Métodos Funcionais

Usualmente fazemos: (Peskin 9.1, Ryder 5.1)

Clássico $\longrightarrow$ Quântico

$$q_i, p_i \longrightarrow \hat{q}_i, \hat{p}_i$$

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

Estudamos então o comportamento destes operadores no espaço de Hilbert, resolvendo:

$$i\hbar\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right) = H(\hat{p},\hat{q})\,|\psi\rangle$$

Alternativamente, podemos estar mais interessados no estudo de objetos do tipo:

$$U(q_a, q_b; T) = \langle q_b | e^{-iHT/\hbar} | q_a \rangle$$

(assumindo um sistema unidimensional)

Que é a amplitude de probabilidade de uma partícula viajar de q_a para q_b em um dado tempo T.

$$T = t_b - t_a$$

$$\langle q_b | e^{-i\frac{H}{\hbar}(t_b - t_a)} | q_a \rangle = \langle q_b | e^{-i\frac{Ht_b}{\hbar}} \; e^{i\frac{Ht_a}{\hbar}} | q_a \rangle =$$

$$|q, t\rangle = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} |q\rangle$$

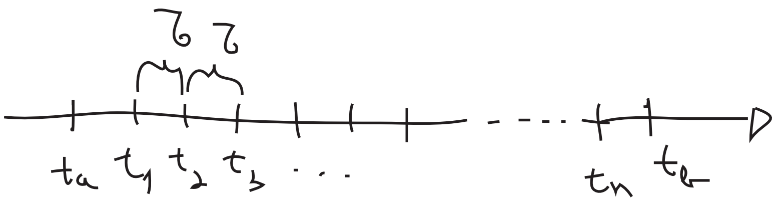
$$= \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$$

Na linguagem de funções de onda:

$$\psi(q_b, t_b) = \langle q_b | \psi(t) \rangle_S = \langle q_b, t_b | \psi \rangle_H = \int dq_a \, \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle \langle q_a, t_a | \psi \rangle_H$$

$$\int dq_a \, |q_a, t_a\rangle\langle q_a, t_a|$$

$$= \int dq_a \, U(q_a, q_b, T)\, \psi(q_a, t_a)$$



$$e^{-i\frac{H}{\hbar}T} = e^{-i\frac{H}{\hbar}\tau}\, e^{-i\frac{H}{\hbar}\tau}\, e^{-i\frac{H}{\hbar}\tau} \cdots e^{-i\frac{H}{\hbar}\tau}$$

$$\mathbb{1} = \int dq \, |q\rangle\langle q|$$

$$U(q_a, q_b; T) = \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_n \, \langle q_b, t_b | q_n, t_n \rangle \langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle \cdots \langle q_1, t_1 | q_a, t_a \rangle$$

(eq. 1.1)

Para um número de intervalos muito grande: $\tau \to 0$

e um elemento qualquer desta cadeia:

$$\langle q_{j+1}\, t_{j+1} | q_j t_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-i\frac{H}{\hbar}\tau} | q_j \rangle \simeq \langle q_{j+1} | 1 - \frac{iH}{\hbar}\tau | q_j \rangle =$$

$$= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j)} dp - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | H | q_j \rangle \qquad \text{(eq. 2.1)}$$

$$\boxed{\delta(q_{j+1} - q_j) = \frac{1}{\hbar}\delta\left[\frac{1}{\hbar}(q_{j+1} - q_j)\right] = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \; e^{\frac{i}{\hbar} p (q_{j+1} - q_j)}}$$

Assumindo uma forma simples para H: $H = f_A(\hat{p}) + f_B(\hat{q})$

$$\langle q_{j+1} | H | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | f_A(\hat{p}) | q_j \rangle + \langle q_{j+1} | f_B(\hat{q}) | q_j \rangle$$

$$\langle q_{j+1} | f_A(\hat{p}) | q_j \rangle = \int dk \int dk' \langle q_{j+1} | k \rangle \langle k | f_A(\hat{p}) | k' \rangle \langle k' | q_j \rangle =$$

$$\boxed{\langle q | k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} k q}}$$

$$= \int dk \int dk' \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(k q_{j+1} - k' q_j)} f_A(k') \delta(k - k') =$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} k (q_{j+1} - q_j)} f_A(k)$$

$$\langle q_{j+1} | f_B(\hat{q}) | q_j \rangle = f_B(q_j) \delta(q_{j+1} - q_j) =$$

