consequentemente, a ação num intervalo de tempo ϵ será

$$S(r_j , r_{j-1}) = \frac{m}{2\epsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \frac{m}{\epsilon} r_j r_{j-1} \cos \theta_j - \frac{1}{2} \epsilon m w^2 r_j^2 , \quad (\text{A.19})$$

de modo que $R_\ell(r_j, r_{j-1})$ se escreve como

$$R_\ell(r_j, r_{j-1}) = \left[\frac{i\pi\epsilon}{2mr_j r_{j-1}} \right]^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\epsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \frac{1}{2} i\epsilon m w^2 r_j^2 \right] I_{\ell+1/2}\left(\frac{m}{i\epsilon} r_j r_{j-1} \right), \quad (\text{A.20})$$

se definirmos os parâmetros:

$$\beta = \frac{m}{\epsilon} \quad \text{e} \quad \alpha = \beta \left(1 - \frac{1}{2} w^2 \epsilon^2 \right), \quad (\text{A.21})$$

podemos reescrever $R_\ell(r_j, r_{j-1})$ como

$$R_\ell(r_j, r_{j-1}) = \left[\frac{i\pi}{2\beta r_j r_{j-1}} \right]^{1/2} \exp\left[\frac{i\beta}{2} (1 - \epsilon^2 w^2) r_j^2 + \frac{i\beta}{2} r_{j-1}^2 \right] I_{\ell+1/2}(-i\beta r_j r_{j-1}), \quad (\text{A.22})$$

mas

$$\begin{aligned} K_\ell(r'', r'; \tau) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (4\pi)^N \left(\frac{\beta}{2\pi i} \right)^{\frac{3N}{2}} \int \int \prod_{j=1}^N \{ R_\ell(r_j, r_{j-1}) \} \prod_{j=1}^{N-1} (r^2 dr) = \\ &= (r' r'')^{-1/2} \lim_{N \rightarrow \infty} (-i\beta)^N \exp\left\{ \frac{i\beta}{2} (r'^2 + r''^2) \right\} \int \dots \int \exp\{ i\alpha (r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_{N-1}^2) \} \cdot \\ &\quad \cdot I_{\ell+1/2}(-i\beta r_0 r_1) \dots I_{\ell+1/2}(-i\beta r_{N-1} r_N) \prod_{j=1}^{N-1} (r dr). \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Utilizando a integral [13]

$$\int_0^\infty \exp(i\alpha r^2) I_\nu(-i\alpha r) I_\nu(-i\beta r) r dr = \frac{i}{2\alpha} \exp\left[-\frac{i(\alpha^2 + \beta^2)}{4\alpha} \right] I_\nu\left(-\frac{i\alpha\beta}{2\alpha} \right), \quad (\text{A.24})$$

que é válida se $\text{Re}(\nu) > -1$ e $\text{Re}(\alpha) > 0$. Com este resultado, podemos calcular as N integrais do propagador radial, e obtemos

$$\int \exp[i\alpha(r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_{N-1}^2)] I_{\ell+1/2}(-i\beta r_0 r_1) \dots I_{\ell+1/2}(-i\beta r_{N-1} r_N) \prod_{j=1}^{N-1} (r dr) =$$

$$= \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{i}{2\alpha_j} \right) \exp\{-i[r'^2 \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\beta_j^2}{4\alpha_j} + r''^2 \frac{\beta^2}{4\alpha_N}]\} I_{\ell+1/2}(-i\beta_N r_0 r_N),$$

(A.25)

sendo que α_j e β_j são coeficientes obtidos pela resolução das equações algébricas abaixo:

$$\alpha_1 = \alpha, \quad \alpha_{j+1} = \alpha - \frac{\beta^2}{4\alpha_j}, \quad \text{para } j \geq 1,$$

(A.26)

$$\beta_1 = \beta, \quad \beta_{j+1} = \beta \prod_{k=1}^j \frac{\beta}{2\alpha_k}, \quad \text{para } j \geq 1;$$

e o propagador radial será dado por

$$K_\ell(r'', r'; \tau) = -i(r' r'')^{-1/2} \lim_{N \rightarrow \infty} a_N \exp(i f_N r'^2 + i g_N r''^2) I_{\ell+1/2}(-i a_N r' r''),$$

