

$t \rightarrow +\infty$
 $\psi^*(t) = 0$
 $\psi(t)$ livre

\Rightarrow só temos a parte de aniquilação no futuro
 $\psi(t)$ é autovalor de a

Como
$$q(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \left[a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t} \right]$$

verificamos que isto é o mesmo que as condições 22.1.

O que ganhamos fazendo de novo este caminho? Para começar ele é mais limpo, não houve uso prescrição alguma. Adicionalmente vimos que o resultado final só pôde ser obtido escolhendo os estados inicial e final como o vácuo, este passo não ficou explícito no caso anterior. De fato a projeção no vácuo estava escondida no único lugar em que poderia, na prescrição de Feynman que, como já vimos, está intrinsecamente ligada a projeção no vácuo assintótico (para tempos grandes) da teoria.

Rotação de Wick para o tempo Euclideano

Até agora viemos fazendo integrais que tipicamente envolviam exponenciais do tipo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-i\alpha x^2}$$

que exige que α ou x sejam tomados ligeiramente complexos para que a integral convirja, ou seja, estas integrais só estão definidas via sua continuação analítica. Este tipo de integral aparece com frequência em teoria de campos, pois em geral podemos expandir as integrais da ação em torno da solução clássica usando a [Saddle Point Approximation](#):

$$S = S[q_{cl}] + \frac{1}{2} \delta q_i S_{,ij} \delta q_j + \mathcal{O}(\delta q^3)$$

$$\boxed{\left. \frac{\delta S}{\delta q} \right|_{q=q_{cl}} = 0}$$

se a ação já é quadrática em q (e.g. no caso livre) este termo é zero e o resultado da SPA é exato.

Uma outra forma de olhar a continuação analítica é fazendo uma rotação para o Espaço Euclideano, este procedimento é também bastante instrutivo pois revela paralelos interessantes entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Estatística. Pois bem, analisemos o seguinte caso:

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

$$E_n > 0$$

$$\hat{1} = \sum |n\rangle \langle n|$$

Uma amplitude de transição seria escrita como:

$$\begin{aligned} \langle q', t' | q, t \rangle_H &= \langle q' | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | q \rangle = \sum_n \sum_m \langle q' | n \rangle \underbrace{\langle n | e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}} | m \rangle}_{\delta_{mn} e^{-iE_n(t'-t)}} \langle m | q \rangle = \\ &= \sum_n \langle q' | n \rangle \langle n | q \rangle e^{-i\frac{E_n(t'-t)}{\hbar}} = \sum_n \psi_n(q') \psi_n^*(q) e^{-i\frac{E_n(t'-t)}{\hbar}} \end{aligned}$$

Que é uma função analítica em $\Delta t \equiv (t' - t)$ e portanto admite a continuação:

$\Delta t \rightarrow -\lambda t_E$ (eq. 29.1) Rotação de Wick $\Delta t \in \mathbb{R}$

