Vamos então fazer uma mudança de variável e escrever:

$$q(t) = q_{cl}(t) + \tilde{q}(t) \rightarrow \boxed{\tilde{q}(t_i) = \tilde{q}(t_f) = 0} \quad \text{(eq. 16.1)}$$

Trajetória clássica, com condições de contorno não triviais

Do ponto de vista da integral de trajetória, mudar a integração de q para $\tilde{q}$ é o mesmo que uma mudança de variável dada pela adição de uma constante em uma integral usual, estamos apenas somando um caminho fixo. Então:

$$\int Dq\, e^{iS[q_{cl}(t)+\tilde{q};J]} = \int D\tilde{q}\, e^{iS[q_{cl}(t)+\tilde{q};J]}$$

De fato, isto decorre da definição da integral de trajetória de um modo trivial:

$$\prod_i dq_i = \prod_i d(\underbrace{q_i^{cl}}_{\text{número}} + \tilde{q}_i) = \prod_i d\tilde{q}_i$$

Lembrando que (pg 8), se acharmos um extremo q_0 de $S[q;J]$, podemos escrever:

$$\left.\begin{array}{l} S[q;J] = \frac{1}{2}Aq^2 + Jq \\ \left.\frac{\delta S}{\delta q}[q;J]\right|_{q=q_0} = 0 \end{array}\right\} = S[q_0;J] + \underbrace{\frac{1}{2}A(q-q_0)^2}_{\text{justamente a ação para } J=0} = S[q_0;J] + S[q-q_0;0]$$

Acontece que q_{cl} é justamente um extremo da ação, de forma que:

$$S[q;J] = S[q_{cl};J] + S[\overbrace{q-q_{cl}}^{\tilde{q}};0] \Rightarrow \boxed{S[q;J] = S[q_{cl};J] + S[\tilde{q};0]} \quad \text{(eq. 16.2)}$$

$$\therefore \boxed{Z[J] = e^{iS[q_{cl};J]} \int D\tilde{q}\, e^{iS[\tilde{q};0]}} \quad \text{(eq. 16.3)}$$

esta integral agora está bem definida, mas não interessa o seu resultado pois ela independe de J e pode ser absorvida na constante que acompanha Z. O importante é que a Δ que vai parar no determinante é obtida invertendo o operador Δ^{-1} numa base em que não há modos com autovalor zero

$$\therefore \boxed{Z[J] = N e^{iS[q_{cl};J]}} \quad \text{(eq. 16.4)}$$

E a equação de movimento para q_{cl} é

$$\boxed{\Delta^{-1} q_{cl}(t;J) = iJ(t)}$$ (eq. 17.1)

E a solução:

$$q_{cl}(t;J) = \underbrace{q_{cl}(t;0)}_{\Delta^{-1} q_{cl}(t;0) = 0} + i(\Delta\cdot J)(t)$$

(estas são as funções problemáticas que satisfazem a eq. 15.2, posso inverter Δ porque ele agora age em $q_{cl}(t;J)$, o segundo termo acima conserta o problema)

Note que:

$$\frac{\delta_{FULL} S[q_{cl};J]}{\delta_{FULL} J(t)} = \int dt' \left[\cancel{\frac{\delta S}{\delta q(t')}\Big|_{q=q_{cl}}} \frac{\delta q_{cl}(t';J)}{\delta J(t)} + \underbrace{\frac{\delta S}{\delta J}}_{q_{cl}} \right] =$$

0 (EOM)

$$\int dJ \left(\frac{\delta_{FULL} S[q_{cl};J]}{\delta_{FULL} J(t)} = q_{cl}(t;J) = q_{cl}(t;0) + i(\Delta\cdot J)(t) \right)$$

$$S[q_{cl}(J);J] = \underbrace{S[q_{cl}(0);0]}_{CONST} + q_{cl}(0)\cdot J + \frac{i}{2} J\cdot\Delta\cdot J$$

cada produto escalar deste é uma integral em t (por isso suprimi as dep. em t)

$$\boxed{Z[J] = N e^{iS[q_{cl};J]} \overset{(eq.\ 16.4)}{=} N\, e^{-\frac{1}{2} J\cdot\Delta\cdot J + i q_{cl}(0)\cdot J}}$$ (eq. 17.2)

Ainda resta saber qual é a forma deste Δ e quais condições de contorno usamos para $q_{cl}(t;J)$ na eq. 17.1

