

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

ANÁLISE DA FORMULAÇÃO FUNCIONAL DA  
MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA\*

Tiago Josué Martins Simões

Dissertação realizada sob a orientação do Dr. Horacio Oscar Girotti, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

\* Trabalho parcialmente financiado pelas seguintes instituições: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP).

Porto Alegre

1980

A meus avōs

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Horacio Oscar Girotti, pela orientação e experiência transmitida;

ã Direção e C.P.G. deste Instituto, pelo incentivo;

ã Acirete, pelo apoio;

ã Maria Cecília do Amaral, pela datilografia;

ã Zuleika, Maria Alice e Ana Catarina, pela eficiência e auxílio;

aos demais funcionários, professores e colegas que de uma forma ou de outra me ajudaram a concluir este trabalho.

Porto Alegre, Fevereiro de 1980.

Tiago Josué Martins Simões

## RESUMO

Estudam-se as regras gerais de correspondência que relacionam quantidades clássicas e quânticas de espaço de fase. Exibe-se o fato que o formalismo funcional não leva a uma representação única para os elementos de matriz da teoria quântica. Usando sistemas físicos simples e a definição da integral funcional pelo método de time-slicing, verifica-se explicitamente a consistência da formulação funcional para uma particular classe de discretizações parametrizadas pela variável real  $\alpha \in [-1/2, +1/2]$ . Ao nível da amplitude de transição, a análise detalhada do mecanismo de cancelamento da dependência de  $\alpha$  é realizada de forma global enquanto que ao nível das funções de Green tal análise é efetuada empregando teoria de perturbações. No caso da definição contínua da integral funcional, demonstra-se que as equações de Schwinger são podem ser apropriadamente formuladas em termos de uma discretização específica. Verifica-se, entretanto, que as correspondentes soluções independem de  $\alpha$ . Enfatiza-se que uma multiplicidade de representações para o propagador não é um efeito peculiar da definição por time-slicing da integral funcional mas uma necessidade do formalismo funcional.



## ABSTRACT

A study is made of the general correspondence rules which relate classical and quantum phase-space quantities. We start by exhibiting that the functional formalism does not lead to a unique representation for the matrix elements of the quantum theory. By using simple physical systems and the time-slicing definition of the path integral, the consistency of the functional approach is explicitly verified for a particular class of discretizations parametrized by the real variable  $\alpha \in [-1/2, +1/2]$ . At the level of the transition amplitude, a detailed analysis of the  $\alpha$ -dependence cancellation mechanism is carried out at global level while for the Green's functions such an analysis is performed in perturbation theory. In the case of the continuous definition of the path integral, it is shown that Schwinger's equations can only be appropriately formulated in terms of a specific discretization. Nevertheless, the corresponding solutions turn out to be  $\alpha$ -independent. We emphasize that a multiplicity of representations for the propagator is not a peculiar effect of the time-slicing definition of the path-integral but rather a necessity of the functional approach.

## Í N D I C E

I - INTRODUÇÃO	1
II - FUNCIONAIS - OPERAÇÕES SOBRE FUNCIONAIS	5
II.1 - Introdução	5
II.2 - Definição de Funcional	7
II.3 - Diferenciação e Derivação Funcional	11
II.4 - Integração Funcional	17
II.4.1 - Integração sobre Funções Reais	17
II.4.2 - Integração sobre Funções Complexas	25
II.4.3 - Mudança de Variáveis na Integral Funcional	27
II.4.4 - Transformada de Fourier e Delta de Dirac Funcionais	35
III - REGRAS CANÔNICAS DE CORRESPONDÊNCIA	38
III.1 - Correspondências Gerais - Propriedades	38
III.2 - Correspondência de Weyl Generalizada de Índice $\alpha$ - Propriedades	69
III.3 - O Problema de Ordenamento	80
IV - FORMULAÇÃO FUNCIONAL DA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA	94
IV.1 - Formulação de Espaço de Configuração	94
IV.2 - Formulação de Espaço de Fase	96
IV.2.1 - Amplitude de Transição	96
IV.2.2 - Funções de Green	102
IV.3 - Unicidade da Formulação Funcional	106

V - UNICIDADE DA FORMULAÇÃO FUNCIONAL	108
V.1 - Unicidade da Amplitude de Transição - Casos Especiais	108
V.1.1 - Partícula Livre	108
V.1.2 - Oscilador Harmônico Simples	113
V.1.3 - Oscilador Harmônico Modificado	120
V.2 - Unicidade das Funções de Green - Casos Especiais	127
V.2.1 - Perturbações à Partícula Livre	127
V.2.2 - Perturbações ao Oscilador Harmônico Simples	144
VI - A DEPENDÊNCIA DA DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SCHWINGER	155
VI.1 - Derivação das Equações de Schwinger	155
VI.2 - Independência da Discretização das Soluções	169
VII - CONCLUSÕES	175
APÊNDICE A - INTEGRAIS GAUSSIANAS	177
APÊNDICE B - ÁLGEBRA DE OPERADORES	179
APÊNDICE C - INTEGRAL QUADRÁTICA - MATRIZES - DETERMINANTES	199
APÊNDICE D - FUNCIONAL GERATRIZ POR AUTOFUNÇÕES	212
APÊNDICE E - DERIVADAS	217
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	230

## I - INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, o formalismo funcional vem despertando interesse crescente em física teórica principalmente pela ampla aplicabilidade e potência deste tipo de técnica. De fato, integrais funcionais são utilizadas em várias áreas da física e podem ser consideradas como uma técnica standard nos dias presentes. O método funcional é o método por excelência no que se refere à quantização de sistemas vinculados<sup>39</sup> a qual inclui, como caso especial, a quantização das teorias de Gauge que, no momento, provêm a melhor descrição das quatro interações fundamentais da natureza. É também o único método amplamente operativo de que se dispõe presentemente em física de Partículas como atestam os desenvolvimentos ligados à aplicação de métodos funcionais semiclássicos em Teoria Quântica de Campos e que formam a chamada teoria de objetos extensos<sup>40</sup> (excitações tipo-vortex, solitons, instantons, merons, etc). A utilização de métodos semiclássicos se prende ao fato de que a formulação funcional é uma formulação "c-number" (para o caso bosônico, e "Grassmann-number" para o caso fermiônico) dada em termos do Lagrangeano ou Hamiltoniano clássicos que permite, por esse motivo, expressar quantidades quanto-mecânicas em termos de quantidades "clássicas" e assim estudar os efeitos, nas quantidades quanto-mecânicas, das várias simetrias e propriedades do correspondente sistema clássico (ou teoria clássica de campos).

Desta forma, pela atual importância teórica da formulação funcional, acima resumida, e com vistas a um posterior estu

do da quantização de sistemas relativísticos com vínculos por meio deste tratamento, resulta fundamental uma análise detalhada da consistência do mesmo, já a nível não-relativístico.

O fato que os elementos de matriz, correspondentes a um sistema físico especificado por um operador Hamiltoniano  $H$ , não possuem uma representação única em termos de integrais funcionais canônicas já foi reconhecido\*. Por exemplo, para definir a integral funcional de espaço de fase através do método de time-slicing<sup>6b,d;25</sup> deve-se escolher uma particular discretização, dentre o número infinito de discretizações a nossa disposição<sup>16c</sup>.

Esta ambiguidade, que nada mais é que o "inverso" da ambiguidade na escolha de um ordenamento de operadores na passagem da mecânica clássica à quântica, não implica por si só a existência de uma doença na formulação funcional se formos capazes de provar que todos os elementos de matriz da teoria adquirem um valor único a despeito de não serem unicamente representados em termos de integrais funcionais.

A questão é então verificar se o formalismo funcional canônico apresenta inconsistências ou se a mencionada "falta de unicidade" é uma flexibilidade do formalismo sem conseqüências adicionais. Nesta dissertação, tratamos da elucidação desta questão.

No capítulo II, fazemos uma revisão de cálculo funcional para facilitar a compreensão dos capítulos subsequentes.

O capítulo III consiste de um estudo das regras gerais de correspondência de Cohen-Agarwal-Wolf<sup>16</sup> entre quantidades de

---

\* Ver, por exemplo, as referências 16, 17c, 18-20, 26a e 32.

espaço de fase. Demonstramos as principais propriedades dessas regras e analisamos o problema de ordenamento de operadores.

No capítulo IV, e com base nos resultados do capítulo anterior, definimos a integral funcional por time-slicing empregando as discretizações gerais de Cohen-Agarwal-Wolf. Mostramos, por construção explícita, que o formalismo funcional provê um número infinito de representações por integrais funcionais canônicas para os elementos de matriz da teoria quântica. Apresentamos o problema dentro da classe de discretizações que denominamos correspondência de Weyl generalizada de índice  $\alpha$ . Como se mostra, as distintas representações por integral funcional podem ser parametrizadas, neste caso, por uma variável real  $\alpha$  definida de  $-1/2$  a  $+1/2$ . Nosso propósito central consiste em entender o mecanismo de cancelamento dos termos dependentes de  $\alpha$  que aparecem como consequência dessa escolha.

Para ver como o mencionado mecanismo opera de forma global, tiramos proveito, na seção V.1, de um modelo exatamente solúvel. A esse respeito frisamos que, até o momento, não se dispõe de provas gerais da unicidade da formulação funcional. Todas as provas parciais (i.e., ligadas a algum sistema físico específico) de independência de  $\alpha$  tem sido invariavelmente conduzidas em teoria de perturbações<sup>22,34</sup>. Dessa forma é que tratamos as funções de Green, na seção V.2, completando nossa análise. Trabalhamos sistematicamente no discreto, só tomando o limite contínuo ao final dos cálculos. Com isso, retemos inteiramente o espírito do método de time-slicing<sup>6b,d;25</sup>.

A definição por time-slicing da integral funcional foi

considerada, por alguns autores, como a fonte de todas as ambiguidades do formalismo funcional<sup>9a,e,f</sup>. No capítulo VI, demonstramos que definições alternativas<sup>9</sup> para a integral funcional canônica também levam a uma representação não-única para o propagador<sup>41,\*</sup>. Isto é uma consequência do fato que, como se demonstra, o esquema diferencial funcional de Schwinger<sup>42</sup> só pode ser apropriadamente formulado depois de especificar uma discretização. Dado que a integral funcional canônica de Feynman<sup>6</sup> pode ser vista como a transformada de Fourier funcional que resolve as equações diferenciais de Schwinger, a dependência estrutural do formalismo funcional em relação à discretização segue de considerações teóricas gerais.

O capítulo VII contém as conclusões. Onde foi possível, para evitar quebras de seqüência e unidade do texto, apresentamos as demonstrações nos Apêndices.

---

\* A demonstração análoga, para o formalismo operatorial, foi dada por Langouche et al<sup>34c</sup>.



## II - FUNCIONAIS - OPERAÇÕES SOBRE FUNCIONAIS

### II.1 - Introdução

O desenvolvimento puramente matemático da teoria de funcionais precedeu em muitos anos sua utilização na Física. O início desse desenvolvimento remonta ao século passado com os trabalhos de Volterra em 1887 sendo que a nomenclatura funcional apareceu mais tarde, criada por Hadamard. Os princípios básicos do cálculo funcional, bem como uma extensa bibliografia sobre teoria de funcionais até 1930, podem ser encontrados no livro de Volterra<sup>1</sup>. Para o estágio atual dessa teoria e desenvolvimentos correlatos referimos, por exemplo, às obras de Kolmogorov-Fomin<sup>2</sup> e Gelfand-Vilenkin-Shilov<sup>3</sup>.

A introdução do cálculo funcional na descrição de sistemas físicos foi feita por Volterra em 1914 ao propor o uso de uma formulação funcional para a dinâmica de sistemas de muitas partículas e meios contínuos<sup>1,4</sup>.

A integração funcional foi introduzida na física teórica independentemente pelo trabalho de Wiener<sup>5</sup> sobre o movimento browniano em 1923 e pelo formalismo de Feynman da física quântica<sup>6</sup> em 1942. Às pioneiras, seguiram inúmeras obras que podem, em linhas gerais, ser divididas em dois tipos: umas cujo conteúdo central consistiu em problemas especificamente matemáticos de rigorização, generalização e extensão das técnicas funcionais\*; ou

---

\* Ver 9c e bibliografia, e.g., refs. [6] (oito trabalhos) e [10] (trinta trabalhos abrangendo o período de 1960 a 1974).



tras que se caracterizaram pela aplicação e extensão de técnicas funcionais à Física<sup>7</sup>. A integral de Wiener, matematicamente rigorosa<sup>4,8</sup> e bem conhecida, é um grande exemplo de integração funcional. A integral de Feynman (ampla e proveitosamente utilizada em mecânica quântica, mecânica estatística e teoria quântica de campos), em que pese sua similaridade com a integral de Wiener, não pode ser definida da mesma forma porque não pode ser construída desde uma medida complexa acotada<sup>9c</sup>. De fato, a definição de Feynman da integral funcional não é matematicamente rigorosa<sup>9</sup> apesar de seu forte apelo intuitivo, heurístico e formal. Daí haver surgido a impressão de que os resultados obtidos por integração funcional são poderiam ser considerados heurísticos, exigindo no futuro uma "prova rigorosa". Esta impressão resultou falsa no caso geral<sup>10</sup>. Em Física, a potência das técnicas de integração funcional deve-se fundamentalmente ao fato de que é possível realizar manipulações formais segundo poucas e simples regras sem ser forçado, a cada passo, a voltar à definição explícita da integração funcional<sup>11</sup>. Em particular, Slavnov<sup>10a</sup> mostrou que todos os resultados obtidos por integração funcional no contexto de teoria de perturbações em Teoria Quântica de Campos são completamente equivalentes e tão rigorosos quanto a técnica diagramática ordinária ou, de outra forma, que todas as propriedades de uma integral de Feynman que são usadas na prática em teoria de perturbações seguem diretamente da definição de uma integral quasi-gaussiana e podem ser justificados independentemente da existência de uma medida integral de Feynman. A axiomatização da noção de integração gaussiana que torna a integral funcional pelo menos tão

rigorosa quanto outros métodos da teoria quântica de campos é dada em 10.

Tendo em vista as considerações acima e os objetivos deste trabalho referidos na INTRODUÇÃO, utilizaremos principalmente a definição de Feynman ou de time-slicing.

Neste capítulo, estabelecemos certas noções matemáticas necessárias para auxiliar a compreensão dos capítulos subsequentes, especialmente dos caps. IV e VI. Começamos com a definição de funcional na seção II.2, passamos às noções de diferenciação e derivação funcionais na seção II.3 e concluimos com a noção de integração funcional na seção II.4. As relações entre as diferentes definições da integral funcional serão discutidas ao longo do texto.

## II.2 - Definição de Funcional

Inicialmente, vejamos a definição geral ordinária de função. Por função escalar, vetorial, operatorial, ... entende-se qualquer mapeamento  $f$  desde um espaço de pontos de dimensão finita até um espaço de números, vetores, operadores, ..., respectivamente. Exemplificando, para os espaços  $\mathbb{R}$  dos números reais e  $\mathbb{R}^n$  das  $n$ -uplas reais, denota-se respectivamente

$$f : x \longrightarrow f(x) \tag{2.1}$$

$$f : (x_1, \dots, x_n) \longrightarrow f(x_1, \dots, x_n)$$

Por simplicidade, considerando o espaço  $R$ , definimos por funcional um mapeamento  $F$  cujo domínio de definição é um da do conjunto de funções  $f(x)$ ,  $\forall x \in [a, b]$ , o qual faz corresponder a cada função  $f(x)$  do conjunto um número, perfeitamente determinado,  $F[f]$ . Denota-se

$$F : f(x) \longrightarrow F[f] \quad (2.2)$$

Vemos que a distinção entre as noções de função e fun cional reside nos espaços sobre os quais são definidos os respec<sub>ti</sub>vos mapeamentos. A diferença essencial entre essas noções é que, na segunda, o conjunto de índices que caracterizam a dimensão do argumento, o ponto  $f$ , não é mais finito como  $1, \dots, n$  mas infi<sub>ni</sub>to

$$a \leq x \leq b$$

de modo que, no cálculo funcional, temos variáveis de dimensão infinita.

O estudo de espaços funcionais, i.e., dos agregados cu<sub>jos</sub> elementos são funções, é do maior interesse para um entendimento preciso do conceito de funcional visto que um funcional  $F[f]$ , da função  $f(x)$ , estará definido em geral somente quando  $f(x)$  varie dentro de um certo espaço de funções bem determinado. Assim, por exemplo, o funcional

$$F[f] = \int_a^b f(x) dx \quad (2.3)$$

está definido somente para o espaço de funções  $f(x)$  que são inte<sub>g</sub>ráveis no intervalo  $[a,b]$ ; o funcional

$$F[f] = \int_a^b g\left(x, f, \frac{df}{dx}, \frac{d^2f}{dx^2}, \dots, \frac{d^n f}{dx^n}\right) dx \quad (2.4)$$

está definido somente para aquelas funções cujas derivadas exist<sub>em</sub> até a ordem  $n$ -ésima, e para

$$g(x) = g\left(x, f(x), f'(x), \dots, f^{(n)}(x)\right)$$

integrável no intervalo  $[a,b]$ ; etc.

Encerramos a seção definindo funcionais particularmente interessantes: os funcionais lineares (ou de primeiro grau) e os funcionais de grau superior ao primeiro.

Funcionais lineares são em geral da forma

$$F_1[g] = \int_a^b \kappa(t) g(t) dt \quad (2.5)$$

onde  $\kappa(t)$  é uma dada função e  $g(t)$  é a função variável. Estes funcionais derivam-se de formas lineares de  $n$  variáveis,

$$P_1(g_i) = \sum_{i=1}^n \kappa_i g_i$$

aplicando-se o método usual de passar de um número finito a um número infinito de variáveis. Colocando

$$g(t) = \mu g_1(t) + \lambda g_2(t) \quad (\mu, \lambda \text{ números}) \quad (2.6)$$

em (2.5), obtemos

$$F_1[g] = \mu F_1[g_1] + \lambda F_1[g_2] \quad (2.7)$$

daí o nome funcional linear.

Analogamente à passagem de formas lineares em  $\underline{n}$  variáveis a funcionais lineares, podemos passar de funções homogêneas do segundo grau em  $\underline{n}$  variáveis

$$P_2 = \sum_{r,s=1}^n K_{rs} g_r g_s \quad (2.8)$$

aos funcionais  $F_2[g]$ , chamados funcionais homogêneos regulares do segundo grau, dados pela expressão geral

$$F_2[g] = \int_a^b \int_a^b K(x,y) g(x) g(y) dx dy \quad (2.9)$$

De forma mais ampla, chamamos funcionais homogêneos regulares de grau  $\underline{n}$  (extensão de formas de grau  $\underline{n}$  ao caso de um número infinito de variáveis) aos funcionais dados pela expressão geral

$$F_n[g] = \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b K(x_1, x_2, \dots, x_n) g(x_1) g(x_2) \dots g(x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (2.10)$$

onde, por razões que se tornarão claras mais adiante, nos restringiremos aos casos em que o núcleo  $k(x_1, \dots, x_n)$  é simétrico em relação às  $\underline{n}$  variáveis. Nosso próximo passo é a introdução da diferenciação funcional.

### II.3 - Diferenciação e Derivação Funcionais

Dadas as definições e exemplos acima, trataremos agora do estabelecimento do cálculo de funcionais geral, análogo ao cálculo ordinário para operações sobre funções. Começamos pela operação de diferenciação. Para funções de  $n$  variáveis  $g(f_1, f_2, \dots, f_n)$ , o diferencial total  $dg$  é definido por

$$dg = \sum_{i=1}^n \frac{\partial g}{\partial f_i} df_i \quad (2.11)$$

sendo que  $dg$  tem duas propriedades fundamentais:

- (i) é uma forma linear das  $n$  quantidades  $df_i$ ;
- (ii) se colocarmos  $df_i = \epsilon \eta_i$  e tomarmos  $\epsilon$  como o infinitesimal principal,  $dg$  difere por infinitésimos de ordem mais alta que a primeira do incremento de  $g$  correspondente aos incrementos  $\epsilon \eta_i$  das variáveis.

Passando do caso de funções de  $n$  variáveis ao caso de funcionais  $F[f]$ ,  $\forall f(x)$  definida no intervalo  $[a, b]$ , damos a  $f(x)$  um incremento  $\delta f(x) = \epsilon \eta(x)$  e tentamos definir uma quantidade  $\delta F$ , correspondente a este incremento, a qual deverá ter as seguintes duas propriedades:

- (i) é um funcional linear de  $\delta f(x) = \epsilon \eta(x)$ ;
- (ii) difere por infinitésimos de ordem mais alta que  $\epsilon$  do incremento  $\Delta F$  do funcional, correspondente ao incremento  $\delta f(x)$  da função variável.

Isto é certamente possível (Volterra, 1887<sup>1</sup>) quando o funcional é derivável (tem uma derivada primeira) em cada ponto

do intervalo  $[a, b]$ . Para definir a primeira derivada num ponto  $x_0$  de um funcional  $F$ , seguiremos um método análogo ao usado para as funções  $g(f_1, f_2, \dots, f_n)$  de  $n$  variáveis. Para estas funções  $\frac{\partial g}{\partial f_i}$  é definido como o limite, quando ele existe, da razão  $\frac{\Delta_i g}{h}$ , onde  $h$  é um incremento da variável  $f_i$  somente, e  $\Delta_i g$  é o incremento de  $g$  correspondente a esse incremento  $h$ . Para os funcionais, daremos a  $f(x)$  um incremento  $\delta f(x) = \omega(x)$  que não muda de sinal e tal que  $|\omega(x)| < \epsilon$ ,  $\omega(x) = 0$  fora de um intervalo  $[m, n]$  de  $[a, b]$ , de amplitude  $h$ , contendo  $x_0$  em seu interior. Iremos supor que (ver figura 1):

- (i) a razão  $\frac{\Delta F}{\epsilon h}$  é sempre menor que um número finito  $M$ ;
- (ii) colocando  $\Omega = \int_m^n \omega(x) dx$ , existe um limite finito e determinado de  $\frac{\Delta F}{\Omega}$  quando  $\epsilon$  e  $h$  tendem simultaneamente a 0, sujeitos a condição que o intervalo  $[m, n]$  sempre contenha o ponto  $x_0$  em seu interior;
- (iii) a razão  $\frac{\Delta F}{\Omega}$  tende a seu limite uniformemente em relação a todas as possíveis funções  $f(x)$  e a todos os pontos  $x_0$ .

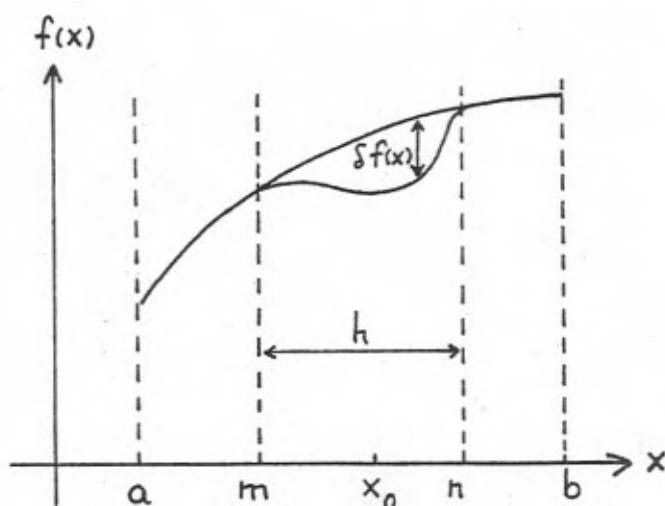


Figura 1.



O limite desta razão dependerá em geral da função  $f(x)$ ; será portanto um funcional de  $f(x)$ , dependerá também do parâmetro  $x_0$  e será função de  $x_0$ . Denotamo-lo

$$F' [f | x_0] \quad \text{ou} \quad \frac{\delta F[f]}{\delta f(x_0)} \quad (2.12)$$

que chamamos derivada primeira do funcional  $F$  em relação à função  $f(x)$  no ponto  $x_0$ .

Observação: a notação  $F[f|x]$  significa que tudo o que está à esquerda da barra é dependência de função e o que está à direita é dependência funcional usual.

Assim como, para as funções  $g(f_1, f_2, \dots, f_n)$  de  $n$  variáveis, temos  $n$  derivadas parciais  $\frac{\partial g}{\partial f_i}$  dependendo do índice descontínuo  $i$  e das  $n$  variáveis; para funcionais temos um número infinito de derivadas dependendo da variável  $f(x)$  e também de todos os possíveis valores do parâmetro contínuo  $x_0$  no intervalo  $[a, b]$ . De acordo com o exposto acima, escrevemos

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[f]}{\delta f(x_0)} &\equiv \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\Delta F}{\epsilon h} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\Delta F}{\Omega} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\Delta F}{\int_m^n w(x) dx} \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde

$$\Delta F \equiv F[f + \delta f] - F[f] \quad (2.14)$$



Além disso, de forma análoga ao caso das funções deriváveis cujo diferencial total é dado pela fórmula (2.11), para funcionais  $F[f]$  que possuem uma derivada  $F'[f|x_0]$ , contínua em relação a  $x_0$  e a  $f(x)$ <sup>1</sup>, é possível construir uma quantidade

$$\delta F = \int_a^b \frac{\delta F[f]}{\delta f(x')} \delta f(x') dx' \quad (2.15)$$

que satisfaz precisamente as duas condições estabelecidas acima.

Da definição implícita (2.15) segue imediatamente que a derivação funcional é uma operação linear,

$$\delta / \delta f(x) [c_1 F_1 + c_2 F_2] = c_1 [\delta F_1 / \delta f(x)] + c_2 [\delta F_2 / \delta f(x)] \quad (2.16)$$

Consideremos o seguinte funcional linear contínuo

$$F[f|x] = \int_a^b \kappa(x, y) f(y) dy \quad (2.17)$$

Aplicando a definição (2.13) de derivação funcional, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[f|x]}{\delta f(x_0)} &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\Delta F}{\Omega} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{F[f + \delta f|x] - F[f|x]}{\int_m^n \delta f(y) dy} \\ &= \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\int_a^b \kappa(x, y) \delta f(y) dy}{\int_m^n \delta f(y) dy} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \frac{\bar{\kappa}(x, x_0) \int_m^n \delta f(y) dy}{\int_m^n \delta f(y) dy} \\ &= \bar{\kappa}(x, x_0) \end{aligned} \quad (2.18)$$

A expressão

$$f(x) = \int_a^b \delta(x-y) f(y) dy \quad (2.19)$$

constitui uma maneira de expressar  $f(x)$  como funcional linear contínuo de si mesma. Comparando (2.17) e (2.19) concluímos, devido ao resultado (2.18), que

$$\frac{\delta f(x)}{\delta f(x_0)} = \delta(x-x_0) \quad (2.20)$$

Pode-se provar que as operações de derivação funcional e ordinária comutam.

Outra noção básica é a de funcional de funcional. Seja  $g[f|x']$  um funcional de  $f(x)$  e uma função do ponto  $x'$ . Considerando o funcional  $F[g[f|x']]$ , usando (2.15), podemos escrever

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta g[f|x'']} \delta g[f|x''] dx''$$

que, ainda por (2.15), pode ser escrito

$$\delta F = \iint \frac{\delta F}{\delta g[f|x'']} \frac{\delta g[f|x'']}{\delta f(x''')} \delta f(x''') dx'' dx'''$$

e de onde obtemos ( $x'' \rightarrow x'$ )

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = \int \frac{\delta F}{\delta g[f|x']} \frac{\delta g[f|x']}{\delta f(x)} dx' \quad (2.21)$$

que é a regra da cadeia funcional. Daí vemos que a derivação funcional obedece a regra do produto

$$\delta/\delta f(x) [ F_1 F_2 ] = [ \delta F_1 / \delta f(x) ] F_2 + F_1 [ \delta F_2 / \delta f(x) ] \quad (2.22)$$

A derivação funcional de ordem mais alta é definida por iteração de (2.15). Assim, as derivadas funcionais de 2ª ordem de  $F[f]$  são dadas por

$$\frac{\delta^2 F[f]}{\delta f(x) \delta f(y)} = F''[f|x, y] \quad (2.23)$$

A generalização da expansão de Taylor para o caso funcional é a seguinte

$$F[f] = F[\bar{f}] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_a^b dx_1 \dots \int_a^b dx_n \frac{\delta^n F[f]}{\delta f(x_1) \dots \delta f(x_n)} \Big|_{f=\bar{f}} [f(x_1) - \bar{f}(x_1)] \dots [f(x_n) - \bar{f}(x_n)] \quad (2.24)$$

no entorno de uma certa função  $\bar{f} = \bar{f}(x)$ . Esta é a chamada série de Taylor funcional ou expansão de Volterra.

## II.4 - Integração Funcional

### II.4.1 - Integração sobre funções reais

A integração funcional é um método para definir e manipular integrais sobre espaços de funções tais como os indicados na seção II.2, ou seja, sobre espaços de dimensão infinita. A mais simples das definições de integração funcional é aquela dada por Albeverio-H. Krohn<sup>9c</sup> a qual consiste em acrescentar à integral funcional um espaço de Hilbert. Consideremos a integral funcional sobre funções reais

$$I = \int [Df] F[f] \quad (2.25)$$

a qual deverá ser calculada sobre um conjunto de funções  $f(x) \in L_2$ ,  $x \in [a, b]$ . Seja  $\{u_i(x); i = 1, 2, \dots\}$  um conjunto ortonormal completo de autofunções de um certo operador linear acotado  $0$  definido em  $L_2$ . Logo,

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(x) \quad (2.26)$$

Considera-se então o conjunto de coeficientes  $c_i$  como as variáveis independentes de integração. Em geral, para garantir a convergência da série do lado direito de (2.26) no intervalo fechado  $[a, b]$ , impõe-se condições de contorno homogêneas sobre  $f(x)$  para  $\{f(x)\} \in L_2$ ,  $a \leq x \leq b$ , na forma

$$B_1 f = B_2 f = 0 \quad (2.27)$$

onde  $B_1 f$  e  $B_2 f$  são combinações lineares apropriadas<sup>12</sup> de  $f(x)$  e suas derivadas, nos pontos extremos  $\underline{a}$  e  $\underline{b}$ . Assim, as autofunções  $\{u_i(x); i = 1, 2, \dots\}$  satisfazem

$$B_1 u_i = B_2 u_i = 0 \quad (2.28)$$

e a série converge no intervalo fechado  $[a, b]$ . Por outro lado, ortonormalidade implica

$$\int_a^b dx u_i(x) u_j(x) = \delta_{ij} \quad (2.29)$$

e completicidade exige

$$\sum_{i=1}^{\infty} u_i(x) u_i(x') = \delta(x-x') \quad (2.30)$$

Em (2.26), se nos restringimos aos  $\underline{n}$  primeiros termos da expansão, o funcional  $F[f]$  torna-se uma função ordinária  $F(c_1, \dots, c_n)$  de  $\underline{n}$  variáveis; a integral funcional  $I$  é então definida como o limite, para  $n \rightarrow \infty$ , da integral múltipla desta função sobre as variáveis  $c_1, \dots, c_n$ :

$$\int [Df] F[f] = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dc_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dc_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dc_n F(c_1, c_2, \dots, c_n) \quad (2.31)$$

À proporção que se varre todos os possíveis valores dos  $c_i$ , na "medida" do lado direito de (2.31), varre-se toda a coleção de funções  $f(x)$  que satisfazem as condições de contorno. Daí a correspondente notação  $[Df]$  da medida funcional. A existência do li

mite acima, em forma ampla, é um problema matemático aberto. Para tal questão referimos a 9a,b (nesses trabalhos a integração funcional é definida em termos de funcionais "cilíndricos" e "medidas cilíndricas", as chamadas promeasures). Entretanto, podemos exibir um caso onde o limite existe. É o caso do funcional gaussiano

$$F[f] = e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{m^2} \right) \int_a^b dx f^2(x)} \quad (2.32)$$

cuja integral é

$$I_1 = \int [Df] e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{m^2} \right) \int_a^b dx f^2(x)} \quad (2.33)$$

Com a mudança de variáveis  $f = \frac{mg}{\sqrt{2\pi}}$ ,  $I_1$  pode também ser escrita como

$$I_1 = \int \left[ \frac{Dmg}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx g^2(x)} \quad (2.34)$$

Usando a expansão em autofunções de  $f(x)$  e pelas propriedades (2.29) e (2.30), temos que

$$\int_a^b dx f^2(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2$$

Logo, (2.33) fica

$$I_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dc_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dc_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dc_n e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{m^2} \right) \sum_{i=1}^n c_i^2} \quad (2.35)$$

Mudando variáveis de integração  $a_i = \frac{\sqrt{2\pi}}{m} c_i$ ,  $dc_i = \frac{m}{\sqrt{2\pi}} da_i$ ; esta expressão se reduz a

$$I_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} (m)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_2}{\sqrt{2\pi}} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{da_n}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i^2}$$

De acordo ao resultado tabelado

$$\int_{-\infty}^{+\infty} da e^{-\frac{1}{2} a^2} = \sqrt{2\pi} \quad (2.36)$$

obtemos então

$$I_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} (m)^n = \begin{cases} \infty & \text{se } m > 1 \\ 1 & \text{se } m = 1 \\ 0 & \text{se } m < 1 \end{cases} \quad (2.37)$$

Observe-se que somente para  $m = 1$  se obtém um resultado finito e diferente de zero. Portanto, da expressão (2.34) conclui-se que

$$I_1 = \int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f(x)^2} = 1 \quad (2.38)$$

onde a medida funcional  $\bar{e}$  é definida por

$$\left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] \equiv \prod_{i=1}^n \frac{dc_i}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.39)$$

Em geral, constata-se que

$$\begin{aligned} \int [Df] e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m}\right) \int_a^b dx f^2} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dc_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dc_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dc_n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m}\right) \sum_{i=1}^n c_i^2} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} (\sqrt{m})^n \int_{-\infty}^{+\infty} dc_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dc_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dc_n e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n c_i^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} (\sqrt{2\pi m})^n \implies \\ I_2 &= \int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi m}} \right] e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m}\right) \int_a^b dx f^2} = 1 \end{aligned} \quad (2.40)$$

sendo que

$$\left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi m}} \right] = \prod_{i=1}^n \frac{dc_i}{\sqrt{2\pi m}} \quad (2.41)$$

Podemos derivar fórmulas úteis, a partir do resultado (2.38), se adicionamos as seguintes hipóteses<sup>13</sup>:

(i) a integração funcional é translacionalmente invariante,

$$\int [Df] F[f] = \int [Df] F[f+g]$$

onde  $g(x)$  é tal que  $f(x) + g(x)$  está na mesma coleção que  $f(x)$ .

(ii) as integrais funcionais dependem linearmente do integrando de modo tal que podemos usar as regras de diferenciação e integração do cálculo ordinário (e também do cálculo funcional) sob o símbolo de integração funcional.



A partir de (i) e do resultado (2.38), obtemos

$$\int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx [f(x) + g(x)]^2} = 1 \quad \therefore$$

$$\int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f^2(x) - \int_a^b dx f(x) g(x)} = e^{\frac{1}{2} \int_a^b dx g^2(x)} \quad (2.42)$$

Como (2.42) é uma identidade em  $g(x)$ , podemos substituir  $g(x)$  por  $-ig(x)$  e obter

$$\int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f^2(x) + i \int_a^b dx f(x) g(x)} = e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx g^2(x)} \quad (2.43)$$

A seguir calculamos

$$I_3 = \int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] F[f] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f^2(x)}$$

Começamos reescrevendo  $I_3$  da seguinte maneira:

$$I_3 = \int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] F[f] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f^2(x) + i \int_a^b dx f(x) g(x)} \Big|_{g(x)=0} \quad (2.44)$$

Por hipótese,  $F[f]$  é um funcional analítico  $\forall f \in \{f(x)\}$ , onde  $\{f(x)\}$  é a coleção de funções reais sobre as quais se efetua a integral funcional. Logo, a expansão de  $F[f]$  em série de Maclaurin funcional (ver (2.24)) nos conduz a

$$F[f] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_a^b dx_1 \int_a^b dx_2 \dots \int_a^b dx_n \frac{\delta^n F[f]}{\delta f(x_1) \delta f(x_2) \dots \delta f(x_n)} \Big|_{f=0} f(x_1) f(x_2) \dots f(x_n) \quad (2.45)$$

Levando (2.45) em (2.44),

$$I_3 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_a^b dx_1 \dots \int_a^b dx_n \frac{\delta^n F[f]}{\delta f(x_1) \dots \delta f(x_n)} \bigg|_{f=0} \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] f(x_1) \dots f(x_n) e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f(x)^2 + i \int_a^b dx f(x) g(x)} \bigg|_{g(x)=0},$$

ou seja,

$$I_3 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_a^b dx_1 \dots \int_a^b dx_n \frac{\delta^n F[f]}{\delta f(x_1) \dots \delta f(x_n)} \bigg|_{f=0} \frac{1}{i^n} \frac{\delta^n}{\delta g(x_1) \dots \delta g(x_n)} \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f(x)^2 + i \int_a^b dx f(x) g(x)} \bigg|_{g(x)=0}.$$

Depois de usar (2.43) e (2.45), obtemos

$$I_3 = \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi}} \right] F[f] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx f(x)^2} = F \left[ \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta g} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx g(x)^2} \bigg|_{g(x)=0}. \quad (2.46)$$

As expressões obtidas até aqui constituem resultados da integral funcional de Wiener, ou seja, da integração sobre funcionais convergentes e com medida funcional real. Consideremos agora a integral funcional  $I_4$  para  $f(x)$  real e tal que  $B_1 f = B_2 f = 0$ ,

$$I_4 = \int \left[ \frac{Df}{\sqrt{2\pi i k}} \right] e^{\frac{i}{2k} \int_a^b dx f(x)^2}. \quad (2.47)$$

De acordo com a definição da integral funcional,

$$I_4 = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dc_1}{\sqrt{2\pi i k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dc_2}{\sqrt{2\pi i k}} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dc_n}{\sqrt{2\pi i k}} e^{\frac{i}{2k} \sum_{j=1}^n c_j^2}. \quad (2.48)$$

Ver as refs. indicadas na nota de rodapé da seção II.1.

$$\left[ \frac{D\alpha}{\sqrt{2\pi}} \right] \left[ \frac{D\beta}{\sqrt{2\pi}} \right] \equiv \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi}} \right], \quad (2.54b)$$

$$\begin{aligned}
 & \int \left[ \frac{D\alpha}{\sqrt{2\pi}} \right] \left[ \frac{D\beta}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx \alpha^2(x) - \frac{1}{2} \int_a^b dx \beta^2(x) + i \int_a^b dx \alpha(x) \gamma(x) + i \int_a^b dx \beta(x) \delta(x)} \\
 &= e^{-\frac{1}{2} \int_a^b dx \gamma^2(x) - \frac{1}{2} \int_a^b dx \delta^2(x)} \quad (2.56)
 \end{aligned}$$

Então, colocando

$$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\gamma(x) + i\delta(x)] \quad , \quad \chi^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\gamma(x) - i\delta(x)] \quad , \quad (2.57)$$

obtemos o análogo de (2.43) para funcionais de funções complexas

$$\int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi}} \right] \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi}} \right] e^{-\int_a^b dx \phi^* \phi + i \int_a^b dx \chi^* \phi + i \int_a^b dx \phi^* \chi - \int_a^b dx \chi^* \chi} = e \quad (2.58)$$

Naturalmente, o análogo de (2.46) é

$$I_7 = \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi}} \right] \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi}} \right] F[\phi^*, \phi] e^{-\int_a^b dx \phi^* \phi - \int_a^b dx \chi^* \chi} \Big|_{\chi=\chi^*=0} = F\left[ \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta\chi}, \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta\chi^*} \right] e \quad (2.59)$$

Da mesma forma, a extensão de (2.50) é a seguinte

$$I_8 = \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \kappa}} \right] \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \kappa}} \right] e^{\frac{i}{\kappa} \int_a^b dx \phi^* \phi} = 1 \quad (2.60)$$

e a de (2.52)

$$I_9 = \left( \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \phi \phi^*} F[\phi^*, \phi] = F \left[ \frac{\hbar \delta}{i \delta \chi}, \frac{\hbar \delta}{i \delta \chi^*} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \chi \chi^*} \Bigg|_{\chi = \chi^* = 0} \right) \quad (2.61)$$

### II.4.3 - Mudança de variáveis na integral funcional

Seja a integral funcional

$$I_{10} = \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi(x) K(x, y) \phi(y)} \quad (2.62)$$

a qual é efetuada sobre a coleção de funções reais  $\{\phi(x)\}$  tais que satisfazem (2.27), isto é

$$B_1 \phi = B_2 \phi = 0 \quad .$$

O núcleo  $K(x, y)$  é, por hipótese, um núcleo simétrico e real,

$$K(x, y) = K(y, x) \quad . \quad (2.63)$$

Nota: A simetria (2.63) garante a existência de autovalores reais e autofunções ortogonais para o núcleo  $K(x, y)$ <sup>12b</sup>.