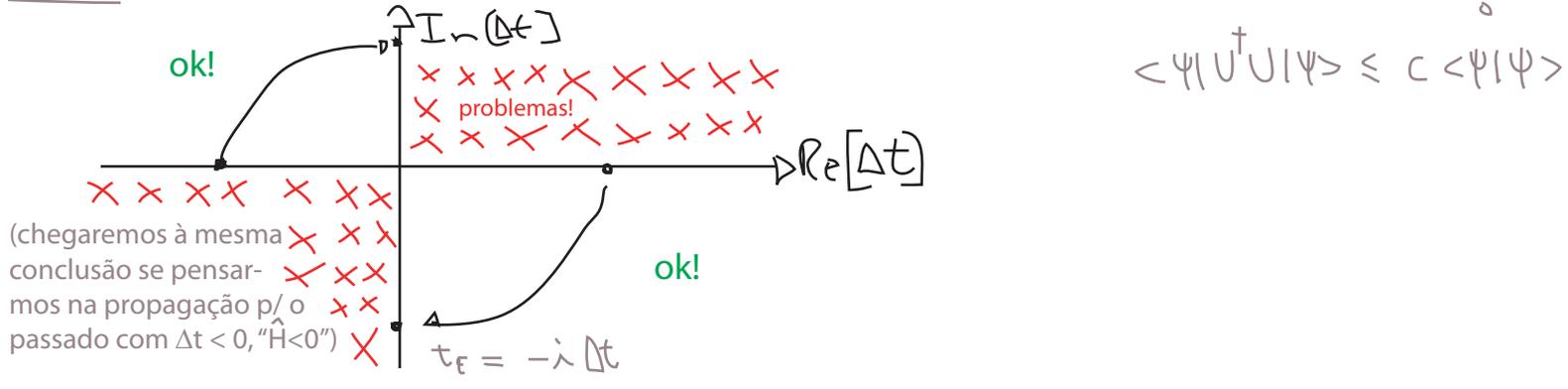
A razão pela qual "rodamos" nesta direção é a seguinte: considere o operador de evolução:

$$U(t) = e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} = e^{-\frac{i\hat{H} \text{Re}[\Delta t]}{\hbar}} e^{\frac{\hat{H} \text{Im}[\Delta t]}{\hbar}}$$

$\left. \begin{matrix} > 1 & \text{Im}[\Delta t] > 0 \\ < 1 & \text{Im}[\Delta t] < 0 \end{matrix} \right\}$

\swarrow propagação p/ futuro ($\Delta t > 0$, " $\hat{H} > 0$ ")

O que acontece se fizermos a continuação analítica para o plano complexo em Δt ? - U só é limitado para valores negativos de $\text{Im}[t]$:



Com esta rotação temos:

$$\langle q', t_E | q, 0 \rangle_H = \sum_n \psi_n(q') \psi_n^*(q) e^{-\frac{t_E E_n}{\hbar}} \quad (\text{eq. 29.2})$$

Note que: $\int dq \langle q, \tau | q, 0 \rangle_H = \sum_n e^{-\frac{\tau E_n}{\hbar}} = \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} \right\} = Z\left(\frac{\tau}{\hbar}\right)$

\swarrow Euclidiano (vou usar τ quando os pontos inicial e final forem iguais)

\swarrow note que são iguais $\int dq |\psi_n(q)|^2 = 1$

é a função de partição canônica do sistema para uma temperatura $kT_Q = \frac{\hbar}{\tau} \equiv \frac{1}{\beta}$ $\tau = \hbar \beta$

\swarrow também é 1 em unidades naturais

Ou seja, a função de partição do sistema é obtida integrando sobre um ponto de uma trajetória fechada ($q' \equiv q(\tau) = q(0) \equiv q$) e de "comprimento" $\tau = \hbar\beta$ no tempo Euclidiano.

Vejamos como fica a integral de trajetória para esta mesma transição. A lagrangiana é:

$$L = \frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - V(q)$$

O expoente na integral de trajetória fica:

$$iS[q] = i \int_t^{t'} dt'' \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt''} \right)^2 - V(q) \right] = i \int_0^{\hbar\beta} (-i dt_E) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq_E}{d(-it_E)} \right)^2 - V(q_E) \right] \equiv -S_E[q_E]$$

$q(t'') \rightarrow q(-it_E) = q_E(t_E)$

$iS[q] = -S_E[q_E]$

① $t'' \rightarrow t'' - t \Rightarrow \int_0^{\Delta t} dt'' \Rightarrow$ ② $t_E = -it''$
 $\tau = i \Delta t = \hbar\beta$

$$\therefore S_E[q_E] = \int_0^{\hbar\beta} dt_E \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq_E}{dt_E} \right)^2 + V(q_E) \right] = \int dt_E L_E(q_E, \dot{q}_E)$$

$\hookrightarrow T + V$ (Hamiltoniana Clássica)

Para obter então a função de partição, basta então exigir que os extremos da trajetória sejam o mesmo ponto (trajetória fechada) e incluir a integral sobre este ponto em \mathcal{D}_q . Na prática estamos integrando sobre todos os caminhos fechados de comprimento $\hbar\beta$.