Uma opção que temos para evitar os polos em 15.1 é tirá-los do eixo real, faremos isto segundo a prescrição:

$$\boxed{p^2 \to p^2 + i\epsilon}$$ (eq. 17.3)

$$\Delta_F(t,t') = i\int \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{-ip(t-t')}}{\underbrace{p^2 - \omega^2 + i\epsilon}}$$

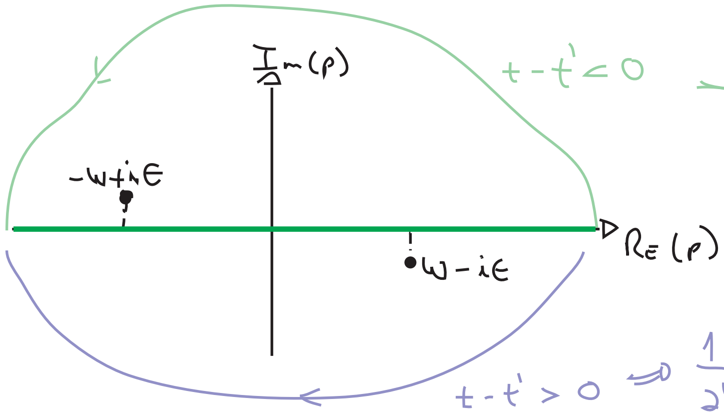
polos em:

$$p = \pm(\omega - i\epsilon)$$

(que obviamente não é inocente, compare com o propagador de Feynman que você conhece e note que estamos fazendo uma "teoria de campos" com 0 dimensões espaciais e uma temporal:

$$\int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{-i}{\underbrace{p^2 + m^2 - i\epsilon}_{-(p^0)^2 + \underbrace{\vec{p}^2 + m^2}_{\omega^2} - i\epsilon}} e^{ip(x-y)} \to \int \frac{dp^0}{(2\pi)} \frac{-i}{-(p^0)^2 + m^2 - i\epsilon} e^{-ip^0(t'-y^0)}$$

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



$$t-t'<0 \Rightarrow \frac{1}{2w} e^{iw(t-t')}$$

$$t-t'>0 \Rightarrow \frac{1}{2w} e^{-iw(t-t')}$$

$$\Delta_F(t,t') = \frac{1}{2w} e^{-iw|t-t'|}$$

Voltemos então a equação 17.1:

$$\Delta^{-1} q_{cl}(t;J) = iJ(t) \Rightarrow i\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + w^2\right) q_{cl}(t,J) = iJ(t)$$

E lembrando que: $$\underbrace{i\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + w^2\right)}_{\Delta^{-1}} \underbrace{\left(i\int \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{-ip(t-t')}}{p^2 - w^2 + i\epsilon}\right)}_{\Delta_F(t-t')} = \delta(t-t')$$

Fica fácil deduzir que: $$q_{cl}(t,J) = i\int dt'\, \Delta_F(t-t')\, J(t')$$

Assumindo que $J(t) \to 0 \,/\, t \to \pm\infty \Rightarrow \int dt' \longrightarrow \int_{-T}^{T} dt'$ algum número finito, pois fora desta região *J(t) = 0*

Então: $$t \to \infty \Rightarrow q_{cl}(t,J) = e^{-iwt} \underbrace{i\int_{-T}^{T} dt' \frac{e^{iwt'}}{2w} J(t')}_{\text{const.}} = A\, e^{-iwt}$$

$$t \to -\infty \Rightarrow q_{cl}(t,J) = e^{+iwt}\, i\int_{-T}^{T} dt' \frac{e^{-iwt'}}{2w} J(t') = B\, e^{+iwT}$$

Vemos que a prescrição 17.3 (chamada de prescrição de Feynman) é equivalente a resolver 17.1 com as condições de contorno:

$$\boxed{\begin{aligned} q_{cl}(t\to\infty, J) &= e^{-iwt} \\ q_{cl}(t\to-\infty, J) &= e^{iwt} \end{aligned}} \quad \text{(eq. 18.1)}$$

e estas condições exigem que *J(t)* seja limitado no tempo. Além disso, como estas condições não permitem soluções não triviais da equação 15.2, vemos que a integral de trajetória original em *q(t)* está bem definida (com a trajetória clássica satisfazendo 18.1 e a quântica satisfazendo 16.1).