Consideremos o conjunto de autofunções  $\{u_j(x)\}$  do operador  $K(x, y)$  as quais são determinadas através das condições de contorno (2.28),  $B_1 u_j = B_2 u_j = 0$ ,  $j = 1, 2, \dots$ . Expandindo  $\phi(x)$  em termos das autofunções do operador  $K$  (método de autofunções), i.e.,

$$I_{10} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \right) \left( \prod_{j=1}^n \frac{a_{0j}}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right) e^{-\sum_{j=1}^n \lambda_j} = [\det K]^{-1/2},$$

usando o resultado (2.50). Portanto,

$$I_{10} = \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi(x) K(x, y) \phi(y)} = [\det K]^{-1/2} \quad (2.68)$$

É claro que, para que a mudança de variáveis (2.67) seja própria, devemos ter  $\lambda_j > 0$  ( $j = 1, 2, \dots$ ). De modo que o resultado (2.68) é válido se todos os autovalores do operador  $K$  são positivos.

Calculemos

$$I_{11} = \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi(x) K(x,y) \phi(y) + \frac{i}{\hbar} \int_a^b dx J(x) \phi(x)}, \quad (2.69)$$

onde  $K$  é um operador hermitiano com todos seus autovalores positivos. Usando o desenvolvimento (2.64) e

$$J(x) = \sum_{j=1}^{\infty} A_j u_j(x), \quad (2.70)$$

a definição de integral funcional nos conduz a

$$I_{11} = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \prod_{j=1}^n \frac{dc_j}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^n \lambda_j c_j^2 + \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n A_j c_j}.$$

Mudando variáveis, agora na forma

$$c_j = \frac{B_j}{\sqrt{\lambda_j}} - \frac{A_j}{\lambda_j} \quad \text{com} \quad dc_j = \frac{dB_j}{\sqrt{\lambda_j}} \quad (2.71)$$

e tal que

$$\frac{1}{2} \lambda_j c_j^2 + A_j c_j = \frac{1}{2} B_j^2 - \frac{1}{2} \frac{A_j^2}{\lambda_j},$$

teremos

$$I_{11} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \right) e^{-\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^n \frac{A_j^2}{\lambda_j}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \prod_{j=1}^n \frac{dB_j}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right) e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^n B_j^2} .$$

Portanto,

$$I_{11} = [\det K]^{-1/2} e^{-\frac{i}{2\hbar} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{A_j^2}{\lambda_j}} . \quad (2.72)$$

Por outro lado, podemos reexpressar  $A_j$  em termos da corrente  $J(x)$ . Desde (2.70) segue que

$$A_j = \int_a^b J(x) u_j(x) dx ,$$

logo,

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{A_j^2}{\lambda_j} = \int_a^b dx \int_a^b dx' J(x) \left( \sum_{j=1}^{\infty} \frac{u_j(x) u_j(x')}{\lambda_j} \right) J(x') . \quad (2.73)$$

Em (2.73), o termo entre parênteses é a resolução espectral da função de Green do operador  $K$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{u_j(x) u_j(x')}{\lambda_j} = \Delta_F(x, x') \quad (2.74)$$

onde  $\Delta_F(x, x')$  é tal que  $\int_a^b dy K(x, y) \Delta_F(y, x') = \delta(x - x')$  .

Com isso, obtemos finalmente

$$\begin{aligned}
 I_{11} &= \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi(x) K(x,y) \phi(y) + \frac{i}{\hbar} \int_a^b dx J(x) \phi(x)} \\
 &= [\det K]^{-1/2} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dx' J(x) \Delta_F(x,x') J(x')} \quad (2.75)
 \end{aligned}$$

A partir de (2.75) e de (2.52) obtemos

$$\begin{aligned}
 I_{12} &= \int \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] F[\phi] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi(x) K(x,y) \phi(y)} \\
 &= [\det K]^{-1/2} F\left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J} \right] e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dx' J(x) \Delta_F(x,x') J(x')} \Big|_{J=0} \quad (2.76)
 \end{aligned}$$

As fórmulas (2.75) e (2.76) condensam os resultados fundamentais para o caso de funções reais. Obteremos a seguir as expressões análogas para o caso de funções complexas. Começamos calculando

$$I_{13} = \int \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x,y) \phi(y)} \quad (2.77)$$

Novamente, o operador  $K$  é hermitiano, simétrico e supomos que todos seus autovalores são positivos. Usando (2.54a), obtemos

$$\begin{aligned}\phi^*(x) K(x, y) \phi(y) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(x) - i\beta(x)] K(x, y) \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(y) + i\beta(y)] \\ &= \frac{1}{2} \alpha(x) K(x, y) \alpha(y) + \frac{1}{2} \beta(x) K(x, y) \beta(y) + \frac{i}{2} \alpha(x) K(x, y) \beta(y) - \frac{i}{2} \beta(x) K(x, y) \alpha(y). \quad (2.78)\end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned}\int_a^b dx \int_a^b dy \alpha(x) K(x, y) \beta(y) &= \langle \alpha | K | \beta \rangle = \langle \beta | K^\dagger | \alpha \rangle^* = \langle \beta | K | \alpha \rangle^* \\ &= \int_a^b dx \int_a^b dy \beta(x) K^*(x, y) \alpha(y)\end{aligned}$$

e

$$\langle y | K | x \rangle = \langle x | K^\dagger | y \rangle^* = \langle x | K | y \rangle^* = K^*(x, y) \quad \therefore$$

$$K^*(x, y) = K(y, x) = K(x, y)$$

uma vez que o núcleo é simétrico. Assim,

$$\int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x, y) \phi(y) = \frac{1}{2} \int_a^b dx \int_a^b dy \alpha(x) K(x, y) \alpha(y) + \frac{1}{2} \int_a^b dx \int_a^b dy \beta(x) K(x, y) \beta(y). \quad (2.79)$$

De modo que, levando em conta (2.54b) e (2.79), a integral  $I_{13}$  se reduz a

$$I_{13} = \int \left[ \frac{D\alpha}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\beta}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \alpha(x) K(x, y) \alpha(y) + \frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \beta(x) K(x, y) \beta(y)} = [\det K]^{-1}, \quad (2.80)$$

dado que o resultado (2.78) se aplica a cada uma das integrais que aparecem em (2.80). Finalmente, escrevemos



$$I_{13} = \int \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x, y) \phi(y)} = [\det K]^{-1} \quad (2.81)$$

Notar a diferença entre (2.68) e (2.81). Passamos agora ao cálculo de

$$I_{14} = \int \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x, y) \phi(y) + \frac{i}{\hbar} \int_a^b dx [\phi^*(x) J(x) + J^*(x) \phi(x)]} \quad (2.82)$$

onde  $J$  é a chamada fonte externa do campo  $\phi^*$  e  $J^*$  é a fonte externa do campo  $\phi$ . Dado que a integral funcional sobre funções complexas está definida a partir das correspondentes integrais para as componentes reais, escrevemos

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + i\phi_2) \quad \text{e} \quad \phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 - i\phi_2) \quad ;$$

$$J = \frac{1}{\sqrt{2}} (J_1 + iJ_2) \quad \text{e} \quad J^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (J_1 - iJ_2) \quad ;$$

onde  $\phi_1, \phi_2, J_1$  e  $J_2$  são reais. Então, de acordo com (2.79), temos

$$\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x, y) \phi(y) = \frac{i}{2\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \left[ \phi_1(x) K(x, y) \phi_1(y) + \phi_2(x) K(x, y) \phi_2(y) \right] \quad (2.83)$$

Por outro lado,

$$\phi^*(x) J(x) + J^*(x) \phi(x) = \phi_1(x) J_1(x) + \phi_2(x) J_2(x) \quad (2.84)$$

Logo, a expressão (2.82) pode ser escrita como

$$I_{14} = \left[ \frac{D\phi_1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi_2}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy [\phi_1(x) K(x,y) \phi_1(y) + \phi_2(x) K(x,y) \phi_2(y)] + \frac{i}{\hbar} \int_a^b dx [\phi_1(x) J(x) + \phi_2(x) J(x)]} \quad (2.85)$$

De acordo com (2.75), isto é

$$I_{14} = [\det K]^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy [J_1(x) \Delta_F(x,y) J_1(y) + J_2(x) \Delta_F(x,y) J_2(y)]} \quad (2.86)$$

a qual pode ser reescrita usando

$$J_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (J(x) + J^*(x)) \quad e \quad J_2(x) = \frac{-i}{\sqrt{2}} (J(x) - J^*(x)) .$$

Assim,

$$J_1(x) \Delta_F(x,y) J_1(y) + J_2(x) \Delta_F(x,y) J_2(y) = J^*(x) \Delta_F(x,y) J(y) + J(x) \Delta_F(x,y) J^*(y)$$

e o expoente de (2.86) se reduz a

$$-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy J^*(x) \Delta_F(x,y) J(y) \quad (2.87)$$

usando o fato de que  $K(x,y) = K(y,x)$  implica  $\Delta_F(x,y) = \Delta_F(y,x)$ .

Substituindo (2.87) em (2.86), obtemos

$$\begin{aligned} I_{14} &= \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x,y) \phi(y) + \frac{i}{\hbar} \int_a^b dx [\phi^*(x) J(x) + J^*(x) \phi(x)]} \\ &= [\det K]^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy J^*(x) \Delta_F(x,y) J(y)} \quad (2.88) \end{aligned}$$

A partir de (2.88) é imediata a obtenção de

$$\begin{aligned}
 I_{15} &= \left[ \frac{D\phi^*}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] \left[ \frac{D\phi}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \right] F[\phi^*, \phi] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy \phi^*(x) K(x, y) \phi(y)} \\
 &= [\det K]^{-1} F\left[ \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J}, \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J^*} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \int_a^b dy J^*(x) \Delta_F(x, y) J(y)} \Bigg|_{J=J^*=0}. \quad (2.89)
 \end{aligned}$$

As expressões (2.88) e (2.89) condensam os resultados fundamentais para o caso de funções complexas. Até aqui vimos resultados da integração funcional sobre variáveis comutantes e portanto diretamente aplicáveis a campos bosônicos.

Para integração sobre variáveis anticomutantes (campos fermiônicos), ver 15.

#### II.4.4 - Transformada de Fourier e Delta de Dirac Funcionais

Introduzimos a transformada de Fourier funcional e sua correspondente antitransformada da seguinte maneira.  $\hat{F}[\omega]$  é a transformada de Fourier funcional de  $F[\alpha]$  tal que

$$F[\alpha] = \int \left[ \frac{D\omega}{\sqrt{2\pi \hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \omega(x) \alpha(x)} \hat{F}[\omega], \quad (2.90)$$

$F[\alpha]$  é a antitransformada de Fourier funcional de  $\hat{F}[\omega]$

$$\hat{F}[\omega] = \int \left[ \frac{D\alpha}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \omega(x) \alpha(x)} F[\alpha] \quad (2.91)$$

Levando (2.91) em (2.90), obtemos

$$F[\alpha] = \int \left[ \frac{D\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \left[ \frac{D\beta}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \omega(x) [\alpha(x) - \beta(x)]} F[\beta] \quad (2.92)$$

A partir desta expressão encontramos natural definir a delta de Dirac funcional  $\delta[\beta - \alpha]$  na forma

$$\delta[\beta - \alpha] = \int \left[ \frac{D\omega}{2\pi\hbar} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dx \omega(x) [\beta(x) - \alpha(x)]} \quad (2.93)$$

com a propriedade

$$\int [D\beta] \delta[\beta - \alpha] F[\beta] = F[\alpha] \quad (2.94)$$

Consideremos novamente o conjunto ortonormal completo das autofunções reais  $\{u_i(x)\}$  em termos dos quais as funções  $\alpha(x)$ ,  $\beta(x)$  e  $\omega(x)$  podem ser desenvolvidas de forma tal que os desenvolvimentos convirjam no intervalo fechado  $[a, b]$ :

$$\alpha(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i u_i(x) \quad , \quad \beta(x) = \sum_{i=1}^{\infty} b_i u_i(x) \quad e \quad \omega(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(x) \quad (2.95)$$

A definição de integral funcional nos permite reescrever (2.93) do seguinte modo

$$\begin{aligned}
 \delta[\beta - \alpha] &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \prod_{j=1}^n \frac{dc_j}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n c_j (a_j - b_j)} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^n \delta(a_j - b_j) \qquad (2.96)
 \end{aligned}$$

de onde concluímos que a delta funcional é uma delta multidimensional de dimensionalidade infinita.

### III - REGRAS CANÔNICAS DE CORRESPONDÊNCIA

Neste capítulo tratamos das chamadas regras canônicas de correspondência, isto é, das regras que relacionam quantidades clássicas (funções "c-number") de espaço de fase a operadores quanto-mecânicos. Como veremos no próximo capítulo, diferentes regras de correspondência dão origem a diferentes representações para os elementos de matriz da teoria quântica em termos de integrais funcionais.

Na seção III.1 estabelecemos as correspondências gerais de Cohen e Agarwal-Wolf. Na seção III.2, definimos a correspondência de Weyl generalizada de índice  $\alpha$ . Concluímos o capítulo analisando o problema de ordenamento de operadores na seção III.3.

#### III.1 - Correspondências Gerais - Propriedades

Sejam  $Q_i$  e  $P_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) os operadores hermitianos de posição e momentum da representação (picture) de Schrödinger, com autovalores  $q_i$ ,  $p_i$  e autoestados  $|q\rangle, |p\rangle$ , respectivamente. Portanto,

$$\left. \begin{aligned} Q_i |q\rangle &= q_i |q\rangle \\ P_i |p\rangle &= p_i |p\rangle \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

As coordenadas retangulares  $q_i$  constituem um conjunto

de variáveis comutantes e os  $p_i$ 's são os correspondentes momenta canonicamente conjugados. Denotamos operadores por letras maiúsculas e funções "c-number" por letras minúsculas.

As relações de comutação são as canônicas usuais, i.e.,

$$\left. \begin{aligned} [Q_i, Q_j] &= [P_i, P_j] = 0 \\ [Q_i, P_j] &= i\hbar \delta_{ij} I \quad (i, j = 1, \dots, n) \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Dirac e  $I$  é o operador identidade.

Trabalhamos em  $n$  dimensões de modo que todas as nossas integrais devem ser entendidas em  $R_n$ . Em particular, as relações de completicidade para os autoestados de posição e momentum são escritas como

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \int dp |p\rangle \langle p| = I \quad (3.3)$$

onde  $dq \equiv dq_1 \dots dq_n$ ,  $dp \equiv dp_1 \dots dp_n$ .

Fixamos o fator de fase em  $\langle q|p\rangle$  escolhendo

$$\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-n/2} \exp(iq \cdot p/\hbar) \quad (3.4)$$

Usamos a notação reduzida

$$\left. \begin{aligned} |q\rangle &= |q_1 q_2 \dots q_n\rangle, \quad |p\rangle = |p_1 p_2 \dots p_n\rangle \\ q \cdot p &= \sum_{i=1}^n q_i p_i, \quad \delta(q' - q'') = \prod_{i=1}^n \delta(q'_i - q''_i) \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

etc.

Definimos<sup>16</sup> os mapeamentos mutuamente anti-recíprocos

$$a(p, q) \xrightarrow{f} A_f(P, Q)$$

$$a_{\tilde{f}}(p, q) \xleftarrow{\tilde{f}} A(P, Q)$$

respectivamente por

$$A_f(P, Q) = \int dp dq a(p, q) \Delta^{(f)}(Q - q, P - p), \quad (3.6)$$

onde

$$\Delta^{(f)}(Q - q, P - p) = (2\pi\hbar)^{-2n} \int d\theta dz f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q - q) + z(P - p)]}, \quad (3.7)$$

e

$$a_{\tilde{f}}(p, q) = (2\pi\hbar)^n \text{Tr}[A(P, Q) \Delta^{(\tilde{f})}(Q - q, P - p)], \quad (3.8)$$



onde

$$\tilde{f}(\theta, \tau) = f^{-1}(-\theta, -\tau) \quad (3.9)$$

Em (3.6) - (3.9), todas as integrais são em  $R_n$  de  $-\infty$  a  $+\infty$ ;  $\text{Tr } A \equiv \int dq \langle q|A|q \rangle = \int dp \langle p|A|p \rangle$ ; os operadores  $\Delta$  são os chamados operadores de mapeamento (ver a propriedade 6) a seguir, item a) e a função transformação  $f(\theta, \tau)$  é tal que, englobando as regras relevantes de associação (Tabela I), satisfaz as seguintes condições:

- (i)  $f(\theta, \tau)$  é uma função inteiramente analítica nas variáveis  $\theta$  e  $\tau$ ;
- (ii)  $f(0, 0) = 1$  (normalização).

Nota: a função  $a_f(p, q)$  é chamada equivalente  $f$  do operador  $A(P, Q)$  ou função  $f$  de  $A(P, Q)$ .

Vejamos algumas propriedades dos operadores  $\Delta$ . Como primeira propriedade, citamos

$$\int dp dq \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) = \int dp dq \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p) = I \quad (3.10)$$

#### Prova

Desde (3.7), para  $n = 1$ , temos

$$\int dp dq \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) = (2\pi k)^{-2} \int dp dq d\theta d\tau f(\theta, \tau) e^{\frac{i}{k}[\theta(Q-q) + \tau(P-p)]} \quad .$$

Tabela I - Funções transformação  $f(\theta, \tau)$  para as regras relevantes de associação

$f(\theta, \tau)$	Regra de Associação
$\exp(\mu\theta^2 + \nu\tau^2 + i\lambda\theta\tau) \left\{ \begin{array}{l} \exp(i\alpha\theta\tau/\hbar) \left\{ \begin{array}{l} \exp(-i\theta\tau/2\hbar) \\ 1 \\ \exp(i\theta\tau/2\hbar) \end{array} \right. \\ \exp(\mu\theta^2 + \nu\tau^2) \left\{ \begin{array}{l} \exp(\theta^2 + \tau^2) \\ 1 \\ \exp(-\theta^2 - \tau^2) \end{array} \right. \end{array} \right.$	<p>Correspondências de Cohen e Agarwal-Wolf</p> <p>Correspondência de Weyl generalizada de Índice <math>\alpha</math> (GW<math>\alpha</math>)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Standard (S)</li> <li>Weyl (W)</li> <li>Antistandard (AS)</li> </ul> <p>Correspondência S de Cahill-Glauber</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Normal (N)</li> <li>Weyl (W)</li> <li>Antinormal (AN)</li> </ul> <p>Simetrização</p> <p>Born-Jordan</p>
$\cos(\theta\tau/2\hbar)$	
$(\theta\tau/2\hbar)^{-1} \text{sen}(\theta\tau/2\hbar)$	

Usando a identidade de Baker-Campbell-Hausdorff

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}, \quad (3.11)$$

válida para quaisquer A e B que comutem com seu comutador  $[A,B]$ , isto é,

$$\int dp dq \Delta^{(f)} = (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta d\tau f(\theta, \tau) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q + \tau p - \theta\tau/2]} e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}\tau P}.$$

Agora, com a decomposição espectral do operador  $\exp(i\theta Q/\hbar)$  e pela propriedade do operador translação  $\exp(i\tau P/\hbar)$ , obtemos

$$\begin{aligned} \int dp dq \Delta^{(f)} &= (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta d\tau d q' f(\theta, \tau) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q + \tau p - \theta\tau/2 - \theta q']} |q'\rangle \langle q' + \tau| \\ &= \int d\theta d\tau d q' f(\theta, \tau) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta\tau/2 + \theta q']} \delta(\theta) \delta(\tau) |q'\rangle \langle q' + \tau| \end{aligned}$$

usando a representação da função  $\delta$ . Integrando em  $\theta$  e  $\tau$

$$\int dp dq \Delta^{(f)} = \int d q' f(0, 0) |q'\rangle \langle q'| = I,$$

onde usamos  $f(0, 0) = 1$  e (3.3). Dado que  $f(0, 0) = 1$  implica  $f^{-1}(0, 0) = 1$ , é imediato verificar que

$$\int dp dq \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p) = I.$$

q.e.d.

Como segunda propriedade, citamos

$$\text{Tr}[\Delta^{(f)}(Q-q, P-p)] = \text{Tr}[\Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p)] = (2\pi\hbar)^{-1} \quad (3.12)$$

Prova

De acordo com (3.7), (3.9) e (3.11)

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\Delta^{(\tilde{f})}] &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz f(-\theta, -z) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q + zp - \theta z/2]} \text{Tr} \left[ e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}zP} \right] \\ &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz dq' f(-\theta, -z) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q + zp - \theta z/2]} e^{\frac{i}{\hbar}\theta q'} \langle q' | q' - z \rangle ; \end{aligned}$$

pela ortogonalidade dos autoestados de posição

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\Delta^{(\tilde{f})}] &= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz f(-\theta, -z) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q + zp - \theta z/2]} \delta(\theta) \delta(z) \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} f(0, 0) = (2\pi\hbar)^{-1} \end{aligned}$$

É obvio que

$$\text{Tr}[\Delta^{(f)}(Q-q, P-p)] = (2\pi\hbar)^{-1} .$$

q.e.d.

A terceira propriedade importante é

$$\text{Tr}[\Delta^{(f)}(Q-q', P-p') \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p)] = \text{Tr}[\Delta^{(\tilde{f})}(Q-q', P-p') \Delta^{(f)}(Q-q, P-p)] = (2\pi\hbar)^{-1} \delta(q-q') \delta(p-p') \quad (3.13)$$

que expressa a ortogonalidade dos operadores de mapeamento  $\Delta$  para quaisquer dois mapeamentos que sejam antirecīprocos ( $f$  e  $\tilde{f}$ ).

Prova

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[\Delta^{(f)}(Q-q', P-p') \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p)] \\ &= (2\pi\hbar)^{-4} \text{Tr} \left[ \int d\theta dz f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q') + z(P-p')]} \right. \\ & \quad \left. \times \int d\theta' dz' \tilde{f}^{-1}(-\theta', -z') e^{\frac{i}{\hbar}[\theta'(Q-q) + z'(P-p)]} \right] \\ &= (2\pi\hbar)^{-4} \int d\theta dz d\theta' dz' f(\theta, z) \tilde{f}^{-1}(-\theta', -z') e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q' + z p' + \theta' q + z' p]} \\ & \quad \times \text{Tr} \left[ e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' Q + z' P)} \right] \quad ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \left[ e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' Q + z' P)} \right] \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z + \theta' z')} \text{Tr} \left[ e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} z P} e^{\frac{i}{\hbar} \theta' Q} e^{\frac{i}{\hbar} z' P} \right] \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z + \theta' z')} \int d q'' \langle q'' | e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} z P} e^{\frac{i}{\hbar} \theta' Q} e^{\frac{i}{\hbar} z' P} | q'' \rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z + \theta' z')} \int d q'' e^{\frac{i}{\hbar} \theta q''} \langle q'' + z | q'' - z \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \theta' (q'' - z')} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z - \theta' z')} \delta(z + z') \int d q'' e^{\frac{i}{\hbar} q'' (\theta + \theta')} \\
&= 2\pi\hbar e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z - \theta' z')} \delta(z + z') \delta(\theta + \theta') ;
\end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \left[ \Delta^{(f)}(Q - q', P - p') \Delta^{(\tilde{f})}(Q - q, P - p) \right] \\
&= (2\pi\hbar)^{-3} \int d\theta dz d\theta' dz' f(\theta, z) f(-\theta', -z') e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta q' + z p' + \theta' q + z' p - \theta z/2 + \theta' z'/2]} \delta(z + z') \delta(\theta + \theta') \\
&= (2\pi\hbar)^{-3} \int d\theta dz f(\theta, z) f^{-1}(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar} \theta (q - q')} e^{\frac{i}{\hbar} z (p - p')} \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \delta(q - q') \delta(p - p') .
\end{aligned}$$

Obviamente, temos também

$$\text{Tr}[\Delta_{(Q-q', P-p')}^{(\tilde{f})} \Delta_{(Q-q, P-p)}^{(f)}] = (2\pi\hbar)^{-1} \delta(q-q') \delta(p-p').$$

q.e.d.

De posse desses resultados para os operadores de mapeamento, passemos às propriedades principais das correspondências gerais.

1) Os mapeamentos anti-recíprocos são simétricos e tais que

$$\left. \begin{aligned} A_{f, \tilde{f}}(P, Q) &= A_{\tilde{f}, f}(P, Q) = A(P, Q) \\ a_{f, \tilde{f}}(p, q) &= a_{\tilde{f}, f}(p, q) = a(p, q) \end{aligned} \right\} \quad (3.14)$$

#### Prova

Calculemos  $A_{f, \tilde{f}}(P, Q)$ , ou seja,

$$A(P, Q) \xrightarrow{\tilde{f}} a_{\tilde{f}}(p, q) \xrightarrow{f} A_{f, \tilde{f}}(P, Q).$$

Levando (3.8) em (3.6),

$$\begin{aligned}
A_{f, \tilde{f}}(P, Q) &= \int dp dq \left\{ a_{\tilde{f}}(p, q) \right\} \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) \\
&= \int dp dq \left\{ 2\pi\hbar \operatorname{Tr} [ A(P, Q) \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p) ] \right\} \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int dp dq \left\{ \operatorname{Tr} [ A(P, Q) (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz f^{-1}(-\theta, -z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q) + z(P-p)]} \right. \\
&\quad \left. \times \int d\theta' dz' f(\theta', z') e^{\frac{i}{\hbar}[\theta'(Q-q) + z'(P-p)]} \right. \\
&\quad \left. = (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz d\theta' dz' f^{-1}(-\theta, -z) f(\theta', z') \operatorname{Tr} [ A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \right] \\
&\quad \times \left\{ (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq e^{-\frac{i}{\hbar}q(\theta + \theta')} e^{-\frac{i}{\hbar}p(z + z')} \right\} e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' Q + z' P)} \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz d\theta' dz' f^{-1}(-\theta, -z) f(\theta', z') \operatorname{Tr} [ A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}z P} ] \\
&\quad \times e^{\frac{i}{\hbar}(\theta z + \theta' z')} e^{\frac{i}{\hbar}\theta' Q} e^{\frac{i}{\hbar}z' P} \delta(\theta + \theta') \delta(z + z') \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz \operatorname{Tr} [ A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}z P} ] e^{\frac{i}{\hbar}\theta z} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{-\frac{i}{\hbar}z P} .
\end{aligned}$$

Por outro lado,



$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[ A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} \tau P} \right] &= \int dq' \langle q' | A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} | q' - \tau \rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \tau} \int dq' \langle q' | A(P, Q) | q' - \tau \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \theta q'} \end{aligned}$$

Então,

$$A_{f, \tilde{f}}(P, Q) = (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta d\tau dq' \langle q' | A(P, Q) | q' - \tau \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \theta q'} e^{-\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{-\frac{i}{\hbar} \tau P}$$

Usando a decomposição espectral do operador  $\exp(-i\theta Q/\hbar)$  e a propriedade de translação de  $\exp(-i\tau P/\hbar)$ , obtemos

$$\begin{aligned} A_{f, \tilde{f}}(P, Q) &= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta d\tau dq' dq \langle q' | A(P, Q) | q' - \tau \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \theta q'} | q \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \theta q} \langle q - \tau | \\ &= \int d\tau dq' dq | q \rangle \langle q' | A(P, Q) | q' - \tau \rangle \langle q - \tau | \delta(q' - q) \\ &= \int d\tau dq | q \rangle \langle q | A(P, Q) | q - \tau \rangle \langle q - \tau | \end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$\left\{ \begin{array}{l} q' = q \\ q'' = q - \tau \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} q = q' \\ \tau = q - q'' \end{array} \right. ;$$

de Jacobiano unitário

$$J = \frac{\partial(\tau, q)}{\partial(q', q'')} = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 1 \quad ,$$

obtemos

$$A_{f, \tilde{f}}(P, Q) = \int dq' dq'' |q'\rangle \langle q'| A(P, Q) |q''\rangle \langle q''| = A(P, Q)$$

usando a completicidade dos estados de posição. A partir dos desenvolvimentos iniciais desta demonstração, é fácil ver que

$$A_{\tilde{f}, f}(P, Q) = A(P, Q) \quad .$$

Demonstramos agora que

$$a(p, q) \xrightarrow{f} A_f(P, Q) \xrightarrow{\tilde{f}} a_{\tilde{f}, f}(p, q) = a_{f, \tilde{f}}(p, q) = a(p, q) \quad .$$

Levando (3.6) em (3.8),

$$a_{\tilde{f}, f}(p, q) = 2\pi\hbar \operatorname{Tr} \left[ A_f(P, Q) \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p) \right]$$

$$= 2\pi\hbar \int dp' dq' a(p', q') \operatorname{Tr} \left[ \Delta^{(f)}(Q-q', P-p') \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p) \right] \quad .$$

Da mesma forma,

$$\begin{aligned} a_{f, \tilde{f}}(p, q) &= 2\pi\hbar \operatorname{Tr} \left[ A_{\tilde{f}}(P, Q) \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) \right] \\ &= 2\pi\hbar \int dp' dq' a(p', q') \operatorname{Tr} \left[ \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q', P-p') \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) \right]. \end{aligned}$$

Portanto, pela propriedade (3.13) obtemos

$$\begin{aligned} a_{\tilde{f}, f}(p, q) &= a_{f, \tilde{f}}(p, q) = 2\pi\hbar \int dp' dq' a(p', q') (2\pi\hbar)^{-1} \delta(q-q') \delta(p-p') \\ &= a(p, q). \end{aligned}$$

q.e.d.

2) Os mapeamentos (3.6) e (3.8) são recíprocos (um é o inverso do outro) quando  $f(\theta, \tau) = f(-\theta, -\tau)$ . Claramente, nesse caso,  $\tilde{f}(\theta, \tau) = f^{-1}(\theta, \tau)$  e a distinção entre recíprocos e anti-recíprocos desaparece:

$$\left. \begin{aligned} A_{f, \tilde{f}^{-1}}(P, Q) &= A_{\tilde{f}^{-1}, f}(P, Q) = A(P, Q) \\ a_{f, \tilde{f}^{-1}}(p, q) &= a_{\tilde{f}^{-1}, f}(p, q) = a(p, q) \end{aligned} \right\} \quad (3.15)$$

Todas as regras de associação da Tabela I são recíprocas, ou seja, satisfazem as propriedades (3.15).

3) Em geral:  $F(P)$  corresponde a  $F(p)$  e  $G(Q)$  correspon-

de  $\tilde{a} G(q)$  sse (se, e somente se)  $f(0, \tau) = 1$  e  $f(\theta, 0) = 1$ , respectivamente.

As regras de associação normal e antinormal da Tabela I não satisfazem esta propriedade.

### Prova

Demonstramos primeiro a condição suficiente, i.e., se  $f(0, \tau) = 1$  e  $f(\theta, 0) = 1$ , então  $F(P)$  corresponde a  $F(p)$  e  $G(Q)$  corresponde a  $G(q)$ , respectivamente.

Seja o caso  $F(p) \xrightarrow{f} F(P)$ ; partindo do lado direito de (3.6), temos

$$\begin{aligned}
 & \int dp dq F(p) \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) \\
 &= (2\pi\kappa)^{-2} \int dp dq d\theta dz F(p) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\kappa}[\theta(Q-q) + z(P-p)]} \\
 &= (2\pi\kappa)^{-1} \int dp d\theta dz F(p) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\kappa}(\theta Q + zP) - \frac{i}{\kappa}z p} (2\pi\kappa)^{-1} \int dq e^{-\frac{i}{\kappa}q\theta} \\
 &= (2\pi\kappa)^{-1} \int dp dz F(p) f(0, z) e^{-\frac{i}{\kappa}z(P-p)} = \int dp dp' \delta(p-p') |p\rangle F(p) \langle p| \\
 &= \int dp |p\rangle F(p) \langle p| = F(P)
 \end{aligned}$$

uma vez que, por hipótese,  $f(0, \tau) = 1$ . Consideremos

$$F(P) \xrightarrow{f} F(p) \quad ;$$

partindo do lado direito de (3.8), temos

$$\begin{aligned}
 & 2\pi\hbar \text{Tr} [ F(P) \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) ] \\
 &= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz f(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \text{Tr} [ F(P) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} ] \\
 &= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz dp' f(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} e^{\frac{i}{2\hbar}\theta z} \langle p' | F(P) e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}z P} | p' \rangle \\
 &= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz dp' f(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p - \theta z/2)} F(p') \langle p' - \theta | p' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}z p'} \\
 &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dz dp' f(0, z) e^{-\frac{i}{\hbar}z(p-p')} F(p') \\
 &= \int dp' F(p') \delta(p-p') = F(p)
 \end{aligned}$$

uma vez que  $f(0, \tau) = 1$ . No desenvolvimento acima, utilizamos a propriedade de translação e a ortonormalidade dos estados de momentum.

Seja o caso  $G(q) \xrightarrow{f} G(Q)$ ; partindo do lado direito de (3.6), temos

$$\int dp dq G(q) \Delta^{(f)}(Q-q, P-p)$$

$$\begin{aligned}
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int dq d\theta dz G(q) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta q} \delta(z) \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int dq d\theta G(q) f(\theta, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(q-Q)} = \int dq dq' \delta(q'-q) |q'\rangle G(q) \langle q'| \\
&= \int dq |q\rangle G(q) \langle q| = G(Q)
\end{aligned}$$

dado que, por hipótese,  $f(\theta, 0) = 1$ . Consideremos

$$G(Q) \xrightarrow{f} G(q) \quad ;$$

partindo de (3.8), temos

$$\begin{aligned}
&2\pi\hbar \text{Tr} [ G(Q) \Delta^{(f)}(Q-q, P-p) ] \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz f(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \text{Tr} [ G(Q) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} ] \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz dq' f(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} e^{\frac{i}{\hbar}\theta z} G(q') e^{\frac{i}{\hbar}\theta q'} \delta(z) \\
&= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dq' f(\theta, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(q-q')} G(q') \\
&= \int dq' \delta(q'-q) G(q') = G(q)
\end{aligned}$$

dado que  $f(\theta, 0) = 1$ .

Passemos à condição necessária, i.e., se  $F(P) \leftrightarrow F(p)$  e  $G(Q) \leftrightarrow G(q)$ , então  $f(0, \tau) = 1$  e  $f(\theta, 0) = 1$ , respectivamente.

Se, em (3.8), multiplicamos ambos lados por  $\exp[-i(\theta'q + \tau'p)/\hbar]$  e integramos em  $dpdq$  sobre todo o espaço, obtemos

$$\begin{aligned} & \int dpdq a_{\tilde{f}}(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta'q + \tau'p)} \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dpdq d\theta dz f^{-1}(-\theta, -z) e^{-\frac{i}{\hbar}[q(\theta'+\theta) + p(z'+z)]} \text{Tr}[A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + \tau P)}] \\ &= 2\pi\hbar f^{-1}(\theta', z') \text{Tr}[A(P, Q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta'Q + \tau'P)}], \end{aligned}$$

ou seja, trocando  $\theta' \rightarrow \theta$ ,  $\tau' \rightarrow \tau$ , encontramos

$$f(\theta, \tau) \int dpdq a_{\tilde{f}}(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + \tau p)} = 2\pi\hbar \text{Tr}[A(P, Q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta Q + \tau P)}]. \quad (I)$$

De forma análoga, se em (3.6) multiplicamos ambos lados por  $\exp[-i(\theta'Q + \tau'P)/\hbar]$  e depois tomamos o Tr, ficamos com

$$f(\theta, \tau) \int dpdq a(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + \tau p)} = 2\pi\hbar \text{Tr}[A_f(P, Q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta Q + \tau P)}]. \quad (II)$$

Impomos, por hipótese,  $F(P) \leftrightarrow F(p)$  em (I) (ou (II)). Ob

temos então

$$f(\theta, z) (2\pi\hbar)^{-1} \int dp dq F(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + zp)} = \text{Tr} [F(P) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)}]$$

$$f(\theta, z) \delta(\theta) \int dp F(p) e^{-\frac{i}{\hbar} zp} = \text{Tr} [F(P) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)}] ;$$

ou seja,

$$f(\theta, z) \int dp F(p) e^{-\frac{i}{\hbar} zp} = \int dp F(p) e^{-\frac{i}{\hbar} zp} .$$

Portanto, para que a igualdade se cumpra, devemos ter necessariamente

$$f(\theta, z) = 1 .$$

Impondo agora,  $G(Q) \leftrightarrow G(q)$  em (I) (ou (II)), obtemos

$$f(\theta, z) (2\pi\hbar)^{-1} \int dp dq G(q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + zp)} = \text{Tr} [G(Q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)}]$$

ou seja,

$$f(\theta, 0) \int dq G(q) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta q} = \int dq G(q) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta q} .$$

Portanto, devemos ter



$$f(\theta, 0) = 1 \quad .$$

Finalmente assinalamos que onde usamos apenas a função  $f(\theta, \tau)$ , poderíamos ter igualmente usado as funções  $\tilde{f}(\theta, \tau)$  e  $f^{-1}(\theta, \tau)$ .

q.e.d.

Observação: Das expressões (I) e (II), vemos que a função  $f(\theta, \tau)$  que relaciona um dado operador com uma dada função c-number não é única. Um exemplo: a correspondência

$$pq \longleftrightarrow \frac{1}{2}(PQ + QP)$$

se cumpre para qualquer  $f(\theta, \tau)$  tal que  $\left. \frac{\partial f(\theta, \tau)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = 0$ .

4) Um operador  $A(P, Q)$  hermitiano corresponde a  $a(p, q)$  real se, e somente se,  $f(\theta, \tau) = f^*(-\theta, -\tau)$  (ou, para as correspondências relevantes da Tabela I, sse  $f(\theta, \tau)$  for real).

#### Prova

Provamos a condição suficiente, i.e., se  $f(\theta, \tau) = f^*(-\theta, -\tau)$  então  $A(P, Q)$  hermitiano corresponde a  $a(p, q)$  real. A demonstração da condição necessária é formalmente a mesma. Consideremos primeiro o caso

$$a(p, q) \xrightarrow{f} A_f(P, Q) \quad .$$

De acordo com (3.6) e (3.7), temos

$$\begin{aligned} A_f(P, Q) &= \int dp dq a(p, q) \Delta^{(f)}(Q - q, P - p) \\ &= (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz f(\theta, \tau) a(p, q) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q - q) + \tau(P - p)]} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Tomando o adjunto hermitiano ( $\dagger$ ) em ambos lados dessa expressão, obtemos

$$\begin{aligned} A_f^\dagger(P, Q) &= \int dp dq a^*(p, q) \Delta^{(f)\dagger}(Q - q, P - p) \\ &= (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz a(p, q) f^*(\theta, \tau) e^{-\frac{i}{\hbar}[\theta(Q - q) + \tau(P - p)]} \end{aligned}$$

uma vez que  $a(p, q)$  é real. Trocando  $\theta \rightarrow -\theta$  e  $\tau \rightarrow -\tau$ , ficamos com

$$A_f^\dagger(P, Q) = (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz a(p, q) f^*(-\theta, -\tau) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q - q) + \tau(P - p)]} \quad (3.17)$$

Como, por hipótese,  $f(\theta, \tau) = f^*(-\theta, -\tau)$ ; comparando (3.16) e (3.17) vemos que  $A_f(P, Q) = A_f^\dagger(P, Q)$ . Portanto, se  $f(\theta, \tau) = f^*(-\theta, -\tau)$ , então  $a(p, q)$  real é mapeado a  $A_f(P, Q)$  hermitiano.