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left\{ e^{-\frac{\hbar\beta}{\hbar} \hat{H}} \right\} = \int_{q_E(t_E + \tau) = q_E(t_E)} \mathcal{D}q_E e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q_E]}$$

Fórmula de Feynman-Kac
(eq. 30.1)

Podemos tirar qualquer quantidade de interesse da função de partição, uma vez que ela tem toda informação relevante do sistema. De fato a mecânica estatística de uma partícula quântica em contato com um banho térmico em temperatura T é dada pela **matriz de densidade**:

$$\hat{\rho}_\beta = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \text{ fator de Boltzman}$$

\hookrightarrow normalização

que contém as probabilidades de encontrar a partícula nos estados de energia E_n : $\frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$

A condição de normalização identifica Z como a função de partição:

$$\text{Tr}[\hat{\rho}_\beta] = 1 \iff Z(\beta) = \text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H})]$$

O valor esperado de qualquer observável \hat{O} é dado por:

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta} = \text{Tr}(\hat{\rho}_{\beta} \cdot \hat{O}) \quad (\text{eq. 31.1})$$

A matriz de densidade é proporcional ao próprio operador de evolução no espaço Euclidiano:

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

$\tau = \hbar \beta$

$$\tau = \hbar \beta = \frac{\hbar}{k_B T_0}$$

$$k_B T_0 = \frac{\hbar}{k_B \tau}$$

$$\hat{\rho}_{\beta} = \frac{1}{Z} \hat{U}(-i\tau) \quad Z = \text{Tr}[\hat{U}(-i\tau)]$$

Vemos que a "evolução" de um sistema neste "tempo imaginário" serve para descrever as propriedades deste mesmo sistema em equilíbrio com um banho térmico.

Recapitulando:

Partícula (quântica) em eq. com banho de temperatura T

$$\hat{\rho}_{\beta} (e^{-\beta \hat{H}}), \quad Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}]$$

Partícula (quântica) isolada em tempo imaginário

$$\hat{U}(-i\tau)$$

isto é tudo que preciso saber, e posso obtê-lo daqui

(31.2)

Além disso, a métrica agora é de um espaço Euclidiano:

$$ds^2 = -dt^2 + dq^2$$

$$\downarrow t = -i t_E$$

$$ds_E^2 = dt_E^2 + dq^2 \Rightarrow \text{distância Euclidiana em } \mathbb{R}^{n+1}$$

Atenção! Estou seguindo a convenção:

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

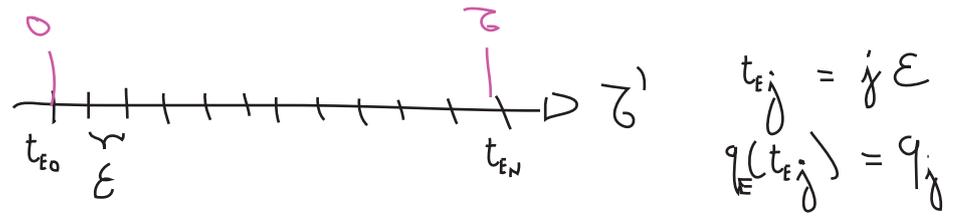
A maioria dos livros usa o sinal oposto (diag{1,-1,-1,-1}) lembre-se disso quando for comparar resultados

e portanto, t_E é uma variável tipo espaço. Vejamos o que acontece se pensarmos na variável de integração t_E como uma distância, além disso, consideraremos um sistema simples (oscilador harmônico):

$$S_E[q_E] = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau} dt_E \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq_E}{dt_E} \right)^2 + V(q_E) \right]$$