$$= f_B\left(\frac{q_{j+1} + q_j}{2}\right) \int \frac{dk}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} k (q_{j+1} - q_j)}$$

$$\bar{q}_j = \frac{q_{j+1} + q_j}{2}$$

$$\langle q_{j+1}|H|q_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)} f_A(p) + $$

$$+ f_B(\bar{q}_j)\int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)}$$

$$\langle q_{j+1}|\underbrace{H(\hat{q},\hat{p})}_{\text{OPERADORES}}|q_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)} \underbrace{H(\bar{q}_j,p)}_{\text{NÚMEROS}}$$

É preciso ter cuidado com Hamiltonianas que tenham produtos entre os operadores p e q, neste caso é preciso "Weyl-ordenar" a Hamiltoniana antes de usar a relação acima (ver Peskin pg 281). Com esse cuidado podemos usar (3.1) normalmente.

De (2.1) temos:

$$\langle q_{j+1}\, t_{j+1}|q_j t_j\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)}\left[1-\frac{i\tau}{\hbar}H(\bar{q}_j,p)\right] =$$

$$= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q_{j+1}-q_j)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\tau H(\bar{q}_j,p)} \qquad \text{(eq. 3.1)}$$

Voltando para (1.1) temos: $(q_0 = q_a \;,\; q_{n+1} = q_b)$

$$U(q_a,q_b;T) = \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_n \langle q_b,t_b|q_n,t_n\rangle\langle q_n,t_n|q_{n-1},t_{n-1}\rangle\cdots\langle q_1,t_1|q_a,t_a\rangle$$

$$= \int dq_1\int dq_2\cdots\int dq_n\left(\int\frac{dp_n}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p_n(q_{n+1}-q_n)}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\tau H(\bar{q}_n,p_n)}\right)\times\cdots\times$$

$$\times\left(\int\frac{dp_0}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p_0(q_1-q_0)}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\tau H(\bar{q}_0,p_0)}\right) =$$

$$= \int\prod_{j=1}^{n}dq_j\int\prod_{i=0}^{n}\frac{dp_i}{2\pi\hbar}\,\mathrm{Exp}\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{\ell=0}^{n}\left[p_\ell(q_{\ell+1}-q_\ell)-\tau H(\bar{q}_\ell,p_\ell)\right]\right\} \qquad \text{(eq. 3.2)}$$

No limite do contínuo ($\tau \to 0$, $n \to \infty$) p e q podem ser pensados como funções do tempo, temos então:

$$q_a = q(t_a) \qquad q_b = q(t_b)$$

$$\sum_{\ell=0}^{n} \left[p_\ell \tau \frac{(q_{\ell+1} - q_\ell)}{\tau} - \tau H(\bar{q}_\ell, p_\ell) \right] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[p(t)\, \dot{q}(t) - H(q,p) \right]$$

$$\boxed{\int \prod_{j=1}^{n} dq_j \int \prod_{i=0}^{n} \frac{dp_i}{2\pi} \equiv \int Dq\, Dp}$$

$$\boxed{U(q_a, q_b; T) = \int \frac{Dq\, Dp}{\hbar} \, \mathrm{Exp}\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[p(t)\, \dot{q}(t) - H(q,p) \right] \right\}}$$

(eq. 4.1)

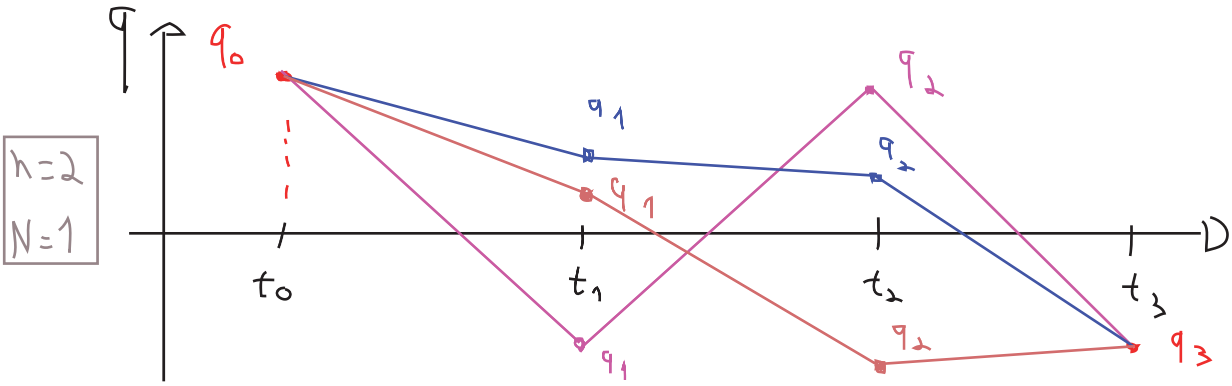
No caso de um sistema com mais coordenadas: $q \to (q^1, q^2, \ldots, q^N)$