Seja agora

$$A(P, Q) \xrightarrow{f} a_f(p, q) \quad ;$$

e (3.19) vemos que  $a_f(p, q) = a_f^*(p, q)$ . Portanto, se  $f(\theta, \tau) = f^*(-\theta, -\tau)$ , então  $A(P, Q)$  hermitiano é mapeado a  $a_f(p, q)$  real.

Notar que a prova acima, realizada com  $f(\theta, \tau)$ , é igualmente válida com as funções  $\bar{f}(\theta, \tau)$  e  $f^{-1}(\theta, \tau)$ .

q.e.d.

$$A_f(P, Q) = (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz \delta(q-q') \delta(p-p') f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q) + z(P-p)]}$$

$$= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q') + z(P-p)]}$$

$$= \Delta^{(f)}(Q-q', P-p')$$

de acordo com (3.7). É obvio que  $\delta(q-q')\delta(p-p') \xrightarrow{\tilde{f}} \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q', P-p')$ .

b) Se  $A(P, Q) = \Delta^{(f)}(Q-q', P-p')$ , então desde (3.8) segue que

$$a_{\tilde{f}}(p, q) = 2\pi\hbar \text{Tr} [\Delta^{(f)}(Q-q', P-p') \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q, P-p)]$$

$$= \delta(q-q') \delta(p-p')$$

usando (3.13).

Se  $A(P, Q) = \Delta^{(\tilde{f})}(Q-q', P-p')$ , então

$$a_f(p, q) = 2\pi\hbar \text{Tr} [\Delta^{(\tilde{f})}(Q-q', P-p') \Delta^{(f)}(Q-q, P-p)]$$

$$= \delta(q-q') \delta(p-p')$$

usando (3.13).

q.e.d.

7) Os mapeamentos (3.6) e (3.8) são lineares, i.e., satisfazem

$$(i) \quad [ \alpha a(p,q) + \beta b(p,q) ] \xrightarrow{f} \alpha A_f(P,Q) + \beta B_f(P,Q)$$

$$(ii) \quad \alpha a_{\tilde{f}}(p,q) + \beta b_{\tilde{f}}(p,q) \xleftarrow{\tilde{f}} [ \alpha A(P,Q) + \beta B(P,Q) ]$$

$$(iii) \quad \left\{ \begin{array}{l} \gamma \xrightarrow{f} \gamma I \\ \gamma \xleftarrow{\tilde{f}} \gamma I \end{array} \right.$$

onde  $\alpha, \beta, \gamma$  são c-numbers arbitrários;  $a(p,q)$  e  $b(p,q)$  são funções c-number arbitrárias que correspondem aos operadores  $A(P,Q)$  e  $B(P,Q)$ , respectivamente.

#### Prova

As propriedades (i) e (ii) seguem diretamente da definição (3.6) - (3.9); a propriedade (iii) segue da propriedade 5).

q.e.d.

A seguir, estabelecemos uma fórmula geral que permite

relacionar dois equivalentes c-number de um mesmo operador. Exemplificamos com algumas das regras de associação da Tabela I.

A representação integral (3.7) pode ser expressa na forma (tomando  $f = f_2$ )

$$\Delta^{(f_2)}(Q-q, P-p) = (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz [f_2(\theta, z) f_1^{-1}(\theta, z)] f_1(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} D(\theta, z)$$

onde

$$D(\theta, z) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)\right] \quad (3.20)$$

A expressão acima pode ser reescrita como

$$\Delta^{(f_2)}(Q-q, P-p) = f_2\left(ik\frac{\partial}{\partial q}, ik\frac{\partial}{\partial p}\right) f_1^{-1}\left(ik\frac{\partial}{\partial q}, ik\frac{\partial}{\partial p}\right) \\ \times (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz f_1(\theta, z) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} D(\theta, z) ,$$

ou seja,

$$\Delta^{(f_2)}(Q-q, P-p) = \mathcal{L}_{21}\left(ik\frac{\partial}{\partial q}, ik\frac{\partial}{\partial p}\right) \Delta^{(f_1)}(Q-q, P-p) , \quad (3.21)$$

onde

$$\mathcal{L}_{21}(x, y) = f_2(x, y) f_1^{-1}(x, y) \quad . \quad (3.22)$$

Por outro lado, de acordo com (3.8), temos

$$a_{f_2}(p, q) = 2\pi\hbar \text{Tr} [ A(P, Q) \Delta^{(f_2)}(Q-q, P-p) ] \quad ; \quad (3.23)$$

substituindo (3.21) em (3.23), obtemos

$$a_{f_2}(p, q) = \mathcal{L}_{21} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) 2\pi\hbar \text{Tr} [ A(P, Q) \Delta^{(f_1)}(Q-q, P-p) ] \quad ;$$

ou seja,

$$a_{f_2}(p, q) = \mathcal{L}_{21} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) a_{f_1}(p, q) \quad (3.24)$$

que é a fórmula mencionada, com  $\mathcal{L}_{21}$  definido por (3.22).

Desde (3.24) e (3.22), uma vez que  $f_w^{-1}(x, y) = 1$ , obtemos por exemplo

$$a_f(p, q) = f \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) a_w(p, q) \quad , \quad (3.25a)$$

onde  $a_w(p, q)$  significa o equivalente Weyl de  $A(P, Q)$ .

Desde (3.22) e da Tabela I, temos também

$$\begin{aligned}
 L_{\alpha W}(x, y) &= e^{\frac{i}{\hbar} \alpha x y} = L_{W\alpha}^*(x, y) \\
 L_{\alpha S}(x, y) &= e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha + \frac{1}{2}) x y} = L_{S\alpha}^*(x, y) \\
 L_{\alpha AS}(x, y) &= e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha - \frac{1}{2}) x y} = L_{AS\alpha}^*(x, y) \\
 L_{WS}(x, y) &= e^{\frac{i}{2\hbar} x y} = L_{SW}^*(x, y) \\
 L_{WAS}(x, y) &= e^{-\frac{i}{2\hbar} x y} = L_{ASW}^*(x, y) \\
 L_{SAS}(x, y) &= e^{-\frac{i}{\hbar} x y} = L_{ASS}^*(x, y)
 \end{aligned} \tag{3.25b}$$

Como veremos na próxima seção,  $\alpha$  é um parâmetro real contínuo tal que  $-1/2 \leq \alpha \leq +1/2$ , portanto as fórmulas (3.25b) podem ser reunidas na expressão

$$L_{\alpha\alpha'}(x, y) = e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha - \alpha') x y} = L_{\alpha\alpha'}^*(x, y) \tag{3.26}$$

Então, nesse caso, por (3.24) e (3.26) temos a seguinte relação entre os equivalentes c-number de um mesmo operador  $A(P, Q)$

$$a_{\alpha}(p, q) = e^{-i\hbar(\alpha - \alpha') \frac{\partial^2}{\partial q \partial p}} a_{\alpha'}(p, q) \tag{3.27}$$

Concluimos a seção apresentando alguns exemplos ilustrativos do mapeamento  $A(P, Q) \xrightarrow{f} a_f(p, q)$ . O mapeamento inverso  $a(p, q) \xrightarrow{f} A_f(P, Q)$  será exemplificado na seção III.3.

Pela aplicação da equação (3.8) obtemos para o operador  $A(P,Q) = QP$ , por exemplo, a expressão geral

$$a_f(p,q) = (qp + i\hbar/2) f(0,0) + i\hbar q \left. \frac{\partial f(0,z)}{\partial z} \right|_{z=0} + i\hbar p \left. \frac{\partial f(\theta,0)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} - \hbar^2 \left. \frac{\partial^2 f(\theta,z)}{\partial \theta \partial z} \right|_{\theta=z=0} \quad (3.28a)$$

ou, para as regras de associação tais que  $f(0,0) = 1$  (e.g., as da Tabela I), obtemos

$$a_f(p,q) = qp + i\hbar/2 + i\hbar q \left. \frac{\partial f(0,z)}{\partial z} \right|_{z=0} + i\hbar p \left. \frac{\partial f(\theta,0)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} - \hbar^2 \left. \frac{\partial^2 f(\theta,z)}{\partial \theta \partial z} \right|_{\theta=z=0} \quad (3.28b)$$

Ainda, para as correspondências que satisfazem a propriedade 3), encontramos

$$a_f(p,q) = qp + i\hbar/2 - \hbar^2 \left. \frac{\partial^2 f(\theta,z)}{\partial \theta \partial z} \right|_{\theta=z=0} \quad (3.28c)$$

A partir de (3.28c) obtemos os resultados dispostos na Tabela II abaixo para o operador  $QP$ . De forma semelhante são obtidos os demais resultados da Tabela II.



Tabela II - Exemplos do mapeamento  $A(P,Q) \rightarrow a(p,q)$ 

Operador	Função			
	Correspondência de Weyl generalizada de índice $\alpha$ ( $GW_\alpha$ )	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Standard (S)} \\ \text{Weyl (W)} \\ \text{Antistandard (AS)} \end{array} \right.$	Simetrização	Born-Jordan
QP	$qp+i\hbar(1/2-\alpha)$	$qp+i\hbar$ $qp+i\hbar/2$ $qp$	$qp+i\hbar/2$	$qp+i\hbar/2$
PQ	$qp-i\hbar(1/2+\alpha)$	$qp$ $qp-i\hbar/2$ $qp-i\hbar$	$qp-i\hbar/2$	$qp-i\hbar/2$
$(QP+PQ)/2$	$qp-i\hbar\alpha$	$qp+i\hbar/2$ $qp$ $qp-i\hbar/2$	$qp$	$qp$
QPQ	$q^2p-2i\hbar\alpha q$	$q^2p+i\hbar q$ $q^2p$ $q^2p-i\hbar q$	$q^2p$	$q^2p$
$Q^2P$	$q^2p+i\hbar q(1-2\alpha)$	$q^2p+2i\hbar q$ $q^2p+i\hbar q$ $q^2p$	$q^2p+i\hbar q$	$q^2p+i\hbar q$
$PQ^2$	$q^2p-i\hbar q(1+2\alpha)$	$q^2p$ $q^2p-i\hbar q$ $q^2p-2i\hbar q$	$q^2p-i\hbar q$	$q^2p-i\hbar q$
$(Q^2P+QPQ+PQ^2)/3$	$q^2p-2i\hbar\alpha q$	$q^2p+i\hbar q$ $q^2p$ $q^2p-i\hbar q$	$q^2p$	$q^2p$
PQP	$qp^2-2i\hbar\alpha p$	$qp^2+i\hbar p$ $qp^2$ $qp^2-i\hbar p$	$qp^2$	$qp^2$
$P^2Q$	$qp^2-i\hbar p(1+2\alpha)$	$qp^2$ $qp^2-i\hbar p$ $qp^2-2i\hbar p$	$qp^2-i\hbar p$	$qp^2-i\hbar p$
$QP^2$	$qp^2+i\hbar p(1-2\alpha)$	$qp^2+2i\hbar p$ $qp^2+i\hbar p$ $qp^2$	$qp^2+i\hbar p$	$qp^2+i\hbar p$
$(P^2Q+PQP+QP^2)/3$	$qp^2-2i\hbar\alpha p$	$qp^2+i\hbar p$ $qp^2$ $qp^2-i\hbar p$	$qp^2$	$qp^2$

### III.2 - Correspondência de Weyl Generalizada de Índice $\alpha$ -Propriedades

A generalização da correspondência de Weyl<sup>17</sup> que apresentamos nesta seção é um caso particular das correspondências gerais de Cohen e Agarwal-Wolf<sup>16</sup> (Tabela I). Tal regra de associação foi introduzida independentemente por Girotti-Maris<sup>18</sup> e Leschke-Schmutz<sup>19</sup>. Foi extendida por Hirshfeld<sup>20</sup> ao caso de espaço de fase com curvatura. Uma transformação semelhante, também para o caso de espaço curvo, foi dada recentemente por Weiss<sup>21</sup>. Langouche et al<sup>22</sup> estudaram-na no tratamento funcional da equação de Fokker-Planck em métodos estocásticos.

A correspondência de Weyl generalizada de índice  $\alpha$  ( $GW_\alpha$ ) é definida pela função transformação

$$f(\theta, z) = \exp(i\alpha\theta z/\hbar) , \quad (3.29)$$

onde  $\alpha$  é um parâmetro real contínuo tal que

$$-1/2 \leq \alpha \leq +1/2 . \quad (3.30)$$

Notar que, neste caso,

$$\tilde{f}(\theta, z) = f^{-1}(-\theta, -z) = \exp(-i\alpha\theta z/\hbar) . \quad (3.31)$$

Com isso, caracterizamos a transformação  $f$  pelo índice  $\alpha$ ; a transformação  $f^{-1}$  pelo índice  $-\alpha$  e denotamos, de acordo com (3.6),

$$A_{\alpha}(P, Q) = \int dp dq a(p, q) \Delta^{\alpha}(Q-q, P-p) \quad (3.32)$$

onde

$$\Delta^{\alpha}(Q-q, P-p) = (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\theta z} e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q) + z(P-p)]} \quad (3.33)$$

A transformação inversa é, segundo (3.8),

$$a_{-\alpha}(p, q) = 2\pi\hbar \text{Tr}[A(P, Q) \Delta^{-\alpha}(Q-q, P-p)] \quad (3.34)$$

A expressão (3.33) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \Delta^{\alpha}(Q-q, P-p) &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz dq' e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\theta z} e^{\frac{i}{\hbar}\theta z} e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} |q'\rangle \langle q'| e^{\frac{i}{\hbar}z P} \\ &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz dq' e^{\frac{i}{\hbar}\theta [q' - [q - (\alpha + 1/2)z]]} e^{-\frac{i}{\hbar}z p} |q'\rangle \langle q' + z| \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{-\frac{i}{\hbar}z p} |q - (\frac{1}{2} + \alpha)z\rangle \langle q + (\frac{1}{2} - \alpha)z| \quad (3.35) \end{aligned}$$

e a expressão (3.34) como

$$a_{-\alpha}(p, q) = (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz dq' e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\theta z} e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \langle q'| A(P, Q) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} |q'\rangle$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1} \int d\theta dz dq' e^{\frac{i}{\hbar} \theta \{q' - [q + (\alpha + \frac{1}{2})z]\}} e^{-\frac{i}{\hbar} z p} \langle q' | A(P, Q) | q' - z \rangle$$

$$= \int dz e^{\frac{i}{\hbar} p z} \langle q - (\frac{1}{2} + \alpha)z | A(P, Q) | q + (\frac{1}{2} - \alpha)z \rangle, \quad (3.36a)$$

onde, no último passo, trocamos  $\tau \rightarrow -\tau$ . As formas (3.32), (3.35) e (3.36a) são as que aparecem originalmente em 18; colocando  $\alpha=0$  nessas expressões, obtemos a forma usual da correspondência de Weyl<sup>17</sup>.

A correspondência de Weyl generalizada de índice  $\alpha$  (na realidade, infinitas correspondências segundo (3.30)) engloba três importantes casos particulares (Tabela I):

- (i) a correspondência de Weyl ( $\alpha = 0$ )
- (ii) a correspondência "standard" ou QP ( $\alpha = -1/2$ )
- (iii) a correspondência "antistandard" ou PQ ( $\alpha = +1/2$ )

De fato, de acordo com a literatura<sup>16</sup>, a correspondência standard (ou ordenamento standard, segundo a definição da seção III.5 adiante) é definida pelo valor do parâmetro  $\alpha = -1/2$  em (3.36a). Desde (3.36a)

$$a_{(-1/2)}^{(p, q)} = a_{1/2}^{(p, q)} = \int dz e^{\frac{i}{\hbar} p z} \langle q | A(P, Q) | q + z \rangle$$

$$= \int dp' dz e^{\frac{i}{\hbar} p' z} \langle q | A(P, Q) | p' \rangle \langle p' | q + z \rangle$$

$$= (2\pi\hbar)^{1/2} e^{-\frac{i}{\hbar} p' q} \langle q | A(P, Q) | p \rangle$$

ou seja, por (3.4),

$$a_{1/2}(p, q) = 2\pi\hbar \langle p | q \rangle \langle q | A(P, Q) | p \rangle \quad (3.36b)$$

É claro, desde (3.36b), que quando  $A(P, Q)$  estiver ordenado na forma standard (todos os  $Q$ 's à esquerda dos  $P$ 's) bastará substituir  $P \rightarrow p$  e  $Q \rightarrow q$  em  $A(P, Q)$ , no lado direito de (3.36b), e obter diretamente

$$a_{QP}(p, q) \cdot 2\pi\hbar \langle p | q \rangle \langle q | p \rangle = a_{1/2}(p, q) \quad .$$

Analogamente, definimos a correspondência antistandard ou  $PQ$  pelo valor  $\alpha = 1/2$  em (3.36a), e obtemos

$$a_{-1/2}(p, q) = 2\pi\hbar \langle q | p \rangle \langle p | A(P, Q) | q \rangle \quad (3.36c)$$

Quando  $A(P, Q)$  estiver ordenado na forma antistandard (todos os  $P$ 's à esquerda dos  $Q$ 's), substituímos  $P \rightarrow p$  e  $Q \rightarrow q$  e le-

mos diretamente  $a_{-1/2}(p,q)$  em (3.36c).

Vejamos as principais propriedades da  $GW_\alpha$ . De acordo com os desenvolvimentos gerais da seção III.3, podemos resumí-las da seguinte maneira, omitindo as respectivas demonstrações.

1) Segundo (3.15), temos

$$\left. \begin{aligned} A_{\alpha, -\alpha}(P, Q) &= A_{-\alpha, \alpha}(P, Q) = A(P, Q) \\ a_{\alpha, -\alpha}(p, q) &= a_{-\alpha, \alpha}(p, q) = a(p, q) \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

2) Dado que  $f(0, \tau) = 1$  e  $f(\theta, 0) = 1$ , temos

$$e \left. \begin{aligned} F(p) &\overset{\alpha}{\longleftrightarrow} F(P) \\ G(q) &\overset{\alpha}{\longleftrightarrow} G(Q) \end{aligned} \right\} \quad (3.38)$$

respectivamente.

3) Dado que  $f(\theta, \tau)$  é complexa:

Um operador hermitiano corresponde, em geral, a uma função complexa (Tabela II). Somente para  $\alpha = 0$  (regra de Weyl) temos a correspondência

$$\text{operador hermitiano} \overset{\alpha}{\longleftrightarrow} \text{função real} .$$

4) O operador identidade  $I$  corresponde à função 1, i.e.,

$$I \xrightarrow{\alpha} 1 \quad (3.39)$$

5) a)

$$\delta(q-q') \delta(p-p') \begin{cases} \xrightarrow{\alpha} \Delta^{\alpha}(Q-q', P-p') \\ \xrightarrow{-\alpha} \Delta^{-\alpha}(Q-q', P-p') \end{cases} \quad (3.40a)$$

b)

$$\delta(q-q') \delta(p-p') \begin{cases} \xrightarrow{-\alpha} \Delta^{\alpha}(Q-q', P-p') \\ \xrightarrow{\alpha} \Delta^{-\alpha}(Q-q', P-p') \end{cases} \quad (3.40b)$$

6) Os mapeamentos  $\alpha$  e  $-\alpha$  são lineares:

$$(i) \quad [C_1 a(p, q) + C_2 b(p, q)] \xrightarrow{\alpha} C_1 A_{\alpha}(P, Q) + C_2 B_{\alpha}(P, Q)$$

$$(ii) \quad C_1 a_{-\alpha}(p, q) + C_2 b_{-\alpha}(p, q) \xleftarrow{-\alpha} [C_1 A(P, Q) + C_2 B(P, Q)]$$

$$(iii) \quad \begin{cases} C_3 \xrightarrow{\alpha} C_3 I \\ C_3 \xleftarrow{-\alpha} C_3 I \end{cases}$$

onde  $C_1, C_2, C_3$  são c-numbers arbitrários.



7) Segundo (3.27), os equivalentes c-number de um mesmo operador se relacionam por

$$a_{\alpha}(p, q) = \exp[-i\hbar(\alpha - \alpha') \partial^2 / \partial q \partial p] a_{\alpha'}(p, q)$$

dessa expressão, segue por exemplo

$$a_{\alpha}(p, q) = \exp[-i\hbar\alpha \partial^2 / \partial q \partial p] a_0(p, q) \quad (3.41)$$

Para derivar outras propriedades precisamos expressões explícitas para as quantidades  $A_{\alpha, \beta}(P, Q)$  e  $a_{\alpha, \beta}(p, q)$  definidas por

$$A \xrightarrow{\alpha} a_{\alpha} \xrightarrow{\beta} A_{\alpha, \beta}$$

$$a \xrightarrow{\alpha} A_{\alpha} \xrightarrow{\beta} a_{\alpha, \beta}$$

onde  $|\alpha| < 1/2$ ,  $|\beta| < 1/2$ . A construção desses mapeamentos é feita através da aplicação repetida das equações (3.32) e (3.34). Assim, obtemos<sup>18</sup>:

$$A_{\alpha, \beta}(P, Q) = \int dq' dq'' |q'\rangle \langle q'| e^{-\frac{i}{\hbar}(\alpha + \beta) P(q' - q'')} A(P, Q) \times e^{\frac{i}{\hbar}(\alpha + \beta) P(q' - q'')} |q''\rangle \langle q''| \quad (3.42)$$



$$a_{\alpha, \beta} (p, q) = (2\pi k)^{-1} \int ds du e^{\frac{i}{k}(p-s)u} a(s, q + (\alpha + \beta)u) \quad (3.43)$$

Da equação (3.42) segue que

$$A_{\alpha, \beta} (P, Q) = A_{\beta, \alpha} (P, Q) \quad (3.44a)$$

$$A_{\alpha, \beta} (P, Q) = A_{\alpha + \gamma, \beta - \gamma} (P, Q) \quad (3.44b)$$

Colocando  $\gamma = -\alpha$ ,  $\gamma = \beta$  em (3.44b) obtemos

$$A_{\alpha, \beta} (P, Q) = A_{0, \alpha + \beta} (P, Q) = A_{\alpha + \beta, 0} (P, Q) \quad (3.44c)$$

Similarmente para  $a_{\alpha, \beta} (p, q)$ , da simples inspeção de (3.43), vemos que:

$$a_{\alpha, \beta} (p, q) = a_{\beta, \alpha} (p, q) \quad (3.45a)$$

$$a_{\alpha, \beta} (p, q) = a_{\alpha + \gamma, \beta - \gamma} (p, q) \quad (3.45b)$$

de onde

$$a_{\alpha, \beta} (p, q) = a_{0, \alpha + \beta} (p, q) = a_{\alpha + \beta, 0} (p, q) \quad (3.45c)$$

Observar que as propriedades (3.37) são casos particulares que seguem diretamente de (3.42) - (3.45).

Vejamos agora objetos mais complicados como o operador  $A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}$  e a função  $a_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}$  definidos, respectivamente, por

$$\left. \begin{aligned} a &\xrightarrow{\alpha_1} A_{\alpha_1} \xrightarrow{\alpha_2} a_{\alpha_1, \alpha_2} \xrightarrow{\alpha_3} \dots \xrightarrow{\alpha_n} A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} \\ A &\xrightarrow{\alpha_1} a_{\alpha_1} \xrightarrow{\alpha_2} A_{\alpha_1, \alpha_2} \xrightarrow{\alpha_3} \dots \xrightarrow{\alpha_n} a_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} \end{aligned} \right\} \quad (3.46)$$

se  $n$  é um inteiro positivo ímpar, e

$$\left. \begin{aligned} A &\xrightarrow{\alpha_1} a_{\alpha_1} \xrightarrow{\alpha_2} A_{\alpha_1, \alpha_2} \xrightarrow{\alpha_3} \dots \xrightarrow{\alpha_n} A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} \\ a &\xrightarrow{\alpha_1} A_{\alpha_1} \xrightarrow{\alpha_2} a_{\alpha_1, \alpha_2} \xrightarrow{\alpha_3} \dots \xrightarrow{\alpha_n} a_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} \end{aligned} \right\} \quad (3.47)$$

se  $n$  é um inteiro positivo par. Em todos os casos

$$|\alpha_i| \leq 1/2, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.48)$$

Notando que (3.37) implica

$$A_{0,0}(P,Q) = A(P,Q), \quad (3.49a)$$

$$a_{0,0}(p,q) = a(p,q) \quad , \quad (3.49b)$$

chega-se<sup>18</sup> facilmente a

$$A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(P, Q) = A_{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}(P, Q) \quad (3.50a)$$

$$a_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(p, q) = a_{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}(p, q) \quad , \quad (3.50b)$$

se  $n$  é ímpar, e

$$A_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(P, Q) = A_{0, \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}(P, Q) \quad (3.51a)$$

$$a_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(p, q) = a_{0, \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}(p, q) \quad , \quad (3.51b)$$

se  $n$  é par.

Concluimos a seção apresentando formas mais convenientes que as definições (3.32) e (3.34) para efeitos de cálculos explícitos. Considerando o mapeamento (3.32), se  $a(p, q) = p^m q^n$ , então (Apêndice B)

$$A_{\alpha}(P, Q) = \sum_{r=0}^{\infty} [-i\kappa(1/2 + \alpha)]^r r! \binom{n}{r} \binom{m}{r} Q^{n-r} P^{m-r} \quad (3.52a)$$

onde  $\binom{n}{r} = n! / r!(n-r)!$ . A expressão (3.52a) está na forma standard.

Uma expressão equivalente, mas na forma Weyl-simetrizada, é (B3)

$$A_{\alpha}(P,Q) = n!m! \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-i\hbar\alpha)^r}{r!(m+n-2r)!} (Q^{n-r} P^{m-r})_{C.L.} \quad (3.52b)$$

onde  $(Q^{n-r} P^{m-r})_{C.L.}$  representa a combinação linear de todos os possíveis produtos de  $(n-r)$  Q's e  $(m-r)$  P's. Outra expressão equivalente é

$$A_{\alpha}(P,Q) = \sum_{r=0}^n \binom{n}{r} [(1/2-\alpha)Q]^{n-r} P^m [(1/2+\alpha)Q]^r \quad (3.52c)$$

cuja demonstração é dada no Apêndice B.

Para o mapeamento (3.34), se  $A(P,Q) = P^m Q^n$ , então (B9)

$$a_{\alpha}(p,q) = \sum_{r=0}^{\infty} [-i\hbar(1/2+\alpha)]^r r! \binom{n}{r} \binom{m}{r} q^{n-r} p^{m-r} \quad (3.53a)$$

De forma análoga, para  $A(P,Q) = Q^n P^m$ , obtemos

$$a_{\alpha}(p,q) = \sum_{r=0}^{\infty} [i\hbar(1/2-\alpha)]^r r! \binom{n}{r} \binom{m}{r} q^{n-r} p^{m-r} \quad (3.53b)$$

De (3.52a) e (3.53b) resultam evidentes as propriedades (3.37). Como exemplos ilustrativos de (3.34), temos<sup>18</sup>

$$\frac{1}{2} P f(Q) P \xrightarrow{\alpha} \frac{1}{2} p^2 f(q) - i\hbar\alpha p \frac{df(q)}{dq} + \frac{\hbar^2}{2} (1/4 - \alpha^2) \frac{d^2 f(q)}{dq^2}, \quad (3.54a)$$

$$\frac{1}{4} [P^2 f(Q) + f(Q) P^2] \xrightarrow{\alpha} \frac{1}{2} p^2 f(q) - i \hbar \alpha p \frac{df(q)}{dq} - \frac{\hbar^2}{2} (\frac{1}{4} + \alpha^2) \frac{d^2 f(q)}{dq^2} \quad (3.54b)$$

Podemos obter (3.54) por cálculo direto desde (3.34), ou desde (3.34) para encontrar  $a_0(p, q)$  e então usar (3.41) para obter  $a_\alpha(p, q)$ .

Exemplos das expressões (3.53) e (3.52a) são dados nas Tabelas II e III, respectivamente.

### III.3 - O Problema de Ordenamento

Não é nosso objetivo discutir o problema de quantização, o qual diz respeito ao mapeamento  $a(p, q) \longrightarrow A(P, Q)$ , em detalhe. Existem várias formas ou regras de quantização<sup>23</sup>. A escolha de uma regra particular é, em geral, uma questão de conveniência; depende do problema específico que se pretenda tratar e também, como sempre, de concordância com a experiência.

Neste trabalho, partimos da Mecânica Quântica, isto é, desde operadores bem determinados; estamos, portanto, particularmente interessados no mapeamento inverso  $a(p, q) \longleftarrow A(P, Q)$ .

Nesta seção, derivamos alguns resultados gerais referentes a esquemas de espaço de fase para ordenamento de operadores não-comutantes; definimos o que <sup>se</sup> entende por forma ordenada de um operador arbitrário, associada a uma dada regra de correspondência, e apresentamos exemplos.

Começamos derivando uma expressão formal que define um esquema de ordenamento de operadores arbitrário. Vejamos primei

ro como foi introduzido por Weyl, em 1927, o ordenamento que traz o seu nome.

Seja  $g(p, q)$  uma função clássica das variáveis comutantes  $p$  e  $q$ . Sua transformada de Fourier  $\bar{e}$

$$\chi(\theta, z) = (2\pi\hbar)^{-1} \int dp dq g(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \quad (3.55)$$

O operador  $G(P, Q)$  correspondente a  $g(p, q)$   $\bar{e}$  definido por

$$\begin{aligned} G(P, Q) &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dz d\theta \chi(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \\ &= (2\pi\hbar)^{-2} \int dz d\theta dp dq g(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Este  $\bar{e}$  é o caso particular, para  $f(\theta, \tau) = 1$ , de (3.6) e (3.7) (ver Tabela I). Uma forma equivalente de definir esse ordenamento  $\bar{e}$  obtida escrevendo

$$g(p, q) = e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' q + z' p)} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta'/\hbar)^n (iz'/\hbar)^m}{n! m!} q^n p^m \quad (3.57)$$

com o que (3.56) fornece

$$\begin{aligned}
 G(P, Q) &= \int dz d\theta e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)} (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq e^{-\frac{i}{\hbar}q(\theta - \theta') - \frac{i}{\hbar}p(z - z')} \\
 &= \int dz d\theta e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)} \delta(\theta - \theta') \delta(z - z') \\
 &= e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' Q + z' P)}.
 \end{aligned}$$

Assim, diz-se que o esquema de ordenamento de operadores (regra de quantização) de Weyl consiste na associação

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \quad (3.58)$$

Outra forma equivalente é obtida escrevendo, desde (3.57),  $a(p, q) = q^n p^m$ . A expressão (3.6) fornece então

$$\begin{aligned}
 A(P, Q) &= (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz q^n p^m e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q - q) + z(P - p)]} \\
 &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)} \int dp dq q^n p^m e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \\
 &= (i\hbar)^{m+n} \int d\theta dz e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)} \delta^{(n)}(\theta) \delta^{(m)}(z),
 \end{aligned}$$

onde  $\delta^{(n)}(\theta)$  é a derivada  $n$ -ésima da função delta. Usando a propriedade  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta^{(n)}(x) = (-1)^n f^{(n)}(x)|_{x=0}$ , obtemos

$$A(P, Q) = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^n \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^m e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + zP)} \Big|_{\theta=z=0}.$$



Portanto, o produto Weyl-ordenado  $\{P^m Q^n\}_W$  é definido por

$$\{P^m Q^n\}_W = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^n \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)^m e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \Big|_{\theta=z=0} \quad (3.59a)$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{r=0}^n \binom{n}{r} Q^{n-r} P^m Q^r \quad (3.59b)$$

e consiste na combinação linear de todos os possíveis produtos, envolvendo  $m$   $P$ 's e  $n$   $Q$ 's, divididos pelo número total desses produtos (Apêndice B). Por exemplo,

$$\{P^2 Q\}_W \equiv \frac{1}{3} (P^2 Q + P Q P + Q P^2) . \quad (3.60)$$

Passemos ao caso mais geral. De acordo com (3.6) e (3.7), temos

$$G_f(P, Q) = (2\pi\hbar)^{-2} \int dp dq d\theta dz g(p, q) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}[\theta(Q-q) + z(P-p)]} \quad (3.61)$$

Analogamente, se  $g(p, q)$  é dada por (3.57), obtemos

$$\begin{aligned} G_f(P, Q) &= \int d\theta dz f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \delta(\theta - \theta') \delta(z - z') \\ &= f(\theta', z') e^{\frac{i}{\hbar}(\theta' Q + z' P)} . \end{aligned}$$

Portanto, definimos formalmente um esquema arbitrário



de ordenamento de operadores pela associação

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \longrightarrow f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \quad (3.62)$$

Assim, o produto f-ordenado  $\{P^m Q^n\}_f$  é definido por

$$\{P^m Q^n\}_f = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}\right)^n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}\right)^m D_f(\theta, z) \Big|_{\theta=z=0} \quad (3.63)$$

onde

$$D_f(\theta, z) = f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \quad (3.64)$$

é o chamado operador de Weyl generalizado.

Observação: Em (3.63), como sempre, a ordem dos fatores operacionais deve ser preservada na diferenciação.

Os desenvolvimentos acima possibilitam obter uma expressão mais operacional que a definição (3.6). Desde (3.6),

$$\begin{aligned} A_f(P, Q) &= (2\pi\hbar)^{-2} \int d\theta dz f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \left\{ \int dp dq a(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \right\} \\ &= \int d\theta dz \left[ f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)} \right] a\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}\right) \delta(\theta) \delta(z) \end{aligned}$$

Supondo que  $a(p, q)$  pode ser expandida em série de po-

tências em  $p$  e  $q$ , obtemos

$$A_f(P, Q) = a\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta}\right) D_f(\theta, z) \Big|_{\theta=z=0} \quad (3.65)$$

que é a expressão mencionada.

Uma medida necessária, para comparar operadores ou regras de quantização, é escrever todos os operadores em uma mesma forma ordenada. Uma expressão adequada a essa finalidade, fornecendo todos os operadores na forma standard, é

$$A_f(P, Q) = f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p}\right)} a(p, q) \Big|_{\substack{q \text{ à esq. de } p \\ q \rightarrow Q; p \rightarrow P}} \quad (3.66)$$

Notar que  $A_f(P, Q)$  está na forma standard. A barra vertical indica que, depois de realizadas todas as operações sobre  $a(p, q)$ , deve-se primeiro ordenar todos os  $q$ 's à esquerda dos  $p$ 's e depois substituir  $q \rightarrow Q$ ,  $p \rightarrow P$  (Apêndice B).

A seguir, vejamos como expressar um operador arbitrário em uma particular forma ordenada, associada com uma dada regra de correspondência.

Para isso, introduzimos para cada regra única de associação da Tabela I, o conjunto de formas ordenadas  $\mathcal{A}_{mn}^{(s)}(P, Q)$  com  $m$  e  $n$  inteiros não negativos. Cada forma ordenada tem uma particular forma funcional definida como segue:

$$\mathcal{A}_{mn}^{(s)}(P, Q) \equiv Q^n P^m \quad (3.67a)$$

$$\mathcal{A}_{mn}^{(AS)}(P, Q) \equiv P^m Q^n \quad (3.67b)$$

$$\mathcal{A}_{mn}^{(W)}(P, Q) \equiv \{P^m Q^n\}_w \equiv \frac{n!m!}{(n+m)!} (QP)_{CL}^{nm} \quad (3.67c)$$

$$\mathcal{A}_{mn}^{(SYM.)}(P, Q) \equiv \{P^m Q^n\}_{SYM.} \equiv \frac{1}{2} [Q^n P^m + P^m Q^n] \quad (3.67d)$$

$$\mathcal{A}_{mn}^{(B-J)}(P, Q) \equiv \{P^m Q^n\}_{B-J} \equiv \frac{1}{n+1} \sum_{r=0}^n Q^{n-r} P^m Q^r \quad (3.67e)$$

de acordo com o Apêndice B. Define-se<sup>16c</sup> também

$$\mathcal{A}_{mn}^{(N)}(a, a^\dagger) \equiv \{a^{\dagger m} a^n\}_N \equiv a^{\dagger m} a^n \quad (3.67f)$$

$$\mathcal{A}_{mn}^{(AN)}(a, a^\dagger) \equiv \{a^{\dagger m} a^n\}_{AN} \equiv a^n a^{\dagger m} \quad (3.67g)$$

onde

$$a \equiv (2\hbar)^{-1/2} (Q + iP), \quad a^\dagger \equiv (2\hbar)^{-1/2} (Q - iP)$$

são os operadores usuais de destruição e criação.

Observações:

- (i) As expressões (3.67f) - (3.67g) foram introduzidas por completicidade.

(ii) O sinal de identidade ( $\equiv$ ) significa que as expressões são iguais entre si sem o uso das relações de comutação (3.2). Por exemplo, tomando  $m=n=1$  e considerando a regra standard (s), temos que  $A_{11}^{(s)}(P,Q) \equiv QP$ . Por outro lado, o operador  $A^{(s)}(P,Q) = QP$  é igual a  $A_{11}^{(s)}(P,Q)$  expressa de qualquer forma, e.g.,  $PQ + i\hbar I$ . Assim,

$$A^{(s)}(P,Q) = QP = PQ + i\hbar I \quad \text{mas} \quad A_{11}^{(s)}(P,Q) \equiv QP.$$

(iii) Não existe a forma  $A_{mn}^{(\alpha)}(P,Q)$  porquanto as  $GW_\alpha$  são infinitas regras. Por exemplo, de acordo com (3.63), o produto  $\{PQ\}_\alpha$  é dado por

$$\begin{aligned} \{PQ\}_\alpha &= \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \left[ e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} (\theta Q + z P)} \right]_{\theta=z=0} \\ &= (-\hbar^2) \frac{\partial^2}{\partial z \partial \theta} \left[ e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha + 1/2) \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} z P} \right]_{\theta=z=0} \\ &= -i\hbar (\alpha + 1/2) + QP \end{aligned} \quad (3.68a)$$

o qual está na forma standard. Todavia, o mesmo produto  $\{PQ\}_\alpha$  pode ser escrito como

$$\{PQ\}_\alpha = i\hbar (1/2 - \alpha) + PQ \quad (3.68b)$$

na forma antistandard, ou como

$$\{PQ\}_\alpha = -i\hbar \alpha + \frac{1}{2}(QP + PQ) \quad (3.68c)$$

na forma Weyl-simetrizada.

De posse das formas ordenadas  $\mathcal{A}_{nm}^{(f)}(P,Q)$  ( $f$  significando correspondências únicas), definimos<sup>16c</sup> a forma  $f$ -ordenada  $A^{(f)}(P,Q)$  de um operador arbitrário  $A(P,Q)$  pelas seguintes propriedades:

$$(i) \quad A^{(f)}(P,Q) = A(P,Q) \quad . \quad (3.69)$$

(ii)  $A^{(f)}(P,Q)$  é identicamente igual à combinação linear dos  $\mathcal{A}_{mn}^{(f)}$ , i.e.,

$$A^{(f)}(P,Q) \equiv \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn} \mathcal{A}_{mn}^{(f)}(P,Q) \quad . \quad (3.70)$$

O sinal identidade é essencial em (3.70).

Introduzimos, para cada mapeamento único  $f$ , um operador linear  $S^{(f)}$  chamado operador substituição para o mapeamento  $f$ .  $S^{(f)}$  é definido por

$$S^{(f)} \left[ \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn} p^m q^n \right] \equiv \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn} \mathcal{A}_{mn}^{(f)}(P,Q) \quad , \quad (3.71)$$

ou seja,  $S^{(f)}$  operando sobre uma série de potências em  $p$  e  $q$  torna-a em uma forma  $f$ -ordenada, substituindo cada  $p^m q^n$  por  $\mathcal{A}_{mn}^{(f)}(P,Q)$ .

Colocando

$$\sum_{m,n=0}^{\infty} c_{mn} p^m q^n = a(p,q) \quad , \quad (3.72)$$

temos, desde (3.71) e (3.70), que

mento apropriado. O teorema implica que para achar a forma f-ordenada de  $A(P,Q)$  s̄o se precisa obter seu equivalente  $f^{-1}$  (inverso)  $a_{f^{-1}}(p,q)$ , expandir  $a_{f^{-1}}(p,q)$  em uma s̄rie de pot̄ncias em  $p$  e  $q$  e fazer as substituiç̄oes indicadas em (3.71).