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:

$$S = \underbrace{S[q_{cl}]}_{\boxed{\left.\frac{\delta S}{\delta q}\right|_{q=q_{cl}} = 0}} + \frac{1}{2}\delta q_i S_{ij}\delta q_j + \underbrace{\mathcal{O}(\delta q^3)}$$

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:

$${}_H\langle q', t'|q, t\rangle_H = {}_S\langle q'|e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}}|q\rangle_S = \sum_n\sum_m \langle q'|n\rangle\underbrace{\langle n|e^{-\frac{i\hat{H}(t'-t)}{\hbar}}|m\rangle}_{\delta_{mn}\, e^{-iE_t(t'-t)}}\langle m|q\rangle =$$

$$= \sum_n \langle q'|n\rangle\langle n|q\rangle e^{-\frac{iE_n(t'-t)}{\hbar}} = \sum_n \psi_n(q')\psi_n^*(q)\, e^{-\frac{iE_n(t'-t)}{\hbar}}$$

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

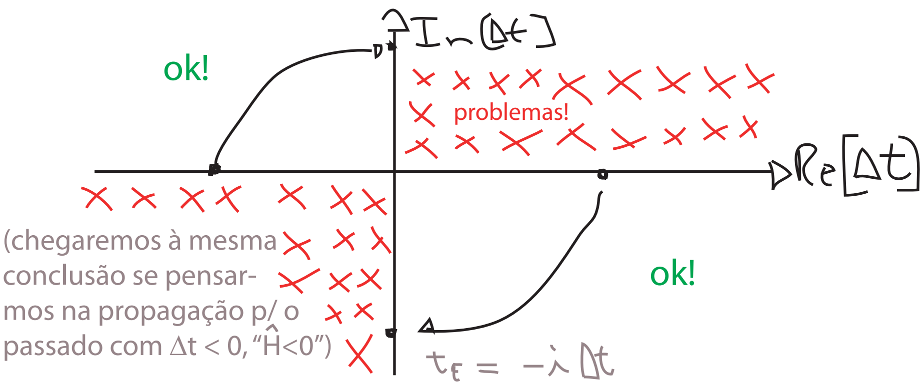
$$\boxed{\Delta t \to -i\, t_E} \quad \text{Rotação de Wick} \qquad \text{(eq. 20.1)}$$

A razão pela qual "rodamos" nesta direção é a seguinte, considere o operador de evolução "para o futuro" (estamos especializando para o caso $\Delta t > 0$):

$$U(t) = \underbrace{e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t}}_{\text{propagação p/ futuro } (\Delta t > 0,\ \text{“}\hat{H}>0\text{”})} = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}Re[\Delta t]}\ \underbrace{e^{\frac{\hat{H}}{\hbar}Im[\Delta t]}}_{\begin{cases} >1 & Im[\Delta t] > 0 \\ <1 & Im[\Delta t] < 0 \end{cases}}$$

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

$$\therefore \quad \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle \leq c\,\langle\psi|\psi\rangle$$



Com esta rotação temos:

$$\boxed{{}_H\langle q', t_E | q, 0\rangle_H = \sum_n \psi_n(q')\,\psi_n^*(q)\, e^{-\frac{t_E E_n}{\hbar}}} \qquad \text{(eq. 20.2)}$$

Euclideano (vou usar τ quando os pontos inicial e final forem iguais)

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

$$\int dq\, |\psi_n(q)|^2 = 1$$

note que o estado inicial e final são iguais e estamos integrando sobre eles também

também temos k = 1 em unidades naturais

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

$$\boxed{\tau = \hbar \beta} \qquad \text{(eq. 20.3)}$$

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 Euclideano.

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 exponente na integral de trajetória fica:

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

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

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

$$\Rightarrow \quad iS[q] = -S_E[q_E]$$

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

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 D_q. Na prática estamos integrando sobre todos os caminhos fechados de comprimento ħβ.

$$\boxed{Z(\beta) = T_R\left\{e^{-\hbar\beta\frac{\hat{H}}{\hbar}}\right\} = \int_{q_E(t_E+\tau) = q_E(t_E)} D_{q_E}\, e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[q_E]}}$$

Fórmula de Feynman-Kac

(eq. 21.1)

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

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

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 indentifica Z como a função de partição:

$$T_R\left[\hat{\rho}_\beta\right] = 1 \longleftrightarrow Z(\beta) = T_R\left[\exp(-\beta\hat{H})\right]$$

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

$$\boxed{\langle \hat{O} \rangle_\beta = Tr(\hat{\rho}_\beta \cdot \hat{O})}$$ (eq. 22.1)

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

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

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

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

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

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

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

Partícula (quântica) isolada em tempo imaginário $\longrightarrow \hat{U}(-i\tau)$

(22.2)

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

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

$$\downarrow t = -it_E$$

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

$$-dS_E^2 = -(dt_E^2 + dq^2) \Longrightarrow$$ distância Euclideana em $\mathbb{R}^{n+1}$

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

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