$$V(q_E) = \frac{\omega^2}{2} q_E^2$$

Discretizando o "tempo Euclideo":



$$\int \mathcal{D}q_E \text{EXP} \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\tau_0} dt_E \left[\frac{\dot{q}_E^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 q_E^2 \right] \right\}$$

$$\downarrow$$

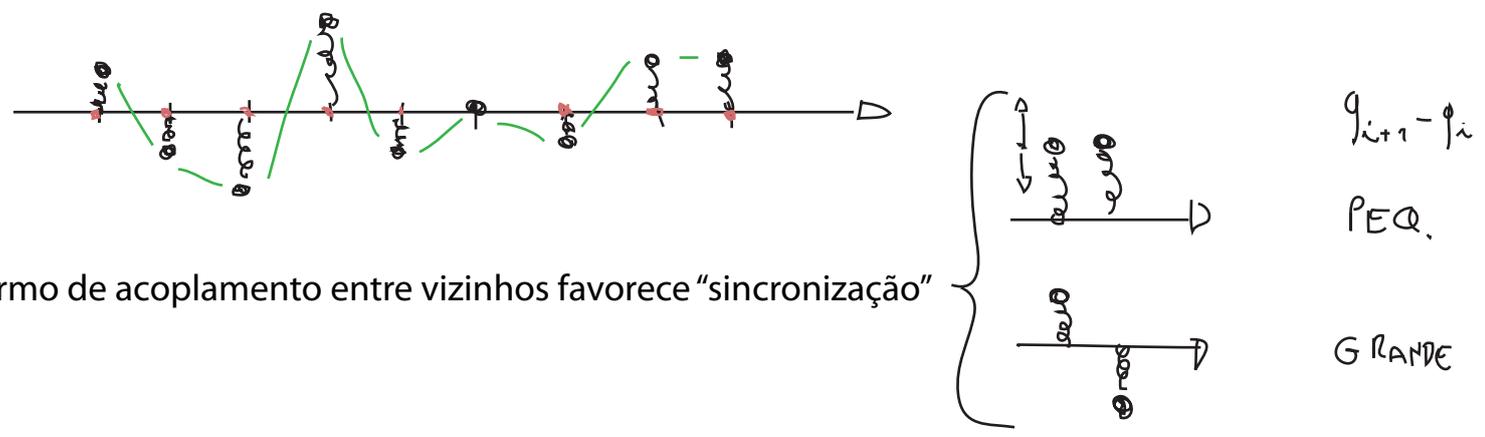
$$\int \prod dq_j \text{EXP} \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_j \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 q_j^2 \right] \right\}$$

Isso é exatamente a função de partição de um sistema clássico em temperatura T_S

$$Z = \underbrace{\int \prod dq_j}_{\text{"soma" todas as configurações } \{q_i\}} \underbrace{\text{EXP}}_{\frac{1}{\hbar T_S}} \left\{ -\frac{1}{\hbar} \sum_j \epsilon \left[\underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2}_{\text{energia total}} + \underbrace{\frac{1}{2} \omega^2 q_j^2}_{\text{energia de um oscilador}} \right] \right\}$$

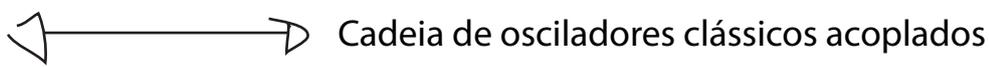
acoplamento entre vizinhos energia de um oscilador

Na prática temos um sistema de osciladores:



O termo de acoplamento entre vizinhos favorece "sincronização"