$$\boxed{\prod_{m=1}^{N} \int Dq\, Dp \equiv \int \prod_{i,j,m} dq_j^m \, \frac{dp_i^m}{2\pi}}$$

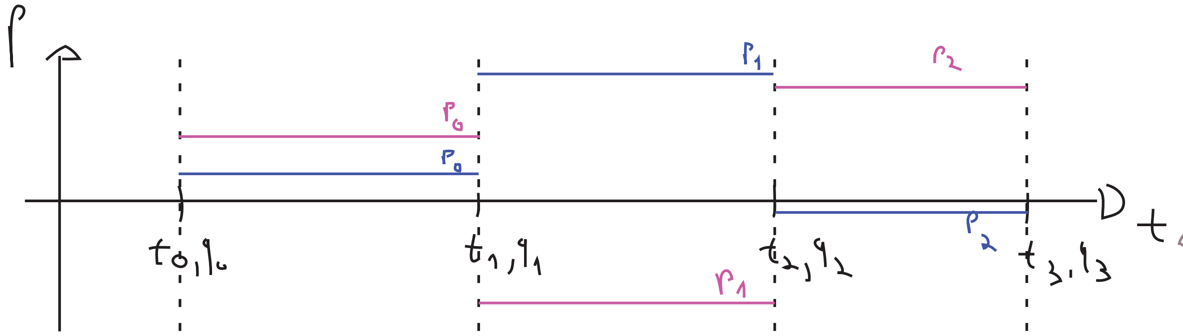
$$\boxed{U(q_a, q_b; T) = \left(\prod_{m}^{N} \int \frac{Dq\, Dp}{\hbar} \right) \mathrm{Exp}\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\sum_{i}^{N} p^i(t)\, \dot{q}^i(t) - H(q,p) \right] \right\}}$$

(eq. 4.2)

Com isso temos uma forma de calcular esta amplitude de transição (que chamaremos de propagador) a partir desta "soma" sobre todas as possíveis trajetórias no espaço de fase.



$$\int dq_1 \int dq_2$$



$$\int dp_0 \int dp_1 \int dp_2$$

Temos uma forma mais simples para o propagador no caso de Hamiltonianas do tipo:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \qquad \text{(eq. 5.1)}$$

neste caso as integrais no momento podem ser feitas:

$$\int \frac{Dp}{\hbar} \, \mathrm{Exp}\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[p(t)\, \dot{q}(t) - \frac{p^2}{2m} \right] \right\}$$

$$\Big\downarrow \text{DISCRETO}$$

$$\int \prod_j \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \, \mathrm{Exp}\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_j \tau \left[p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\tau} - \frac{p_j^2}{2m} \right] \right\}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{Exp}\left[-ax^2 + bx + c \right] dx = \mathrm{Exp}\left[\frac{b^2}{4a} + c \right] \left(\frac{\pi}{a} \right)^{1/2}$$

$$\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \, \mathrm{Exp}\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[p_j (q_{j+1} - q_j) - \frac{\tau}{2m} p_j^2 \right] \right\} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \tau} \right)^{1/2} \mathrm{Exp}\left[\frac{im}{2\hbar\tau} (q_{j+1} - q_j)^2 \right]$$

(n+1) INTEGRAIS EM p

$$U(q_a,q_b;T)=\int \prod_j dq_j \,\mathrm{Exp}\left\{\sum_j \frac{i\tau}{\hbar}\left[-V(q_j)\right]\right\}\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}}\mathrm{Exp}\left[\sum_j \frac{im}{2\hbar\tau}(q_{j+1}-q_j)^2\right]=$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}}\int \prod_j dq_j \;\mathrm{Exp}\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_j \tau\left[\frac{m}{2}\frac{(q_{j+1}-q_j)^2}{\tau^2}-V(q_j)\right]\right\}$$