(A.27)

para resolver totalmente o problema, precisamos ainda determinar os fatores a_N , f_N e g_N , que podem ser expressos como:

$$a_N = \prod_{j=1}^{N-1} \frac{\beta}{2\alpha_j},$$

(A.28a)

$$f_N = \frac{1}{2} \beta - \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\beta_j^2}{\alpha_j},$$

(A.28b)

$$g_N = \frac{1}{2} \beta - \frac{1}{4} \frac{\beta^2}{\alpha_N}.$$

(A.28c)

Para determinarmos estes fatores, vamos definir λ_j como $2\alpha_j/\beta$ e chamar de Λ_k o produto dos λ_j^{-1} , ou seja

$$\Lambda_k = \prod_{j=1}^k \lambda_j^{-1} . \quad (\text{A.29})$$

Neste caso teremos que

$$a_N = \beta \Lambda_{N-1}, \quad (\text{A.30a})$$

$$f_N = \frac{1}{2} \beta \left(1 - \sum_{j=1}^{N-1} \Lambda_j \Lambda_{j-1} \right), \quad (\text{A.30b})$$

$$g_N = \frac{1}{2} \beta \left(1 - \Lambda_N / \Lambda_{N-1} \right). \quad (\text{A.30c})$$

Vamos agora calcular a expressão destes fatores no limite do contínuo ($N \rightarrow \infty$). Para isso consideremos a série

$$X_k = \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k+j+1}{2j+1} \eta^{2j+1} . \quad (\text{A.31})$$

Por indução, pode-se mostrar que ela satisfaz a relação

$$X_{k+1} + X_{k-1} = X_1 X_k, \quad (\text{A.32})$$

pode-se mostrar também que

$$\lambda_k = X_k / X_{k-1} , \quad (\text{A.33})$$

satisfaz a relação

$$\lambda_{k-1} + \lambda_k^{-1} = \lambda_1 , \quad (\text{A.34})$$

para isto basta aplicar (A.33) em (A.32); esta expressão coincide com a equação (A.26) se fizermos a substituição $\lambda_j = 2\alpha_j / \beta$. Partindo de (A.33) é fácil concluir que

$$\Lambda_k = X_1/X_k, \quad (\text{A.35})$$

onde η é igual a $w\varepsilon$.

Sendo N e η tais que o produto $N\eta$ permaneça finito, qualquer que seja o valor de N . Então X_{k-1} tende a ser $(k\eta)$ quando N tende a infinito. Para chegarmos a essa conclusão, podemos comparar a soma dos n primeiros termos de X_{k-1} ,

$$T_n = \sum_{j=0}^{n < k} (-1)^j \binom{k+j}{2j+1} \eta^{2j+1}, \quad (\text{A.36})$$

com a dos termos da série de $\text{sen}(k\eta)$,

$$S_n = \sum_{j=0}^{n < k} (-1)^j \frac{(k\eta)^{2j+1}}{(2j+1)!}, \quad (\text{A.37})$$

ou seja,

$$|T_n - S_n| < [n(n+1)\eta/k] \text{sen}(k\eta), \quad (\text{A.38})$$

de modo que podemos ver que realmente $X_{k-1} \rightarrow \text{sen}(k\eta)$ quando $N \rightarrow \infty$.

Com isso, pode-se mostrar que

$$a_N \rightarrow \beta\eta \text{cosec}(N\eta), \quad (\text{A.39})$$

$$f_N \rightarrow \frac{1}{2} \beta\eta \text{cotg}(N\eta).$$

Podemos mostrar também que $\Lambda_k \Lambda_{k-1}$ converge uniformemente para $\eta^2 \text{cosec} [(k+1)\eta] \text{cosec}(k\eta)$ no mesmo limite. Por conseguinte, podemos escrever