1 Oscilador Quântico
(em Temp finita ou tempo imaginário)



Futuações quânticas



Futuações térmicas

\hbar



$\hbar \omega T_S$

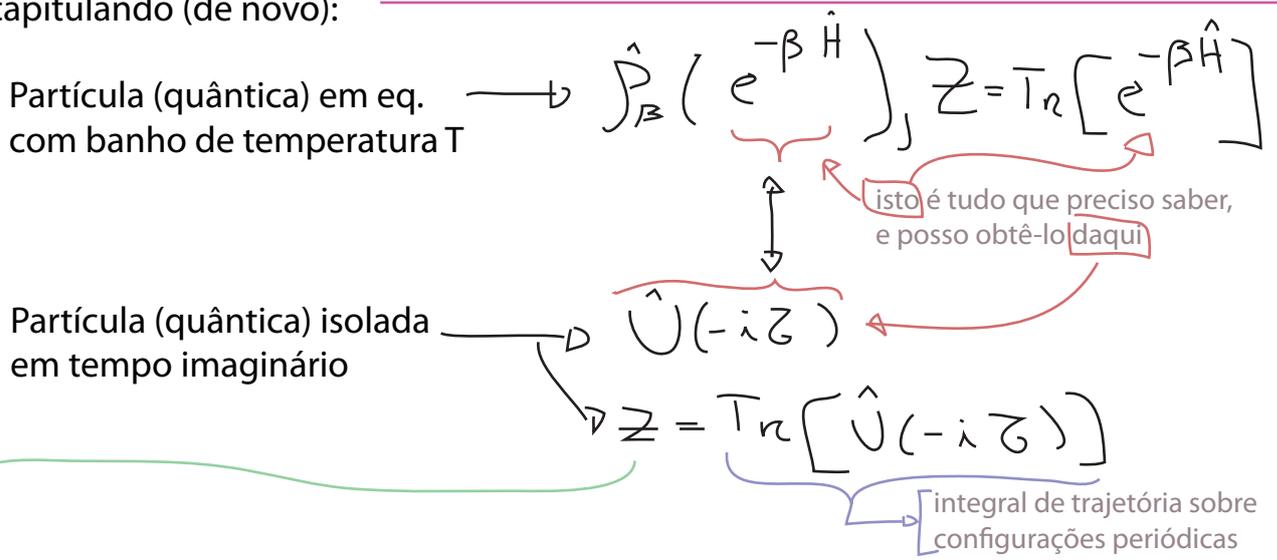
temperatura do Sistema de osciladores clássicos

1 grau de liberdade \longleftrightarrow número grande graus de liberdade clássicos

Temperatura \longleftrightarrow (Comprimento da Cadeia)⁻¹
 $T_Q = \frac{\hbar}{k_B \tau}$ \rightarrow período τ^{-1}

temperatura de um banho térmico com o qual um oscilador Quântico está em contato

Recapitulando (de novo):



É também a função de partição de um sistema clássico (de fato de muitos sistemas clássicos acoplados aos "primeiros vizinhos") \rightarrow Mecânica Estatística

(33.1)

Até agora vimos a relação entre o operador de evolução e a função de partição. E os observáveis?

$\hat{A}(q)$ $\xrightarrow{(31.1)}$ quântica em T $\rightarrow \langle \hat{A}(q_\epsilon) \rangle_\beta = \text{Tr} [\hat{\rho}_\beta \cdot \hat{A}(q_\epsilon)] = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}(q_\epsilon)]}{Z}$

$\beta = \frac{1}{k_B T_Q}$

$= \frac{\text{Tr} [\hat{U}_\epsilon(\tau) \hat{A}(q_\epsilon)]}{\text{Tr} [\hat{U}_\epsilon(\tau)]}$

$\text{Tr} [\hat{U}_\epsilon(\tau)] \stackrel{30.1}{=} \int_{\mathcal{P}} \mathcal{D}q_\epsilon e^{-\frac{1}{\hbar} S_\epsilon[q_\epsilon]}$