Nota: O teorema ̄e mais geral se em vez de  $f^{-1}$  usamos  $\tilde{f}$ .

Na Tabela III, a seguir, apresentamos exemplos de mapeamento  $a(p,q) \xrightarrow{f} A_f(P,Q)$  obtidos atrav̄s da express̄o (3.66), a qual est̄a na forma standard.

Os ordenamentos de Weyl, Simetrizaç̄o e de Born-Jordan podem ser escritos (ver (B.1b), (B.21a) e (B.23)) na forma comum

$$\{P^m Q^n\} = \sum_{r=0}^{\infty} (-i\hbar)^r \binom{m}{r} \binom{n}{r} \frac{r!}{a_r} Q^{n-r} P^{m-r} \quad (3.77)$$

onde

$$a_r = 2^r \quad (\text{regra de Weyl}) \quad (3.78a)$$

$$= \frac{2}{\delta_{r,0} + 1} \quad (\text{regra de Simetrizaç̄o}) \quad (3.78b)$$

$$= r+1 \quad (\text{regra de Born-Jordan}) \quad (3.78c)$$

Os coeficientes  $a_0$  e  $a_1$  s̄o os mesmos para as tr̄s regras, de modo que as tr̄s d̄o os mesmos resultados para  $\underline{m}$  ou  $\underline{n}$  igual ̄a unidade. Para  $\underline{m}$  e  $\underline{n} \geq 2$ , essas regras diferem por termos

$$S^{(f)} [ a(p, q) ] \equiv A^{(f)}(P, Q) \quad (3.73)$$

pela linearidade de  $S^{(f)}$ .

Com isso, é claro que  $A^{(f)}(P, Q)$  é o operador  $A(P, Q)$  expresso na particular forma funcional na qual a função  $a(p, q)$  é mapeada através do mapeamento  $f$ :

$$A^{(f)}(P, Q) = A_f(P, Q) = A(P, Q) \quad , \quad (3.74)$$

ou, tomando a inversa de (3.74)

$$a(p, q) = a_{f^{-1}, f}^{(f)}(p, q) \xleftarrow{f^{-1}} A_f(P, Q) = A(P, Q) \quad (3.75)$$

Portanto, desde (3.73) e (3.75), temos o seguinte Teorema:

A forma  $f$ -ordenada  $A_f(P, Q)$  de uma função arbitrária  $A(P, Q)$  dos operadores  $P$  e  $Q$  é dada por

$$A_f(P, Q) \equiv S^{(f)} [ a_{f^{-1}, f}^{(f)}(p, q) ] \quad (3.76a)$$

onde

$$a_{f^{-1}, f}^{(f)}(p, q) = 2\pi\hbar \text{Tr} [ A(P, Q) \Delta^{(f^{-1})}(Q-q, P-p) ] \quad (3.76b)$$

O teorema acima reduz o problema de determinar a forma  $f$ -ordenada ( $f$  única) de um dado operador arbitrário ao problema de mapear dito operador a uma função  $c$ -number através do mapea



mento apropriado. O teorema implica que para achar a forma f-ordenada de  $A(P,Q)$  s $\tilde{o}$  se precisa obter seu equivalente  $f^{-1}$  (inverso) a  $f^{-1}(p,q)$ , expandir a  $f^{-1}(p,q)$  em uma s $\tilde{e}$ rie de pot $\tilde{e}$ ncias em  $p$  e  $q$  e fazer as substitui $\tilde{c}$ oes indicadas em (3.71).

Nota: O teorema  $\tilde{e}$  mais geral se em vez de  $f^{-1}$  usamos  $\tilde{f}$ .

Na Tabela III, a seguir, apresentamos exemplos de mapeamento  $a(p,q) \xrightarrow{f} A_f(P,Q)$  obtidos atrav $\tilde{e}$ s da express $\tilde{a}$ o (3.66), a qual est $\tilde{a}$  na forma standard.

Os ordenamentos de Weyl, Simetriza $\tilde{c}$ ao e de Born-Jordan podem ser escritos (ver (B.1b), (B.21a) e (B.23)) na forma comum

$$\{P^m Q^n\} = \sum_{r=0}^{\infty} (-i\hbar)^r \binom{m}{r} \binom{n}{r} \frac{r!}{a_r} Q^{n-r} P^{m-r} \quad (3.77)$$

onde

$$a_r = 2^r \quad (\text{regra de Weyl}) \quad (3.78a)$$

$$= \frac{2}{\delta_{r,0} + 1} \quad (\text{regra de Simetriza $\tilde{c}$ ao}) \quad (3.78b)$$

$$= r+1 \quad (\text{regra de Born-Jordan}) \quad (3.78c)$$

Os coeficientes  $a_0$  e  $a_1$  s $\tilde{a}$ o os mesmos para as tr $\tilde{e}$ s regras, de modo que as tr $\tilde{e}$ s d $\tilde{a}$ o os mesmos resultados para  $\underline{m}$  ou  $\underline{n}$  igual  $\tilde{a}$  unidade. Para  $\underline{m}$  e  $\underline{n} \geq 2$ , essas regras diferem por termos



de ordem  $\hbar^2$  (Tabela III).

Apesar da semelhança (Tabelas II e III) com a regra de Weyl, as regras de Simetrização e de Born-Jordan não serão consideradas nos capítulos subsequentes porquanto os mapeamentos inversos, para essas regras, apresentam singularidades. Este fato gera questões interessantes ao nível da formulação funcional, as quais poderão ser tratadas futuramente.

As Tabelas II e III permitem ilustrar o teorema (3.76). Exemplos são obtidos em três passos:

- a) Mapeamento de  $A(P, Q)$  pelo mapeamento inverso;
- b) Substituição da função obtida em a) de acordo com (3.71);
- c) Verificação de que o operador obtido em b) é igual ao operador de partida.

1) A forma standard de  $PQ$  é  $QP - i\hbar$ .

Prova

$$a) \quad PQ \xrightarrow{AS} qP - i\hbar$$

$$b) \quad S^{(s)} [qP - i\hbar] \equiv QP - i\hbar$$

$$c) \quad PQ = QP - i\hbar \quad \text{por (3.2)} .$$

2) A forma standard de  $QPQ$  é  $Q^2P - i\hbar Q$ .

Prova

$$a) \quad QPQ \xrightarrow{AS} q^2P - i\hbar q$$

$$b) \quad S^{(s)} [q^2P - i\hbar q] \equiv Q^2P - i\hbar Q$$

$$c) \quad Q^2P - i\hbar Q = Q(QP - i\hbar) = QPQ .$$

3) A forma Weyl-ordenada de  $(Q^2P+PQ^2)/2$  é  $(Q^2P+QPQ+PQ^2)/3$ .

Prova

$$a) (Q^2P+PQ^2)/2 \xrightarrow{w^{-1}} \begin{matrix} Q^2 \\ | \\ P \end{matrix}$$

$$b) S^{(w)} \left[ \begin{matrix} Q^2 \\ | \\ P \end{matrix} \right] \equiv (Q^2P+QPQ+PQ^2)/3$$

$$\begin{aligned} c) (Q^2P+QPQ+PQ^2)/3 &= (Q^2P+PQ^2)/3 - QPQ + \frac{4}{3}QPQ \\ &= Q^2P+PQ^2 - QPQ = (Q^2P+PQ^2)/2 + (Q^2P+PQ^2-2QPQ)/2 \\ &= (Q^2P+PQ^2)/2 \end{aligned}$$

Tabela III - Exemplos do mapeamento  $a(p,q) \rightarrow A(P,Q)$

Função	Operador				
	Correspondência de Weyl generalizada de Índice $\alpha$ ( $GW_\alpha$ )	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Standard (S)} \\ \text{Weyl (W)} \\ \text{Antistandard (AS)} \end{array} \right\} = \text{(S)}$	Simetrização	Born-Jordan	
$pq$	$QP - i\hbar(1/2 + \alpha)$	$\left\{ \begin{array}{l} QP \\ \frac{1}{2}(QP + PQ) \\ PQ \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} QP \\ QP - i\hbar/2 \\ QP - i\hbar \end{array} \right\}$	$QP - i\hbar/2$	$QP - i\hbar/2$
$pq^2$	$Q^2P - i\hbar(1 + 2\alpha)Q$	$\left\{ \begin{array}{l} Q^2P \\ \frac{1}{2}(Q^2P + QPQ + PQ^2) \\ PQ^2 \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} Q^2P \\ Q^2P - i\hbar Q \\ Q^2P - 2i\hbar Q \end{array} \right\}$	$Q^2P - i\hbar Q$	$Q^2P - i\hbar Q$
$qp^2$	$QP^2 - i\hbar(1 + 2\alpha)P$	$\left\{ \begin{array}{l} QP^2 \\ QP^2 - i\hbar P \\ QP^2 - 2i\hbar P \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} QP^2 \\ QP^2 - i\hbar P \\ QP^2 - 2i\hbar P \end{array} \right\}$	$QP^2 - i\hbar P$	$QP^2 - i\hbar P$
$q^2p^2$	$Q^2P^2 - 2i\hbar(1 + 2\alpha)QP - 2\hbar^2(1/2 + \alpha)^2$	$\left\{ \begin{array}{l} Q^2P^2 \\ Q^2P^2 - 2i\hbar QP - \hbar^2/2 \\ Q^2P^2 - 4i\hbar QP - 2\hbar^2 \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} Q^2P^2 \\ Q^2P^2 - 2i\hbar QP - \hbar^2 \\ Q^2P^2 - 2i\hbar QP - \hbar^2 \end{array} \right\}$	$Q^2P^2 - 2i\hbar QP - \hbar^2$	$Q^2P^2 - 2i\hbar QP - \frac{2}{3}\hbar^2$

## IV - FORMULAÇÃO FUNCIONAL DA MECÂNICA-QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA

IV.1 - Formulação de Espaço de Configuração

A formulação de espaço de configuração é a formulação original de Feynman para a mecânica quântica não-relativística. Nesse tratamento da dinâmica de um sistema de uma partícula, é dada uma prescrição para o cálculo da função transformação  $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$  (o módulo ao quadrado da qual dá a densidade de probabilidade para a partícula, cuja dinâmica é descrita por um operador Hamiltoniano  $H$ , ser encontrada na posição  $q_b$  no tempo  $t_b$  se sua posição inicial foi  $q_a$  em  $t_a$ ) da seguinte maneira. Atribui-se uma amplitude de probabilidade complexa  $\Phi$  a cada trajetória espaço-tempo  $q(t)$  (com  $q(t_a) = q_a$  e  $q(t_b) = q_b$ ), i.e., começando em  $q_a$  no tempo  $t_a$  e terminando em  $q_b$  no tempo  $t_b$ , na forma

$$\Phi[q] = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt L(q(t), \dot{q}(t))\right] \quad (4.1a)$$

onde  $L(q(t), \dot{q}(t))$  é o Lagrangeano clássico para a partícula. No lado direito de (4.1a), a ação

$$S[q|t_b, t_a] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(q(t), \dot{q}(t)) \quad (4.1b)$$

é um funcional de  $q(t)$ . A amplitude  $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$  é obtida como a soma das amplitudes  $\Phi$  sobre todas as trajetórias ligando  $q_a, t_a$  a  $q_b, t_b$  e escrita como a integral funcional

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \mathcal{N} \int [Dq] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt L(q(t), \dot{q}(t)) \right] \quad (4.2)$$

onde  $\mathcal{N}$  é um fator de normalização.

A expressão (4.2) constitui o postulado fundamental de Feynman<sup>6b</sup>: as trajetórias contribuem quantidades iguais à amplitude mas com fases diferentes. A fase da contribuição, para uma trajetória, é igual a correspondente ação clássica  $S$  em unidades de  $\hbar$ .

Note-se que no limite clássico todas as quantidades são muito maiores que  $\hbar$ . Segue que somente a trajetória  $\bar{q}(t)$ , determinada pelo princípio de mínima ação (a trajetória clássica), sobrevive. Pode-se verificar que a formulação funcional reproduz os resultados da formulação operatorial da mecânica quântica. Em particular, é possível derivar a equação de Schrödinger a partir da formulação funcional.

A integral funcional em (4.2) foi definida através de um procedimento de discretização chamado "time-slicing" (seção IV.2 abaixo). Este tipo de integral funcional foi estendido a sistemas não-lineares por DeWitt<sup>24</sup>, usando um formalismo covariante. Mais tarde, a integral funcional canônica (que envolve soma sobre trajetórias de espaço de fase e também introduzida por Feynman<sup>6c</sup>) tornou-se amplamente utilizada a partir dos trabalhos de Toboçman, Davies e Garrod<sup>25</sup>. Resultou imediatamente claro que ambas formulações, lagrangeana e canônica, são equivalentes para o caso de sistemas cujo Hamiltoniano não contém termos com produtos de operadores não comutantes. No caso mais geral de sistemas não-lineares, a formulação correta é a formulação funcional

$$t_a \equiv t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m < t_{m+1} \equiv t_b \quad . \quad (4.4)$$

Dado que amplitudes para eventos ocorrendo sucessivamente no tempo multiplicam-se, reescrevemos (4.3) como

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \int dq_1 \dots dq_m \prod_{j=0}^m K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) \quad (4.5)$$

onde introduzimos  $q_{m+1} \equiv q_b$ ,  $q_0 \equiv q_a$ .

Consideremos o elemento de matriz

$$K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) = \langle q_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q)} | q_j \rangle \quad (4.6)$$

Em primeira ordem em  $(t_{j+1} - t_j)$  temos

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q)} = I - \frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q) \quad (4.7)$$

De acordo com a propriedade 1) das correspondências gerais (seção III.1), podemos escrever:

$$I - \frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q) = \left[ I - \frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q) \right]_{f, \tilde{f}} \quad (4.8)$$

Usando as propriedades 5) e 7) das correspondências gerais, o lado direito de (4.8) pode ser escrito como

$$\left[ I - \frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)H(P, Q) \right]_{f, \tilde{f}} = \int dp dq \left[ 1 - \frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)h_f(p, q) \right] \Delta^{(\tilde{f})}(Q=q, P=p) \quad (4.9)$$

Portanto, em primeira ordem em  $(t_{j+1} - t_j)$ , o  $(j+1)$ -ésimo "short-time propagator" é dado por

$$K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) = \int dp dx_j e^{-\frac{i}{\hbar}(t_{j+1} - t_j)h_f(p, x_j)} \langle q_{j+1} | \Delta^{(\tilde{f})}(Q=x_j, P=p_j) | q_j \rangle \quad (4.9)$$



O elemento de matriz  $\langle q_{j+1} | \Delta^{(\tilde{f})} (Q-x_j, P-p_j) | q_j \rangle$ , desde (3.7) é

$$\langle q_{j+1} | \Delta^{(\tilde{f})} (Q-x_j, P-p_j) | q_j \rangle = (2\pi\hbar)^{-2n} \int d\theta \tilde{f}(\theta, q_j - q_{j+1}) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta [x_j - \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)]} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (q_{j+1} - q_j)} \quad (4.10)$$

Então, das equações (4.9) e (4.10) segue que

$$K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) = (2\pi\hbar)^{-2n} \int dp_j dx_j d\theta \tilde{f}(\theta, q_j - q_{j+1}) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta [x_j - \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)]} e^{\frac{i}{\hbar} [p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{(t_{j+1} - t_j)} - h(p_j, x_j)] (t_{j+1} - t_j)} \quad (4.11)$$

Levando (4.11) em (4.5), obtemos

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \int dq_1 \dots dq_m \times \prod_{j=0}^m \left\{ \frac{dp_j dx_j d\theta_j}{(2\pi\hbar)^{2n}} \tilde{f}(\theta_j, q_j - q_{j+1}) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta_j [x_j - \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)]} e^{\frac{i}{\hbar} [p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{(t_{j+1} - t_j)} - h(p_j, x_j)] (t_{j+1} - t_j)} \right\},$$

ou seja,

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \int \frac{dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m}{(2\pi\hbar)^{(m+1)n}}$$

$$\times \prod_{j=0}^m \left\{ \frac{dx_j d\theta_j}{(2\pi\hbar)^n} \tilde{f}(\theta_j, q_j - q_{j+1}) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta_j [x_j - \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)]} e^{\frac{i}{\hbar} [p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{(t_{j+1} - t_j)} - h(p_j, x_j)] (t_{j+1} - t_j)} \right\} \quad (4.12)$$

A expressão (4.12) é a aproximação discreta mais geral (que engloba as correspondências relevantes da Tabela I) ao propagador. A aproximação (4.11) ao short-time propagator depende da

particular discretização utilizada ( $f(\theta, \tau)$ ). Por exemplo, para o caso da  $GW_\alpha$ , (4.11) reduz-se a

$$K(q_{t_{j+1}}, t_{j+1}; q_{t_j}, t_j) = (2\pi\hbar)^{-n} \int dp_j e^{\frac{i}{\hbar} \left[ p_j \frac{(q_{t_{j+1}} - q_{t_j})}{(t_{j+1} - t_j)} - h_\alpha(p_j, (\frac{1}{2} + \alpha)q_{t_{j+1}} + (\frac{1}{2} - \alpha)q_{t_j}) \right] (t_{j+1} - t_j)} \quad (4.13)$$

com o que obtemos<sup>18</sup>

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} (2\pi\hbar)^{-n(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m \times e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{t_{j+1}} - q_{t_j})}{(t_{j+1} - t_j)} - h_\alpha(p_j, (\frac{1}{2} + \alpha)q_{t_{j+1}} + (\frac{1}{2} - \alpha)q_{t_j}) \right] (t_{j+1} - t_j) \right\}} \quad (4.14)$$

É claro que, para que a formulação funcional seja consistente, a amplitude de transição deve ser independente de  $\alpha$ . É um dos propósitos centrais deste trabalho, estudar o mecanismo de cancelamento de dita dependência.

O limite  $m \rightarrow \infty$  deve ser entendido como  $\max(t_{j+1} - t_j) \rightarrow 0$  enquanto  $\sum_{j=0}^m (t_{j+1} - t_j) = t_b - t_a$ . O integrando em (4.14) é suposto tender a um funcional bem definido para todo  $\alpha \in [-1/2, 1/2]$ . Assim, escrevemos<sup>18</sup>

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \int_\alpha \left[ \frac{Dp Dq}{2\pi\hbar} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p(t)\dot{q}(t) - h_\alpha(p(t), q(t))] dt} \quad (4.15)$$

A integral funcional (4.15) deve ser entendida como definida em (4.14). Isto implica que seu valor é encontrado efetuando



do primeiro todas as integrais no lado direito de (4.14) e depois tomando o limite  $m \rightarrow \infty$ . Se tal limite existe, como acontece para os sistemas estudados neste trabalho, dá o valor da integral funcional. O sub-índice  $\alpha$  no sinal de integral funcional em (4.15) indica que quando a transformada de Weyl generalizada de índice  $\alpha$  do operador Hamiltoniano, i.e.,  $h_\alpha(p, q)$  é usada como função "clássica" na integral funcional de espaço de fase, deve-se correspondentemente calcular os termos dependentes de posição (no método de time-slicing) no ponto  $q = (1/2 + \alpha)q_{j+1} + (1/2 - \alpha)q_j$ .

As diferentes discretizações (diferentes escolhas de  $f(\theta, \tau)$  que por sua vez definem distintas regras de ordenamento de operadores) correspondem diferentes representações por integrais funcionais. Portanto, como vemos desde (4.11) ou (4.13), um problema quanto-mecânico especificado por um dado operador Hamiltoniano não tem uma translação única à linguagem de integrais funcionais.

Uma importante forma alternativa para a integral funcional canônica (4.15) é a chamada forma holomórfica da integral funcional. Esta forma é definida em termos das variáveis complexas  $a = (1/\sqrt{2})(q + ip)$  e  $a^* = (1/\sqrt{2})(q - ip)$ . Estas variáveis definem uma realização do espaço de Hilbert em termos de funções analíticas inteiras. Este espaço foi investigado em detalhe por Bargmann<sup>27</sup>. Em particular, a forma holomórfica remove o problema da medida complexa mencionado na Introdução do capítulo II — a medida funcional neste caso é real. Remove também o problema de integrais não-convergentes do tipo  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ix^2) dx$  —

somente integrais absolutamente convergentes são encontradas neste tratamento. A integral de espaço de fase sobre as variáveis  $a$  e  $a^*$  foi discutida, por exemplo, por Schweber<sup>28</sup>, Berezin<sup>17c</sup>, Agarwal-Wolf<sup>16c</sup> e Faddeev<sup>29</sup>. Uma descrição detalhada pode ser encontrada em 15.

Algumas asseverações gerais podem ser feitas à base de (4.14) e (4.15), conseqüências diretas da equação de Schrödinger.

a) Cada trajetória de espaço de fase contribui à amplitude com uma fase igual a  $1/\hbar$  vezes uma "ação efetiva" tomada ao longo da mesma. De acordo com (3.34) ou (3.53), as funções  $\alpha$  do operador  $H(P,Q)$  podem ser decompostas na forma

$$h_\alpha(p,q) = h_{cl}(p,q) + \delta h_\alpha(p,q) \quad , \quad (4.16)$$

onde a função clássica de espaço de fase

$$h_{cl}(p,q) \equiv \lim_{\hbar \rightarrow 0} h_\alpha(p,q) \quad (4.17)$$

corresponde a  $H(P,Q)$  no limite clássico e é independente de  $\alpha$ . Assim, no limite clássico a fase é proporcional à ação clássica. A dependência em  $\alpha$  aparece apenas no termo de "correção quântica"  $\delta h_\alpha(p,q)$  o qual é pelo menos de ordem  $\hbar$ .

b) O princípio de incerteza é automaticamente satisfeito em (4.15) no fato de que não temos informação alguma dos momenta inicial e final (quando a partícula está estritamente localizada) e, portanto, a integral funcional é uma integral sobre todas as hiper superfícies contínuas de espaço de fase ao longo das linhas

( $q = q_a, t = t_a$ ) e ( $q = q_b, t = t_b$ ) e entre elas.

c) Expressões semelhantes a (4.14) e (4.15) são obtidas se o Hamiltoniano é dependente do tempo, desde que  $[H(t), H(s)] = 0$  para todo  $t, s \in [t_a, t_b]$ . O operador evolução temporal é então  $\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_j}^{t_{j+1}} H(P, Q, s) ds\right]$  o qual é igual a  $\exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(P, Q, t_j)(t_{j+1} - t_j)\right]$  em primeira ordem em  $(t_{j+1} - t_j)$ . O argumento procede como antes.

d) Notar, em (4.15), a ausência de qualquer fator de normalização. A normalização surge naturalmente no formalismo de espaço de fase, como veremos no capítulo V.

#### IV.2.2 - Funções de Green

Consideremos o elemento de matriz do operador posição  $Q$  da representação de Heisenberg, calculado no tempo  $t'_1$ , para  $t_b \geq t'_1 \geq t_a$ .

Escrevemos  $\langle q_b, t_b | Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle$  da maneira usual<sup>30</sup>, subdividindo o intervalo temporal como em (4.4). Escolhendo  $t'_1$  como um dos  $t_j$ , por exemplo  $t_{1j}$ , temos

$$\langle q_b, t_b | Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle = \int dq_1 \dots dq_m \langle q_b, t_b | q_m, t_m \rangle \langle q_m, t_m | q_{m-1}, t_{m-1} \rangle \dots$$

$$\langle q_{1j+1}, t_{1j+1} | q_{1j}, t_{1j} \rangle \langle q_{1j}, t_{1j} | Q(t'_1) | q_{1j-1}, t_{1j-1} \rangle \langle q_{1j-1}, t_{1j-1} | q_{1j-2}, t_{1j-2} \rangle \dots \langle q_{11}, t_{11} | q_a, t_a \rangle. \quad (4.18)$$

É claro que, em (4.18)

$$\langle q_{1j}, t_{1j} | Q(t'_1) | q_{1j-1}, t_{1j-1} \rangle = q_{1j} \langle q_{1j}, t_{1j} | q_{1j-1}, t_{1j-1} \rangle .$$

Portanto,

$$\langle q_b, t_b | Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle = \int dq_{11} \dots dq_{1m} q_{1j} \prod_{i=0}^m \langle q_{i+1}, t_{i+1} | q_i, t_i \rangle \quad (4.19a)$$

e, de forma similar,

$$\langle q_b, t_b | P(t'_1) | q_a, t_a \rangle = \int dq_{11} \dots dq_{1m} p_{1k} \prod_{i=0}^m \langle q_{i+1}, t_{i+1} | q_i, t_i \rangle . \quad (4.19b)$$

Em (4.19), o subíndice  $j$  se refere ao autovalor de posição no instante  $t'_1$  e o subíndice  $k$  se refere ao autovalor de momentum no instante  $t_1$ .

O argumento que levou a (4.14) se repete exceto que agora aparecem os fatores extras  $q_{1j}, p_{1k}$  sob as integrais no lado direito de (4.19). Obtemos, por exemplo, desde (4.19a)

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle &= \lim_{m \rightarrow \infty} (2\pi\hbar)^{-n(m+1)} \int dq_{11} \dots dq_{1m} dp_0 \dots dp_m \\ &\times q_{1j} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{(t_{j+1} - t_j)} - h_\alpha(p_j, (\frac{1}{2} + \alpha)q_{j+1} + (\frac{1}{2} - \alpha)q_j) \right] (t_{j+1} - t_j)} \end{aligned} \quad (4.20)$$

que dá origem a

$$\langle q_b, t_b | Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle = \int_{\alpha} \left[ \frac{Dp Dq}{2\pi\hbar} \right] q(t'_1) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p(t)\dot{q}(t) - h_\alpha(p(t), q(t))] dt} \quad (4.21)$$

depois de tomar o limite.

Para calcular  $\langle q_b, t_b | Q(t'_1) Q(t'_2) | q_a, t_a \rangle$  escolhemos  $t'_1$  e  $t'_2$  como dois dos tempos que ligam os subintervalos nos quais  $[t_b, t_a]$  é dividido. Então, se  $t'_1 > t'_2$ , temos

$$\langle q_b, t_b | Q(t'_1) Q(t'_2) | q_a, t_a \rangle = \int dq_1 \dots dq_m \langle q_b, t_b | q_m, t_m \rangle \dots \langle q_{j-1}, t_{j-1} | Q(t'_1) | q_{j-1}, t_{j-1} \rangle \dots$$

$$\langle q_{2j}, t_{2j} | Q(t'_2) | q_{2j-1}, t_{2j-1} \rangle \dots \langle q_1, t_1 | q_a, t_a \rangle \quad (4.22)$$

Seguindo passos análogos aos que levaram a (4.21), obtemos

$$\langle q_b, t_b | Q(t'_1) Q(t'_2) | q_a, t_a \rangle = \int_{\alpha} \left[ \frac{Dp Dq}{2\pi\hbar} \right] q(t'_1) q(t'_2) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p(t)\dot{q}(t) - h_{\alpha}(p(t), q(t))] dt} \quad (4.23)$$

A equação (4.23) vale somente se  $t'_1 > t'_2$ . É fácil ver que se  $t'_2 > t'_1$ , o lado direito de (4.23) seria igual a  $\langle q_b, t_b | Q(t'_2) Q(t'_1) | q_a, t_a \rangle$ . Portanto, a integral funcional em (4.23) é o elemento de matriz do produto ordenado no tempo

$$T[Q(t'_1) Q(t'_2)] \quad (4.24)$$

Este resultado é imediatamente generalizado ao produto de qualquer número de Q's e P's

$$\langle q_b, t_b | T[Q(t'_1) \dots Q(t'_r) P(t_1) \dots P(t_s)] | q_a, t_a \rangle$$

$$= \int_{\alpha} \left[ \frac{Dp Dq}{2\pi\hbar} \right] q(t'_1) \dots q(t'_r) p(t_1) \dots p(t_s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p(t)\dot{q}(t) - h_{\alpha}(p(t), q(t))] dt \right\} \quad (4.25)$$

A integral funcional em (4.25) é definida como (ver (4.20))

$$\lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (2\pi\hbar)^{-n(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m q_{1j} \dots q_{rj} p_{1k} \dots p_{sk} \\ \times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - h \left( p_j, \left( \frac{1+\alpha}{2} q_{j+1} + \left( \frac{1-\alpha}{2} \right) q_j \right) \right) \right] \right\} \quad (4.26)$$

onde definimos

$$\epsilon \equiv t_{j+1} - t_j \quad . \quad (4.27)$$

Se introduzirmos em (4.26), fontes externas de posição  $J$  e momentum  $K$  acopladas na forma usual

$$J_j q_j, \quad K_j p_j \quad ; \quad (4.28)$$

obtemos

$$\langle q_b, t_b | T [Q(t'_1) \dots Q(t'_r) P(t_1) \dots P(t_s)] | q_a, t_a \rangle$$

$$= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right)^{r+s} \frac{\partial^{r+s} W(J, K, \epsilon, m)}{\partial J_{1j} \dots \partial J_{rj} \partial K_{1k} \dots \partial K_{sk}} \Big|_{J=K=0} \quad (4.29)$$

onde

$$W(J, K, \epsilon, m) = (2\pi\hbar)^{-n(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m \\ \times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - h \left( p_j, \left( \frac{1+\alpha}{2} q_{j+1} + \left( \frac{1-\alpha}{2} \right) q_j \right) \right) + J_j q_j + K_j p_j \right] \right\} \quad . \quad (4.30)$$



A expressão (4.29) constitui a definição das funções de Green de  $(r+s)$  - pontos da teoria. Tomados os limites, obtemos formalmente

$$\begin{aligned} & \langle q_b, t_b | T[Q(t'_1) \dots Q(t'_r) P(t_1) \dots P(t_s)] | q_a, t_a \rangle \\ &= \left(\frac{t}{i}\right)^{r+s} \frac{\delta^{r+s} W[J, K]}{\delta J(t'_1) \dots \delta J(t'_r) \delta K(t_1) \dots \delta K(t_s)} \Big|_{J=K=0} \end{aligned} \quad (4.31)$$

com a funcional geratriz de funções de Green\*  $W[J, K]$  dada por

$$W[J, K] = \int_{\alpha} \left[ \frac{Dp Dq}{2\pi\hbar} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t)\dot{q}(t) - h(p(t), q(t)) + J(t)q(t) + K(t)p(t)]} \quad (4.32)$$

Assim, da mesma forma que o propagador, as funções de Green da Mecânica Quântica admitem infinitas representações por integrais funcionais.

#### IV.3 - Unicidade da Formulação Funcional

Conforme mencionamos na INTRODUÇÃO, é fato reconhecido que dispomos de infinitas representações por integrais funcionais

\* Em (4.25), (4.29) ou (4.31), o ordenamento cronológico não está definido quando  $t'_j = t_k$  devido à não-comutatividade dos operadores  $Q(t)$ ,  $P(t)$ . Entretanto, é possível definir uma operação ordenamento-temporal  $T_f$  a qual estende a operação de Wick  $T$  a tempos iguais em uma forma dependente do ordenamento  $f$ <sup>31</sup>.

canônicas para os elementos de matriz da teoria quântica.

É claro que, do mesmo modo que a nível operatorial os resultados físicos independem do ordenamento escolhido (o qual em geral é questão de conveniência), a nível funcional os resultados físicos deverão ser independentes da representação (classe de representações) escolhida.

A unicidade (valor único) da amplitude de transição<sup>31</sup>  $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$  em Mecânica Quântica bem como a de alguns elementos específicos de matriz  $S$ <sup>33</sup>, via teoria de perturbações em Teoria Quântica de Campos, é um resultado já estabelecido. Estudos incluindo as funções de Green, com base na definição contínua da integral funcional, apareceram recentemente: foi demonstrada, usando métodos perturbativos, a unicidade também de alguns desses elementos de matriz<sup>34a,b</sup>.

Na primeira seção do próximo capítulo (seção V.1) analisamos a amplitude de transição para sistemas especiais dentre os quais tiramos proveito, para estudar globalmente o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ , de um modelo exatamente solúvel que denominamos oscilador modificado. Na seção V.2, tratamos das funções de Green em teoria de perturbações.



## V - UNICIDADE DA FORMULAÇÃO FUNCIONAL

V.1 - Unicidade da Amplitude de Transição - Casos Especiais

## V.1.1 - Partícula Livre

Neste caso, a dinâmica do sistema é descrita pelo operador Hamiltoniano

$$H(P, Q) = \frac{P^2}{2M} \quad (5.1)$$

onde  $M$  é a massa da partícula. É claro que

$$h_{\alpha}(p, q) = \frac{p^2}{2M} \quad (5.2)$$

de onde (4.14) resulta ser, para  $n = 1$ , igual a

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int dq_{t_1} \dots dq_{t_m} dp_0 \dots dp_m \\ &\times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - \frac{p_j^2}{2M} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Definimos

$$\epsilon \equiv t_{j+1} - t_j \quad (5.4)$$

Cada integral em  $\underline{p}$  é uma integral gaussiana da forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(ap_j^2 + bp_j)} dp_j$$

com

$$a \equiv -\epsilon/2M\hbar < 0, \quad b \equiv (q_{j+1} - q_j)/\hbar \quad (5.5)$$

De acordo com (A.2) obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(ap_j^2 + bp_j)} dp_j = \left(\frac{\pi}{i|a|}\right)^{1/2} e^{\frac{ib^2}{4|a|}} = \left(\frac{2\pi\hbar M}{i\epsilon}\right)^{1/2} e^{\frac{iM}{2\hbar\epsilon}(q_{j+1} - q_j)^2}$$

e, para as  $m+1$  integrais em  $\underline{p}$ , obtemos

$$\left(\frac{2\pi\hbar M}{i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{M}{2\epsilon} (q_{j+1} - q_j)^2\right] \quad (5.6)$$

Levando (5.6) em (5.3), ficamos com

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left(\frac{M}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} P(m, \epsilon) \quad (5.7)$$

onde

$$P(m, \epsilon) \equiv \int dq_1 \dots dq_m e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{M}{2\epsilon} (q_{j+1} - q_j)^2} \quad (5.8)$$

Calculemos  $P(m, \epsilon)$ . Obviamente

$$\frac{M}{2\epsilon} (q_{j+1} - q_j)^2 = R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2$$

onde

$$R \equiv M/2\epsilon \quad (5.9a)$$

$$G \equiv -M/2\epsilon \quad (5.9b)$$

$$H \equiv M/2\epsilon \quad (5.9c)$$

Então, dado que  $q_0 \equiv q_a$ ,  $q_{m+1} \equiv q_b$ , identificamos o expoente em (5.8) como a soma de três termos: um termo independente de  $q_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ), um termo linear em  $q_j$  e uma forma quadrática. Ou seja,

$$\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{M}{2\epsilon} (q_{j+1} - q_j)^2 = \frac{i}{\hbar} [R q_b^2 + H q_a^2] + \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^m v_j q_j + \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j=1}^m a_{ij} q_j q_i \quad (5.10)$$

onde ( $a_{ij} = a_{ji}$ , ver (C.1))

$$a_{11} = R+H, \quad a_{12} = a_{21} = G, \quad a_{13} = a_{14} = \dots = a_{1m} = 0,$$

$$a_{22} = R+H, \quad a_{23} = a_{32} = G, \quad a_{24} = a_{25} = \dots = a_{2m} = 0,$$

$$\vdots$$

$$a_{m-2,m-2} = R+H, \quad a_{m-2,m-1} = a_{m-1,m-2} = G, \quad a_{m-2,m} = 0$$

$$a_{m-1,m-1} = R+H, \quad a_{m-1,m} = a_{m,m-1} = G$$

$$a_{m,m} = R+H;$$

isto é, a matriz  $A$  de elementos  $a_{ij}$ , quadrada de ordem  $m$  e simétrica, é dada por

$$A = \begin{bmatrix} R+H & G & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ G & R+H & G & & & & & & 0 \\ 0 & G & R+H & & & & & & 0 \\ \cdot & & & \cdot & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & & & & & \cdot & & & \cdot \\ 0 & & & & & & R+H & G & 0 \\ 0 & & & & & & G & R+H & G \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & G & R+H \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

e onde os  $v_j$  são

$$v_1 = 2Gq_a, \quad v_2 = v_3 = \dots = v_{m-2} = v_{m-1} = 0, \quad v_m = 2Gq_b. \quad (5.12)$$

Portanto, desde (5.8) - (5.10) e (C.7), obtemos

$$P(m, \epsilon) = (i\pi\hbar)^{m/2} (\det A)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{M}{2\epsilon} (q_a^2 + q_b^2) - \frac{c^2}{4} \right]} \quad (5.13)$$

onde  $c^2 = \langle v | A^{-1} | v \rangle$ . Para obter  $P(m, \epsilon)$  precisamos calcular  $\det A$  e  $c^2$ . De acordo com (C.10),  $\det A = (-G)^m \det D$ . Neste caso,  $G = -M/2\epsilon$  e  $U = 2$ , de acordo com (5.9) e (C.9). Então, desde (C.24),

$$D_r^m = r + 1 \quad (5.14)$$

e

$$\det A = (M/2\epsilon)^m (m+1) \quad (5.15a)$$

usando (C.25). Por outro lado, desde (5.12),

$$\begin{aligned} c^2 = \langle v | A^{-1} | v \rangle &= \left[ (\bar{a}^{-1})_{11} v_1^2 + 2(\bar{a}^{-1})_{1m} v_1 v_m + (\bar{a}^{-1})_{mm} v_m^2 \right] \\ &= \frac{M^2}{\epsilon^2} \left[ (\bar{a}^{-1})_{11} q_a^2 + (\bar{a}^{-1})_{mm} q_b^2 + 2q_a q_b (\bar{a}^{-1})_{1m} \right]. \end{aligned}$$

Com (C.15), (C.33) e (C.24), obtemos

$$(\bar{a}^{-1})_{11} = (\bar{a}^{-1})_{mm} = (M/2\epsilon)^{-1} \frac{m}{m+1}$$

$$(\bar{a}^{-1})_{1m} = (M/2\epsilon)^{-1} \frac{1}{m+1}$$

Logo,

$$c^2 = \frac{2M}{\epsilon} \left[ \frac{m}{m+1} (q_a^2 + q_b^2) + \frac{2}{m+1} q_a q_b \right] \quad (5.15b)$$

Com isso,

$$P(m, \epsilon) = \left( \frac{2\pi k i \epsilon}{M} \right)^{m/2} (m+1)^{-1/2} e^{\frac{iM}{2k\epsilon(m+1)} (q_b - q_a)^2} \quad (5.16)$$

Substituindo (5.16) em (5.7), encontramos

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left( \frac{M}{2\pi k i \epsilon (m+1)} \right)^{1/2} e^{\frac{iM}{2k\epsilon(m+1)} (q_b - q_a)^2} \\ &= \left( \frac{M}{2\pi k i (t_b - t_a)} \right)^{1/2} e^{\frac{iM}{2k(t_b - t_a)} (q_b - q_a)^2} \end{aligned} \quad (5.17)$$

que é a expressão para o propagador da partícula livre (ver 6d, p.64).