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{N-1} (\Lambda_k \Lambda_{k-1})^{-1} = \eta \int_{\eta}^{N\eta} \text{cosec}^2(x) dx, \quad (\text{A.40})$$

e determinar o valor limite de g_N quando $N \rightarrow \infty$, ou seja,

$$g_N \rightarrow \frac{1}{2} \beta \eta \cotg(N\eta). \quad (\text{A.41})$$

Lembrando que $\beta \eta = mw$ e $N\eta = w\tau$, temos finalmente os parâmetros limites sendo dados por:

$$a_N \rightarrow mw \operatorname{cosec}(w\tau), \quad (\text{A.42a})$$

$$f_N \rightarrow \frac{1}{2} mw \cotg(w\tau), \quad (\text{A.42b})$$

$$g_N \rightarrow \frac{1}{2} mw \cotg(w\tau). \quad (\text{A.42c})$$

Agora, podemos escrever a expressão final do propagado radial:

$$K_{\ell}(r'', r'; \tau) = \frac{-imw}{\sqrt{r' r''}} \operatorname{cosec}(w\tau) \cdot \exp\left\{\frac{imw}{2} \cotg(w\tau) (r' + r'')\right\} I_{\ell+1/2}[-imw r' r'' \operatorname{cosec}(w\tau)]. \quad (\text{A.43})$$

Como casos particulares temos o oscilador bidimensional

$$K(r'', \phi''; r', \phi'; \tau) = \frac{mw}{2\pi i \operatorname{sen}(w\tau)} \cdot \exp\left\{\frac{imw}{2 \operatorname{sen}(w\tau)} [(r'^2 + r''^2) \cos(w\tau) - 2r' r'' \cos(\phi'' - \phi')]\right\}. \quad (\text{A.44})$$

e o oscilador unidimensional

$$K(r'', r'; \tau) = \left(\frac{mw}{2\pi i \operatorname{sen}(w\tau)}\right)^{1/2} \cdot \exp\left[\frac{imw}{2} (r'^2 + r''^2) \cotg(w\tau) - 2r' r'' \operatorname{cosec}(w\tau) mw\right], \quad (\text{A.45})$$

que no limite em que w tende a zero, recai na expressão do propagador de uma partícula livre num espaço unidimensional,

$$K_0(r'', r'; \tau) = \left(\frac{m}{2\pi i \tau}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{im}{2\tau} (r' - r'')^2\right\}. \quad (\text{A.46})$$

ii - Demonstração do propagador (3.10):

Da equação (3.9), podemos ver que se pode escrever o propagador em questão como:

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K_\sigma(\vec{r}'', \vec{r}', t) d\sigma, \quad (\text{A.47})$$

sendo que $K_\sigma(r'', r'; t)$ será escrito como (note-se que $tr \neq 1$ nesta seção)

$$K_\sigma(\vec{r}'', \vec{r}', t) = \int \delta\left[\sigma - \int_0^t \dot{\psi} d\tau + wt\right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t L d\tau\right\} D[\vec{r}(t)]. \quad (\text{A.48})$$

Usando agora, a conhecida expressão

$$\delta(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda u) d\lambda, \quad (\text{A.49})$$

é fácil ver que podemos escrever

$$\delta\left[\sigma - \int_0^t \dot{\psi} d\tau + wt\right] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i\lambda\left(\sigma - \int_0^t \dot{\psi} d\tau + wt\right)\right] d\lambda, \quad (\text{A.50})$$

com isso a expressão do propagador (A.48) ficará sendo

$$K_0(\vec{r}'', \vec{r}'; \tau) = e^{-if\omega\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \left[\frac{D[\vec{r}]}{2} \right] \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\mu}{2} [\dot{r}^2 + r^2 (\dot{\psi} - \Omega^2) + (f - \lambda)\hbar\dot{\psi}] \right\} e^{i\lambda(\phi + \omega\tau)}, \quad (A.51)$$

ou seja, podemos reescrevê-lo como

$$K_0(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \exp(-if\omega t) \int_{-\infty}^{+\infty} K_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) \exp[i\lambda(\phi + \omega t)] d\lambda, \quad (A.52)$$

com

$$K_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \frac{1}{2\pi} \int D[\vec{r}(t)] \exp \left\{ i \int_0^t \left[\frac{\mu}{2\hbar} (\dot{r}^2 - \Omega^2 r^2) + (f - \lambda)\dot{\psi} \right] d\tau \right\}, \quad (A.53)$$