$\text{Tr} [\hat{U}_\epsilon(\tau) \hat{A}(q_\epsilon)] = \int_{\mathcal{P}} \mathcal{D}q_\epsilon e^{-\frac{1}{\hbar} S_\epsilon[q_\epsilon]} A(q_\epsilon(\tau_1))$

$\hat{A}(q_\epsilon) |q_\epsilon(\tau_1)\rangle = A(q_\epsilon(\tau_1)) |q_\epsilon(\tau_1)\rangle$ (em caminhos periódicos)

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int_{\mathcal{P}} \mathcal{D}q_E e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q_E]} A(q_E(\tau_1))}{\int_{\mathcal{P}} \mathcal{D}q_E e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[q_E]}}$$

(eq. 34.1)

Notem que, pensando em $\int \mathcal{D}q_E$ como a soma sobre as configurações de uma cadeia clássica, esta mesma definição dá o valor esperado em Mecânica Estatística para observáveis de um sistema de temperatura $T_s = \frac{\hbar}{k_B \tau}$

O que acontece quando fazemos $T_Q \rightarrow 0$?

$$\tau = \hbar \beta = \frac{\hbar}{k_B T_Q}$$

$$T_Q \rightarrow 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \beta \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow \infty \end{array} \right.$$

$$\text{Tr} [\hat{U}_E(\tau)] = \sum_n e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_n}$$

$$\tau \rightarrow \infty \Rightarrow e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_0} \gg e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_1} \gg e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_2}$$

Seleciono a configuração de menor energia

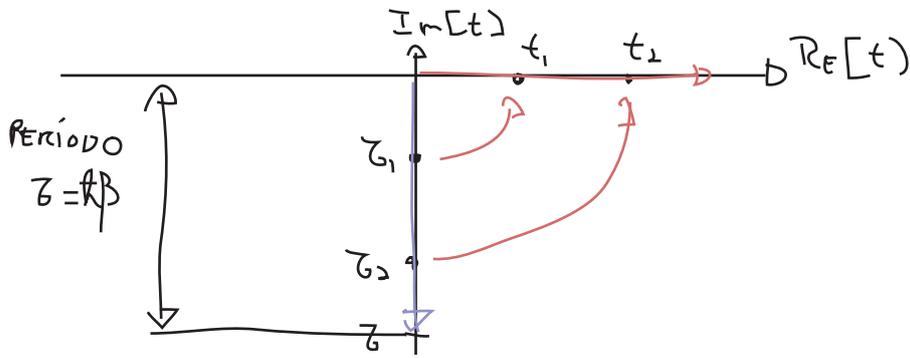
$$\text{Tr} [\hat{U}_E(\tau \rightarrow \infty)] = \langle 0 | e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_0} | 0 \rangle$$

$$\text{Tr} [\hat{U}_E(\tau) \hat{A}(q_E)] = \langle 0 | \hat{A}(q_E) | 0 \rangle e^{-\frac{\tau}{\hbar} E_0}$$

$$\langle 0 | \hat{A}(q_E) | 0 \rangle = \langle \hat{A} \rangle_{\beta \rightarrow \infty}$$

Mandar a temperatura para zero **projeta os operadores no vácuo da teoria**. Com isso podemos entender outra forma de obter os propagadores de Feynman:

$$\Delta_F(t_1 - t_2) = \langle 0 | T \{ \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \} | 0 \rangle$$



Podemos obter primeiro o valor $\langle \hat{q}_E(z_1) \hat{q}_E(z_2) \rangle_{\beta = \frac{\hbar}{kT}} = \int_{\mathcal{P}} \mathcal{D}q_E e^{-\frac{i}{\hbar} S_E} q_E(z_1) q_E(z_2)$

$(z_1 < z_2) \Rightarrow (t_1 < t_2)$

e então voltar ao tempo real fazendo: $z_1 \rightarrow i t_1$
 $z_2 \rightarrow i t_2 \Rightarrow \langle \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \rangle_{\beta}$