### V.1.2 - Oscilador Harmônico Simples

O Hamiltoniano que descreve o sistema, tomando  $M=1$ ,

é

$$H(P, Q) = \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} \omega^2 Q^2 \quad (5.18)$$

Em  $H(P, Q)$ , não há mistura de operadores não-comutantes, logo

$$h_\alpha(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega^2 q^2 \quad (5.19)$$

Agora,

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m \\ &\times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - \frac{1}{2} (p_j^2 + \omega^2 q_{j,j+1}^2(\alpha)) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.20)$$

onde

$$q_{j,j+1}(\alpha) \equiv \left(\frac{1}{2} + \alpha\right) q_{j+1} + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) q_j \quad (5.21)$$

As integrais em  $p$  são idênticas às do caso anterior, portanto, desde (5.6)

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left( \frac{1}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{\frac{m+1}{2}} O(m, \epsilon) \quad (5.22)$$

onde

$$O(m, \epsilon) \equiv \int dq_1 \dots dq_m e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{1}{2\epsilon} [(q_{j+1} - q_j)^2 - \omega^2 \epsilon^2 q_{j,j+1}^2(\alpha)]} \quad (5.23)$$

É claro que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\epsilon} [(q_{j+1} - q_j)^2 - \omega^2 \epsilon^2 q_{j,j+1}^2(\alpha)] &= \frac{1}{2\epsilon} \left\{ (q_{j+1} - q_j)^2 - \omega^2 \epsilon^2 [(1/2 + \alpha) q_{j+1} + (1/2 - \alpha) q_j]^2 \right\} \\ &= R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2 \end{aligned}$$

definindo

$$R \equiv [1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/2 + \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.24a)$$

$$G \equiv [-1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/4 - \alpha^2)] / 2\epsilon \quad (5.24b)$$

$$H \equiv [1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/2 - \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.24c)$$

Neste caso identificamos

$$\begin{aligned} &\sum_{j=0}^m [R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2] \\ &= R q_b^2 + H q_a^2 + \sum_{j=1}^m v_j q_j + \sum_{i,j=1}^m a_{ij} q_j q_i \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde a matriz A, simétrica e  $m \times m$ , é dada por



$$A = \begin{bmatrix} R+H & G & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ G & R+H & G & & & & 0 \\ 0 & G & R+H & & & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & & R+H & G & 0 \\ 0 & & & & G & R+H & G \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & G & R+H \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

e

$$v_1 = 2Gq_a, \quad v_2 = v_3 = \dots = v_{m-2} = v_{m-1} = 0, \quad v_m = 2Gq_b. \quad (5.27)$$

Logo, desde (5.23), (5.25) e (C.7), obtemos

$$O(m, \epsilon) = (i\pi\hbar)^{m/2} (\det A)^{-1/2} \frac{i}{\hbar} \left[ Rq_b^2 + Hq_a^2 - \frac{c^2}{4} \right] \quad (5.28)$$

onde  $c^2 = \langle v | A^{-1} | v \rangle$ . Desde (C.10) e (C.17a), segue que

$$\det A = (-G)^m D_m^m = (-G)^m \frac{\sin[(m+1)\phi]}{\sin \phi} \quad (5.29a)$$

com  $\phi$  dado por (C.24b), i.e.,

$$\phi = \cos^{-1} \left( -[R+H]/2G \right) \quad (5.29b)$$

e R, G, H dados por (5.24). A expressão (5.27) fornece

$$c^2 = [ (\bar{a}^{-1})_{11} v_1^2 + 2 (\bar{a}^{-1})_{1m} v_1 v_m + (\bar{a}^{-1})_{mm} v_m^2 ]$$

$$= 4G^2 [ (\bar{a}^{-1})_{11} q_a^2 + (\bar{a}^{-1})_{mm} q_b^2 + 2 q_a q_b (\bar{a}^{-1})_{1m} ] .$$

De acordo com (C.15) e (C.33),

$$(\bar{a}^{-1})_{11} = (\bar{a}^{-1})_{mm} = (-G)^{-1} D_{m-1}^m / D_m^m ,$$

$$(\bar{a}^{-1})_{1m} = (-G)^{-1} / D_m^m ,$$

logo

$$c^2 = -4G [ (q_a^2 + q_b^2) D_{m-1}^m + 2q_a q_b ] / D_m^m . \quad (5.30)$$

Com isso, (5.28) fica

$$O(m, \epsilon) = (-i\pi\hbar/G) (D_m^m)^{m/2 - 1/2} \frac{i}{\hbar} \left[ \left( R + \frac{GD_{m-1}^m}{D_m^m} \right) q_b^2 + \left( H + \frac{GD_{m-1}^m}{D_m^m} \right) q_a^2 + \frac{2G}{D_m^m} q_a q_b \right] ,$$

ou, definindo em (5.24),

$$g \equiv 2\epsilon G , \quad h \equiv 2\epsilon H , \quad r \equiv 2\epsilon R , \quad (5.31)$$

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left\{ [2\pi\hbar i (-g)^m \epsilon D_m^m]^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar \epsilon D_m^m} \left[ (r D_m^m + g D_{m-1}^m) q_b^2 + \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. (h D_m^m + g D_{m-1}^m) q_a^2 + 2g q_a q_b \right] \right\} . \quad (5.33)$$

Como o limite de um produto de termos  $\bar{\epsilon}$  igual ao produ

$$\phi(0) = 0, \quad \phi'(0) = \omega, \quad \phi''(0) = 0 \quad (5.36)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (-g)^m \epsilon D_m^m &= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (-g)^m \frac{\epsilon}{\text{sen } \phi} \text{sen} [(m+1)\phi] \\ &= \frac{\text{sen} [\omega(t_b - t_a)]}{\omega} \end{aligned} \quad (5.37)$$

De acordo com (5.24),

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} r = 1, \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} g = -1, \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} h = 1 \quad (5.38)$$

Com isso, no expoente em (5.33) temos dois termos da forma

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} [D_m^m - D_{m-1}^m] &= \left[ \frac{\text{sen} [(m+1)\phi] - \text{sen} (m\phi)}{\text{sen } \phi} \right]_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \\ &= \left[ \frac{\text{sen} [(m+1)\phi] - \text{sen} [(m+1)\phi] \cos \phi + \text{sen } \phi \cos [(m+1)\phi]}{\text{sen } \phi} \right]_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \\ &= \cos [\omega(t_b - t_a)] \end{aligned} \quad (5.39)$$

usando (5.36) e o fato de que  $(m+1)\epsilon = t_b - t_a$ . Os resultados (5.37) - (5.39) fornecem finalmente

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \left( \frac{\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_b - t_a)} \right)^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{i\omega M}{2\hbar \sin \omega(t_b - t_a)} \left[ (q_a^2 + q_b^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2q_a q_b \right] \right\} \quad (5.40)$$

que é a expressão conhecida para o propagador do oscilador harmônico simples\* (6d, p.63). Assinalamos que, embora a definição original de Feynman para a integral funcional tenha sido a de time-slicing, no seu cálculo para o propagador do oscilador harmônico em 6d, usou a definição contínua por autofunções.

### V.1.3 - Oscilador Harmônico Modificado

Chamamos oscilador harmônico modificado ao sistema cuja dinâmica é descrita pelo Hamiltoniano

$$H(P, Q) = \frac{1}{2} P^2 + \omega^2 Q^2 + \frac{\omega}{2} (QP + PQ) \quad (5.41)$$

pois o mesmo equivale ao Hamiltoniano do oscilador harmônico simples como se pode ver através da transformação canônica

$$\left. \begin{aligned} P &= \sqrt{2} P' \\ Q &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q' - \frac{P'}{\omega} \right) \end{aligned} \right\} \quad (5.42)$$

Tal característica já é suficiente para assegurar a unicidade do propagador  $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$  correspondente. Entretanto, o cálculo direto é instrutivo porque permite explicitar o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ . Segundo a Tabela II, temos

$$h_\alpha(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + \omega^2 q^2 + \omega p q - i\hbar \alpha \omega \quad (5.43)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int dq_{t_1} \dots dq_{t_m} dp_0 \dots dp_m \\ &\times \exp\left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{t_{j+1}} - q_{t_j})}{\epsilon} - \frac{1}{2} p_j^2 - \omega_{t_j, t_{j+1}}^2 q_{t_j}(\alpha) - \omega p_j q_{t_j, t_{j+1}}(\alpha) + i\hbar \alpha \omega \right] \right\} \quad (5.44) \end{aligned}$$

As integrais em  $p$  são gaussianas da forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(a p_j^2 + b p_j)} dp_j$$

com

$$a \equiv -\epsilon/2\hbar < 0, \quad b \equiv [(q_{t_{j+1}} - q_{t_j}) - \omega q_{t_j, t_{j+1}}(\alpha)\epsilon]/\hbar \quad (5.45)$$

Desde (A.2) obtemos, para as  $m+1$  integrais, o resultado

$$\left( \frac{2\pi\hbar}{i\epsilon} \right)^{\frac{m+1}{2}} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{1}{2\epsilon} [(q_{t_{j+1}} - q_{t_j}) - \omega q_{t_j, t_{j+1}}(\alpha)\epsilon]^2 \right\} \quad (5.46a)$$

Observar que, a partir desta expressão, de (5.44) e de (4.5), o short-time propagator é dado por

$$K(q_{j+1}, t_{j+1}; q_j, t_j) \approx \left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{1/2} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \epsilon \left( \frac{1}{2} \frac{\Delta_j^2}{\epsilon^2} - \frac{\omega^2}{2} \bar{q}_j^2 - \omega \bar{q}_j \frac{\Delta_j}{\epsilon} + i\hbar\alpha\omega \right) - \epsilon^2 \left( \alpha\omega \frac{\Delta_j}{\epsilon} + \alpha\omega \frac{\Delta_j^2}{\epsilon^2} \right) - \epsilon^3 \left( \frac{\omega^2}{2} \alpha^2 \frac{\Delta_j^2}{\epsilon^2} \right) \right] \right\}, \quad (5.46b)$$

onde

$$\Delta_j \equiv q_{j+1} - q_j, \quad \bar{q}_j \equiv \frac{1}{2}(q_{j+1} + q_j)$$

e o sinal = indica que o lado direito de (5.46b) reproduz corretamente o short-time propagator até termos de primeira ordem em  $\epsilon$ .

Da simples inspeção de (5.46b) segue que o fator  $\exp(-\epsilon\alpha\omega)$ , o qual dá uma contribuição efetiva ao short-time propagator em sua aproximação linear, não pode ser compensado pelos demais fatores dependentes de  $\alpha$ . Então, o cancelamento entre termos dependentes de  $\alpha$  em (5.44) só poderá ocorrer depois de realizar as integrais em  $q$  e como uma consequência da chamada natureza estocástica da integral funcional<sup>26b,35</sup>. A análise de Edwards et al.<sup>35</sup> indica que os termos de ordem  $\epsilon^2$  em (5.46b) são essenciais para a construção do mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$  e devem, portanto, ser retidos. Como se vê, o mecanismo sob investigação não é trivial.

Levando (5.46a) em (5.44), ficamos com

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left( \frac{1}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{\frac{m+1}{2} - \alpha \omega \epsilon(m+1)} e^{\tilde{O}(m, \epsilon)} \quad (5.47)$$

onde

$$\tilde{O}(m, \epsilon) \equiv \int dq_{t_1} \dots dq_{t_m} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left\{ \frac{[(q_{j+1} - q_j) - \omega q_{j,j+1}^{(\alpha)} \epsilon]^2}{2\epsilon} - \omega q_{j,j+1}^{(\alpha)} \epsilon \right\}} \quad (5.48)$$

Desde (5.48) vemos que, para que ocorra o desejado cancelamento da dependência em  $\alpha$ , as integrais em  $q$  deverão gerar um fator compensante  $\exp[+\alpha \omega (t_b - t_a)]$  dado que  $\epsilon(m+1) \rightarrow t_b - t_a$ . Como veremos, este é o caso.

É imediato comprovar que

$$\frac{1}{2\epsilon} [(q_{j+1} - q_j) - \omega q_{j,j+1}^{(\alpha)} \epsilon]^2 - \omega q_{j,j+1}^{(\alpha)} \epsilon = R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2$$

onde agora

$$R \equiv [1 - 2\epsilon \omega (1/2 + \alpha) - \omega^2 \epsilon^2 (1/2 + \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.49a)$$

$$G \equiv [-1 + 2\epsilon \omega \alpha - \omega^2 \epsilon^2 (1/4 - \alpha^2)] / 2\epsilon \quad (5.49b)$$

$$H \equiv [1 + 2\epsilon \omega (1/2 - \alpha) - \omega^2 \epsilon^2 (1/2 - \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.49c)$$

No problema em questão, obtemos formalmente as mesmas expressões (5.25) - (5.32) subentendendo R, G e H dados por (5.49). Portanto, desde (5.48) e (5.25) - (5.32), obtemos

$$\tilde{O}(m, \epsilon) = (2\pi k i \epsilon)^{m/2} [(-g) D_m^m]^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i}{2k \epsilon D_m^m} \left[ (r D_m^m + g D_{m-1}^m) q_b^2 + (h D_m^m + g D_{m-1}^m) q_a^2 + 2g q_a q_b \right] \right\} \quad (5.50)$$

Substituindo (5.50) em (5.47), encontramos

$$\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle = \lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \left\{ \frac{e^{-\alpha \omega \epsilon (m+1)}}{[2\pi k i (-g)^m \epsilon D_m^m]^{1/2}} \exp \left\{ \frac{i}{2k \epsilon D_m^m} \left[ (r D_m^m + g D_{m-1}^m) q_b^2 + (h D_m^m + g D_{m-1}^m) q_a^2 + 2g q_a q_b \right] \right\} \right\} \quad (5.51)$$

com r, g, h dados por (5.31) e (5.49). Procedemos à análise cuidadosa dos limites indicados em (5.51). Neste caso,

$$\phi(\epsilon) = \cos^{-1} \left[ \frac{1 - 2\omega \epsilon \alpha - \epsilon^2 \omega^2 (1/4 + \alpha^2)}{1 - 2\omega \epsilon \alpha + \epsilon^2 \omega^2 (1/4 - \alpha^2)} \right] \quad (5.52)$$

e, para a expansão de Maclaurin

$$\phi(\epsilon) = \phi(0) + \epsilon \phi'(0) + \frac{\epsilon^2}{2!} \phi''(0) \quad (5.53)$$

obtemos



$$\phi(\epsilon) = 0 + \epsilon \left[ 2\omega \left( \frac{1}{4} + \alpha^2 \right) + 2\omega \left( \frac{1}{4} - \alpha^2 \right) \right] + \frac{\epsilon^2}{2} [2\alpha\omega^2] = \omega\epsilon + \alpha\omega^2\epsilon^2 \quad (5.54)$$

Observar que em (5.54) ocorre um cancelamento efetivo da dependência em  $\alpha$ . Este é um aspecto importante do mecanismo de cancelamento de dita dependência pois a equação (5.54) implica que a dependência em  $\alpha$  de  $\phi$  está inteiramente contida nos termos de ordem  $\epsilon^2$ . Com isso,

$$\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ m \rightarrow \infty}} \text{sen } \phi = \omega\epsilon, \quad \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ m \rightarrow \infty}} \text{sen}[(m+1)\phi] = \text{sen}[\omega(t_b - t_a)] \quad (5.55)$$

Entretanto, a diferença essencial em relação ao caso do oscilador harmônico simples ocorre no limite do termo  $(-g)^m$ . Este termo resulta responsável pelo cancelamento da dependência em  $\alpha$  que aparece explicitamente em (5.51), a qual foi originada pela transformação (5.43). No limite indicado em (5.51),

$$\begin{aligned} (-g)^{-m/2} &= [1 - 2\epsilon\omega\alpha + \omega^2\epsilon^2(1/4 - \alpha^2)]^{-m/2} \longrightarrow [1 - 2\epsilon\omega\alpha]^{-m/2} \longrightarrow \\ &= e^{-2\epsilon\omega\alpha m} = e^{\alpha\omega\epsilon m} \end{aligned} \quad (5.56)$$

É claro que, se

$$\epsilon(m+1) \longrightarrow (t_b - t_a) \quad (5.57)$$

então

$$\epsilon m \longrightarrow (t_b - t_a) \quad (5.58)$$

Assim, o termo (5.56), provisto pelo  $\det A$ , cancela exatamente o termo de sinal oposto em (5.51). Como se vê em (5.56), esse termo resulta da presença do termo de ordem  $\epsilon$  em (5.49b) o qual, por sua vez, teve origem em um dos termos de ordem  $\epsilon^2$  em (5.46b). Para ver este efeito de forma transparente, computemos a contribuição ao expoente em (5.48) provista pelos termos lineares em  $\epsilon$  nas equações (5.49):

$$\frac{i}{2\epsilon\hbar} \left( -2\epsilon\omega\alpha q_{t_{j+1}}^2 + 4\epsilon\omega\alpha q_{t_j} q_{t_{j+1}} - 2\epsilon\omega\alpha q_{t_j}^2 \right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \omega\alpha \epsilon^2 \Delta_j^2 / \epsilon^2 .$$

É claro que  $\exp(-\frac{i}{\hbar}\omega\alpha\epsilon^2\Delta_j^2/\epsilon^2)$  é um dos fatores retidos em (5.46b). Indubitavelmente, a natureza estocástica da integral funcional está na base do mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ .

Os demais limites são os mesmos do caso anterior:

$$\epsilon D_m^m \rightarrow \frac{\text{sen}[\omega(t_b - t_a)]}{\omega} , \quad (5.59)$$

$$r \rightarrow 1 , \quad g \rightarrow -1 , \quad h \rightarrow 1 , \quad (5.60)$$

$$[D_m^m - D_{m-1}^m] \rightarrow \cos[\omega(t_b - t_a)] . \quad (5.61)$$

Desta forma, obtemos a mesma amplitude (5.40) para o

oscilador modificado, em concordância com o que foi mencionado no início da seção. Notar que, à diferença do oscilador simples (seção V.1.2), o Hamiltoniano (5.41) leva efetivamente a uma representação não-única por integral funcional para a amplitude  $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$ . Entretanto, o resultado final é único devido à ação de um intrincado mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ .

## V.2 - Unicidade das Funções de Green - Casos Especiais

### V.2.1 - Perturbações a Partícula Livre

Calculemos a geratriz de funções de Green (4.30) para o sistema descrito por

$$H_0(P, Q) = \frac{P^2}{2} \quad . \quad (5.62)$$

De acordo com (5.2), tomando massa unitária, temos

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m \\ \times \exp\left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - \frac{1}{2} p_j^2 + J_j q_j + K_j p_j \right] \right\} \quad .$$

Efetuada as  $m+1$  integrações em  $p$ , cada uma da forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp_j \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{p_j^2 \epsilon}{2} + [K_j \epsilon + (q_{j+1} - q_j)] p_j \right] \right\} \quad ,$$

obtemos (A.2)

$$\left(\frac{2\pi\hbar}{i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \frac{1}{2\epsilon} [K_j \epsilon + (q_{j+1} - q_j)]^2\right\} \quad (5.63)$$

e ficamos com

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{\frac{m+1}{2}} P(J, K, \epsilon, m), \quad (5.64)$$

onde

$$P(J, K, \epsilon, m) \equiv \int dq_1 \dots dq_m e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left\{ J_j q_j \epsilon + \frac{1}{2\epsilon} [K_j \epsilon + (q_{j+1} - q_j)]^2 \right\}}. \quad (5.65)$$

A chave acima pode ser escrita como

$$\frac{1}{2\epsilon} (q_{j+1} - q_j)^2 + K_j (q_{j+1} - q_j) + J_j q_j \epsilon + \frac{1}{2} K_j^2 \epsilon$$

$$= R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2 + L_j^{(+)} q_{j+1} + L_j^{(-)} q_j + \frac{1}{2} K_j^2 \epsilon$$

sendo que

$$R \equiv 1/2\epsilon \quad (5.66a)$$

$$G \equiv -1/2\epsilon \quad (5.66b)$$

$$H \equiv 1/2\epsilon \quad (5.66c)$$

$$L_j^{(+)} \equiv K_j \quad (5.66d)$$

$$L_j^{(-)} \equiv J_j \epsilon - K_j \quad (5.66e)$$

Se tomarmos, sem perda de generalidade,

$$q_a = q_b = 0 \quad , \quad (5.67)$$

identificamos

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^m \left[ R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2 + L_j^{(+)} q_{j+1} + L_j^{(-)} q_j + \frac{1}{2} K_j^2 \epsilon \right] \\ &= \sum_{i,j=1}^m a_{ij} q_j q_i + \sum_{j=1}^m v_j q_j + \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=0}^m K_j^2 \end{aligned} \quad (5.68)$$

onde a matriz  $A$  é a mesma do caso sem fontes (seção V.1.1) dada por

$$A = \begin{bmatrix} R+H & G & 0 & \cdots & 0 \\ G & R+H & & & \vdots \\ 0 & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & R+H & G \\ 0 & \cdots & 0 & G & R+H \end{bmatrix} \quad (5.69)$$

e onde os  $v_j$  são da forma

$$v_j = L_{j-1}^{(+)} + L_j^{(-)} \quad (5.70)$$

com  $R, G, H, L_j^{(+)}$  e  $L_j^{(-)}$  dados por (5.66).

Então, desde (5.65) - (5.68) e (C.7), segue que

$$P(j, k, \epsilon, m) = (i\pi\epsilon)^{m/2} (\det A)^{-1/2} e^{\frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{j=0}^m K_j^2} e^{-\frac{ic^2}{4\hbar}} \quad (5.71)$$

com  $c^2 = \langle v | A^{-1} | v \rangle$ . A expressão (5.15a) fornece

$$\det A = (1/2\epsilon)^m (m+1) \quad (5.72)$$

Por outro lado, desde (C.15) e (5.66b), temos

$$c^2 = (-G)^{-1} \sum_{j,k=1}^m v_j(S)_{jk} v_k = 2\epsilon \sum_{j,k=1}^m v_j(S)_{jk} v_k \quad (5.73)$$

Agora, usando

$$t_j = t_a + j\epsilon \quad (5.74)$$

onde  $t_j$  é o  $j$ -ésimo tempo de slice, obtemos

$$\epsilon(S)_{jk} = \frac{j\epsilon[(m+1-k)\epsilon]}{(m+1)\epsilon} = \frac{(t_j - t_a)[(m+1)\epsilon - (t_k - t_a)]}{(m+1)\epsilon}, \quad j < k; \quad (5.75a)$$

$$\epsilon(S)_{jj} = \frac{j\epsilon[(m+1-j)\epsilon]}{(m+1)\epsilon} = \frac{(t_j - t_a)[(m+1)\epsilon - (t_j - t_a)]}{(m+1)\epsilon}, \quad j = k; \quad (5.75b)$$

$$\epsilon(S)_{jk} = \frac{k\epsilon[(m+1-j)\epsilon]}{(m+1)\epsilon} = \frac{(t_k - t_a)[(m+1)\epsilon - (t_j - t_a)]}{(m+1)\epsilon}, \quad j > k; \quad (5.75c)$$

de acordo com (C.33) e (5.14). Lembrando que no limite

$$(m+1)\epsilon \rightarrow (t_b - t_a) \quad ,$$

concluimos, desde (D.10), que as expressões (5.75) correspondem exatamente à versão discreta da função de Green uni-dimensional simétrica da partícula livre. Denotamos, então,

$$\epsilon(S)_{jk} = \Delta_{jk} = \frac{j_{<} \epsilon [(m+1 - j_{>}) \epsilon]}{(m+1) \epsilon} \quad (5.76)$$

onde  $j_{<}$  ( $j_{>}$ ) é o menor (maior) entre  $j$  e  $k$ . Levando (5.76) em (5.73), usando (5.70), encontramos

$$c^2 = 2\epsilon^2 \sum_{j,k=0}^m \left[ J_j - \frac{(K_j - K_{j-1})}{\epsilon} \right] \Delta_{jk} \left[ J_k - \frac{(K_k - K_{k-1})}{\epsilon} \right] \quad (5.77)$$

Nota: Em (5.77), podemos somar desde  $j = k = 0$  uma vez que

$$\Delta_{0k} = \Delta_{j0} = \Delta_{00} = 0 \quad (5.78)$$

de acordo com (5.76).

Finalmente, as expressões (5.77), (5.72), (5.71) e (5.64) fornecem

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = N e^{\phi(J, K, \epsilon, m)} \quad (5.79)$$

com

$$N = [2\pi k i \epsilon (m+1)]^{-1/2}, \quad (5.80a)$$

$\phi(J, K, \epsilon, m)$

$$\equiv \frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{j=0}^m K_j^2 - \frac{i\epsilon^2}{2\hbar} \sum_{j,k=0}^m \left[ J_j - \frac{(K_j - K_{j-1})}{\epsilon} \right] \Delta_{jk} \left[ J_k - \frac{(K_k - K_{k-1})}{\epsilon} \right]. \quad (5.80b)$$

Observação: No limite ( $m \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$ ), doravante denotado simplesmente  $\lim$ ,  $W_0(J, K, \epsilon, m)$  se reduz exatamente a (D.7).

A geratriz de funções de Green para o sistema descrito por

$$H(P, Q) = H_0(P, Q) + H^{(I)}(P, Q), \quad (5.81)$$

para o qual

$$h_\alpha(p, q) = h_0(p, q) + h_\alpha^{(I)}(p, q), \quad (5.82)$$

é, de acordo com (4.30), dada por

$W(J, K, \epsilon, m)$

$$= e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{s=0}^m h_\alpha^{(I)} \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s}, \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right]} W_0(J, K, \epsilon, m) \quad (5.83)$$

com  $W_0$  dada por (5.79).

Assinalemos que, para  $H_0(P, Q)$  dado por (5.62), a dependência em  $\alpha$  do termo do lado direito de (5.83) está inteiramente



contida em  $h_{\alpha}^{(I)} [p_j, (1/2+\alpha)q_{j+1} + (1/2-\alpha)q_j]$ . Parte dessa dependência vem do mapeamento  $\alpha$  (seção III.2). O restante da dependência em  $\alpha$  vem do particular ponto de slice no qual a variável  $q$  deve ser calculada.

Consideremos uma perturbação, ao sistema definido por (5.62), do tipo

$$H^{(I)}(P, Q) = \frac{\lambda}{2} Q P Q \quad (5.84)$$

para a qual (Tabela II) temos

$$h_{\alpha}^{(I)}(p, q) = \lambda \left[ \frac{1}{2} q^2 p - i \hbar \alpha q \right] \quad (5.85)$$

De posse da geratriz (5.83), calculemos a função de Green de um ponto para o sistema em questão. Desde (4.29),

$$\langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right) \frac{\partial W(J, K, \epsilon, m)}{\partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.86)$$

Em teoria de perturbações o cancelamento da dependência em  $\alpha$  deverá ocorrer em cada ordem da constante de acoplamento. Nos limitamos à primeira ordem, a qual já é suficiente para explicitar o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ .

A contribuição de ordem zero à função de Green (5.86) é claramente independente de  $\alpha$ , uma vez que  $W_0$  independe de  $\alpha$ . Passemos à contribuição de ordem  $\lambda$  a qual denotamos  $\langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)}$ . De acordo com (5.83), (5.85) e (5.86), obtemos

$$\begin{aligned}
\langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)} &= \lim \left\{ (-1)^{\sum_{s=0}^m} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right]^2 \right. \right. \\
&\times \left. \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s} \right] - i\hbar\alpha \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right) \left[ \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right] \frac{\partial W_0(J, K, \epsilon, m)}{\partial J_r} \right\}_{J=K=0} \\
&= \lim N \left[ \alpha^2 A(J, K, \epsilon, m) + \alpha B(J, K, \epsilon, m) + C(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \quad (5.87)
\end{aligned}$$

usando (5.79), com

$$\begin{aligned}
A(J, K, \epsilon, m) &= \sum_{s=0}^m \left[ \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \left( \frac{\partial^4}{\partial J_{s+1}^2 \partial K_s \partial J_r} - 2 \frac{\partial^4}{\partial J_{s+1} \partial J_s \partial K_s \partial J_r} + \frac{\partial^4}{\partial J_s^2 \partial K_s \partial J_r} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\hbar^2}{\epsilon} \left( \frac{\partial^2}{\partial J_{s+1} \partial J_r} - \frac{\partial^2}{\partial J_s \partial J_r} \right) \right] e^{\phi(J, K, \epsilon, m)}, \quad (5.88)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(J, K, \epsilon, m) &= \sum_{s=0}^m \left[ \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \left( \frac{\partial^4}{\partial J_{s+1}^2 \partial K_s \partial J_r} - \frac{\partial^4}{\partial J_s^2 \partial K_s \partial J_r} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2\epsilon} \left( \frac{\partial^2}{\partial J_{s+1} \partial J_r} + \frac{\partial^2}{\partial J_s \partial J_r} \right) \right] e^{\phi(J, K, \epsilon, m)}, \quad (5.89)
\end{aligned}$$

e  $C(J, K, \epsilon, m)$  denota a soma de todos os termos que não dependem de  $\alpha$ . Simplificando a notação, calculemos os limites

$$\lim_{J=K=0} A = \lim [U + V + X + Y + Z] \quad (5.90)$$

e

$$\lim B \Big|_{J=K=0} = \lim [U - X + \frac{1}{2}(Y - Z)] \quad (5.91)$$

onde

$$U = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4_e \phi}{\partial J_{s+1}^2 \partial K_s \partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.92a)$$

$$V = \sum_{s=0}^m \left( \frac{-\hbar^3}{i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4_e \phi}{\partial J_{s+1} \partial J_s \partial K_s \partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.92b)$$

$$X = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4_e \phi}{\partial J_s^2 \partial K_s \partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.92c)$$

$$Y = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2_e \phi}{\partial J_{s+1} \partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.92d)$$

$$Z = \sum_{s=0}^m \left( \frac{-\hbar^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2_e \phi}{\partial J_s \partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.92e)$$

A partir das expressões (E.13) - (E.17), temos

$$\lim A \Big|_{J=K=0}$$

$$\begin{aligned}
&= (it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_{s+1} \Delta_{r,s+1} + \frac{1}{2} M_r \Delta_{s+1,s+1} - M_{s+1} \Delta_{r,s} - M_r \Delta_{s,s+1} \right. \\
&\quad \left. - M_s \Delta_{r,s+1} + M_s \Delta_{r,s} + \frac{1}{2} M_r \Delta_{s,s} - \Delta_{r,s+1} + \Delta_{r,s} \right] \\
&= (it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{1}{2} (\Delta_{s+1,s+1} + \Delta_{s,s}) M_r - \Delta_{s,s+1} M_r \right. \\
&\quad \left. + [1 - (M_{s+1} - M_s)] (\Delta_{r,s} - \Delta_{r,s+1}) \right] \tag{5.93}
\end{aligned}$$

Dado que

$$(s+1) \iff s + \epsilon$$

implica

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (s+1) \longrightarrow s \tag{5.94}$$

a expressão (5.93) se reduz a

$$\lim A \Big|_{J=K=0} = 0 \tag{5.95}$$

de modo que a contribuição de ordem  $\alpha^2$ , em (5.87), se cancela no limite.

A expressão (5.91) consiste em

$$\begin{aligned}
\lim_{J=K=0} B &= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_{s+1} \Delta_{r,s+1} + \frac{1}{2} M_r \Delta_{s+1,s+1} \right. \\
&\quad \left. - M_s \Delta_{r,s} - \frac{1}{2} M_r \Delta_{s,s} + \frac{1}{2} (-\Delta_{r,s+1} - \Delta_{r,s}) \right] \\
&= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{M_r}{2} (\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s}) - \frac{1}{2} (\Delta_{r,s+1} + \Delta_{r,s}) \right. \\
&\quad \left. + M_{s+1} \Delta_{r,s+1} - M_s \Delta_{r,s} \right] \\
&= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta_{s+1,r} - \Delta_{s,r}}{\epsilon} \right) (\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s}) - \frac{1}{2} (\Delta_{r,s+1} + \Delta_{r,s}) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s+1}}{\epsilon} \right) \Delta_{r,s+1} - \left( \frac{\Delta_{s+1,s} - \Delta_{s,s}}{\epsilon} \right) \Delta_{r,s} \right]
\end{aligned}$$

usando (E.3). Portanto, de acordo com (E.12)

$$\begin{aligned}
\lim_{J=K=0} B &= i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \lim_{t_s \rightarrow t_s^+} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s)}{dt_s} \right) \Delta(t_r, t_s) \right. \\
&\quad \left. - \lim_{t_s \rightarrow t_s^-} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s)}{dt_s} \right) \Delta(t_r, t_s) \right] \\
&= i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \left( \frac{(t_b - t_s)}{(t_b - t_a)} + \frac{(t_s - t_a)}{(t_b - t_a)} \right) \Delta(t_r, t_s) \right] \\
&= i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \Delta(t_r, t_s) \right] = 0, \quad (5.96)
\end{aligned}$$

onde usamos (D.10). Assim, a contribuição de ordem  $\alpha$ , em (5.87), também se cancela no limite. Observar que o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$  se processa através da descontinuidade da derivada de  $\Delta(t, t')$  em  $t = t'$ . Usamos (D.10) por simplicidade, o resultado é o mesmo usando primeiro (5.76) e depois tomando o limite.

De forma análoga, calculamos

$$\langle q_b, t_b | P(t_r) | q_a, t_a \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right) \frac{\partial W(J, K, \epsilon, m)}{\partial K_r} \Bigg|_{J=K=0} \quad (5.97)$$

que, em primeira ordem em  $\lambda$ , fornece

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | P(t_r) | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ (-1) \sum_{s=0}^m \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right] \right\}^2 \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s} \right] \right. \\ &\quad \left. - i\hbar\alpha \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right) \left[ \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right] \right\} \frac{\partial W_0(J, K, \epsilon, m)}{\partial K_r} \Bigg|_{J=K=0} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} N \left[ \alpha^2 \bar{A}(J, K, \epsilon, m) + \alpha \bar{B}(J, K, \epsilon, m) + \bar{C}(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \quad (5.98) \end{aligned}$$

onde  $\bar{A}$ ,  $\bar{B}$ ,  $\bar{C}$  são obtidos desde  $A$ ,  $B$ ,  $C$  substituindo a derivada  $\partial/\partial J_r$  por  $\partial/\partial K_r$ . Assim

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \bar{A} \Big|_{J=K=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [ \bar{U} + \bar{V} + \bar{X} + \bar{Y} + \bar{Z} ] \quad (5.99)$$

$$\lim \bar{B} \Big|_{J=K=0} = \lim [\bar{U} - \bar{X} + \frac{1}{2}(\bar{Y} - \bar{Z})] \quad (5.100)$$

onde

$$\bar{U} = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_{s+1}^2 \partial K_s \partial K_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.101a)$$

$$\bar{V} = \sum_{s=0}^m \left( \frac{-\hbar^3}{i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_{s+1} \partial J_s \partial K_s \partial K_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.101b)$$

$$\bar{X} = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_s^2 \partial K_s \partial K_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.101c)$$

$$\bar{Y} = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial J_{s+1} \partial K_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.101d)$$

$$\bar{Z} = \sum_{s=0}^m \left( \frac{-\hbar^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial J_s \partial K_r} \Big|_{J=K=0}. \quad (5.101e)$$

A partir das expressões (E.18) - (E.22), temos

$$\lim \bar{A} \Big|_{J=K=0}$$

$$\begin{aligned}
&= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) [\Delta_{s+1,s+1} - 2\Delta_{s,s+1} + \Delta_{s,s}] \right. \\
&\quad \left. - \tilde{M}_{s+1} M_{s+1} + M_s \tilde{M}_{s+1} + \tilde{M}_s M_{s+1} - M_s \tilde{M}_s + \tilde{M}_{s+1} - \tilde{M}_s \right\} \\
&= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) [\Delta_{s+1,s+1} - 2\Delta_{s,s+1} + \Delta_{s,s}] \right. \\
&\quad \left. + (\tilde{M}_{s+1} - \tilde{M}_s) [1 - M_{s+1} + M_s] \right\} = 0 \tag{5.102}
\end{aligned}$$

uma vez que, de acordo com (E.3) e (5.76)

$$\begin{aligned}
\lim [1 - (M_{s+1} - M_s)] &= \lim \left\{ 1 - \left[ \left( \frac{\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s+1}}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\Delta_{s+1,s} - \Delta_{s,s}}{\epsilon} \right) \right] \right\} \\
&= \lim \left[ 1 - \frac{m\epsilon}{(m+1)\epsilon} \right] = 0 \quad ; \tag{5.103a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim (\tilde{M}_{s+1} - \tilde{M}_s) &= \lim \left[ \left( \frac{\Delta_{r+1,s+1} - \Delta_{r,s+1}}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\Delta_{r+1,s} - \Delta_{r,s}}{\epsilon} \right) \right] \\
\rightarrow \left[ \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} - \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} \right] &= 0 \quad . \tag{5.103b}
\end{aligned}$$

Notar que o resultado (5.103a) segue também de (5.96). Por outro lado,



$$\lim_{J=K=0} \bar{B} = (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) [\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s}] \right.$$

$$\left. - \tilde{M}_{s+1} M_{s+1} + M_s \tilde{M}_s + \frac{1}{2} (\tilde{M}_{s+1} + \tilde{M}_s) \right\} ;$$

$$\lim [ M_s \tilde{M}_s - M_{s+1} \tilde{M}_{s+1} + \frac{1}{2} (\tilde{M}_{s+1} + \tilde{M}_s) ]$$

$$= \lim \left\{ \left( \frac{\Delta_{s+1,s} - \Delta_{s,s}}{\epsilon} \right) \left( \frac{\Delta_{r+1,s} - \Delta_{r,s}}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\Delta_{s+1,s+1} - \Delta_{s,s+1}}{\epsilon} \right) \left( \frac{\Delta_{r+1,s+1} - \Delta_{r,s+1}}{\epsilon} \right) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\Delta_{r+1,s+1} - \Delta_{r,s+1}}{\epsilon} \right) + \left( \frac{\Delta_{r+1,s} - \Delta_{r,s}}{\epsilon} \right) \right] \right\} \Rightarrow$$

$$\lim_{J=K=0} \bar{B} = -i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left\{ \left[ \lim_{t_s \rightarrow t_s^-} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s)}{dt_s} \right) - \lim_{t_s \rightarrow t_s^+} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s)}{dt_s} \right) \right] \right.$$

$$\left. \times \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} + \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} \right\}$$

$$= -i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ - \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} + \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} \right] = 0 \quad (5.104)$$

de acordo com (5.96).

Os resultados (5.102) e (5.104) demonstram a unicidade da função de Green (5.98).

Seja a perturbação

$$H^{(I)}(P, Q) = \frac{\lambda}{2} P Q P \quad (5.105)$$

o Hamiltoniano (5.62). A Tabela II fornece

$$h_{\alpha}^{(I)}(p, q) = \lambda \left[ \frac{1}{2} q p^2 - i \hbar \alpha p \right] \quad (5.106)$$

Como no caso anterior, começamos calculando

$$\langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \right) \frac{\partial W(J, K, \epsilon, m)}{\partial J_r} \Big|_{J=K=0} \quad (5.107)$$

As fórmulas (5.83), (5.106) e (5.107) implicam

$$\begin{aligned} \langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ (-1) \sum_{s=0}^m \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right] \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s} \right]^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - i \hbar \alpha \left( \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s} \right) \right\} \frac{\partial W_0(J, K, \epsilon, m)}{\partial J_r} \right\} \Big|_{J=K=0} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} N \left[ \alpha L(J, K, \epsilon, m) + I(J, K, \epsilon, m) \right] \Big|_{J=K=0} \quad (5.108) \end{aligned}$$

onde

$$L(J, K, \epsilon, m) = \sum_{s=0}^m \left[ \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \left( \frac{\partial^4}{\partial J_{s+1} \partial K_s^2 \partial J_r} - \frac{\partial^4}{\partial J_s \partial K_s^2 \partial J_r} \right) + \frac{\hbar^2}{\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial K_s \partial J_r} \right] e^{\phi(J, K, \epsilon, m)} \quad (5.109)$$

$I(J, K, \epsilon, m)$  denota a soma de todos os termos que não dependem de  $\alpha$ . Calculemos o limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} L \Big|_{J=K=0} = \lim [R - S + T] \quad (5.110)$$

onde

$$R = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_{s+1} \partial K_s^2 \partial J_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.111a)$$

$$S = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^3} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_s \partial K_s^2 \partial J_r} \Big|_{J=K=0}, \quad (5.111b)$$

$$T = \sum_{s=0}^m \left( \frac{\hbar^2}{\epsilon} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial K_s \partial J_r} \Big|_{J=K=0}. \quad (5.111c)$$

A partir de (E.23) - (E.25), temos

$$\begin{aligned} \lim_{J=K=0} L &= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_r M_{s+1} - M_r M_s - M_r \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} (\Delta_{r,s+1} - \Delta_{r,s}) \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \\ &= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ M_r [1 - (M_{s+1} - M_s)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta_{r,s+1} - \Delta_{r,s}}{\epsilon} \right) [1 - (M_{s+1} - M_s)] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.112)$$

usando o resultado (5.103a). A seguir, calculamos

$$\langle q_b, t_b | P(t_r) | q_a, t_a \rangle = \lim_{J=K=0} N^{(1)} \left[ \alpha \bar{L}(J, K, \epsilon, m) + \bar{I}(J, K, \epsilon, m) \right], \quad (5.113)$$

onde  $\bar{L}$ ,  $\bar{I}$  são obtidos desde  $L$ ,  $I$  substituindo a derivada  $\partial/\partial J_r$  por  $\partial/\partial K_r$ . Então, a partir de (E.26) - (E.28)

$$\begin{aligned} \lim_{J=K=0} \bar{L} &= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ (M_{s+1} - M_s) \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} (\tilde{M}_{s+1} - \tilde{M}_s) \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \right] \\ &= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ [1 - (M_{s+1} - M_s)] \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \left( \frac{M_{r+1} - M_r}{\epsilon} \right) [1 - (M_{s+1} - M_s)] \right] = 0 \end{aligned} \quad (5.114)$$

de acordo com (5.103a) e (E.9).