que, escrito em termos do tempo partilhado fica:

$$K_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \frac{1}{2\pi} \int \int \prod_{j=1}^N \cdot \exp \left\{ i \left[\frac{\mu}{2\hbar} \frac{(r_j^2 + r_{j-1}^2)}{\epsilon} - \frac{\mu}{\epsilon} r_j r_{j-1} \cos(\Delta\psi_j) - \lambda' \Delta\psi_j + \frac{\mu\epsilon}{2\hbar} \Omega^2 r_j^2 \right] \prod_{j=1}^{N-1} (d\vec{r}_j) \right\}, \quad (A.54)$$

$\lambda' = \lambda - f$. Podemos ainda reescrevê-la de uma forma mais conveniente, ou seja,

$$K_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \frac{1}{2\pi} \int D[\vec{r}(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\mu}{2\epsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) + \frac{\mu\epsilon}{2} \Omega^2 r_j^2 + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\mu}{\epsilon} r_j r_{j-1} \cos(\Delta\psi_j - \frac{\lambda' \hbar \epsilon}{\mu r_j r_{j-1}}) - \frac{\lambda'^2 \hbar^2 \epsilon}{2\mu r_j r_{j-1}} \right] \right\}. \quad (A.55)$$

Pode-se verificar a igualdade (quando $\epsilon \rightarrow 0$) entre (A.55) e (A.54), bastando para isso que se expanda os senos e cossenos de (A.55),

pegando até o termo de segunda ordem em $\lambda' \hbar \varepsilon / \mu r_j r_{j-1}$ para o coseno e até o de primeira ordem para o seno. Observando-se que $Z_j = i \mu r_j r_{j-1} / \varepsilon$ torna-se muito grande no limite em que ε tende a zero, torna-se interessante usar a relação assintótica com a função de Bessel modificada $I_\nu(Z)$ para $|Z|$ grande e $|\arg(Z)| < \pi/2$:

$$\exp \left\{ Z_j \cos \left[\theta + \frac{i \lambda'}{Z_j} \right] - \frac{\lambda'^2}{2 Z_j} \right\} \sim \sum_{m_j = -\infty}^{+\infty} e^{i m_j \theta} I_{m_j + \lambda'}(Z_j) . \quad (\text{A.56})$$

Lembrando ainda da relação de ortogonalidade

$$\int_0^{2\pi} \exp \{ i (m_j - m_{j-1}) \psi \} d\psi = 2\pi \delta_{m_j, m_{j-1}} , \quad (\text{A.57})$$

podemos ver que o propagador terá a forma

$$K_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp [i m (\psi'' - \psi')] Q_{m+\lambda-f}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) , \quad (\text{A.58})$$

sendo que $Q_{m+\lambda-f}(\vec{r}'', \vec{r}'; t)$ pode ser expresso como

$$Q_{m+\lambda-f}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \lim_{N \rightarrow \infty} (2\pi)^{N-1} A_N(\varepsilon) \int \dots \int_{j=1}^N \cdot \left(\exp \left\{ \frac{i \mu}{2 \hbar \varepsilon} [r_j^2 + r_{j-1}^2] - \varepsilon^2 \Omega^2 r_j^2 \right\} \right) I_{m+\lambda-f} \left(\frac{\mu}{i \hbar \varepsilon} r_j r_{j-1} \right) \prod_{j=1}^{N-1} (r_j dr_j) . \quad (\text{A.59})$$

Fazendo agora a troca da variável λ por $\lambda - m + f$, e usando (A.52), encontramos,

$$K_\sigma(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{i m (\psi'' - \psi' - \sigma - \omega t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i [\sigma (\lambda + f) + \lambda \omega t]} Q_\lambda(\vec{r}'', \vec{r}'; t) d\lambda . \quad (\text{A.60})$$

Usando ainda a fórmula de soma de Poisson

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{imv} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(v + 2\pi n)$$

obteremos

$$K_{\sigma}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta[\psi'' - \psi' - \dot{\sigma} - \omega t + 2\pi n] \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i[\phi(\lambda+f) - \lambda\omega t]\} Q_{\lambda}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) d\lambda \quad . \quad (A.62)$$