Se tivéssemos calculado a mesma coisa com $z_2 < z_1$ (note que na integral de trajetória não há diferença), teríamos voltado para: $\langle \hat{q}(t_2) \hat{q}(t_1) \rangle_{\beta}$

ou seja, voltamos sempre no produto temporalmente ordenado:

$$\langle T \{ \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \} \rangle_{\beta}$$

Para projetar no vácuo basta tomar temperatura zero

$$\left. \begin{matrix} \beta \rightarrow \infty \\ T \rightarrow 0 \end{matrix} \right\} \Rightarrow \langle 0 | T \{ \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \} | 0 \rangle$$

Podemos também obter uma expressão para o propagador/correlator livre em temperaturas finitas:

$$\Delta_{\text{FREE}}(z') = \langle T \{ \hat{q}(-i z') \hat{q}(0) \} \rangle_{\beta}$$

considerando a equação de movimento:

$$\left[-\frac{d^2}{dt_1^2} + \omega^2 \right] \Delta_{\text{FREE}}(z_1 - z_2) = \delta(z_1, z_2) \quad (\text{eq. 35.1})$$

$$\frac{d^2}{dz_1^2} + \omega^2$$

1 (já podemos voltar para unidades naturais)

Lembrando que, como o espaço Euclidiano é cíclico de período $\tau = \hbar/\beta$, vale:

$$\Delta_{\text{FREE}}(\tau \pm \beta) = \Delta_{\text{FREE}}(z')$$

A eq. 35.1 tem somente uma solução para $(z_1 - z_2) \in [0, \beta]$:

$$\Delta_{F \neq E} (z') = \frac{1}{2\omega} \left[(1 + n(\omega)) e^{-\omega z'} + n(\omega) e^{\omega z'} \right] \quad (\text{eq. 36.1})$$

onde:

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\beta|\omega|} - 1} \quad (\text{eq. 36.2})$$

é a distribuição de Bose-Einstein. E no limite de temperatura zero:

$$\begin{aligned} T=0 & \quad n(\omega) \rightarrow 0 \\ \beta \rightarrow \infty & \quad \Delta_{F \neq E} \rightarrow \Delta_F(z') = \frac{e^{-\omega z'}}{2\omega} \quad (\text{compare com 27.3}) \end{aligned}$$

O oscilador Harmônico forçado (de novo)

Veamos como fica o oscilador no espaço Euclidiano. Partindo da ação:

$$i S[q] = i \int dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - \frac{\omega^2}{2} q^2 + J q \right]$$

$$\begin{aligned} \text{Wick} & \left\{ \begin{aligned} t &= -i t_E \\ q(t) &= q(-i t_E) = q_E(t_E) \\ J(t) &= J(-i t_E) = J_E(t_E) \end{aligned} \right. \quad \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 = \left(\frac{1}{-i} \right)^2 \left(\frac{dq_E}{dt_E} \right)^2 \end{aligned}$$

$$-S_E[q] = \int dt_E \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{dq_E}{dt_E} \right)^2 - \frac{\omega^2}{2} q_E^2 + J_E q_E \right]$$

Suprimindo todos os índices "E" para simplificar a notação, obtemos a seguinte função de partição:

$$Z_E[J] = \int_{\mathcal{F}} \mathcal{D}q \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int dt \left[\left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + \omega^2 q^2 \right] + \int dt J(t) q(t) \right\} \quad (\text{eq. 36.2})$$

A vantagem agora é que estamos fazendo esta integral em trajetórias fechadas, por isso não há problema com bordas quando integramos por partes (compare com a pg 18):

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \int_{\mathcal{F}} \mathcal{D}q \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{z_1}^{z_1+\beta} dt q \left[\underbrace{\left(\frac{dq}{dt} \right)^2}_{\Delta_E^{-1}} + \omega^2 \right] q + \int_{z_1}^{z_1+\beta} dt J(t) q(t) \right\} = \\ &= N \exp \left\{ \frac{1}{2} \int ds \int ds' J(s) \Delta_E(s, s') J(s') \right\} \quad (\text{eq. 36.3}) \end{aligned}$$

