



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.009/07

**Coordenadas vestidas: formulação segundo a interpretação de
Dirac-Feynman para a Mecânica Quântica e aplicações em QED**

Laércio Benedito de Sousa Júnior

Orientador

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

São Paulo – SP
27 de agosto de 2007

À minha mãe, Regina.

Ao meu pai, Laércio.

Aos meus irmãos, Josely e Juliano.

Ao meu amor, Roberta.

À Sra. Elisa Bracco.

Ao eterno amigo Pe. Rosalvo.

À Paróquia São José de Salesópolis, da qual sou filho muito amado.

E a todo o pessoal do Colégio Objetivo de Mogi das Cruzes,

na pessoa do casal Nilo & Vera Antunes.

Agradecimentos

Dedico meus sinceros agradecimentos:

- A Deus, Senhor da minha vida e da minha história, meu princípio e meu fim. Pai, Filho e Espírito Santo, a Vós — e somente a Vós —, agora e por toda a eternidade, dirijo a minha oração, as minhas graças, o meu louvor e a minha adoração! Amém! Aleluia!
- À minha família, pelo amor, carinho e compreensão dedicados durante todos esses anos.
- Ao amigo Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar, que, muito além de me orientar neste Mestrado, me ensinou a importância de agradecer.
- Ao Prof. Dr. Rodolfo Alván Casana Sifuentes, pela ajuda imprescindível no meu aprendizado de integração funcional.
- Aos Drs. Gabriel “Chucky” Flores-Hidalgo e Yony Walter Milla Gonzales, pela ajuda na compreensão dos trabalhos originais sobre coordenadas vestidas. Em sua pessoa, gostaria de estender este agradecimento aos Profs. Drs. Adolfo Pedro Carvalho Malbouisson, Arthur Mattos Neto e Nelson Pinheiro Andion (os quais não conheço pessoalmente) pelo trabalho pioneiro sobre o tema.
- Ao Prof. Dr. Paulo Alberto Nussenzweig, pela excelente disciplina de Óptica Quântica ministrada no IFUSP, que cursei durante meu Mestrado, e que foi fundamental para que eu pudesse bem contextualizar meu trabalho. Agradeço-lhe também, e ao Prof. Dr. Marcelo Martinelli, por me aceitarem em seu grupo de pesquisa para desenvolver meu trabalho de Doutorado.
- Aos Profs. Drs. Rogério Rosenfeld, Gastão Inácio Krein, Ruben Aldrovandi, Roberto André Kraenkel e Sandra dos Santos Padula, com os quais cursei minhas disciplinas durante minha formação no IFT.
- Ao amigo Danilo Jimenez Rezende, que acompanha minha carreira de aspirante a físico desde antes de eu passar no vestibular, em 2001. Depois de tantos anos juntos (e do período de incertezas que me assombraram enquanto ficamos separados), creio que agora

eu encontrei meu caminho na Física, assim como você deve ter encontrado o seu. Do fundo do meu coração, desejo-lhe muito sucesso e felicidade em sua carreira.

- Aos novos amigos que eu fiz no IFT (sem uma ordem preferencial): Cássius (que me apresentou o Instituto e o Prof. Pimentel), “P.J.” (ou será “P.G.”?), Rodrigo, Carlos Bonin, Ana Carolina, “Fran”, Caio, Thiago “Manu”, Rafael, David “Goldman”, Carlos “Vai-Vai”, Bruno, Daniel Pamplona (a paz, meu rapaz!), Fernando Gardim, Ricardo “Gaúcho”, Hiroshi, dentre outros.
- A todos os funcionários do IFT, dentre os quais mencionarei alguns: Rosane, Meire e Luzinete (da Secretaria de Pós-Graduação); o “Zé” e toda a equipe da Secretaria Geral; a Marcela (da biblioteca); a “Zezé”, o Heitor e o pessoal do Pólo Computacional; o “Seu Jorge” (o que seria de nós do IFT sem o café do “Seu Jorge”?) e o pessoal da faxina.
- Aos desenvolvedores do projeto ABNT_{TEX}, que têm se esforçado muito em debulhar as absurdas normas da ABNT, para que pobres mortais, como eu, sofram menos para escrever seus trabalhos em conformidade com tais normas.
- Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), pelo apoio financeiro.

“Ainda que eu falasse as línguas dos homens e dos anjos, se não tivesse amor, seria como um bronze que soa ou um címbalo que retine. Ainda que eu tivesse o dom da profecia, o conhecimento de todos os mistérios e de toda a ciência, ainda que eu tivesse toda a fé, a ponto de remover montanhas, se não tivesse amor, eu nada seria.”