Lembrando que o propagador total é dado por (A.47), vem que

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = e^{if(\psi'' - \psi' - \omega t)} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2\pi inf} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i\lambda(\psi'' - \psi' + 2\pi n)\} Q_{\lambda}(\vec{r}'', \vec{r}'; t) d\lambda \quad , \quad (A.63)$$

com $Q_{\lambda}(\vec{r}'', \vec{r}'; t)$ tendo como fator de normalização $A_N(t) = (\mu/2\pi i\hbar \epsilon)^N$ é, como vimos no item anterior, o propagador para o oscilador harmônico (A.44). Aproveitando este resultado, obteremos

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; t) = \left[\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right] e^{if(\theta'' - \theta')} \exp\left\{ \frac{i\mu\Omega}{2\hbar} (r'^2 + r''^2) \cotg(\Omega t) \right\} \cdot \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{2\pi inf} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i\lambda(\psi'' - \psi' + 2n\pi)\} I_{|\lambda|} \left(\frac{\mu\Omega r' r''}{i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right) d\lambda \quad . \quad (A.64)$$

Para chegarmos à equação (3.10), vamos utilizar mais uma vez a fórmula de soma de Poisson (A.61) com $v = -2\pi(\lambda + f)$,

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; t) = \left[\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right] e^{if(\theta'' - \theta')} \exp\left\{ \frac{i\mu\Omega}{2\hbar} (r'^2 + r''^2) \cotg(\Omega t) \right\} \cdot$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i\lambda(\psi'' - \psi')\} \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\lambda} \right) I_{|\lambda|} \left(\frac{\mu\Omega}{i\hbar} \frac{r'r''}{\text{sen}(\Omega t)} \right) d\lambda , \quad (\text{A.65})$$

e finalmente, com uso da equação (A.61), chegamos à expressão procurada para o propagador:

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; t) = \left[\frac{\mu\Omega}{2\pi i\hbar \text{sen}(\Omega t)} \right] e^{-if\omega t} \exp\left\{ \frac{i\mu\Omega}{2\hbar} (r'^2 + r''^2) \cotg(\Omega t) \right\} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[i m(\theta'' - \theta' + \omega t)] I_{|m-f|} \left(\frac{\mu\Omega}{i\hbar} \frac{r'r''}{\text{sen}(\Omega t)} \right) . \quad (\text{A.66})$$

REFERENCIAS

- [1] Dirac, P.A.M. Selected Paper on Quantum Electrodynamics, p. 312 (Ed. Schwinger J., Dover Publi. Inc., N.Y., 1958).
R.P. Feynman, Rev. Mod. Phys. 20, 367 (1948).
- [2] R.P. Feynman; A.R. Hibbs; "Quantum Mechanics and Path Integrals" New York: McGraw-Hill (1965).
A. de Souza Dutra; M.B. Hott; C. Farina de Souza; A. Narayan Vaidya; "Propagadores na mecânica quântica não-relativística e integrais de trajetória"; Monografia, Dep. Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro (1986).
- [3] I.H. Duru; H. Kleinert ; Phys. Lett. 84B, 185 (1979).
- [4] R. Ho; A. Inomata; Phys. Rev. Lett. 48, 231 (1982).
- [5] L. Flugge; "Practical Quantum Mechanics" (Berlin: Springer) (1971).
- [6] C. Farina de Souza; M.B. Hott; A. de Souza Dutra; Am. J. Phys. 54, 377 (1986).
- [7] E. Merzbacher; "Quantum Mechanics". New-York-London: John Wiley & Sons, Inc. (1961).
- [8] A. de Souza Dutra; C. Farina de Souza; M.B. Hott. J. Phys. A19, L763 (1986).
- [9] A. de Souza Dutra; A. Soares de Castro; "An alternative method to calculate propagators". Submetido ao American Journal of Physics.
- [10] B.K. Cheng; A. de Souza Dutra; Phys. Lett. A123, 105 (1987).
- [11] S.F. Edwards; Proc. Phys. Soc. London 91, 513 (1967).
- [12] L.S. Schulman; "Techniques and applications of path integration" Wiley, New York (1981).
- [13] D. Peak; A. Inomata. J. Math. Phys. 10, 1422 (1969).
- [14] C.C. Bernido; A. Inomata. J. Math. Phys. 22, 715 (1981).
- [15] B.K. Cheng. Phys. Rev. A 36, 2964 (1987).
- [16] L.S. Schulman. J. Math. Phys., 12, 304 (1971).
- [17] M.G.G. Laidlaw and C.M. DeWitt. Phys. Rev. D 3, 1375 (1971).