$\Downarrow$ contínuo

$$U(q_a,q_b;T)=N\int Dq \;\mathrm{Exp}\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,\underbrace{\left[\frac{m\dot{q}^2}{2}-V(q)\right]}_{L(q,\dot{q})}\right\}$$

$$\boxed{N=\lim_{\substack{n\to\infty\\ \tau\to 0}}\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}\right)^{\frac{n+1}{2}}}$$

$$\boxed{U(q_i,q_f;T)=\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=N\int Dq\; e^{\frac{i}{\hbar}S[q]}} \qquad \text{(eq. 6.1)}$$

Comentários:

(1) Nem sempre é possível escrever o propagador na forma (6.1), ela só vale se o Hamiltoniano for da forma (5.1)

(2) Originalmente Feynman assumiu (6.1) e a partir dela provou a eq. de Schrödinger

Derivadas Funcionais

(Peskin pg 289, Ryder 5.4)

Função: $\mathbb{R}^n \longmapsto \mathbb{R}^m$

Funcional: $C^\infty(\underline{M}) \longmapsto \mathbb{R}$ NOTAÇÃO $f(x_n) \longrightarrow F[f]$

$\hookrightarrow$ eg.: $\mathbb{R}, \mathbb{R}^3, \ldots$

Ex: (1) $F(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx$

(2) $\underbrace{F_a}_{\text{PARÂMETRO}}[f] = f^2(a)$

Derivada Funcional:

podemos definir diferencial de funções por: $df \equiv \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon h) - f(x)}{\epsilon} = ah \quad \forall h \in \mathbb{R}$

$(\mathbb{R} \longmapsto \mathbb{R})$

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon h) - f(x)}{\epsilon} = \overbrace{\lim_{\eta \to 0} \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta}}^{a} h$$

$$h = 1 \Rightarrow df = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} = a \equiv \frac{df}{dx}$$

Em $\mathbb{R}^n \longmapsto \mathbb{R}$

$$f = f(x_1, x_2, \dots)$$

DIFERENCIAL: $df = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(\vec{x} + \epsilon \vec{h}) - f(\vec{x})}{\epsilon} = \vec{a} \cdot \vec{h}$

$$\vec{h} = (0, 0, 0, \dots, \underset{i}{1}, \dots) \Rightarrow h_j = \delta_{ij} \Rightarrow \vec{a} \cdot \vec{h} = a_j h_j = = a_i$$

$$\Downarrow$$

$$df = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_i + \epsilon, \dots) - f(\vec{x})}{\epsilon} = a_i = \underbrace{\frac{df}{dx_i}}_{\text{DERIVADAS}}$$

$$\vec{a} = \vec{\nabla} f$$

Em $C^{\infty}(\mathbb{R}) \longmapsto \mathbb{R}$

$$F[f] \Rightarrow \delta F = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[f+\epsilon h] - F[f]}{\epsilon} = \int a(x) h(x)\, dx$$

$$h = \delta_y \Rightarrow h(x) = \delta(x-y) \Rightarrow \int a(x) h(x)\, dx = a(y)$$

$$\delta F = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[f+\epsilon \delta_y] - F[f]}{\epsilon} = a(y) \equiv \frac{\delta F}{\delta f(y)}$$

$$\boxed{\frac{\delta F}{\delta f(y)} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[f+\epsilon \delta_y] - F[f]}{\epsilon}}$$ (eq. 8.1)

LINEAR!

(FRÉCHET DERIVATIVE)

$$\boxed{\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} h(x)\, dx = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[f+\epsilon h] - F[f]}{\epsilon}}$$ (eq. 8.2)

Ex: $F[f] = \int_0^1 f^2(x)\, dx$

$$(8.2) \Rightarrow F[f+\epsilon h] = \int_0^1 [f^2(x) + 2\epsilon f(x) h(x) + \cancel{O(\epsilon^2)}]\, dx =$$

$$\delta F = \frac{F[f+\epsilon h] - F[f]}{\epsilon} = \int_0^1 \underbrace{2 f(x)}_{} h(x)\, dx$$

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = 2 f(x)$$

$$(8.1) \Rightarrow \frac{\delta F}{\delta f(y)} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \delta(x-y)] - F[f(x)]}{\epsilon} =$$