Primeira Epístola de São Paulo aos Coríntios, cap. 13, vv. 1–2

Resumo

Neste trabalho, faremos um estudo sobre as recém-introduzidas *coordenadas vestidas* na abordagem de integração funcional, segundo a interpretação de Dirac-Feynman para a teoria quântica. Estas coordenadas são introduzidas no modelo de um oscilador harmônico acoplado linearmente a um conjunto de modos normais de um campo escalar não-massivo e permitem uma descrição não-perturbativa e unificada do processo de radiação de um átomo numa cavidade arbitrariamente dessintonizada, generalizando a descrição segundo o modelo de Jaynes-Cummings, amplamente utilizado em CQED (Eletrodinâmica Quântica em Cavidades). As coordenadas vestidas também permitem uma descrição fisicamente aceitável da estabilidade do estado de vácuo do sistema, sem necessidade de apelar para a conhecida *aproximação de onda girante*.

Mostraremos que, neste modelo, as coordenadas vestidas se manifestam através de uma transformação linear não-ortogonal de coordenadas que preserva a medida de integração funcional, o que viabiliza e simplifica os cálculos nessa abordagem. Também faremos uma generalização da estratégia de *regras de soma*, introduzida recentemente para facilitar os cálculos de probabilidades de transição. Finalmente, veremos que, no caso limite de uma cavidade infinitamente grande, recuperamos a bem conhecida taxa exponencial de decaimento espontâneo de um átomo no espaço livre. Por outro lado, para uma cavidade suficientemente pequena, o modelo diz que o oscilador pode permanecer quase estável em seu estado 1-excitado.

Palavras-chave: integração funcional, coordenadas vestidas, regras de soma, CQED

Áreas do conhecimento: teoria geral de partículas e campos; óptica quântica

Abstract

In this work, we will study the just-introduced *dressed coordinates* in the path-integral approach, according to the Dirac-Feynman interpretation of quantum theory. These coordinates are introduced in the model of a harmonic oscillator coupled linearly to a set of normal modes of a massless scalar field, and will allow a non-perturbative and unified description of an atom radiation process in an arbitrarily detuned cavity, generalizing the description according to the Jaynes-Cummings model, largely used in Cavity QED. The dressed coordinates also give a physically acceptable description of the system's vacuum-state stability, without necessity of appealing to the known *rotating wave approximation*.

We will show that, in this model, the dressed coordinates reveal themselves through a non-orthogonal linear coordinate transformation preserving the path-integral functional measure, which makes it possible and simplifies the calculations in this approach. We will also generalize the *sum rules* strategy, recently introduced to make calculations of transition probabilities easier. Finally, we will see that, in the limiting case of an infinitely large cavity, we recover the well-known exponential rate of spontaneous decay of an atom in free space. On the other hand, for a sufficiently small cavity, the model says the oscillator can remain almost stable in its 1-excited state.

Keywords: path integrals, dressed coordinates, sum rules, Cavity QED

Sumário

Introdução	p. 11
1 A interpretação de Dirac-Feynman para a Mecânica Quântica	p. 13
1.1 O papel da ação na Mecânica Clássica	p. 13
1.1.1 O princípio de Hamilton	p. 13
1.1.2 As equações de Hamilton	p. 14
1.1.3 Transformações canônicas	p. 15
1.1.4 A equação de Hamilton-Jacobi	p. 18
1.2 Operadores de evolução temporal. Propagadores	p. 20
1.3 O propagador como uma integral funcional	p. 21
1.3.1 Buscando uma formulação lagrangeana para a Mecânica Quântica: uma breve história sobre o trabalho de Feynman	p. 21
1.3.2 Uma formulação lagrangeana para o propagador a tempos curtos	p. 24
1.3.3 O propagador a tempos longos: uma formulação lagrangeana para a integral funcional	p. 26
1.3.4 A integral funcional deduzida a partir do formalismo de operadores. A fórmula do produto de Trotter	p. 28
1.3.5 O propagador a tempos longos: a formulação hamiltoniana para a integral funcional	p. 31
1.3.6 Integrais funcionais para sistemas com vários graus de liberdade	p. 33
1.3.7 Transformações de coordenadas em integrais funcionais: alguns co- mentários	p. 35
1.4 Integração funcional e o princípio de Hamilton	p. 37