Em (5.112) e (5.114), que demonstram a unicidade das funções de Green de um ponto em primeira ordem na constante de acoplamento observamos, explicitamente, outro aspecto do mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$ : temos aparentemente divergentes se agrupam de forma tal que seu limite é zero. Isto nos permite inferir que, para funções de Green de maior número de pontos ou para ordens mais altas de teoria de perturbação, o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$  seja deveras intrínco.

## V.2.2 - Perturbações ao Oscilador Harmônico

No caso em que

$$H_0(P, Q) = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} Q^2, \quad (5.115)$$

a geratriz de funções de Green correspondente é dada por

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = (2\pi\hbar)^{-(m+1)} \int dq_1 \dots dq_m dp_0 \dots dp_m \times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left[ p_j \frac{(q_{j+1} - q_j)}{\epsilon} - \frac{1}{2} p_j^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q_{j,j+1}^2(\alpha) + J_j q_j + K_j p_j \right] \right\}. \quad (5.116)$$

As integrais em  $p$  são idênticas às do caso anterior. A expressão (5.63) fornece

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar i\epsilon} \right)^{\frac{m+1}{2}} O(J, K, \epsilon, m) \quad (5.117)$$

com

$$O(J, K, \epsilon, m) \equiv \int dq_1 \dots dq_m e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^m \left\{ J_j q_j \epsilon - \frac{1}{2} \omega^2 q_{j,j+1}^2(\alpha) \epsilon + \frac{1}{2\epsilon} [K_j \epsilon + (q_{j+1} - q_j)]^2 \right\}} \quad (5.118)$$

A chave em (5.118) é igual a

$$R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2 + L_j^{(+)} q_{j+1} + L_j^{(-)} q_j + \frac{1}{2} K_j^2 \epsilon$$

onde

$$R \equiv [1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/2 + \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.119a)$$

$$G \equiv [-1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/4 - \alpha^2)] / 2\epsilon \quad (5.119b)$$

$$H \equiv [1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/2 - \alpha)^2] / 2\epsilon \quad (5.119c)$$

$$L_j^{(+)} \equiv K_j \quad (5.119d)$$

$$L_j^{(-)} \equiv J_j \epsilon - K_j \quad (5.119e)$$

Por simplicidade, tomamos

$$q_a = q_b = 0 \quad (5.120)$$

e identificamos

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^m [R q_{j+1}^2 + 2G q_j q_{j+1} + H q_j^2 + L_j^{(+)} q_{j+1} + L_j^{(-)} q_j] \\ &= \sum_{i,j=1}^m a_{ij} q_j q_i + \sum_{j=1}^m v_j q_j \end{aligned} \quad (5.121)$$

Como no caso anterior, a matriz  $A$  é a mesma da seção V.1.2 e dada pela expressão (5.26). Os  $v_j$  são da forma

$$v_j = L_{j-1}^{(+)} + L_j^{(-)} \quad (5.122)$$

Desde (5.118), (5.121) e (C.7)

$$O(J, K, \epsilon, m) = (i\pi\hbar) (\det A) e^{\frac{m/2 - 1/2}{2\hbar} \sum_{j=0}^m K_j^2 - \frac{iC}{4\hbar}} \quad (5.123)$$

De acordo com os resultados da seção V.1.2, temos

$$\det A = (-G)^m D_m^m \quad , \quad (5.124a)$$

$$D_r^m = \frac{\text{sen}[(r+1)\phi]}{\text{sen } \phi} \quad , \quad (5.124b)$$

$$\phi = \cos^{-1} \left[ \frac{1 - \epsilon^2 \omega^2 (1/4 + \alpha^2)}{1 + \epsilon^2 \omega^2 (1/4 - \alpha^2)} \right] \quad , \quad (5.124c)$$

$$c^2 = \left( \frac{-2\epsilon}{g} \right) \sum_{j,k=1}^m v_j (S)_{jk} v_k \quad . \quad (5.124d)$$

Analisemos  $c^2$ . Definindo

$$(T)_{jk} = D_m^m (S)_{jk} = D_{j-1}^m D_{m-k}^m \quad , \quad j \leq k \quad ; \quad (5.125a)$$

$$(T)_{jk} = D_m^m (S)_{jk} = D_{k-1}^m D_{m-j}^m \quad , \quad k \leq j \quad ; \quad (5.125b)$$

a expressão (5.124d) pode ser escrita como

$$c^2 = \left( \frac{-2}{g \in D_m^m} \right) \sum_{j,k=1}^m v_j \tilde{\epsilon} (T)_{jk} v_k \quad . \quad (5.126)$$

A partir de (5.124b) e (5.125), é claro que

$$\epsilon^2(T)_{jk} = \frac{\epsilon^2 \operatorname{sen}(j\phi) \operatorname{sen}[(m-k+1)\phi]}{\operatorname{sen}^2 \phi}, \quad j < k; \quad (5.127a)$$

$$\epsilon^2(T)_{jj} = \frac{\epsilon^2 \operatorname{sen}(j\phi) \operatorname{sen}[(m-j+1)\phi]}{\operatorname{sen}^2 \phi}, \quad j = k; \quad (5.127b)$$

$$\epsilon^2(T)_{jk} = \frac{\epsilon^2 \operatorname{sen}(k\phi) \operatorname{sen}[(m-j+1)\phi]}{\operatorname{sen}^2 \phi}, \quad j > k. \quad (5.127c)$$

No limite, lembrando que

$$\left. \begin{aligned} \phi &\longrightarrow \omega \epsilon \\ j\phi &\longrightarrow \omega(t_j - t_a) \\ (m+1)\epsilon &\longrightarrow t_b - t_a \\ (m+1-k)\phi &\longrightarrow \omega(t_b - t_k) \end{aligned} \right\}, \quad (5.128)$$

teremos

$$\epsilon^2(T)_{jk} \longrightarrow \frac{1}{\omega} \operatorname{sen} \omega(t_b - t_a) \Delta(t_j, t_k), \quad t_j < t_k; \quad (5.129a)$$

$$\epsilon^2(T)_{jj} \longrightarrow \frac{1}{\omega} \operatorname{sen} \omega(t_b - t_a) \Delta(t_j, t_j), \quad t_j = t_k; \quad (5.129b)$$

$$\epsilon^2(T)_{jk} \longrightarrow \frac{1}{\omega} \operatorname{sen} \omega(t_b - t_a) \Delta(t_j, t_k), \quad t_j > t_k; \quad (5.129c)$$



onde  $\Delta(t_j, t_k)$  é a função de Green uni-dimensional simétrica do oscilador harmônico no contínuo, de acordo com (D.15). Dado que as expressões (5.37) e (5.38) permanecem válidas, temos também

$$\left( \frac{-1}{g \in D_m^m} \right) \longrightarrow \frac{\omega}{\text{sen } \omega(t_b - t_a)} \quad . \quad (5.130)$$

Assim, das expressões (5.129) e (5.130), concluímos que

$$\left( \frac{-1}{g \in D_m^m} \right) \dot{\epsilon}^2(T)_{jk} \longrightarrow \Delta(t_j, t_k) \quad . \quad (5.131)$$

Portanto, o termo do lado esquerdo de (5.131) pode ser visto como representação discreta da função de Green uni-dimensional simétrica do oscilador harmônico. Denotamos

$$\left[ \frac{-\epsilon(T)_{jk}}{g D_m^m} \right] \equiv \Delta_{jk} \quad . \quad (5.132)$$

Substituindo (5.132) em (5.126), encontramos

$$c^2 = 2\epsilon^2 \sum_{j,k=0}^m \left[ J_j - \frac{(K_j - K_{j-1})}{\epsilon} \right] \Delta_{jk} \left[ J_k - \frac{(K_k - K_{k-1})}{\epsilon} \right] \quad . \quad (5.133)$$

Nota: Como antes, podemos somar desde  $j = k = 0$  pois

$$\Delta_{0k} = \Delta_{j0} = \Delta_{00} = 0 \quad (5.134)$$

como se vê a partir de (5.127).

Finalmente, as expressões (5.133), (5.124a), (5.123) e (5.117) fornecem

$$W_0(J, K, \epsilon, m) = N_{\text{o.H.}} \mathcal{L}^{\phi(J, K, \epsilon, m)} \quad (5.135)$$

com

$$N_{\text{o.H.}} = [2\pi\hbar i (-g)^m \epsilon D_m^m]^{-1/2}, \quad (5.136a)$$

$$\phi(J, K, \epsilon, m)$$

$$\equiv \frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{j=0}^m K_j^2 - \frac{i\epsilon^2}{2\hbar} \sum_{j,k=0}^m \left[ J_j - \frac{(K_j - K_{j-1})}{\epsilon} \right] \Delta_{j,k} \left[ J_k - \frac{(K_k - K_{k-1})}{\epsilon} \right]. \quad (5.136b)$$

Observação: No limite ( $m \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$ ),  $W_0(J, K, \epsilon, m)$  se reduz exatamente a (D.13).

Pela completa identidade formal de (5.136b) e (5.80b), podemos utilizar diretamente os resultados da seção V.2.1, com a diferença que agora  $\Delta_{j,k}$  é a função de Green do oscilador harmônico. Como em (5.83), a geratriz de funções de Green é

$$W(J, K, \epsilon, m)$$

$$= \mathcal{L} \left[ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{s=0}^m h_{\alpha}^{(I)} \left[ \frac{\hbar}{i\epsilon} \frac{\partial}{\partial K_s}, \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_{s+1}} + \frac{\hbar}{i\epsilon} \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) \frac{\partial}{\partial J_s} \right] \right] W_0(J, K, \epsilon, m)$$

com  $W_0(J, K, \epsilon, m)$  dada por (5.135).

Neste caso, a dependência em  $\alpha$  está distribuída em  $h_{\alpha}^{(I)} [p_j, (1/2 + \alpha)q_{j+1} + (1/2 - \alpha)q_j]$  (parte provém do mapeamento  $\alpha$  e parte do slice) e em  $W_0(J, K, \epsilon, m)$  (em  $\Delta_{j,k}$  e na constante de nor

malização).

Analisemos as perturbações (5.84) e (5.105) a  $H_0(P, Q)$  dado por (5.115). As contribuições de ordem zero às funções de Green são independentes de  $\alpha$  uma vez que, no limite,  $W_0(J, K, \epsilon, m)$  independe de  $\alpha$ .

Seja a perturbação (5.84), i.e.,  $H^{(I)}(P, Q) = \frac{\lambda}{Z} QPQ$ . A expressão (5.87) fornece

$$\begin{aligned} & \langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} N_{\text{o.H.}} \left[ \alpha^2 A_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + \alpha B_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + C_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \end{aligned} \quad (5.137)$$

De acordo com (5.93),

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} A_{\text{o.H.}} \Big|_{J=K=0} = 0 \quad (5.138)$$

independentemente da forma funcional da função  $\Delta(t, t')$ . Desde (5.96),

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 0} B_{\text{o.H.}} \Big|_{J=K=0} &= ik \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \lim_{t_s' \rightarrow +t_s} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} \right) \Delta(t_r, t_s) \right. \\ &\quad \left. - \lim_{t_s' \rightarrow -t_s} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} \right) \Delta(t_r, t_s) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \left( \frac{\text{sen } \omega(t_b - t_s) \cos \omega(t_s - t_a)}{\text{sen } \omega(t_b - t_a)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\text{sen } \omega(t_s - t_a) \cos \omega(t_b - t_s)}{\text{sen } \omega(t_b - t_a)} \right) \Delta(t_r, t_s) \right] \\
&= i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\Delta(t_r, t_s) + \left( \frac{\text{sen } \omega(t_b - t_s + t_s - t_a)}{\text{sen } \omega(t_b - t_a)} \right) \Delta(t_r, t_s) \right] = 0
\end{aligned}$$

(5.139)

onde usamos (D.15). A expressão (5.98) fornece

$$\begin{aligned}
&\langle q_b, t_b | P(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)} \\
&= \lim_{\text{o.H.}} N_{\text{o.H.}} \left[ \alpha^2 \bar{A}_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + \alpha \bar{B}_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + \bar{C}_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \quad (5.140)
\end{aligned}$$

De acordo com (5.102) e (5.103b),

$$\lim_{\text{o.H.}} \bar{A}_{\text{o.H.}} \Big|_{J=K=0} = 0 \quad (5.141)$$

independentemente da forma funcional de  $\Delta(t, t')$ . Desde (5.104),

$$\begin{aligned}
\lim_{\text{o.H.}} \bar{B} \Big|_{J=K=0} &= -i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left\{ \left[ \lim_{t_s' \rightarrow -t_s} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} \right) - \lim_{t_s' \rightarrow +t_s} \left( \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} \right) \right] \right. \\
&\times \left. \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} + \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} \right\} \\
&= -i\hbar \int_{t_a}^{t_b} dt_s \left[ -\frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} + \frac{d\Delta(t_r, t_s)}{dt_r} \right] = 0 \quad (5.142)
\end{aligned}$$

usando (5.139).

Seja a perturbação (5.105), i.e.,  $H^{(I)}(P, Q) = \frac{\lambda}{2} P Q P$ . A expressão (5.108) fornece

$$\begin{aligned}
&\langle q_b, t_b | Q(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)} \\
&= \lim_{\text{o.H.}} N_{\text{o.H.}} \left[ \alpha L_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + I_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \quad (5.143)
\end{aligned}$$

De acordo com (5.112),

$$\begin{aligned}
&\lim_{\text{o.H.}} L_{\text{o.H.}} \Big|_{J=K=0} \\
&= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ [1 - (M_{s+1} - M_s)] \left[ M_r + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta_{r, s+1} - \Delta_{r, s}}{\epsilon} \right) \right] \right\} = 0 \quad (5.144)
\end{aligned}$$

uma vez que

$$\begin{aligned}
&\lim [1 - (M_{s+1} - M_s)] = \lim \left\{ 1 - \left[ \left( \frac{\Delta_{s+1, s+1} - \Delta_{s, s+1}}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\Delta_{s+1, s} - \Delta_{s, s}}{\epsilon} \right) \right] \right\} \\
&= 1 - \left[ \lim_{t_s' \rightarrow +t_s} \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} - \lim_{t_s' \rightarrow -t_s} \frac{d\Delta(t_s, t_s')}{dt_s} \right] = 0 \quad , \quad (5.145)
\end{aligned}$$

como vemos desde (5.139). A expressão (5.113) fornece

$$\begin{aligned} & \langle q_b, t_b | P(t_r) | q_a, t_a \rangle^{(1)} \\ &= \lim_{\text{o.H.}} N_{\text{o.H.}} \left[ \alpha \bar{L}_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) + \bar{I}_{\text{o.H.}}(J, K, \epsilon, m) \right]_{J=K=0} \quad (5.146) \end{aligned}$$

Desde (5.114),

$$\begin{aligned} \lim_{\text{o.H.}} \bar{L}_{\text{o.H.}} \Big|_{J=K=0} &= i \hbar \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ [1 - (M_{s+1} - M_s)] \right. \\ & \times \left. \left[ \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) + \frac{1}{2} \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right] \right\} = 0 \quad (5.147) \end{aligned}$$

de acordo com (5.145).

Desta forma, verificamos explicitamente a unicidade das funções de Green de um ponto do oscilador harmônico simples, em ordem  $\lambda$ , para as perturbações especiais (5.84) e (5.105). Obviamente, a inferência final da seção V.2.1 também se aplica ao os cilador harmônico simples.

## VI - A DEPENDÊNCIA DA DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SCHWINGER

Tem sido uma crença comum que uma multiplicidade de representações como (4.15) surge apenas em conexão com a definição da integral funcional por time-slicing<sup>9a,e,f</sup>. Como veremos, isto não é verdade. Neste capítulo<sup>41</sup>, mostramos sobre uma base geral que uma prescrição de discretização é sempre requerida para um estabelecimento apropriado da formulação funcional da dinâmica quântica.

Como primeiro passo nesse sentido, iremos demonstrar que, no caso mais geral, as equações diferenciais funcionais de Schwinger devem ser formuladas em termos de uma discretização específica.

VI.1 - Derivação das Equações de Schwinger

Para derivar as equações de Schwinger, consideremos um sistema físico ( $H'(Q'(t), P'(t))$ , ou simplesmente  $H'$ ) na presença de fontes externas. A interação fontes-sistema é escolhida na forma

$$H^{(s)'} = -J' \cdot Q' - K' \cdot P' \quad , \quad (6.1)$$

onde  $J'$  e  $K'$  são fontes externas para  $Q'$  e  $P'$ , respectivamente. Por economia na escrita, essas fontes serão também designadas, genericamente, por  $s$ . Começamos trabalhando na representação

$$|\Psi(t)\rangle = U'[s|t, t_i] |\Psi(t_i)\rangle \quad (6.4)$$

onde  $U'$  é um operador unitário

Substituindo (6.12) em (6.7), obtemos

$$\frac{dU[s|t, t_i]}{dt} = -i H^{(s)}(t) U[s|t, t_i] \quad (6.13)$$

que expressa o movimento do operador  $U[s|t, t_i]$  em termos de quantidades do FSP. As expressões (6.8) e (6.13) podem ser resumidas na equação

$$U[s|t, t_i] = I - i \int_{t_i}^t dt' H^{(s)}(t') U[s|t', t_i] \quad (6.14)$$

É claro que no limite de fontes externas anuladas ( $s=0$ ), a FSP coincide com a HP.

Passamos ao cálculo de uma expressão geral que vai nos permitir determinar as derivadas funcionais de  $U[s|t_f, t_i]$ . Damos a  $H^{(s)}(t)$  um incremento  $\delta H^{(s)}(t)$ . Por hipótese<sup>42</sup>, a dependência de  $U[s|t_f, t_i]$  com  $H^{(s)}(t)$  é contínua. Assim, desde (6.14), obtemos

$$\begin{aligned} & U[s|t_f, t_i] + \delta U[s|t_f, t_i] \\ &= I - i \int_{t_i}^{t_f} dt' [H^{(s)}(t') + \delta H^{(s)}(t')] \{ U[s|t', t_i] + \delta U[s|t', t_i] \} \quad (6.15) \end{aligned}$$

Através das definições

$$\left. \begin{aligned} U[s|t_f, t_i] + \delta U[s|t_f, t_i] &\equiv R \quad ; \quad U[s|t_f, t_i] \equiv R_1 \quad ; \\ -i(H^{(s)} + \delta H^{(s)}) &\equiv K_1 + K \quad \text{com} \quad -iH^{(s)} \equiv K_1 \quad , \quad -i\delta H^{(s)} \equiv K \quad ; \end{aligned} \right\} \quad (6.16)$$



reescrevemos (6.15) e (6.14) como

$$R = I + (K + K_1)R \quad e \quad R_1 = I + K_1 R_1$$

respectivamente. Combinando estas equações, obtemos facilmente, até primeira ordem no incremento, a equação ( $R = R_1 + R_1 K R$ )

$$U[s|t_f, t_i] + \delta U[s|t_f, t_i] = U[s|t_f, t_i] - i \int_{t_i}^{t_f} dt' U[s|t_f, t'] \delta H^{(s)}(t') U[s|t', t_i]$$

de onde encontramos

$$\delta U[s|t_f, t_i] = -i \int_{t_i}^{t_f} dt' U[s|t_f, t'] \delta H^{(s)}(t') U[s|t', t_i] \quad (6.17)$$

que é a expressão mencionada.

Agora, desde (6.1), é claro que

$$\delta H^{(s)}(t) = -Q(t) \cdot \delta J(t) - P(t) \cdot \delta K(t) \quad (6.18)$$

Levando (6.18) em (6.17), ficamos com

$$\begin{aligned} \delta U[s|t_f, t_i] &= i \int_{t_i}^{t_f} dt' U[s|t_f, t'] Q(t') U[s|t', t_i] \delta J(t') \\ &+ i \int_{t_i}^{t_f} dt' U[s|t_f, t'] P(t') U[s|t', t_i] \delta K(t') \end{aligned} \quad (6.19)$$

dado que  $U$  comuta com as fontes  $c$ -number  $J$  e  $K$ . Por outro lado, pela definição de diferencial funcional

$$\begin{aligned} \delta U[s|t_f, t_i] &= \int_{t_i}^{t_f} dt' \frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta J(t')} \delta J(t') \\ &+ \int_{t_i}^{t_f} dt' \frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta K(t')} \delta K(t') \end{aligned} \quad (6.20)$$

Posto que as variações  $\delta J$  e  $\delta K$  são independentes entre si, desde (6.19) e (6.20) surge que

$$\frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta J(t)} = \lambda U[s|t_f, t] Q(t) U[s|t, t_i] \equiv \lambda(t_f, Q(t), t_i) \quad , \quad (6.21a)$$

$$\frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta K(t)} = \lambda U[s|t_f, t] P(t) U[s|t, t_i] \equiv \lambda(t_f, P(t), t_i) \quad . \quad (6.21b)$$

As derivadas funcionais segundas seguem a partir de (6.21). Calculemos  $\delta^2 U[s|t_f, t_i] / \delta K_r(t') \delta J_s(t)$ . Devemos analisar dois casos:

(i)  $t' > t$ .

Desde (6.21a), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 U[s|t_f, t_i]}{\delta K(t') \delta J(t)} &= \lambda \frac{\delta U[s|t_f, t]}{\delta K(t')} Q(t) U[s|t, t_i] \\ &= (\lambda)^2 U[s|t_f, t'] P(t') U[s|t', t] Q(t) U[s|t, t_i] \\ &\equiv (\lambda)^2 (t_f, P(t') Q(t), t_i) \end{aligned} \quad (6.22a)$$

(ii)  $t' < t$ .

Desde (6.21a),

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta^2 U[s|t_f, t_i]}{\delta K(t') \delta J(t)} &= i U[s|t_f, t] Q(t) \frac{\delta U[s|t, t_i]}{\delta K(t')} \\
 &= (i)^2 U[s|t_f, t] Q(t) U[s|t, t'] P(t') U[s|t', t_i] \\
 &\equiv (i)^2 (t_f, Q(t) P(t'), t_i) \quad . \quad (6.22b)
 \end{aligned}$$

As expressões (6.22) podem ser reunidas em uma só:

$$(i)^{-2} \frac{\delta^2 U[s|t_f, t_i]}{\delta K(t') \delta J(t)} = (t_f, T\{Q(t)P(t')\}, t_i) \quad . \quad (6.23)$$

Em geral temos

$$\begin{aligned}
 (i)^{-l+m} &\frac{\delta^{l+m} U[s|t_f, t_i]}{\delta J_{s_1}(t_1) \dots \delta J_{s_l}(t_l) \delta K_{r_1}(t'_1) \dots \delta K_{r_m}(t'_m)} \\
 &= (t_f, T\{Q_{s_1}(t_1) \dots Q_{s_l}(t_l) P_{r_1}(t'_1) \dots P_{r_m}(t'_m)\}, t_i) \quad , \quad (6.24)
 \end{aligned}$$

onde o produto-T cronologicamente ordenado é definido por

$$(t_f, T\{Q_s(t) P_r(t')\}, t_i)$$

$$= \begin{cases} U[s|t_f, t] Q_s(t) U[s|t, t'] P_r(t') U[s|t', t_i] & , \text{ se } t > t' . \\ U[s|t_f, t'] P_r(t') U[s|t', t] Q_s(t) U[s|t, t_i] & , \text{ se } t' > t . \end{cases} \quad (6.25)$$

Todos os subíndices em (6.24) vão de 1 a n.

As equações de Schwinger são as equações de movimento para as derivadas funcionais de U em relação às fontes externas. Para encontrar ditas equações de movimento precisamos conhecer as equações de movimento dos operadores. Dado que estas últimas são em geral derivadas na HP, convém reexpressar (6.21) em termos de operadores da HP.

De acordo com (6.4) e (6.11),

$$\frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta J_r(t)} = i U[s|t_f, t_i] Q_r'(t) \quad (6.26a)$$

$$\frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta K_r(t)} = i U[s|t_f, t_i] P_r'(t) \quad (6.26b)$$

A partir de (6.26)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{1}{i} \frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta J_r(t)} &= U[s|t_f, t_i] \frac{dQ_r'(t)}{dt} \\ &= -i U[s|t_f, t_i] [Q_r'(t), H'(t) + H^{(s)'}(t)] \end{aligned} \quad (6.27a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{1}{i} \frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta K_r(t)} &= U[s|t_f, t_i] \frac{dP_r'(t)}{dt} \\ &= -i U[s|t_f, t_i] \left[ P_r'(t), H'(t) + H^{(s)'}(t) \right], \end{aligned} \quad (6.27b)$$

onde usamos (6.2).

Através das igualdades

$$\left. \begin{aligned} [Q_r'(t), H'(Q'(t), P'(t))] &= i \frac{\partial H'(Q'(t), P'(t))}{\partial P_r'(t)} \equiv i A_r'(Q'(t), P'(t)) \\ [P_r'(t), H'(Q'(t), P'(t))] &= -i \frac{\partial H'(Q'(t), P'(t))}{\partial Q_r'(t)} \equiv i B_r'(Q'(t), P'(t)) \end{aligned} \right\} (6.28)$$

válidas sempre que se preserve a ordem dos fatores não-comutantes no processo de diferenciação, e pelo uso explícito das relações canônicas de comutação a tempos iguais

$$[Q_r'(t), Q_s'(t)] = [P_r'(t), P_s'(t)] = 0 \quad (6.29a)$$

$$[Q_r'(t), P_s'(t)] = i \delta_{rs} I, \quad (6.29b)$$

é imediato verificar que (6.27) se reduz a

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{i} \frac{\delta U[s|t_f, t_i]}{\delta J_r(t)} = U[s|t_f, t_i] \left\{ A_r'(Q'(t), P'(t)) - K_r'(t) \right\}, \quad (6.30a)$$

$$\begin{aligned}
 U[s|t_f, t] & \left\{ \begin{array}{l} A_r(Q(t), P(t)) \\ B_r(Q(t), P(t)) \end{array} \right\} U[s|t, t_i] \\
 & = \left\{ \begin{array}{l} A_r \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(t)}, \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta K(t)} \right) \\ B_r \left( \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(t)}, \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta K(t)} \right) \end{array} \right\} U[s|t_f, t_i] \quad . \quad (6.33)
 \end{aligned}$$

Isto, é claro, é uma consequência de (6.29a). Entretanto, se  $A_r$  e/ou  $B_r$  contêm produtos de operadores não-comutantes não é mais possível usar (6.33). O problema pode ser resolvido apenas escolhendo um procedimento de discretização, i.e.,

$$A_r(Q(t), P(t)) = [A_r(Q(t), P(t))]_{\alpha, -\alpha} \quad , \quad (6.34a)$$

$$B_r(Q(t), P(t)) = [B_r(Q(t), P(t))]_{\alpha, -\alpha} \quad . \quad (6.34b)$$

Antes de aplicar o formalismo da seção III.2 para calcular o lado direito de (6.34), cabe um esclarecimento. O formalismo daquela seção foi desenvolvido para operadores da Schrödinger picture (SP) enquanto que nesta seção estamos trabalhando com operadores da FSP. Como ambas representações estão ligadas por uma transformação canônica, implementada por algum operador unitário, não é difícil transformar nossas equações (3.32) - (3.34) em seus equivalentes da FSP.

Depois desta mudança de representação, obtemos

$$\begin{aligned}
 \left. \begin{array}{l} A_r(Q(t), P(t)) \\ B_r(Q(t), P(t)) \end{array} \right\} &= (2\pi)^{-2n} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy du dv \\
 &\times \left. \begin{array}{l} a_{r_\alpha}(x, y) \\ b_{r_\alpha}(x, y) \end{array} \right\} \exp\left[i\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) u \cdot v\right] \exp\left\{i[x - Q(t)] \cdot u\right\} \\
 &\times \exp\left\{i[y - P(t)] \cdot v\right\} \quad , \quad (6.35)
 \end{aligned}$$

onde  $a_{r_\alpha}$  e  $b_{r_\alpha}$  são as transformadas generalizadas de índice  $\alpha$  de  $A_r$  e  $B_r$ , respectivamente. Portanto, a  $GW_\alpha$  reduz qualquer problema de ordenamento arbitrariamente complicado ao problema de um produto de uma função de  $Q$  vezes uma função de  $P$ . Este é o papel crucial desempenhado pela discretização. Dado que

$$F(Q(t))G(P(t)) = \lim_{t' \rightarrow t_-} T\{F(Q(t))G(P(t'))\} \quad , \quad (6.36)$$

onde  $t_- = t - \delta$ ,  $\delta > 0$ , a substituição de (6.35) em (6.31) nos leva, em vista de (6.36), à seguinte forma final para as equações de Schwinger

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \frac{1}{i} \frac{\delta U_0[s|t_f, t_i]}{\delta J_r(t)} &= \lim_{t' \rightarrow t_-} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \left[ a_{r_\alpha}(x, y) \Delta(x, y; -\alpha) \right] \\
 &\times U_0[s|t_f, t_i] - K_r(t) U_0[s|t_f, t_i] \quad , \quad (6.37a)
 \end{aligned}$$



$$\frac{d}{dt} \frac{1}{i} \frac{\delta U_0[s|t_f, t_i]}{\delta K_r(t)} = \lim_{t' \rightarrow t_-} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \left[ b_{r\alpha}(x, y) \Delta(x, y; -\alpha) \right] \\ \times U_0[s|t_f, t_i] + J_r(t) U_0[s|t_f, t_i] \quad , \quad (6.37b)$$

onde

$$\Delta(x, y; -\alpha) = (2\pi)^{-2n} \int_{-\infty}^{+\infty} du dv \exp \left[ i \left( \frac{1}{2} - \alpha \right) u \cdot v \right] \\ \times \exp \left\{ i \left[ x - \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta J(t)} \right] \cdot u \right\} \exp \left\{ i \left[ y - \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta K(t')} \right] \cdot v \right\} \quad (6.38)$$

e

$$U_0[s|t_f, t_i] = \langle E_0 | U[s|t_f, t_i] | E_0 \rangle \quad . \quad (6.39)$$

Obviamente, estamos assumindo que o operador  $H$  é acotado por baixo (bounded from below) de modo a definir um problema fisicamente sensível. Em (6.39) denotamos por  $|E_0\rangle$  o estado fundamental de  $H$ . Na literatura,  $U_0$  é conhecida como a funcional geratriz de funções de Green.

Assim, demonstramos que o formalismo funcional diferencial de espaço de fase  $\bar{s}$  pode ser estabelecido, no caso mais geral, em termos de uma discretização. Esta afirmação não implica que as soluções de (6.37) dependerão de  $\alpha$  mas implica que devemos escolher alguma discretização  $\alpha$  para expressar o problema



como um sistema de equações diferenciais funcionais. Esta situação se assemelha a que ocorre em teorias (de campos) de gauge: para resolver o problema deve-se escolher um gauge, mas os resultados fisicamente significativos são independentes de gauge.

## VI.2 - Independência da Discretização das Soluções

Para verificar a independência de  $\alpha$  das soluções das equações de Schwinger, passamos ao problema de integrar as equações (6.37). No sentido funcional, o conjunto de equações (6.37) é linear. Sua solução pode, então, ser escrita na forma de uma transformada de Fourier funcional, i.e.,

$$U_0[s|t_f, t_i] = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{t_f} dq_{t_i} \Phi_0^*(q_{t_f}) \Phi_0(q_{t_i}) \times \int [Dq] [Dp] \tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i] \exp\left\{ \int_{t_i}^{t_f} dt [J(t) \cdot q(t) + K(t) \cdot p(t)] \right\}, \quad (6.40)$$

onde  $q(t)$  e  $p(t)$ , denotadas genericamente por  $\tilde{s}$ , são as variáveis transformadas de Fourier de  $J(t)$  e  $K(t)$ , respectivamente,  $\tilde{U}_0$  é a transformada de Fourier funcional de  $U_0$ ,  $\mathcal{N}$  é uma constante de normalização e  $\Phi_0(q) = \langle q | E_0 \rangle$ . Nada se afirma em relação a definição adotada para a integral funcional contínua em (6.40). Depois de substituir (6.40) em (6.37) chegamos a

$$i \tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i] \left[ \frac{dq_r(t)}{dt} - \Omega_{r\alpha}^{(\alpha)}(q(t), p(t)) \right] = \frac{\delta \tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i]}{\delta p_r(t)}, \quad (6.41a)$$

$$i\tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i] \left[ -\frac{dp_r(t)}{dt} + \Omega_{r_\alpha}^{(b)}(q(t), p(t)) \right] = \frac{\delta \tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i]}{\delta q_r(t)}, \quad (6.41b)$$

onde

$$\Omega_{r_\alpha}^{(a)}(q(t), p(t)) = \exp\left[\frac{-i q(t) \cdot p(t)}{(\frac{1}{2} - \alpha)}\right] a_{r_\alpha}(\eta, \zeta) \exp\left[\frac{i q(t) \cdot p(t)}{(\frac{1}{2} - \alpha)}\right], \quad (6.42a)$$

$$\Omega_{r_\alpha}^{(b)}(q(t), p(t)) = \exp\left[\frac{-i q(t) \cdot p(t)}{(\frac{1}{2} - \alpha)}\right] b_{r_\alpha}(\eta, \zeta) \exp\left[\frac{i q(t) \cdot p(t)}{(\frac{1}{2} - \alpha)}\right], \quad (6.42b)$$

com

$$\eta_s = -i\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \frac{\partial}{\partial p_s(t)}, \quad (6.43a)$$

$$\zeta_s = -i\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \frac{\partial}{\partial q_s(t)}. \quad (6.43b)$$

Deve-se notar que, em princípio, as únicas funções coeficientes aparentemente dependentes de  $\alpha$  em (6.41) são  $\Omega_{r_\alpha}^{(a)}$  e  $\Omega_{r_\alpha}^{(b)}$ .

Estamos agora em boa posição para verificar que  $\tilde{U}_0$  é independente de  $\alpha$ . Faremos isso calculando, explicitamente, alguns exemplos unidimensionais. Como passo preliminar, estabelecemos o seguinte teorema, cuja demonstração está dada no apêndice B.

Teorema 2: Seja  $H(Q,P)$  da forma polinomial e sejam

$$H(Q,P) \xrightarrow{\alpha} h_{\alpha}(q,p) \quad ,$$

$$\frac{\partial H(Q,P)}{\partial P_r} \xrightarrow{\alpha} a_{r_{\alpha}}(q,p) \quad ,$$

$$-\frac{\partial H(Q,P)}{\partial Q_r} \xrightarrow{\alpha} b_{r_{\alpha}}(q,p) \quad .$$

Então,

$$a_{r_{\alpha}}(q,p) = \frac{\partial h_{\alpha}(q,p)}{\partial p_r} \quad , \quad (6.44a)$$

$$b_{r_{\alpha}}(q,p) = -\frac{\partial h_{\alpha}(q,p)}{\partial q_r} \quad . \quad (6.44b)$$

Como primeiro exemplo, tomamos o da seção V.1.3. Então, de acordo com o teorema acima (ver também (5.43))

$$a_{\alpha}(\eta, \zeta) = \omega \eta + \zeta \quad , \quad (6.45a)$$

$$b_{\alpha}(\eta, \zeta) = -2\omega^2 \eta - \omega \zeta \quad . \quad (6.45b)$$

Depois de levar em conta (6.43), encontramos

$$\Omega_{\alpha}^{(a)}(q(t), p(t)) = \omega q(t) + p(t) \quad , \quad (6.46a)$$

$$\Omega_{\alpha}^{(b)}(q(t), p(t)) = -2\omega^2 q(t) - \omega p(t) \quad . \quad (6.46b)$$

Portanto, para o sistema físico descrito pelo Hamiltoniano (5.41), todas as funções coeficientes em (6.41) são independentes de  $\alpha$  e, como consequência, também o  $\bar{U}_0$ .

Nosso segundo, e último, exemplo é algo mais complicado. Esta vez tomamos

$$H(Q, P) = Q P^2 \quad , \quad (6.47)$$

cuja  $\text{GWT}_{\alpha}$  resulta ser

$$h_{\alpha}(q, p) = q^2 p^2 - 4i\alpha qp + \left(\frac{1}{2} - 2\alpha^2\right) \quad . \quad (6.48)$$

Então,

$$a_{\alpha}(\eta, \zeta) = 2\eta^2 \zeta - 4i\alpha \eta \quad , \quad (6.49a)$$

$$b_{\alpha}(\eta, \zeta) = -2\eta \zeta^2 + 4i\alpha \zeta \quad . \quad (6.49b)$$

Efetuando as substituições indicadas em (6.43), chega-se a

$$\Omega_{\alpha}^{(a)}(q(t), p(t)) = 2q^2(t)p(t) - 2i\alpha q(t) \quad (6.50a)$$

$$\Omega_{\alpha}^{(b)}(q(t), p(t)) = -2q(t)p^2(t) + 2i\alpha p(t) \quad . \quad (6.50b)$$

Mais uma vez, verificamos que as equações (6.41) não contêm funções coeficientes dependentes de  $\alpha$ .

A independência de  $\alpha$  de  $\tilde{U}_0[\tilde{s}]$  garante, através de (6.40), que a funcional geratriz  $U_0[s]$  não depende da discretização. Este é nosso segundo resultado neste capítulo.

Concluimos esta seção assinalando que qualquer solução explícita das equações de Schwinger, a despeito de ser independente de  $\alpha$ , sempre envolverá uma discretização específica. Por exemplo, as eqs. (6.41) adquirem uma forma simples para  $\alpha = +1/2$  (ordenamento antistandard) cuja integração fornece

$$\tilde{U}_0[\tilde{s}|t_f, t_i] = e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt [p(t) \cdot \dot{q}(t) - h_{1/2}(q(t), p(t))]} \quad (6.51)$$

Aqui,  $\tilde{U}_0$  é dada em termos de  $h_{1/2}$  que é uma GWT específica de  $H$ . Qualquer outro  $\alpha$  pode ser inserido em (6.51) pelo uso de (3.27). Assim, concluimos que a existência de uma multiplicidade de representações para o propagador quanto-mecânico não é uma peculiaridade da definição por time-slicing da integral funcional mas uma necessidade do formalismo funcional. O que sim depende da definição da integral funcional é o nível operacional no qual a dependência de  $\alpha$  se cancela. De fato, para a formulação funcional contínua apresentada nesta seção o integrando em (6.40), i.e.  $\tilde{U}_0$ , já é independente de  $\alpha$ . Por outro lado, nossos resultados da seção V.1.3 nos dizem que quando o método de time-slicing é usado, o cancelamento dos termos dependentes de  $\alpha$  ocorre somente depois

de efetuar as integrações funcionais. Este comportamento se origina, como vimos na seção V.1.3, na seqüência inevitável de aproximações necessárias à derivação da representação por integral funcional do propagador pelo método de time-slicing. Tais aproximações tornam-se exatas no limite contínuo  $m \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$  e  $\bar{\epsilon}$  a  $\bar{\epsilon}$  que a dependência de  $\alpha$  desaparece.



## VII - CONCLUSÕES

Do estudo aqui desenvolvido resulta evidente que para definir a integral funcional pelo método de time-slicing devemos especificar um particular procedimento de discretização que por sua vez, no caso mais geral, corresponde a um determinado esquema de ordenamento de operadores. Dado que existe um infinito contínuo de discretizações à nossa disposição<sup>16</sup>, uma representação não-única em termos de integrais funcionais canônicas para os elementos de matriz da teoria quântica emerge naturalmente.