$z_1 \rightarrow -\infty$
 $z_1 + \beta \rightarrow \infty$
 $J(t) \neq 0 \quad -T < t < T$
 $J(t) = 0 \quad |t| > |T|$

note que este Δ é a função de Green que soluciona o problema clássico:

$$-\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = J(t)$$

$$q(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \Delta(t, t') J(t')$$

$$\Delta_E(s, s') \equiv \left(-\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2\right)^{-1}(s, s') = \int \frac{dE_E}{2\pi} \frac{e^{-i E_E (s-s')}}{E_E^2 + \omega^2} \quad (\text{eq. 37.1})$$

$$\left(-\frac{d^2}{ds^2} + \omega^2\right) \Delta_E(s, s') = \int \frac{dE_E}{2\pi} \left(-(-i E_E)^2 + \omega^2\right) \frac{e^{-i E_E (s-s')}}{E_E^2 + \omega^2} = \delta(s-s')$$

Note que a integral feita da primeira para a segunda linha de 36.3 é uma Gaussiana tradicional (nenhuma exponencial complexa por ali). Além disso o propagador Euclidiano em 37.1 não tem pólos para E_E real e portanto não precisamos falar nada sobre o caminho de integração. Os polos foram movidos para o eixo complexo pela rotação de Wick:

polos de Δ_E : $E_E = \pm i \omega$

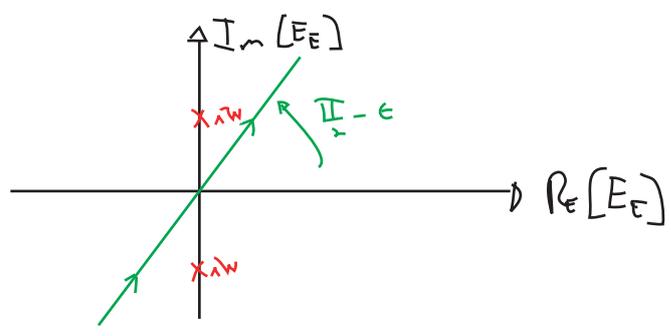
Queremos, finalmente, voltar para o espaço de Minkowski. Já sabemos que $t = -i t_E$ mas como rodamos E_E ? Primeiramente exigimos que $E t = E_E t_E$, então:

$$E \approx i E_E \approx e^{i \frac{\pi}{2}} E_E \quad E t = (i E_E)(-i t_E) = E_E t_E$$

(o que é arbitrário, mas garante que ondas planas se propagem na mesma direção espacial com t ou t_E crescente, uma vez que:

$$e^{i p \cdot x} = e^{-i(E t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = e^{-i(E_E t_E - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

Além disso, para que a extensão analítica seja válida, não podemos cruzar os polos, portanto não podemos rodar totalmente para $E_E = -i E$ mas sim parar antes de chegar no polo:



$$E = e^{i(\frac{\pi}{2} - \epsilon)} E_E = i(E_E - i \epsilon')$$

ou

$$E_E = e^{-i(\frac{\pi}{2} - \epsilon)} E = -i(E + i \epsilon')$$

Com esta rotação temos:

$$(\text{eq. 37.1}) \Rightarrow \Delta_E(t_E = i t) = \int \frac{dE_E}{2\pi} \frac{e^{-i E_E t_E}}{E_E^2 + \omega^2} = \int \frac{-i dE}{2\pi} \frac{e^{-i E t}}{-E^2 + \omega^2 - i \epsilon}$$

$$E_E^2 = [-i(E + i \epsilon')]^2 = -(E^2 + i \epsilon' E + \omega(\epsilon'))$$

De forma que, mais uma vez, somos levados ao propagador de Feynman.