- [18] C.C. Gerry; V.A. Singh. Phys. Rev.D 20, 2550 (1979).
- [19] G. Morandi; E. Menossi. Eur. J. Phys. 5, 49 (1984).
- [20] R. Sundrum; L.J. Tassie. J.Math.Phys. 27, 1566 (1986).
- [21] R.R. Lewis. Phys. Rev.A 28, 1228 (1983).
- [22] I.S. Gradshteyn; I.M. Ryzhik; "Tables of integrals, series and products"; Academic Press, New York, 712,973,1038 (1980).
- [23] M.S. Marinov. Phys. Rep. 60, 1 (1980).
- [24] J.M. Manoyan. J.Phys. A 19, 3013 (1986).
- [25] E.H. Sondheimer; A.H. Wilson. Proc. R. Soc. A 210, 173 (1951).
- [26] B.K. Cheng. J. Phys. A 17, 819 (1984).
- [27] N. Kokiantonis; D.P.L. Castigiano. J. Phys.A 18, 45 (1985).
- [28] I.M. Davies. J.Phys. A 18, 2737 (1985).
- [29] A. de Souza Dutra; B.K. Cheng; "Feynman's propagator for a charged particle with time-dependent mass in a crossed time-varying electromagnetic field". Submetido ao Physical Review A.
- [30] R.K. Colegrave; M.S. Abdalla. Opt. Acta 28, 495 (1981).
- [31] R.K. Colegrave; M.S. Abdalla. J. Phys. A 14, 2.269 (1981).
J. Phys. A 15, 1549 (1982).
- [32] M.S. Abdalla. Phys. Rev. A 34, 4598 (1986).
- [33] K.K. Thorner; R.P. Feynman. Phys. Rev. B 1, 4099 (1970).
- [34] N.J.M.Horing , H.L. Cui; G. Fiorenza. Phys. Rev. A 34, 612 (1986).
- [35] I. Sökmen. Phys. Lett. A 115, 6 (1986).
- [36] B.R. Holstein. Am. J. Phys. 51, 1015 (1983).
- [37] G. Rosen. Lettere al Nuovo Cimento, 2, 69 (1971).
- [38] B.K. Cheng. Phys. Lett. A 113, 293 (1985).
- [39] G. Junker; A. Inomata. Phys. Lett. A 110, 195 (1985).
- [40] A. Erdelyi. Ed. Higher transcendental functions, 2 (McGraw-Hill, New York, 1965).