Escolhendo a discretização  $\alpha$  ( $GW_\alpha$ ) e resolvendo explicitamente alguns exemplos de forma fechada, verificamos que o propagador quanto-mecânico é independente de  $\alpha$ , como deveria ser. Entretanto, não conseguimos estabelecer uma prova geral de independência de  $\alpha$  para os elementos de matriz da teoria. Por outro lado, o exemplo do oscilador modificado nos permitiu tornar transparente o mecanismo de cancelamento da dependência em  $\alpha$  o qual está intrinsicamente ligado à natureza estocástica da integral funcional.

Por meio de teoria de perturbações, verificamos a unicidade também das funções de Green que se dá por meio de um processo intrincado de cancelamento, confirmando resultados análogos obtidos pelo método operatorial<sup>31</sup> ou com a definição contínua da integral funcional<sup>34</sup>. Com isso, estabelecemos a confiabilidade da definição por time-slicing nos casos considerados.

Finalmente, a partir do esquema funcional de Schwinger, concluímos que uma multiplicidade de representações por integrais fun

cionais canônicas não é uma peculiaridade da definição por time-slicing, mas uma necessidade do formalismo funcional. A dependência estrutural da formulação funcional em relação à discretização segue de considerações teóricas gerais independentemente da definição adotada para a integral funcional. O que resulta ligado à particular definição adotada para esta integral é o nível operacional no qual os termos dependentes da discretização se cancelam.

Tratamos exclusivamente variáveis canônicas, o problema que se abre para variáveis vinculadas está fora do escopo desta dissertação. A obtenção de regras de correspondência nesse caso e, como consequência, o tratamento do severo problema de ordenamento característico de sistemas vinculados é um problema de pesquisa em aberto. Esperamos discutir estas questões em publicação futura.



## APENDICE A

## INTEGRAIS GAUSSIANAS

Uma integral de Fresnel típica, i.e.,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(at^2+bt)} dt \quad (a > 0)$$

pode sempre ser considerada como o limite da expressão

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(at^2+bt)-\eta t^2} dt, \quad \text{quando } \eta \rightarrow +0.$$

Para calculá-la, mudamos variáveis

$$t = \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} x - \frac{b}{2a}, \quad dt = \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} dx;$$

$i(at^2+bt) = -ax^2 - \frac{ib^2}{4a}$ . Tal mudança consiste de uma rotação de um ângulo  $\frac{\pi}{4}$   $\left[ \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} = e^{\frac{i\pi}{4}} = \sqrt{i} \right]$  e de um deslocamento da origem. Então,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(at^2+bt)} dt &= \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(a+i\eta)t^2+bt]} dt \\ &= \lim_{\eta \rightarrow +0} \sqrt{i} e^{-\frac{ib^2}{4(a+i\eta)}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-(a+i\eta)x^2} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \sqrt{i} e^{-\frac{ib^2}{4(a+i\eta)}} \left( \frac{\pi}{a+i\eta} \right)^{1/2} \\ &= \sqrt{\frac{i\pi}{a}} e^{-\frac{ib^2}{4a}} \quad (a > 0). \end{aligned}$$

(A1)

Semelhantemente, para calcular a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(at^2+bt)} dt \quad (a < 0),$$

fazemos a mudança de variáveis

$$t = \frac{(-1+i)x}{\sqrt{2}} + \frac{b}{2|a|}, \quad dt = \frac{(-1+i)}{\sqrt{2}} dx;$$

$$i(-|a|t^2+bt) = -|a|x^2 + \frac{ib^2}{4|a|};$$

que consiste de uma rotação de  $-\frac{\pi}{4}$   $\left[ \frac{(-1+i)}{\sqrt{2}} = e^{-\frac{i\pi}{4}} = \frac{1}{\sqrt{i}} \right]$  e deslocamento da origem.

Assim,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(at^2+bt)} dt &= \lim_{\eta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(-|a|+i\eta)t^2+bt]} dt \\ &= \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{i}} e^{\frac{ib^2}{4(|a|-i\eta)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(|a|-i\eta)x^2} dx = \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{i}} e^{\frac{ib^2}{4(|a|-i\eta)}} \left( \frac{\pi}{|a|-i\eta} \right)^{1/2} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{i|a|}} e^{\frac{ib^2}{4|a|}} \quad (a < 0). \end{aligned} \tag{A2}$$

## APÊNDICE B

## ÁLGEBRA DE OPERADORES

Prova da expressão (3.52a)

Desde (3.63) e (3.64), temos

$$\begin{aligned} \{P^m Q^n\}_\alpha &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} (\theta Q + z P)} \right\}_{\theta=z=0} \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} (\frac{1}{2} + \alpha) \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} z P} \right\}_{\theta=z=0}. \end{aligned}$$

É claro que

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} (\frac{1}{2} + \alpha) \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} \theta Q} e^{\frac{i}{\hbar} z P} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \sum_{t=0}^{\infty} \frac{[i(1/2+\alpha)t]^t (\theta z)^t}{t!} \cdot \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(it)^r (\theta Q)^r}{r!} \cdot \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(it)^s (zP)^s}{s!} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \sum_{r,s,t=0}^{\infty} \frac{(it)^{r+s+t} (1/2+\alpha)^t}{r! s! t!} Q^r P^s \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \theta^{r+t} z^{s+t} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \sum_{r,s,t=0}^{\infty} \frac{(it)^{r+s+t} (1/2+\alpha)^t}{r! s! t!} Q^r P^s \left[ (r+t)(r+t-1) \dots (r+t-n+1) \right]$$

$$\times \left[ (s+t)(s+t-1) \dots (s+t-m+1) \right] \theta^{r+t-n} z^{s+t-m} \Big|_{\theta=z=0}$$

Os únicos termos que sobrevivem são aqueles para os quais  $t = n-r = m-s$ , no somatório em  $\underline{t}$ , e aqueles para os quais  $s = m-n+r$  no somatório em  $\underline{s}$ . Assim,

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{1}{2} + \alpha)\theta z} e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}zP} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \sum_{r,s=0}^{\infty} \frac{(i/\hbar)^{n+s} (1/2 + \alpha)^{n-r}}{r! s! (n-r)!} Q^r P^s n! m! \delta_{s, m-n+r}$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(i/\hbar)^{m+r} (1/2 + \alpha)^{n-r}}{r! [m-(n-r)]! (n-r)!} n! m! Q^r P^{m-(n-r)}$$

$$= \sum_{r'=0}^{\infty} \frac{(i/\hbar)^{m+n-r'} (1/2 + \alpha)^{r'}}{(n-r')! (m-r')! r'!} n! m! Q^{n-r'} P^{m-r'}$$

onde, no último passo, trocamos  $r$  por  $r' = n-r$  com  $\underline{n}$  fixo.

Portanto,

$$\{P^m Q^n\}_{\alpha} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{m+n} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{m+n} \sum_{r=0}^{\infty} (\hbar/i)^r (1/2 + \alpha)^r r! \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r}$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} [-i\hbar(1/2 + \alpha)]^r r! \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r},$$

(B.1a)

que é a expressão (3.52a). Casos particulares de (3.52a) são, por exemplo,

$$\{P^m Q^n\}_{\text{WEYL}} = \{P^m Q^n\}_0 = \sum_{r=0}^{\infty} (-i\hbar)^r \frac{r!}{2^r} \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r} \quad , \quad (\text{B.1b})$$

$$\{P^m Q^n\}_s = \{P^m Q^n\}_{-1/2} \equiv Q^n P^m \quad , \quad (\text{B.1c})$$

$$\begin{aligned} \{P^m Q^n\}_{\text{AS}} = \{P^m Q^n\}_{1/2} &= \sum_{r=0}^{\infty} (-i\hbar)^r r! \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r} \\ &\equiv P^m Q^n \end{aligned} \quad (\text{B.1d})$$

A identidade em (B.1d) segue, por indução, da relação de comutação  $[Q, P] = i\hbar I$ .

Prova da expressão (3.52b)

De acordo com (3.63) e (3.64),

$$\begin{aligned} \{P^m Q^n\}_\alpha &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \alpha \theta z} e^{\frac{i}{\hbar} (\theta Q + z P)} \right\}_{\theta=z=0} \\ &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{m+n} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^r (i\alpha/\hbar)^s}{r! s!} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \theta^s z^s [\theta Q + z P]^r \right\}_{\theta=z=0} \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$[\theta Q + z P]^r = \sum_{k,l=0}^r \delta_{k+l,r} \theta^k z^l (Q^k P^l)_{C.L.} \quad (B.2)$$

onde  $(Q^k P^l)_{C.L.}$  é a combinação linear de todos os possíveis produtos envolvendo  $k$  Q's e  $l$  P's. Então

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \theta^s z^s [\theta Q + z P]^r \right\}_{\theta=z=0} &= \sum_{k,l=0}^r \delta_{k+l,r} (Q^k P^l)_{C.L.} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \theta^{k+s} z^{l+s} \right\}_{\theta=z=0} \\ &= \sum_{k,l=0}^r \delta_{k+l,r} (Q^k P^l)_{C.L.} \left[ (k+s)(k+s-1) \dots (k+s-n+1) \right] \theta^{k+s-n} \\ &\quad \times \left[ (l+s)(l+s-1) \dots (l+s-m+1) \right] z^{l+s-m} \Big|_{\theta=z=0} \\ &= \delta_{n+m-2s,r} (Q^{n-s} P^{m-s})_{C.L.} n! m! \end{aligned}$$

Logo,

$$\{P^m Q^n\}_\alpha = \left(\frac{t}{i}\right)^{m+n} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(it)^r (i\alpha/t)^s}{r! s!} \delta_{r,m+n-2s} (Q^{n-s} P^{m-s})_{C.L.} n! m!$$

$$= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(t/i)^{2s} (i\alpha/t)^s}{(n+m-2s)! s!} n! m! (Q^{n-s} P^{m-s})_{C.L.}$$

$$= n! m! \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-it\alpha)^s}{s! (n+m-2s)!} (Q^{n-s} P^{m-s})_{C.L.} \quad (B.3)$$

que é a expressão (3.52b).

No caso de  $\alpha = 0$ , temos o produto Weyl-ordenado

$$\{P^m Q^n\}_W \equiv \frac{n!m!}{(n+m)!} (Q^n P^m)_{c.l.} \quad (B.4)$$

o que prova o enunciado logo abaixo da expressão (3.59b).

Prova de (3.52c)

Desde (3.32) e (3.33), obtemos

$$\begin{aligned} \langle q'' | A_\alpha(P, Q) | q' \rangle &= \int dp dq a(p, q) \langle q'' | \Delta^\alpha(Q - q, P - p) | q' \rangle \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dp dq a(p, q) e^{\frac{i}{\hbar} p(q'' - q')} \delta\{q - [(1/2 + \alpha)q' + (1/2 - \alpha)q'']\} \\ &= (2\pi\hbar)^{-1} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(q'' - q')} a(p, (1/2 + \alpha)q' + (1/2 - \alpha)q'') \quad . \end{aligned} \quad (B.5)$$

Para  $a(p, q) = p^m q^n$ , (B.5) fornece

$$\langle q'' | \{P^m Q^n\}_\alpha | q' \rangle = [(1/2 + \alpha)q' + (1/2 - \alpha)q'']^n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''}\right)^m \delta(q'' - q') \quad .$$

Usando a expansão binomial

$$(a + x)^n = \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} x^l a^{n-l} \quad , \quad (B.6)$$



ficamos com

$$\begin{aligned} \langle q'' | \{P^m Q^n\}_\alpha | q' \rangle &= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} [(1/2+\alpha)q']^l [(1/2-\alpha)q'']^{n-l} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''}\right)^m \delta(q''-q') \\ &= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} [(1/2-\alpha)q'']^{n-l} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''}\right)^m [(1/2+\alpha)q']^l \delta(q''-q') \end{aligned}$$

de onde concluímos que

$$\{P^m Q^n\}_\alpha = \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} [(1/2-\alpha)Q]^{n-l} P^m [(1/2+\alpha)Q]^l \quad (B.7)$$

q.e.d.

Casos particulares de (B.7) são, por exemplo,

$$\{P^m Q^n\}_w = \frac{1}{2^n} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} Q^{n-l} P^m Q^l \quad (B.8a)$$

o que prova a expressão (3.59b);

$$\{P^m Q^n\}_{1/2} = \{P^m Q^n\}_{As} = P^m Q^n \quad (B.8b)$$

e

$$\{P^m Q^n\}_{-1/2} = \{P^m Q^n\}_s = Q^n P^m \quad (B.8c)$$

Prova de (3.53a)

Desde (3.36a)

$$a_{\alpha}(p, q) = \int dv e^{\frac{i}{\hbar} p v} \langle q^{-(1/2-\alpha)v} | P^m Q^n | q^{+(1/2+\alpha)v} \rangle$$

$$= \int dv e^{\frac{i}{\hbar} p v} [q^{+(1/2+\alpha)v}]^n \langle q^{-(1/2-\alpha)v} | P^m | q^{+(1/2+\alpha)v} \rangle$$

$$= \text{coeficiente de } (i\lambda/\hbar)^m / m! \quad \text{em}$$

$$\left\{ \int dv e^{\frac{i}{\hbar} p v} [q^{+(1/2+\alpha)v}]^n \langle q^{-(1/2-\alpha)v} | e^{\frac{i}{\hbar} \lambda P} | q^{+(1/2+\alpha)v} \rangle \right\}$$

$$= \text{coef. de } (i\lambda/\hbar)^m / m! \quad \text{em}$$

$$\left\{ \int dv e^{\frac{i}{\hbar} p v} [q^{+(1/2+\alpha)v}]^n \delta(\lambda - v) \right\}$$

$$= \text{coef. de } [(i\lambda/\hbar)^m / m!] \text{ em } \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} p \lambda} [q^{+(1/2+\alpha)\lambda}]^n \right\}$$

usando a propriedade do operador translação. Agora, usando a expanção binomial (B.6), escrevemos a chave acima como

$$\left\{ e^{\frac{i}{\hbar} p \lambda} \left[ \sum_{r=0}^n \binom{n}{r} [(1/2+\alpha)\lambda]^r q^{n-r} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\{ \left[ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\lambda/t)^j p^j}{j!} \right] \left[ \sum_{r=0}^n \binom{n}{r} (1/2+\alpha)^r (\kappa/i)^r (i\lambda/t)^r q^{n-r} \right] \right\} \\
&= \sum_{r,j=0}^{\infty} \binom{n}{r} \frac{(-it)^r}{j!} (1/2+\alpha)^r p^j q^{n-r} m! \left[ (i\lambda/t)^{r+j} / m! \right] \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} \binom{n}{r} \frac{(-it)^r}{(m-r)!} (1/2+\alpha)^r p^{m-r} q^{n-r} m! \left[ (i\lambda/t)^m / m! \right] .
\end{aligned}$$

Portanto,

$$a_{\alpha}(p, q) = \sum_{r=0}^{\infty} [-it(1/2+\alpha)]^r r! \binom{n}{r} \binom{m}{r} q^{n-r} p^{m-r} . \quad (\text{B.9})$$

q.e.d.

Prova de (3.66)

Desde (3.6) e (3.7),

$$A_f(P, Q) = (2\pi t)^{-2} \int d\theta dz dp dq f(\theta, z) a(p, q) e^{\frac{i}{t}[\theta(Q-q) + z(P-p)]} . \quad (\text{B.10})$$

Definindo

$$\gamma(\theta, z) \equiv (2\pi t)^{-2} \int dp dq a(p, q) e^{\frac{i}{t}(\theta q + z p)} , \quad (\text{B.11})$$

a expressão (B.10) pode ser escrita

$$A_f(P, Q) = \int d\theta dz \gamma(\theta, z) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta Q + z P)}, \quad (B.12)$$

ou, usando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$A_f(P, Q) = \int d\theta dz \gamma(\theta, z) f(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}\theta z} e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}z P}. \quad (B.13)$$

Supondo  $f(\theta, \tau)$  analítica em  $\theta$  e  $\tau$ , podemos expandi-la em série

$$f(\theta, z) = \sum_{r, s=0}^{\infty} c_{rs} \theta^r z^s. \quad (B.14)$$

Com isso, (B.13) fica

$$A_f(P, Q) = \sum_{r, s=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_{rs} \frac{(i/\hbar)^n}{n!} \int d\theta dz [\theta^{n+r} z^{n+s} \gamma(\theta, z)] e^{\frac{i}{\hbar}\theta Q} e^{\frac{i}{\hbar}z P}. \quad (B.15)$$

Por outro lado, desde (B.11)

$$a(p, q) = \int d\theta dz \gamma(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)} \quad (B.16)$$

de onde

$$\frac{\partial^{2n+r+s}}{\partial q^{n+r} \partial p^{n+s}} [a(p, q)] = (i/\hbar)^{2n+r+s} \int d\theta dz \theta^{n+r} z^{n+s} \gamma(\theta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(\theta q + z p)}. \quad (B.17)$$

Invertendo (B.17), obtemos

$$\left[ \theta^{n+r} z^{n+s} \gamma(\theta, z) \right] = (k/i)^{2n+r+s} (2\pi k)^{-2} \int dp dq \left\{ \frac{\partial^{2n+r+s}}{\partial q^{n+r} \partial p^{n+s}} a(p, q) \right\} e^{-\frac{i}{k}(\theta q + z p)} \quad (B.18)$$

Substituindo (B.18) em (B.15), encontramos

$$A_f(P, Q) = (2\pi k)^{-2} \sum_{r, s, n=0}^{\infty} \frac{c_{rs} (i/2k)^n}{n!} (k/i)^{2n+r+s}$$

$$\times \int dp dq \left\{ \frac{\partial^{2n+r+s}}{\partial q^{n+r} \partial p^{n+s}} a(p', q') \right\} e^{-\frac{i}{k}(\theta q' + z p')} e^{\frac{i}{k} \theta Q} e^{\frac{i}{k} z P} \quad (B.19)$$

Esta expressão está na forma standard (às vezes chama da normal), i.e., os fatores Q estão à esquerda dos fatores P. Podemos portanto substituir os operadores Q e P pelas variáveis q e p, respectivamente; realizar a integração, ordenar o resultado de forma que os fatores q fiquem à esquerda dos p's e então resubstituir q e p por Q e P. Assim fazendo, obtemos

$$A_f(P, Q)$$

$$= \sum_{r,s,n=0}^{\infty} \frac{c_{rs} (i/2t)^n}{n!} (t/i)^{2n+r+s} \left\{ \frac{\partial^{2n+r+s}}{\partial q^{n+r} \partial p^{n+s}} a(p,q) \right\} \Bigg|_{\substack{q \text{ à esq. de } p \\ q \rightarrow Q \\ p \rightarrow P}}$$

$$= \sum_{r,s=0}^{\infty} c_{rs} (t/i)^{r+s} \frac{\partial^{r+s}}{\partial q^r \partial p^s} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/2)^n}{n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial q^n \partial p^n} \cdot a(p,q) \Bigg|_{\substack{q \text{ à esq. de } p \\ q \rightarrow Q \\ p \rightarrow P}}$$

Portanto, de acordo com (B.14), ficamos com

$$A_f(p,Q) = f\left(\frac{t}{i} \frac{\partial}{\partial q}, \frac{t}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{-\frac{it}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q \partial p}\right)} a(p,q) \Bigg|_{\substack{q \text{ à esq. de } p \\ q \rightarrow Q, p \rightarrow P}} \quad . (B.20)$$

q.e.d.

Prova de (3.67d)

Desde (3.63), (3.64) e Tabela I

$$\begin{aligned}
\{P^m Q^n\}_{\text{sym.}} &= \left(\frac{t}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ \cos(\theta z / 2t) e^{\frac{i}{t}(\theta Q + z P)} \right\}_{\theta=z=0} \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{t}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ e^{\frac{i}{t}\theta z} e^{\frac{i}{t}\theta Q} e^{\frac{i}{t}zP} + e^{\frac{i}{t}\theta Q} e^{\frac{i}{t}zP} \right\}_{\theta=z=0} \\
&= \frac{1}{2} \left[ \{P^m Q^n\}_{\alpha=1/2} + \{P^m Q^n\}_{\alpha=-1/2} \right]
\end{aligned}$$

de acordo com a primeira expressão deste Apêndice. Portanto, de acordo com (B.1), temos

$$\begin{aligned}
\{P^m Q^n\}_{\text{sym.}} &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{r=0}^{\infty} (-i t)^r r! \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r} + \sum_{r=0}^{\infty} (-i t)^r r! \binom{m}{r} \binom{n}{r} Q^{n-r} P^{m-r} \delta_{r,0} \right\} \\
&= \sum_{r=0}^{\infty} (-i t)^r \binom{m}{r} \binom{n}{r} r! \frac{(\delta_{r,0} + 1)}{2} Q^{n-r} P^{m-r} \quad (\text{B.21a})
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} [P^m Q^n + Q^n P^m] \quad (\text{B.21b})$$

usando (B.1d).

Prova de (3.67e)

Desde (3.6) e (3.7),

$$\begin{aligned}
\langle q'' | A_{B-J}(p, q) | q' \rangle &= \int dp dq a(p, q) \langle q'' | \Delta^{(B-J)}(q - q', p - p) | q' \rangle \\
&= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(q'' - q')} \int d\theta f(\theta, d) \int \frac{dq}{2\pi\hbar} a(p, q) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta(q - \bar{q})} \\
&= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(q'' - q')} \int d\theta f(\theta, d) e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} \left[ a\left(p, i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}\right) \delta(\theta) \right]
\end{aligned}$$

onde definimos  $d \equiv q' - q''$  e  $\bar{q} \equiv (q' + q'')/2$ .

Para  $a(p, q) = p^m q^n$ , temos

$$\begin{aligned}
\langle q'' | \{P^m Q^n\}_{B-J} | q' \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} p^m e^{\frac{i}{\hbar} p(q'' - q')} \int d\theta f(\theta, d) e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^n \delta(\theta) \\
&= \left\{ (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial \theta^n} \left[ f(\theta, d) e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} \right]_{\theta=0} \right\} \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''} \right)^n \delta(q'' - q') .
\end{aligned}$$

Usando as expansões

$$\left\{ \begin{aligned}
f(\theta, d) &= \frac{\sin(\theta d/2\hbar)}{(\theta d/2\hbar)} = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \frac{(\theta d/2\hbar)^{2r}}{(2r+1)!} \\
e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(i\bar{q}/\hbar)^s}{s!} \theta^s
\end{aligned} \right. ,$$

a chave acima é



$$\left\{ (-it)^n \frac{\partial^n}{\partial \theta^n} \left[ f(\theta, d) e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} \right]_{\theta=0} \right\}$$

$$= (-it)^n \sum_{r,s=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (d/2\hbar)^{2r}}{(2r+1)!} \frac{(i\bar{q}/\hbar)^s}{s!} \frac{\partial^n}{\partial \theta^n} \left[ \theta^{2r+s} \right]_{\theta=0}$$

$$= (-it)^n \sum_{r,s=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (d/2\hbar)^{2r} (i\bar{q}/\hbar)^s}{(2r+1)! s!} \left[ (2r+s)(2r+s-1)\dots(2r+s-n+1) \theta^{2r+s-n} \right]_{\theta=0}$$

$$= (-it)^n \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r (d/2\hbar)^{2r} (i\bar{q}/\hbar)^{n-2r}}{(2r+1)! (n-2r)!} n! = \bar{q}^n \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(d/2\bar{q})^{2r}}{(2r+1)!} \binom{n}{2r}$$

Substituindo as expressões de  $\bar{q}$  e  $d$ , obtemos

$$\left\{ (-it)^n \frac{\partial^n}{\partial \theta^n} \left[ f(\theta, d) e^{\frac{i}{\hbar} \theta \bar{q}} \right]_{\theta=0} \right\} = \frac{(q'+q'')^n}{2^n} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{[(q'-q'')/(q'+q'')]^{2r}}{(2r+1)!} \binom{n}{2r}$$

$$= \frac{1}{(n+1)!} \left[ \sum_{r=0}^n q''^{n-r} q'^r \right]$$

como é fácil verificar. Com isso

$$\langle q'' | \{ P^m Q^n \}_{B-J} | q' \rangle$$

$$= \frac{1}{n+1} \sum_{r=0}^n q''^{n-r} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''} \right)^m q'^r \delta(q'' - q')$$

de onde concluímos que

$$\{P^m Q^n\}_{B-J} = \frac{1}{n+1} \sum_{r=0}^n Q^{n-r} P^m Q^r \quad (B.22)$$

q.e.d.

Prova de (3.78c)

Novamente, desde (3.63), (3.64) e Tabela I:

$$\{P^m Q^n\}_{B-J} = \left(\frac{k}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ (i\theta z/k)^{-1} \operatorname{sen}(\theta z/k) e^{\frac{i}{k}(\theta Q + zP)} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \left(\frac{k}{i}\right)^{m+n} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left\{ (i\theta z/k)^{-1} (e^{\frac{i}{k}\theta z} - 1) e^{\frac{i}{k}\theta Q} e^{\frac{i}{k}zP} \right\}_{\theta=z=0}$$

$$= \left(\frac{k}{i}\right)^{m+n} \sum_{r,s=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(i/k)^{r+s} (i/k)^{k-1}}{r! s! k!} \frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left[ (i\theta)^r (zP)^s (\theta z)^{k-1} \right]_{\theta=z=0}$$

Resulta que

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial \theta^n \partial z^m} \left[ \theta^{r+k-1} z^{s+k-1} \right]_{\theta=z=0}$$

$$= \left[ (r+k-1)(r+k-2)\dots(r+k-n) \right] \left[ (s+k-1)(s+k-2)\dots(s+k-m) \right] \theta^{r+k-1-n} z^{s+k-1-m} \Big|_{\theta=z=0}$$

implica que, no somatório em  $k$ , os únicos termos que sobrevivem são aqueles para os quais  $k=n-r+1 = m-s+1$ . Isto significa também que no somatório em  $s$  temos uma delta de Kronecker  $\delta_{s,m-n+r}$ . Portanto,

$$\{P^m Q^n\}_{B-J} = \left(\frac{k}{i}\right)^{m+n} \sum_{r,s=0}^{\infty} \frac{(i/k)^{r+s} (i/h)^{n-r} \delta_{s,m-n+r}}{r! s! (n-r+1)!} n! m! Q^r P^s$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(i/k)^{-(n-r)} n! m!}{r! [m-(n-r)]! (n-r+1)!} Q^r P^{m-(n-r)}$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} (k/i)^r \binom{n}{r} \binom{m}{r} \frac{r!}{r+1} Q^{n-r} P^{m-r} \quad (B.23)$$

trocando mais uma vez  $r$  por  $r' = n-r$ .

### Prova do Teorema 2 (Capítulo VI)

Para  $H(Q,P) = p^v q^u$  ( $u, v$  naturais\*), calculemos

$$I = \text{GWT}_{\alpha} \left\{ \frac{\partial^{j+k}}{\partial Q^j \partial P^k} H(Q,P) \right\}_{j,k \text{ naturais}^*}, \quad (B.24)$$

onde  $\text{GWT}_{\alpha} \{H(Q,P)\} = h_{\alpha}(q,p)$ .

Nota:  $\{\mathbb{N}^* = 0, 1, 2, 3, \dots\}$

Preservando a ordem dos fatores não-comutantes durante o processo de diferenciação, obtemos

$$\begin{aligned} I &= \text{GWT}_\alpha \left\{ \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} (P^v Q^u) \right\} = \text{GWT}_\alpha \left\{ k! \binom{v}{k} P^{v-k} j! \binom{u}{j} Q^{u-j} \right\} \\ &= k! j! \binom{v}{k} \binom{u}{j} \text{GWT}_\alpha \left\{ P^{v-k} Q^{u-j} \right\}. \end{aligned}$$

De acordo com (3.53a), isto é, ( $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} I &= k! j! \binom{v}{k} \binom{u}{j} \sum_{r=0}^{\infty} [-i(1/2+\alpha)]^r r! \binom{v-k}{r} \binom{u-j}{r} q^{u-j-r} p^{v-k-r} \\ &= \sum_{r=0}^{\infty} [-i(1/2+\alpha)]^r j! k! r! \binom{v}{k} \binom{u}{j} \binom{v-k}{r} \binom{u-j}{r} q^{u-j-r} p^{v-k-r}. \end{aligned}$$

Calculemos agora

$$\text{II} = \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} \left( \text{GWT}_\alpha \{ H(Q,P) \} \right)_{j,k \text{ naturais}^*} \quad (\text{B.25})$$

Usando novamente (3.53a),

$$\text{II} = \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} \left( \text{GWT}_\alpha \{ P^v Q^u \} \right)$$

$$= \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} \left( \sum_{r=0}^{\infty} [-i(1/2+\alpha)]^r r! \binom{v}{r} \binom{u}{r} q^{u-r} p^{v-r} \right)$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} [-i(1/2+\alpha)]^r r! \binom{v}{r} \binom{u}{r} \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} \left( q^{u-r} p^{v-r} \right)$$

$$= \sum_{r=0}^{\infty} [-i(1/2+\alpha)]^r j! k! r! \binom{v}{r} \binom{u}{r} \binom{u-r}{j} \binom{v-r}{k} q^{u-r-j} p^{v-r-k}$$

O produto de coeficientes binomiais em I é

$$\binom{v}{k} \binom{u}{j} \binom{v-k}{r} \binom{u-j}{r} = \frac{v! u! (v-k)! (u-j)!}{k! (v-k)! j! (u-j)! r! (v-k-r)! (u-j-r)! r!}$$

$$= \frac{u! v!}{j! k! (r!)^2 (u-j-r)! (v-k-r)!} \quad ; \quad (B.26)$$

o produto dos coeficientes binomiais de II é

$$\binom{v}{r} \binom{u}{r} \binom{u-r}{j} \binom{v-r}{k} = \frac{v! u! (u-r)! (v-r)!}{r! (v-r)! r! (u-r)! (u-r-j)! j! (v-r-k)! k!}$$

$$= \frac{u! v!}{j! k! (r!)^2 (u-j-r)! (v-r-k)!} \quad (B.27)$$

Como (B.27) = (B.26)  $\Rightarrow$  I = II temos, portanto, o teorema geral

$$GWT_{\alpha} \left\{ \frac{\partial^{j+k}}{\partial Q^j \partial P^k} H(Q,P) \right\} = \frac{\partial^{j+k}}{\partial q^j \partial p^k} h_{\alpha}(q,p) \quad (B.28)$$

para Hamiltonianos polinômicos.

Um caso particular deste teorema, é o Teorema 2 (capítulo VI). De fato, para  $j = 0$  e  $k = 1$ , obtemos

$$GWT_{\alpha} \left\{ \frac{\partial H(Q,P)}{\partial P} \right\} = \frac{\partial h_{\alpha}(q,p)}{\partial p} \quad ; \quad (B.29a)$$

para  $j = 1$  e  $k = 0$ ,

$$GWT_{\alpha} \left\{ \frac{\partial H(Q,P)}{\partial Q} \right\} = \frac{\partial h_{\alpha}(q,p)}{\partial q} \quad . \quad (B.29b)$$

q.e.d.

## APÊNDICE C

## INTEGRAL QUADRÁTICA - MATRIZES - DETERMINANTES

Seja a integral m-dimensional <sup>†</sup>

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots dx_m \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^m v_k x_k + \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j=1}^m x_i a_{ij} x_j \right] \quad (C.1)$$

Em (C.1), podemos tomar  $a_{ij} = a_{ji}^*$  e, para assegurar a convergência das integrais, supomos que a forma quadrática é positiva-definida<sup>12</sup>. Sejam A a matriz cujos elementos são  $a_{ij}$ ,  $|x\rangle$  o vetor cujas componentes são  $x_1, x_2, \dots, x_m$  e  $|v\rangle$  o vetor cujas componentes são  $v_1, v_2, \dots, v_m$ , em uma dada base de vetores  $\{|i\rangle, i=1, 2, \dots, m\}$ . Assim, escrevemos

$$\langle x|A|x\rangle = \sum_{i,j=1}^m \langle x|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|x\rangle = \sum_{i,j=1}^m x_i a_{ij} x_j$$

$$\langle v|x\rangle = \sum_{k=1}^m \langle v|k\rangle \langle k|x\rangle = \sum_{k=1}^m v_k x_k$$

e a integral I como

$$I = \int dx e^{\frac{i}{\hbar} [\langle v|x\rangle + \langle x|A|x\rangle]} \quad (C.2)$$

\* A estrutura simétrica  $x_i x_j$  seleciona automaticamente  $a_{ij}$  simétrico.

†  $i$  acoplado com  $\hbar$  e' a  $\sqrt{-1}$ .

sobre todo o espaço  $m$ -dimensional. Agora, seja  $U$  a transformação unitária de determinante  $+1$  que diagonaliza  $A$  tal que

$$U^\dagger A U = D \quad (C.3)$$

onde  $D$  é uma matriz diagonal com elementos  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$  todos maiores que zero. Escrevendo

$$|x\rangle = U |y\rangle \quad , \quad (C.4)$$

teremos

$$\left. \begin{aligned} \langle v | x \rangle &= \langle v | U | y \rangle = (\langle v | U) | y \rangle \equiv \langle z | y \rangle \\ \langle x | A | x \rangle &= \langle y | U^\dagger A U | y \rangle = \langle y | D | y \rangle \end{aligned} \right\} \quad (C.5)$$

A expressão (C.4) implica

$$x_i = \sum_{j=1}^m (U)_{ij} y_j \quad \therefore \quad \frac{\partial x_i}{\partial y_j} = (U)_{ij}$$

e

$$\begin{aligned} dx_1 \dots dx_m &= J \left( \frac{\partial x_i}{\partial y_j} \right) dy_1 \dots dy_m \\ &= (\det U) dy_1 \dots dy_m \quad , \end{aligned}$$

ou seja,



$$dx = dy \quad .$$

Com isso, I fica

$$I = \int dy e^{\frac{i}{\hbar} [\langle z|y\rangle + \langle y|D|y\rangle]}$$

sobre todo o espaço m-dimensional. É claro que

$$\langle z|y\rangle = \sum_{i=1}^m \langle z|i\rangle \langle i|y\rangle = \sum_{i=1}^m z_i y_i$$

$$\langle y|D|y\rangle = \sum_{i,j=1}^m \langle y|i\rangle \langle i|D|j\rangle \langle j|y\rangle = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i^2 \quad .$$

Então, precisamos calcular

$$I = \int dy e^{\frac{i}{\hbar} \left[ \sum_{i=1}^m z_i y_i + \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i^2 \right]} \quad . \quad (C.6)$$

Cada integral em (C.6) é gaussiana do tipo tratado no Apêndice A, i.e., da forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(a y_i^2 + b y_i)} dy_i \quad \text{com } a > 0, \quad \begin{cases} a \equiv \lambda_i / \hbar \\ b \equiv z_i / \hbar \end{cases} \quad .$$

Desde (A.1), segue

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(a y_i^2 + b y_i)} dy_i = \left( \frac{i\pi}{a} \right)^{1/2} e^{\frac{-ib^2}{4a}} = \left( \frac{i\pi\hbar}{\lambda_i} \right)^{1/2} e^{\frac{-iz_i^2}{4\hbar\lambda_i}} \quad ,$$

de modo que, para as  $m$  integrais em  $y$ , obtemos

$$I = \frac{(i\pi\hbar)^{m/2}}{(\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_m)^{1/2}} e^{\frac{-i}{4\hbar} \sum_{i=1}^m \frac{z_i^2}{\lambda_i}}$$

Notando que

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_m = \det D = \det A$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \frac{z_i^2}{\lambda_i} &= \sum_{i=1}^m \langle z | i \rangle \frac{1}{\lambda_i} \langle i | z \rangle = \left( \langle \nu | U \right) \sum_{i=1}^m |i\rangle \frac{1}{\lambda_i} \langle i | \left( U^\dagger | \nu \rangle \right) \\ &= \langle \nu | \left( U D^{-1} U^\dagger \right) | \nu \rangle = \langle \nu | \bar{A}^{-1} | \nu \rangle, \end{aligned}$$

usando (C.5) e (C.3), encontramos finalmente

$$I = (i\pi\hbar)^{m/2} (\det A)^{-1/2} e^{\frac{-i}{4\hbar} \langle \nu | \bar{A}^{-1} | \nu \rangle} \quad (C.7)$$

Seja a matriz  $A$  quadrada de ordem  $m$ , simétrica, de elementos  $(A)_{ij} = a_{ij}$  dada por

$$A = \begin{bmatrix} R+H & G & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ G & R+H & G & & & & & & 0 \\ 0 & G & R+H & & & & & & 0 \\ \vdots & & & \cdot & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & \cdot & & & & \vdots \\ 0 & & & & & & R+H & G & 0 \\ 0 & & & & & & G & R+H & G \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & G & R+H \end{bmatrix}, \quad (C.8)$$

onde  $R$ ,  $H$  e  $G$  são funções arbitrárias de  $\alpha$  e  $\epsilon$ . Definindo

$$U \equiv -(R+H)/G, \quad (C.9)$$

teremos

$$A = (-G)D, \quad \det A = (-G)^m \det D, \quad (C.10)$$

com a matriz  $D$ , simétrica, dada por

$$D = \begin{bmatrix} U & -1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ -1 & U & -1 & & & & & & 0 \\ 0 & -1 & U & & & & & & 0 \\ \vdots & & & \cdot & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & \cdot & & & & \vdots \\ 0 & & & & & & U & -1 & 0 \\ 0 & & & & & & -1 & U & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -1 & U \end{bmatrix}. \quad (C.11)$$

Se  $M_D^{ij}$  é o determinante menor de  $D$ , obtido ao retirar mos a linha  $i$  e a coluna  $j$  de  $D$ , temos que ( $1 \leq i \leq m$ )

$$\det D = \sum_{k=1}^m d_{ik} (-1)^{i+k} M_D^{ik} \quad , \quad (\text{C.12a})$$

$$= \sum_{i=1}^m d_{ij} (-1)^{i+j} M_D^{ij} \quad ; \quad (\text{C.12b})$$

(C.12a) é a expansão do determinante pela  $i$ -ésima linha e (C.12b) é a expansão pela  $j$ -ésima coluna. A matriz inversa  $A^{-1}$ , simétrica, tem elementos definidos por

$$(a^{-1})_{ij} = \frac{(\text{adjunta } A)_{ij}}{\det A} = \frac{(\text{cofator } A)_{ij}}{\det A} = \frac{(-1)^{i+j} M_A^{ij}}{\det A} \quad . \quad (\text{C.13})$$

Por outro lado, desde (C.10)

$$M_A^{ij} = (-G)^{m-1} M_D^{ij} \quad . \quad (\text{C.14})$$

Logo, de acordo com (C.10), (C.13) e (C.14):

$$(a^{-1})_{ij} = \frac{(-1)^{i+j} M_D^{ij}}{(-G) \det D} = (-G)^{-1} (d^{-1})_{ij} = (-G)^{-1} (S)_{ij} \quad , \quad (\text{C.15})$$

onde definimos

$$S \equiv D^{-1} \quad (C.16)$$

Cálculo de  $\det D$ :

Definimos os subdeterminantes  $D_k^m$  do canto inferior direito de  $D$ , de ordem  $k$  sendo que  $1 \leq k \leq m$ . Assim

$$D_m^m = \det D \quad , \quad D_1^m = U \quad (C.17a)$$

Definindo

$$D_0^m = 1 \quad , \quad D_{-n}^m = 0 \quad (n=1,2,\dots) \quad (C.17b)$$

segue, desde (C.11) e (C.12a), que um subdeterminante genérico  $D_k^m$  é igual a

$$D_k^m = U (-1)^2 D_{k-1}^m + (-1)(-1) \begin{vmatrix} -1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & U & -1 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & U & & \\ \vdots & 0 & & & \\ 0 & 0 & & & U \end{vmatrix}$$

$$= U D_{k-1}^m - D_{k-2}^m \quad (C.18)$$

usando (C.12b). A relação de recorrência (C.18) para os subdeterminantes pode ser escrita como

$$D_{r+1}^m(U) - U D_r^m(U) + D_{r-1}^m(U) = 0 \quad (C.19)$$

que, com a condição de contorno (C.17), corresponde exatamente à equação de definição dos polinômios de Tchebyshev de 2.<sup>a</sup> espécie  $T_n(x)$ <sup>36</sup>

$$T_{r+1}(x) - 2x T_r(x) + T_{r-1}(x) = 0, \quad (C.20)$$

onde o subíndice indica o grau do polinômio e

$$T_1(x) = 2x. \quad (C.21)$$

Portanto, desde (C.17a) e (C.19) - (C.21), identificamos  $U = 2x$  e

$$D_r^m(U) = T_r(U/2). \quad (C.22)$$

Por outro lado, os polinômios  $T_r(x)$  estão definidos em termos dos polinômios de Gegenbauer de ordem  $\underline{u}$ ,  $C_r^{(1)}$ , por<sup>36</sup> (ver as expressões 8.937.1, 8.940.2, 8.941.2)

$$T_r(x) = C_r^{(1)}(\cos \phi) = \frac{\text{sen}[(r+1)\phi]}{\text{sen } \phi}. \quad (C.23)$$

Assim, identificamos  $U/2 = \cos \phi$ , ou seja,

$$D_r^m(U) = \frac{\text{sen}[(r+1)\phi]}{\text{sen } \phi} \quad (C.24a)$$

onde

$$\phi = \cos^{-1}(U/2) \quad (C.24b)$$

Finalmente,

$$\det D = \frac{\text{sen}[(m+1)\phi]}{\text{sen } \phi} \quad (C.25)$$

Cálculo de S:

Desde (C.15) e (C.16), segue que

$$(S)_{jk} = \frac{(-1)^{j+k} M_D^{jk}}{\det D} \quad (C.26)$$

Analisemos  $(S)_{jk}$  por regiões. Começemos pela diagonal principal ( $k=j$ ). Nesse caso,

$$(S)_{jj} = \frac{(-1)^{2j} M_D^{jj}}{\det D} = \frac{M_D^{jj}}{D_m^m}$$

Por outro lado, o det. menor  $M_D^{jj}$  apresenta a seguinte forma

$$M_D^{jj} = \begin{array}{c} \left. \begin{array}{cc} \overbrace{\begin{array}{c} U-1 \\ -1 \ U \\ \dots \\ U-1 \\ -1 \ U \end{array}}^{j-1} & \overbrace{\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}}^{m-j} \\ \hline \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} & \begin{array}{c} U-1 \\ -1 \ U \\ \dots \\ U-1 \\ -1 \ U \end{array} \end{array} \right\} \begin{array}{l} j-1 \\ m-j \end{array} \end{array} \quad (C.27)$$







$$M_D^{3K} = \begin{array}{c} \left. \begin{array}{cccc} & \overbrace{\hspace{2cm}}^{k-1} & \overbrace{\hspace{2cm}}^{m-k} & \\ U & -1 & 0 & 0 \\ -1 & U & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & U \\ & 0 & 0 & -1 \\ & & & \ddots \\ & & & -1 & -1 \\ & & & 0 & U & -1 \\ & & & & -1 & U \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & U \end{array} \right\} \begin{array}{l} k-1 \\ m-k \end{array} \end{array}$$

$$\begin{aligned} &= U^2 (-1)^{k-3} D_{m-k}^m + (-1)^2 (-1)^{k-2} D_{m-k}^m \\ &= (U^2 - 1) (-1)^{k-3} D_{m-k}^m = (-1)^{k-3} D_2^m D_{m-k}^m \end{aligned}$$

se expandido pela 1.<sup>a</sup> coluna. Logo

$$(S)_{3K} = \frac{(-1)^{3+k} (-1)^{k-3} D_2^m D_{m-k}^m}{D_m^m} = \frac{D_2^m D_{m-k}^m}{D_m^m} \quad (C.32)$$

Assim, desde (C.29) - (C.32), inferimos que

$$(S)_{jK} = \frac{D_{j-1}^m D_{m-k}^m}{D_m^m}, \quad 1 \leq j \leq k \leq m \quad (C.33a)$$

De forma análoga, obtemos

$$(S)_{jK} = \frac{D_{k-1}^m D_{m-j}^m}{D_m^m}, \quad 1 \leq k \leq j \leq m \quad (C.33b)$$

Nota: a verificação de que (C.33) é de fato a inversa da matriz D foi efetuada comprovando que  $SD = DS = I$ . Por razões de espaço, omitimos esse cálculo.