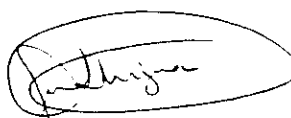
- [41] P.A. Horvathy. Int. J. Theor. Phys. 18, 245 (1979).
- [42] B.K. Cheng. Phys. Lett. A 101 (1984) 464; 110, 347 (1985).
- [43] M.L. Glasser. Phys. Rev. 133, 831 (1964).
- [44] B.K. Cheng. Phys. Lett. A 100, 490 (1984).
- [45] B.K. Cheng. Phys. Rev. A 30, 1491 (1984).
- [46] A. Jones; G.J. Papadopolous. J. Phys. A 4, L86(1971);
R. Ferreira; B.K. Cheng. J. Phys. A 18, L1127 (1985).
- [47] A.B. Nassar; R.T.Berg. Phys. Rev. A 34, 2462 (1986).
- [48] C. Farina de Souza; A. de Souza Dutra. Phys. Lett. A 123,
297 (1987).
- [49] P. Caldirola. Nuovo Cimento B 77, 241 (1983).
- [50] V.V.Dodonov; V.I. Man'ko. Phys. Rev. A 20, 550 (1979).
- [51] M.S. Abdalla. Phys. Rev. A 33, 2870 (1983).
- [52] P.G.L. Leach. J. Phys. A. 16, 3261 (1983).
- [53] A.B. Nassar, J.M.F.Bassalo; P.T.S. Alencar. Phys. Lett. A 113,
365 (1986).
- [54] S.V. Lawande; A.K. Dhara. Phys. Lett. A 99, 353 (1983);
Phys. Rev. A 30, 560 (1984); J. Phys. A 17, 2423 (1984).
- [55] J.R. Ray; T.L. Reid. J. Math. Phys. 22, 91 (1981).
- [56] V. de Alfaro; S.Fubini; F. Furlan. Nuovo Cimento 34, 569 (1976).
- [57] R. Jackiw. Ann. Phys. (NY) 129, 183 (1980).
- [58] P.Y.Cai; A. Inomata; P. Wang. Phys. Lett. A 91, 331 (1982).
- [59] N.K. Pak; J. Sökmen. Phys. Rev. A 30, 1629 (1984);
C.C. Gerry. J. Math. Phys. 24, 874 (1983);
D.W. MacLaughlin; L.S.Schulman 12, 2520 (1971).
- [60] Marcia L. Lima; Juan A. Mignaco. J. Phys. A 17, L323 (1984);
CBPF - NF - 052/85. Revista Brasileira de Física, 15, 247 (1985).
- [61] A. de Souza Dutra; "Exact solutions of the Schrödinger equation
for coulombian atoms in presence of some anharmonic oscillator
potentials". Submetido ao Physic Letters A.

- [62] C.E. Reid. J. Mol. Spectrosc. 36, 183 (1970).
- [63] C.M. Bender; T.T.Wu. Phys. Rev. Lett. 37, 117 (1976).
- [64] C.A.Aragão de Carvalho. Nucl. Phys. B 119, 401 (1977).
- [65] K.Datta; A. Rampal. Phys. Rev. D 23, 2875 (1981).
- [66] G.S. Sharma; K.L. Sharma. J. Math. Phys. 25, 2947 (1984).
- [67] R.G. Campos. Revista Mexicana de Física, 32, 379 (1986).
- [68] G.P.Flessas. Phys. Lett. A 72, 289 (1979).
- [69] G.P.Flessas; K.Das. Phys. Lett. A 78, 19 (1980).
- [70] G.P.Flessas. Phys. Lett. A 81, 17 (1981).
- [71] G.P.Flessas. J. Phys. A 14, L209 (1981).
- [72] E. Magyari. Phys. Lett. A 81, 116 (1981).
- [73] G.P. Flessas; R.R. Whitehead; A.Rigas. J.Phys. A 16, 85 (1983).
- [74] C.C. Gerry. Phys. Lett. A 115, 9 (1986).
- [75] E. Eichten; K. Gottfried; T. Kinoshita; K.D. Lane; T.M. Yan. Phys. Rev. D 17, 3090 (1978).
- [76] C. Quigg; J.L. Rosner. Phys. Rep. 56, 167 (1979).
- [77] C. Farina de Souza; A. de Souza Dutra. "Galilean transformation and the path integral propagator for a crossed electric and magnetic fields". Submetido ao American Journal of Physics.
- [78] G.V. Dunne; I.G. Halliday. Phys. Lett. B 193, 247 (1987).

"CÁLCULO DE PROPAGADORES NA
MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA"

ALVARO DE SOUZA DUTRA

Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



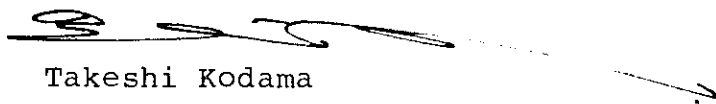
Juan Alberto Mignaco - Presidente



Arvind Narayan Vaidya



Nivaldo Agostinho Lemos



Takeshi Kodama

Rio de Janeiro, 30 de março de 1988