## APENDICE D

## FUNCIONAL GERATRIZ POR AUTOFUNÇÕES

A funcional geratriz de funções de Green é definida, no contínuo, pela integral funcional

$$W[J, K] = \int [Dp][Dq] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t)\dot{q}(t) - h(p(t), q(t)) + q(t)J(t) + p(t)K(t)]} \quad (D.1)$$

Para a partícula livre de massa unitária, temos

$$\begin{aligned} W_0[J, K] &= \int [Dp][Dq] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t)\dot{q}(t) - \frac{1}{2}p^2(t) + q(t)J(t) + p(t)K(t)]} \\ &= \int [Dq] \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [K^2(t) + 2K(t)\dot{q}(t) + \dot{q}^2(t) + 2q(t)J(t)] \right\} \\ &\quad \times \int [Dp] \exp\left\{ \frac{-i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [p(t) - (K(t) + \dot{q}(t))]^2 \right\} \\ &= \int [Dq] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [K^2(t) + 2K(t)\dot{q}(t) + \dot{q}^2(t) + 2q(t)J(t)]} \quad (D.2) \end{aligned}$$

usando a invariância translacional da integral funcional. Tomando a condição de contorno (5.67)

$$q(t_a) = q(t_b) = 0 \quad (D.3)$$

obtemos

$$\left. \begin{aligned} \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{q}^2(t) &= - \int_{t_a}^{t_b} dt q(t) \ddot{q}(t) \\ \int_{t_a}^{t_b} dt K(t) \dot{q}(t) &= - \int_{t_a}^{t_b} dt \dot{K}(t) q(t) \end{aligned} \right\} \quad (D.4)$$

Substituindo (D.4) em (D.2), ficamos com

$$\begin{aligned} W_0[J, K] &= \int [Dq] \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ K^2(t) + q(t) \left( -\frac{d^2}{dt^2} \right) q(t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2(J(t) - \dot{K}(t)) q(t) \right] \right\} \\ &= e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt K^2(t)} \int [Dq] e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 q(t_1) H(t_1, t_2) q(t_2) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt F(t) q(t)} \end{aligned} \quad (D.5)$$

onde definimos

$$\left. \begin{aligned} F(t) &\equiv J(t) - \dot{K}(t) \\ H(t_1, t_2) &\equiv \left( -\frac{d^2}{dt^2} \right) \delta(t_1 - t_2) \end{aligned} \right\} \quad (D.6)$$

Utilizando o resultado (2.75), encontramos

$$\begin{aligned}
 W_0[J, K] &= N e^{\frac{-i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 F(t_1) \Delta(t_1, t_2) F(t_2)} e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt K^2(t)} \\
 &= N e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt K^2(t) - \frac{i}{2\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 [J(t_1) - \dot{K}(t_1)] \Delta(t_1, t_2) [J(t_2) - \dot{K}(t_2)]}
 \end{aligned} \tag{D.7}$$

onde

$$N = [\det H]^{-1/2} = [2\pi i \hbar (t_b - t_a)]^{-1/2} \tag{D.8}$$

e  $\Delta(t_1, t_2)$  é a função de Green de  $H(t_1, t_2)$ , da qual tratamos a seguir. A equação

$$\int dt_2 H(t_1, t_2) \Delta(t_2, t_3) = \delta(t_1 - t_3)$$

implica, usando (D.6),

$$\left( \frac{-d^2}{dt_1^2} \right) \Delta(t_1, t_3) = \delta(t_1 - t_3)$$

Segundo (2.74) e (D.3), precisamos resolver o problema de contorno

$$\left. \begin{aligned}
 -\frac{d^2}{dt^2} \Delta(t, t') &= \delta(t - t') \\
 \Delta(t_a, t') &= 0 \\
 \Delta(t', t_b) &= 0
 \end{aligned} \right\} \tag{D.9}$$

Pelo procedimento usual<sup>38</sup> de resolução, chega-se facilmente à solução

$$\Delta(t, t') = \begin{cases} \frac{(t-t_a)(t_b-t')}{(t_b-t_a)}, & t_a \leq t \leq t' \leq t_b. \quad (D.10a) \\ \frac{(t_b-t)(t'-t_a)}{(t_b-t_a)}, & t_a \leq t' \leq t \leq t_b. \quad (D.10b) \end{cases}$$

ou, usando a função de Heaviside,

$$\Delta(t, t') = \frac{1}{(t_b-t_a)} \left[ \theta(t'-t)(t-t_a)(t_b-t') + \theta(t-t')(t_b-t)(t'-t_a) \right], \quad (D.11)$$

que é a função de Green unidimensional simétrica da partícula livre. Para o caso do oscilador harmônico, o procedimento é análogo. Se (D.3) permanecer válida, teremos

$$H_{o.H.}(t_1, t_2) \equiv \left( \frac{-d^2}{dt_1^2} - \omega^2 \right) \delta(t_1 - t_2) \quad (D.12)$$

e também nesse caso

$$W_0[J, K] = N_{o.H.} e^{\frac{i}{2k} \int_{t_a}^{t_b} dt K(t)^2 - \frac{i}{2k} \int_{t_a}^{t_b} dt_1 \int_{t_a}^{t_b} dt_2 [J(t_1) - \dot{K}(t_1)] \Delta(t_1, t_2) [J(t_2) - \dot{K}(t_2)]} \quad (D.13)$$

com

$$N_{o.H.} = [\det H_{o.H.}]^{-1/2} = \left[ \frac{2\pi t_i \operatorname{sen} \omega (t_b - t_a)}{\omega} \right]^{-1/2}, \quad (D.14)$$

e onde

$$\Delta(t, t') = \begin{cases} \frac{\operatorname{sen} \omega (t - t_a) \operatorname{sen} \omega (t_b - t')}{\omega \operatorname{sen} \omega (t_b - t_a)}, & t_a \leq t \leq t' \leq t_b. \quad (D.15a) \\ \frac{\operatorname{sen} \omega (t' - t_a) \operatorname{sen} \omega (t_b - t)}{\omega \operatorname{sen} \omega (t_b - t_a)}, & t_a \leq t' \leq t \leq t_b. \quad (D.15b) \end{cases}$$

ou

$$\Delta(t, t') = \frac{1}{\omega \operatorname{sen} \omega (t_b - t_a)} \left[ \theta(t' - t) \operatorname{sen} \omega (t - t_a) \operatorname{sen} \omega (t_b - t') + \theta(t - t') \operatorname{sen} \omega (t' - t_a) \operatorname{sen} \omega (t_b - t) \right], \quad (D.16)$$

que é a função de Green unidimensional simétrica do oscilador harmônico simples. Com relação às expressões (D.8) e (D.14), ver, por exemplo, a referência 6d.



## APENDICE E

## DERIVADAS

Desde (5.80b), temos

$$\phi(J, K, \epsilon, m) = \frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{j=0}^m K_j^2 - \frac{i\epsilon^2}{2\hbar} \sum_{j,k=0}^m F_j \Delta_{j,k} F_k \quad (\text{E.1})$$

onde

$$F_j \equiv \left[ J_j - \frac{(K_j - K_{j-1})}{\epsilon} \right] \quad (\text{E.2})$$

Definindo

$$M_k \equiv \frac{\Delta_{s+1,k} - \Delta_{s,k}}{\epsilon}, \quad \tilde{M}_k \equiv \frac{\Delta_{r+1,k} - \Delta_{r,k}}{\epsilon}, \quad (\text{E.3})$$

e usando a propriedade

$$\Delta_{j,k} = \Delta_{k,j},$$

é fácil verificar que, se  $\partial/\partial J_s = \partial_{J_s}$  e  $\partial/\partial K_s = \partial_{K_s}$ , então

$$\partial_{J_s} \phi = \left( \frac{-i\epsilon}{\hbar} \right) \epsilon \sum_{k=0}^m \Delta_{s,k} F_k, \quad (\text{E.4})$$

$$\partial_{K_s} \phi = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ K_s - \epsilon \sum_{k=0}^m M_k F_k \right], \quad \partial_{K_r} \phi = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left[ K_r - \epsilon \sum_{k=0}^m \tilde{M}_k F_k \right], \quad (\text{E.5})$$

$$\partial_{J_r, J_s}^2 \phi = \left( \frac{-i\epsilon^2}{\hbar} \right) \Delta_{s,r}, \quad (\text{E.6})$$

$$\partial_{J_s^2}^2 \phi = \left( \frac{-i\epsilon^2}{\hbar} \right) \Delta_{s,s}, \quad (\text{E.7})$$

$$\partial_{J_r, K_s}^2 \phi = \left( \frac{-i\epsilon^2}{\hbar} \right) M_r, \quad \partial_{J_s, K_r}^2 \phi = \left( \frac{-i\epsilon^2}{\hbar} \right) \tilde{M}_s, \quad (\text{E.8})$$

$$\partial_{K_r, K_s}^2 \phi = \frac{i\epsilon^2}{\hbar} \left[ \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon} (M_{r+1} - M_r) \right] = \frac{i\epsilon^2}{\hbar} \left[ \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon} (\tilde{M}_{s+1} - \tilde{M}_s) \right]. \quad (\text{E.9})$$

Observação: Qualquer derivada 3ª e de mais alta ordem é zero. No tar que

$$(\partial_{J_s} \phi)^2 = \frac{-\epsilon^2}{\hbar} \left( \epsilon \sum_{k=0}^m \Delta_{s,k} F_k \right)^2. \quad (\text{E.10})$$

Usando as expressões (E.1) - (E.10), calculamos (5.88) e (5.89). Começamos calculando, desde (5.92a)

$$\begin{aligned}
\lim U &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{t^3}{2i\epsilon^4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_{s+1}^2 \partial K_s \partial J_r} \right]_{J=K=0} \\
&= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{t^3}{2i\epsilon^4} \left[ \left( \partial_{J_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) + \left( \partial_{J_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}} \phi \right)^2 + 2 \left( \partial_{J_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi \right) \right. \right. \\
&\quad + 2 \left( \partial_{J_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}} \phi \right) + 2 \left( \partial_{J_r} \phi \right) \left( \partial_{K_s, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}} \phi \right) + \left( \partial_{J_r} \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) \\
&\quad \left. \left. + \left( \partial_{J_r} \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}} \phi \right)^2 \right] \epsilon \phi \right\}_{J=K=0} \quad (E.11)
\end{aligned}$$

Nas expressões (E.4) - (E.10), separamos os fatores de forma tal que ao substituirmos as mesmas em (E.11) notamos claramente que:

- (i) Cada produto de derivadas de  $\phi$  provê um fator  $\epsilon^4$  que cancela o fator  $\epsilon^4$  do denominador.
- (ii) Depois da simplificação (i), os mencionados produtos tendem a quantidades perfeitamente definidas no contínuo através dos limites usuais

$$\epsilon \sum_{s=0}^m \rightarrow \int_{t_a}^{t_b} dt_s, \quad M_K \rightarrow \frac{d\Delta(t_s, t_k)}{dt_s}, \quad \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} \rightarrow \delta(t_s - t_r). \quad (E.12)$$

$$\begin{aligned}
\lim V &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \left( \frac{-t^3}{i\epsilon^4} \right) \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_{s+1} \partial J_s \partial K_s \partial J_r} \right]_{J=K=0} \\
&= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-t^3}{i\epsilon^4} \left[ \left( \partial_{J_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s, K_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{J_s, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_r, K_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{J_r, J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi \right) \right. \right. \\
&\quad + \left( \partial_{J_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) + \left( \partial_{J_r, J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) + \left( \partial_{J_s, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_r}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) \\
&\quad + \left( \partial_{J_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_r}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{J_s, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_r}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) \\
&\quad \left. \left. + \left( \partial_{J_r}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s} \phi \right) \right] \epsilon \phi \right\}_{J=K=0} \\
&= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-t^3}{i} \left[ \left( \frac{-i}{t} \right)^2 \Delta_{r, s+1} M_s + \left( \frac{-i}{t} \right)^2 \Delta_{s, s+1} M_r + \left( \frac{-i}{t} \right)^2 \Delta_{r, s} M_{s+1} \right] \right\} \\
&= (-it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_{s+1} \Delta_{r, s} + M_r \Delta_{s, s+1} + M_s \Delta_{r, s+1} \right] \quad (E.14)
\end{aligned}$$

Desde (5.92c),

$$\lim X = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{t^3}{2i\epsilon^4} \cdot \frac{\partial^4 \phi}{\partial J_s^2 \partial K_s \partial J_r} \right]_{J=K=0}$$

Observação: O limite de expressões da forma (E.9) deve ser analisado com cuidado. Por exemplo,

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} [M_{r+1} - M_r] &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[ \left( \frac{\Delta_{s+1,r+1} - \Delta_{s,r+1}}{\epsilon} \right) - \left( \frac{\Delta_{s+1,r} - \Delta_{s,r}}{\epsilon} \right) \right] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial \Delta(t_s, t_r + \epsilon)}{\partial t_s} - \frac{\partial \Delta(t_s, t_r)}{\partial t_s}}{\epsilon} \rightarrow \frac{\partial^2 \Delta(t_s, t_r)}{\partial t_s \partial t_r} . \end{aligned}$$

(iii) Qualquer produto que contenha pelo menos uma derivada 1ª [ver (E.4) e (E.5)], dá contribuição nula à função de Green no limite de fontes anuladas.

Com esse esclarecimento, obtemos imediatamente

$$\begin{aligned} \lim U &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t_r \partial t_s} \right) \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t_{s+1} \partial t_{s+1}} \right) + 2 \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t_r \partial t_{s+1}} \right) \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t_{s+1} \partial t_s} \right) \right] e^{\phi} \right\}_{J=K=0} \\ &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 M_r \Delta_{s+1,s+1} + 2 \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 M_{s+1} \Delta_{r,s+1} \right] \right\} \\ &= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_{s+1} \Delta_{r,s+1} + \frac{1}{2} M_r \Delta_{s+1,s+1} \right] , \quad (E.13) \end{aligned}$$

retendo apenas os termos que contribuem no limite de fontes anuladas. Analogamente, desde (5.92b)

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-\hbar^2}{\epsilon^2} \left[ (\partial_{J_r, J_s}^2 \phi) + (\partial_{J_r} \phi)(\partial_{J_s} \phi) \right] e^{\phi} \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ -\hbar^2 \left[ \frac{-i}{\hbar} \Delta_{r,s} \right] \right\}$$

$$= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \Delta_{r,s} \right] \quad (E.17)$$

Calculamos agora o limite das expressões (5.101). Desde (E.13), substituindo  $\partial_{J_r}$  por  $\partial_{K_r}$ , obtemos

$$\lim \bar{U} = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ (\partial_{K_r, K_s}^2 \phi)(\partial_{J_{s+1}}^2 \phi) + 2(\partial_{K_r, J_{s+1}}^2 \phi)(\partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi) \right] e^{\phi} \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \Delta_{s+1, s+1} \cdot \frac{i}{\hbar} \left[ \delta_{s,r} \epsilon - \frac{1}{\epsilon} (M_{r+1} - M_r) \right] \right. \right.$$

$$\left. \left. + 2 \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \tilde{M}_{s+1} M_{s+1} \right] \right\}$$

$$= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \Delta_{s+1, s+1} - \tilde{M}_s M_{s+1} \right] \quad (E.18)$$

Desde (5.101b) e (E.14)

$$\begin{aligned}
 \lim \bar{V} &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-\hbar^3}{i\epsilon^4} \left[ \left( \partial_{k_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s, K_s}^2 \phi \right) \right. \right. \\
 &+ \left. \left( \partial_{J_s, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{k_r, K_s}^2 \phi \right) + \left. \left( \partial_{k_r, J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi \right) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-\hbar^3}{i} \left[ \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \tilde{M}_{s+1} M_s + \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \Delta_{s, s+1} \cdot \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right] \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \tilde{M}_s M_{s+1} \right] \right\} \\
 &= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \Delta_{s, s+1} - M_s \tilde{M}_{s+1} - M_{s+1} \tilde{M}_s \right] ; \quad (E.19)
 \end{aligned}$$

desde (5.101c) e (E.15)

$$\begin{aligned}
 \lim \bar{X} &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ \left( \partial_{k_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s}^2 \phi \right) + 2 \left( \partial_{k_r, J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s, J_s}^2 \phi \right) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \Delta_{s, s} + 2 \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \tilde{M}_s M_s \right] \right\} \\
 &= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \Delta_{s, s} - M_s \tilde{M}_s \right] \quad (E.20)
 \end{aligned}$$

Desde (5.101d) e (E.16)

$$\begin{aligned}
 \lim \bar{Y} &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{t^2}{\epsilon^2} \left[ (\partial_{K_r, J_{s+1}}^2 \phi) e^\phi \right] \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ t^2 \left[ \frac{-i}{t} \tilde{M}_{s+1} \right] \right\} \\
 &= (-it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \tilde{M}_{s+1} \right] \quad ; \quad (E.21)
 \end{aligned}$$

desde (5.101e) e (E.17)

$$\begin{aligned}
 \lim \bar{Z} &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{-t^2}{\epsilon^2} \left[ (\partial_{K_r, J_s}^2 \phi) e^\phi \right] \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ -t^2 \left[ \frac{-i}{t} \tilde{M}_s \right] \right\} \\
 &= (it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \tilde{M}_s \right] \quad . \quad (E.22)
 \end{aligned}$$

Passemos ao limite das expressões (5.111). Desde (E.14), trocando  $\partial_{J_s}$  por  $\partial_{K_s}$ , obtemos



$$\lim R = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ (\partial_{J_r, J_{s+1}}^2 \phi) (\partial_{K_s^2}^2 \phi) + (\partial_{K_s, J_{s+1}}^2 \phi) (\partial_{J_r, K_s}^2 \phi) \right. \right. \\ \left. \left. + (\partial_{J_r, K_s}^2 \phi) (\partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \Delta_{r, s+1} \cdot \frac{i}{\hbar} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) + 2 \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 M_r M_{s+1} \right] \right\}$$

$$= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_r M_{s+1} - \frac{1}{2} \Delta_{r, s+1} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \quad (E.23)$$

Desde (E.14), trocando  $\partial_{J_{s+1}}$  por  $\partial_{K_s}$ , segue que

$$\lim S = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ (\partial_{J_r, K_s}^2 \phi) (\partial_{J_s, K_s}^2 \phi) + (\partial_{J_s, K_s}^2 \phi) (\partial_{J_r, K_s}^2 \phi) \right. \right. \\ \left. \left. + (\partial_{J_r, J_s}^2 \phi) (\partial_{K_s^2}^2 \phi) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ 2 \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 M_r M_s + \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \Delta_{r, s} \cdot \frac{i}{\hbar} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \right\}$$

$$= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_r M_s - \frac{1}{2} \Delta_{r, s} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \quad (E.24)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned}
 \lim T &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{t^2}{\epsilon^2} \left[ \left( \partial_{K_s, J_r}^2 \phi \right) e^\phi \right] \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ t^2 \left( \frac{-i}{t} \right) M_r \right] \\
 &= (-it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_r \right] \quad . \quad (E.25)
 \end{aligned}$$

Finalmente, calculemos os limites de  $\bar{R}$ ,  $\bar{S}$ ,  $\bar{T}$ . Desde (E.23) trocando  $\partial_{J_r}$  por  $\partial_{K_r}$ , obtemos

$$\begin{aligned}
 \lim \bar{R} &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{t^3}{2i\epsilon^4} \left[ \left( \partial_{K_r, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{K_s, J_{s+1}}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_r, K_s}^2 \phi \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left( \partial_{K_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_{s+1}, K_s}^2 \phi \right) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0} \\
 &= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{t^3}{2i} \left[ \left( \frac{-i}{t} \right) \tilde{M}_{s+1} \cdot \frac{i}{t} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) + 2 \left( \frac{-i}{t} \right) M_{s+1} \cdot \frac{i}{t} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \right] \right\} \\
 &= (-it) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_{s+1} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) + \frac{1}{2} \tilde{M}_{s+1} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \quad . \quad (E.26)
 \end{aligned}$$

Desde (E.24),

$$\lim \bar{S} = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i\epsilon^4} \left[ 2 \left( \partial_{K_r, K_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{J_s, K_s}^2 \phi \right) + \left( \partial_{K_r, J_s}^2 \phi \right) \left( \partial_{K_s}^2 \phi \right) \right] e^\phi \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^3}{2i} \left[ 2 \cdot \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \cdot \left( \frac{-i}{\hbar} \right) M_s + \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \tilde{M}_s \cdot \frac{i}{\hbar} \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] \right\}$$

$$= (-i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ M_s \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) + \frac{1}{2} \tilde{M}_s \left( \frac{1}{\epsilon} - \frac{(M_{s+1} - M_s)}{\epsilon} \right) \right] ; \quad (E.27)$$

desde (E.25)

$$\lim \bar{T} = \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \frac{\hbar^2}{\epsilon} \left[ \left( \partial_{K_s, K_r}^2 \phi \right) e^\phi \right] \right\}_{J=K=0}$$

$$= \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left\{ \hbar^2 \cdot \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right) \right\}$$

$$= (i\hbar) \lim \left( \epsilon \sum_{s=0}^m \right) \left[ \frac{\delta_{s,r}}{\epsilon} - \frac{(M_{r+1} - M_r)}{\epsilon} \right] \quad (E.28)$$

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. VOLTERRA, V. Theory of functionals and of integral and integro-differential equations. New York, Dover, 1959. 226p.
2. KOLMOGOROV, A.N. & FOMIN, S.V. Elements of the theory of functions and functional analysis. Rochester, Graylock Press, 1967. 2v.
3. GELFAND, I.M.; SHILOV, G.E.; VILENKIN, N.Ya. Generalized functions. New York, Academic Press, 1964. 5v.
4. STREIT, L. An introduction to theories of integration over functions spaces. Acta Physica Austriaca Supplement, Wien, 2:2-21, 1966.
5. a) WIENER, N. Differential space. Journal of Mathematical Physics, Cambridge, 2:131-74, 1923.  
b) \_\_\_\_\_. The average value of a functional. Proceedings of the London Mathematical Society, London, 22(6):454-67, 1924.  
c) \_\_\_\_\_ & PALEY, R.E. Fourier transforms in the complex domain. Amer.Math.Soc.Colloquium Publs., New York, vol. XIX, 1930.
6. a) FEYNMAN, R.P. The principle of least action in quantum mechanics. Ph.D. Thesis, Princeton University, 1942.  
b) \_\_\_\_\_. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. Reviews of Modern Physics, New York, 20(2): 367-87, April 1948.

- c) FEYNMAN, R.P. An operator calculus having applications in quantum electrodynamics. Physical Review, New York, 84(1):108-28, Oct. 1951.
- d) \_\_\_\_\_ & HIBBS, A.R. Quantum mechanics and path integrals. New York, McGraw-Hill, 1965. 365p.
7. a) FEYNMAN, R.P. The theory of positrons. Physical Review, New York, 76(6):749-59, Sept. 1949.
- b) \_\_\_\_\_. Space-time approach to quantum electrodynamics. Physical Review, New York, 76(6):769-89, Sept. 1949.
- c) \_\_\_\_\_. Mathematical formulation of the quantum theory of electromagnetic interaction. Physical Review, New York, 80(3):440-57, Nov. 1950.
- d) \_\_\_\_\_. *Slow electrons in a polar crystal*. Physical Review, New York, 97(3):660-5, Feb. 1955.
- e) FRIEDRICHS, K.O. & SHAPIRO, H.N. Integration over Hilbert space and outer extensions. Proceedings of the National Academy of Sciences U.S. Easton, 43(4):336-8, April 1957.
- f) FRIEDRICHS, K.O. et alii. Integration of functionals - CIMS seminar notes. New York, N.Y. University, 1957. 223p.
- g) FRIEDRICHS, K.O. Remarques sur l'intégration des fonctionnelles dans l'espace d'Hilbert in Les problèmes mathématiques de la théorie quantique des champs. Paris, CNRS Ed., 1959.
- h) \_\_\_\_\_. Mathematical aspects of the quantum theory of fields. New York, Interscience, 1953. 272p.

- i) GELFAND, I.M. & YAGLOM, A.M. Integration in functional spaces and its applications in quantum physics. Journal of Mathematical Physics, New York, 1(1):48-69, Jan./Feb. 1960.
- j) BRUSH, S.G. Functional integrals and statistical physics. Review of Modern Physics, New York, 33(1):79-92, Jan. 1961.
- k) FRADKIN, E.S. Quantum field theory and hydrodynamics. Proceedings of the P.N. Lebedev Physical Institute, Moscow, vol. 29, 1965.
- l) \_\_\_\_\_; ESPOSITO, U.; TERMINI, S. Functional techniques in physics. Rivista del Nuovo Cimento, Bologna, 2(4):498-560, ott./dic., 1970.
- m) FRIED, H.M. Functional methods and models in quantum field theory. Cambridge, MIT Press, 1972. 214p.
- n) WIEGEL, F.W. Path integral methods in statistical mechanics. Physics Reports, Amsterdam, 16(2):57-114, Feb. 1975.
- o) GUTZWILLER, M.C. et alii. Path integrals and their application in quantum, statistical, and solid state physics. New York, Plenum Press, 1978.
8. a) KAC, M. On distributions of certain Wiener functionals. Transactions of the American Mathematical Society, Providence, 65:1-13, 1949.
- b) \_\_\_\_\_. Probability and related topics in physical sciences. New York, Interscience, 1959. 266p.
- c) WIENER, N. et alii. Differential space, quantum systems and prediction. Cambridge, MIT Press, 1966.



- d) NELSON, E. Dynamical theories of brownian motion.  
Princeton, Princeton University, 1967. 142p.
- e) YEH, J. Stochastic processes and the Wiener integral.  
New York, Dekker, 1973.
9. a) DeWITT-MORETTE, C.; MAHESHWARI, A.; NELSON, B. Path  
integration in non-relativistic quantum mechanics.  
Physics Reports, Amsterdam, 50(5):255-372, Mar. 1979.
- b) CHOQUET-BRUHAT, Y.; DeWITT-MORETTE, C.; DILLARD-BLEICK, M.  
Analysis, manifolds and physics. Amsterdam, North-  
-Holland, 1977. 544p.
- c) ALBEVERIO, S.A. & HOEGH-KROHN, R.J. Mathematical theory of  
Feynman path integrals. Berlin, Springer-Verlag, 1976.  
139p. (Lectures notes in mathematics, 523).
- d) ARTHURS, A.M. ed. Functional integration and its  
applications. Oxford, Clarendon Press, 1975.
- e) MIZRAHI, M.M. On path integral solutions of the Schrödinger  
equation, without limiting procedure. Journal of  
Mathematical Physics, New York, 17(4):566-75, April  
1976.
- f) \_\_\_\_\_. Phase space path integrals, without limiting  
procedure. Journal of Mathematical Physics, New York,  
19(1):298-307, Jan. 1978.
10. a) SLAVNOV, A.A. Functional integral in perturbation theory.  
Teor. i Matem. Fizika, 22(2):177-85, 1975.
- b) ZINN-JUSTIN, J. Bonn lectures, Saclay. (Preprint DPL-T/  
74/88).
11. a) ROSEN, G. Formulations of classical and quantum dynamical  
theory. New York, Academic Press, 1969. 151p.

- b) KATZ, A. Classical mechanics, quantum mechanics and field theory. New York, Academic Press, 1965. 207p.
12. a) FRIEDMAN, B. Principles and techniques of applied mathematics. New York, Wiley, 1956. 315p.
- b) COURANT, R. & HILBERT, D. Methods of mathematical physics. New York, Interscience, 1953, v.1.
13. a) FRIEDRICHS, K.O. Communications on Pure and Applied Mathematics, New York, 4:161, 1951.
- b) SYMANZIK, K. Über das Schwingersches funktional in der feldtheorie. Zeitschrift fuer Naturforschung, Tübingen, 9:809-24, 1954.
- c) LURIE, D. Particles and fields. New York, Interscience, 1968. 506p.
14. a) BOGOLIUBOV, N.N. & SHIRKOV, D.V. Introduction to the theory of quantized fields. New York, Interscience, 1959. 720p.
- b) NELSON, E. Feynman integrals and the Schrödinger equation. Journal of Mathematical Physics, New York, 5(3):332-43, Mar. 1964.
- c) CAMERON, R.H. A family of integrals serving to connect the Wiener and Feynman integrals. Journal of Mathematical Physics, Cambridge, 39:126-41, 1960.
15. BEREZIN, F.A. The method of second quantization. New York, Academic Press, 1966. 228p.
16. a) COHEN, L. Generalized phase-space distribution functions. Journal of Mathematical Physics, New York, 7(5):781-6, May 1966.



- b) COHEN, L. Correspondence rules and path integrals.  
Journal of Mathematical Physics, New York, 17(4):597-8,  
April 1976.
- c) AGARWAL, G.S. & WOLF, E. Calculus for functions of  
noncommuting operators and general phase-space methods  
in quantum mechanics. I. Mapping theorems and ordering  
of functions of noncommuting operators. Physical Review  
D, New York, 2(10):2161-86, Nov. 1970.
- d) MAYES, I.W. Ph.D. Thesis, Manchester University, 1971.
17. a) WEYL, H. The theory of groups and quantum mechanics.  
Princeton, Dover, 1950. 422p.
- b) MIZRAHI, M.M. The Weyl correspondence and path integrals.  
Journal of Mathematical Physics, New York, 16(11):2201-6,  
Nov. 1975.
- c) BEREZIN, F.A. Non-Wiener functional integrals. Teor. i  
Matem. Fizika, 6:194-212, Feb. 1971.
18. GIROTTI, H.O. & MARIS, Th.A.J. Generalized Weyl transforms  
and path integrals. (Preprint IFUFRGS 1977. Apresenta  
do no I Encontro Nacional de Física de Partículas, Cam-  
buquira, MG, 1979).
19. LESCHKE, H. & SCHMUTZ, M. Operator orderings and functional  
formulations of quantum and stochastic dynamics.  
Zeitschrift fuer Physik B, Berlin, 27:85-94, 1977.
20. HIRSHFELD, A.C. Canonical and covariant path integrals.  
Physics Letters A, Amsterdam, 67(1):5-8, July 1978.
21. WEISS, U. Operator ordering schemes and covariant path  
integrals of quantum and stochastic processes in curved  
space. Zeitschrift fuer Physik B, Berlin, 30:429-36, 1978.

22. LANGOUCHE, F.; ROEKAERTS, D.; TIRAPEGUI, E. Functional integrals and the Fokker-Planck equation. Nuovo Cimento B, Bologna, 53(1):135-59, Sept. 1979.
23. SHEWELL, J.R. On the formation of quantum-mechanical operators. American Journal of Physics, New York, 27(1):16-21, Jan. 1959.
24. DeWITT, B.S. Dynamical theory in curved spaces. I. A review of the classical and quantum action principles. Review of Modern Physics, 29(3):377-97, July 1957.
25. a) TOBOCMAN, W. Transition amplitudes as sums over histories. Nuovo Cimento, Bologna, 3(6):1213-29, June 1956.
- b) DAVIES, H. Hamiltonian approach to the method of summation over Feynman histories. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 59(1):147-55, Jan. 1963.
- c) GARROD, C. Hamiltonian path-integral methods. Review of Modern Physics, New York, 38(3):483-94, July 1966.
26. a) MAYES, I.W. & DOWKER, J.S. Hamiltonian orderings and functional integrals. Journal of Mathematical Physics, New York, 14(4):434-39, April 1973.
- b) GERVAIS, J.L. & JEVICKI, A. Point canonical transformations in the path integral. Nuclear Physics B, Amsterdam, 110(1):93-112, July 1976.
27. BARGMANN, V. Communications on Pure and Applied Mathematics, New York, 14:187, 1961.
28. SCHWEBER, S.S. On Feynman quantization. Journal of Mathematical Physics, New York, 3(5):831-42, Sept./Oct. 1962.

29. FADDEEV, L.D. Introduction to functional methods in Methods in field theory. Amsterdam, North-Holland, 1976. 386p. (Les Houches, session XXVIII, 1975).
30. ABERS, E.S. & LEE, B.W. Gauge theories. Physics Reports, Amsterdam, 9(1):1-141, Oct. 1973.
31. LESCHKE, H.; HIRSHFELD, A.C.; SUZUKI, T. Canonical perturbation theory for nonlinear systems. Physical Review D, New York, 18(8):2834-48, Oct. 1978.
32. a) MAYES, I.W. & DOWKER, J.S. Canonical functional integrals in general coordinates. Proceedings of the Royal Society of London A, London, 327(1568):131-5, Feb. 1972.
- b) FANELLI, R. Canonical transformations and phase space path integrals. Journal of Mathematical Physics, New York, 17(4):490-3, April 1976.
- c) DOWKER, J.S. Path integrals and ordering rules. Journal of Mathematical Physics, New York, 17(10):1873-4, Oct. 1976.
- d) BERTRAND, J. & IRAC, M. Non-uniqueness in writing Schrödinger kernel as a functional integral. Letters in Mathematical Physics, Dordrecht, 3(2):97-107, Mar. 1979.
33. a) LESCHKE, H.; HIRSHFELD, A.C.; SUZUKI, T. Dyson-Wick expansions for nonlinear Bose systems. Physics Letters A, 67(2):87-9, July 1978.
- b) SUZUKI, T.; HIRSHFELD, A.C.; LESCHKE, H. The role of operator ordering in quantum field theory. (Preprint of the International Centre for Theoretical Physics IC/78/93, Trieste, Italia, 1978).

34. a) LANGOUCHE, F.; ROEKAERTS, D.; TIRAPEGUI, E. On the perturbation expansion for the Fokker-Planck dynamics. Progress of Theoretical Physics, Kyoto, 61(6):1617-28, June 1979.
- b) \_\_\_\_\_. Functional integral methods for stochastic fields. Physics A, Amsterdam, 95(2):252-74, Feb. 1979.
- c) \_\_\_\_\_. Discretization problems of functional integrals in phase space. Physical Review D, New York, 20(2): 419-32, July 1979.
35. EDWARDS, S.F. & GULYAEV, Y.V. Path integrals in polar coordinates. Proceedings of the Royal Society of London A, London, 279(1377):229-35, May 1964.
36. GRADSHTEYN, I.S. & RYZHIK, I.M. Table of integrals, series and products. New York, Academic Press, 1965. 1086p.
37. JOSHI, A.W. Matrices and tensors in physics. New York, Wiley, 1975. 251p.
38. BUTKOV, E. Mathematical physics. Reading, Addison-Wesley, 1968. 735p.
39. a) DIRAC, P.A.M. Lectures on quantum mechanics. New York, Yeshiva University, 1964. 87p.
- b) FADDEEV, L.D. The Feynman integral for singular lagrangians. Theoretical Mathematical Physics, 1:1-13, 1970. (transl. from Teoretical I Matem. Fizika, 1(1):3-18, Oct. 1969 by Plenum Publ. Corporation, 1970).
- c) SENJANOVIC, S.P. Path integral quantization of field theories with second-class constraints. Annals of Physics, New York, 100(1/2):227-61, Sept. 1976.

- d) FRADKIN, E.S. & VILKOVISKY, G.A. Quantization of relativistic systems with constraints. Equivalence of canonical and covariant formalisms in quantum theory of gravitational field. (Preprint TH 2332-CERN, 9 June 1977).
40. NEVEU, A. et alii. Extended systems in field theory. Physics Reports, Amsterdam, 23(3):237-374, Feb. 1976 (e referências).
41. GIROTTI, H.O. & SIMÕES, T.J.M. Uniqueness of the functional approach. (Preprint IFUFRGS 1980. Submetido para publicação em Physical Review D). Aceito: Phys.Rev. D22, 1385(1980).
42. a) SCHWINGER, J. Proceedings of the National Academy of Sciences U.S. Easton, 37:452, 1951.
- b) \_\_\_\_\_ . ibid. 37:455, 1951.
- c) VISCONTI, A. Théorie Quantique des Champs. Paris, Gauthiers-Villars, 1965. 2v.

P.S. : A presente tese deu origem à Ref. 41 acima e ao trabalho posterior

GIROTTI, H.O. & SIMÕES, T.J.M. A Generalized Treatment of Point Canonical Transformations in the Path Integral. Il Nuovo Cimento 74B(1): 59-66, Marzo, 1983. Este trabalho generaliza resultados da Ref. 26, b), acima.