2	Alguns exemplos de aplicação das integrais funcionais	p. 38
2.1	Alguns resultados úteis	p. 38
2.2	A partícula livre	p. 43
2.3	O oscilador harmônico simples	p. 45
2.3.1	Oscilador livre	p. 45
2.3.2	Oscilador sujeito a uma força externa dependente do tempo	p. 47
2.4	O conjunto não-degenerado de osciladores harmônicos acoplados	p. 49
3	Tópicos em QED: os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings	p. 53
3.1	O problema de um conjunto de cargas interagindo com um campo eletromagnético	p. 54
3.1.1	Transformações de <i>gauge</i> e representações quânticas alternativas	p. 54
3.1.2	A aproximação de grandes comprimentos-de-onda	p. 55
3.1.3	O <i>gauge</i> de Göppert-Mayer	p. 56
3.1.4	Reformulação do problema para um campo quantizado	p. 57
3.2	O modelo de Rabi	p. 58
3.3	O modelo de Jaynes-Cummings	p. 60
3.4	Experimentos em QED no regime de acoplamento forte	p. 63
4	O modelo de acoplamento linear	p. 64
4.1	Apresentação do modelo	p. 64
4.2	Transformação para coordenadas normais	p. 67
4.3	A equação das autofreqüências	p. 68
4.4	A representação quântica das coordenadas normais	p. 70
4.5	As autofreqüências e a matriz de transformação em alguns casos particulares	p. 71
4.5.1	Caso $N = 1$	p. 72
4.5.2	Caso $N \rightarrow \infty$	p. 72

5	Formulação das coordenadas vestidas	p. 74
5.1	O problema da estabilidade do vácuo e a aproximação de onda girante	p. 74
5.2	Proposição das coordenadas vestidas	p. 75
5.3	Determinação das coordenadas vestidas	p. 76
5.4	Cálculo das amplitudes de transição	p. 80
5.5	As regras de soma	p. 84
5.6	Oscilador “confinado” numa cavidade arbitrariamente grande	p. 88
5.7	Oscilador confinado numa cavidade pequena	p. 90
	Conclusões e perspectivas	p. 93
	Referências Bibliográficas	p. 95
	Apêndice A – Operadores de criação/aniquilação e estados de Fock	p. 98
A.1	Ponto de partida: a relação canônica de comutação	p. 98
A.2	Os operadores de criação/aniquilação. Estados de Fock	p. 98
A.3	Operadores de criação/aniquilação na representação de Schrödinger	p. 100
A.4	Estados de Fock na representação de Schrödinger. Polinômios de Hermite	p. 101
A.5	Propriedades dos polinômios de Hermite: relação de recorrência e teoremas integrais	p. 103
	Apêndice B – Derivação da lagrangeana (4.5) a partir de um modelo oscilador- campo	p. 106
B.1	Apresentação do modelo	p. 106
B.2	Expansão do campo em modos normais	p. 107

Introdução

A motivação para este trabalho é uma área de pesquisa em Óptica Quântica conhecida como *Eletrodinâmica Quântica em Cavidades*, ou CQED¹. A CQED estuda os processos fundamentais de interação entre átomos e campo eletromagnético, confinados em uma cavidade refletora. Descrever teoricamente tais processos de um modo geral é algo bastante trabalhoso e, na maioria dos casos, só é feito perturbativamente (método de Weisskopf-Wigner²). No entanto, para alguns casos especiais, existem modelos que fornecem soluções não-perturbativas para um sistema átomo-campo numa cavidade, a saber: o *modelo de Rabi*, que descreve a interação dipolar entre um átomo de dois níveis e um campo clássico oscilante, e o *modelo de Jaynes-Cummings*, que difere do modelo de Rabi por considerar o campo quantizado, com apenas um modo normal (um laser, por exemplo).

Não obstante sua simplicidade, os modelos supracitados vem sendo largamente aplicados, sobretudo a partir da década de 1990, com o advento dos experimentos em CQED no chamado *regime de acoplamento forte*. No entanto, ambos os modelos somente admitem soluções exatas quando se faz a chamada *aproximação de onda girante* no hamiltoniano do sistema. No caso semi-clássico, tal aproximação é razoável quando a frequência do campo é ressonante, ou quase-ressonante, com a transição entre os dois níveis atômicos em questão. No caso puramente quântico, no entanto, a aproximação de onda girante acaba “jogando para debaixo do tapete” uma inconsistência do modelo de Jaynes-Cummings, a saber: aquilo que esperamos ser o estado fundamental do sistema (o átomo em seu estado de mais baixa energia e o campo em seu estado de vácuo) deixa de ser estável (fótons poderiam surgir *do nada*) quando não fazemos essa aproximação — ou, dito de outra forma, o estado fundamental do sistema, segundo o modelo de Jaynes-Cummings sem a aproximação de onda girante, não corresponde ao vácuo que esperamos.

Um trabalho introduzido em 2001 [2] surgiu como uma alternativa para se resolver problemas como os que surgem em CQED. A proposta deste trabalho era desenvolver um modelo exatamente solúvel para descrever a interação entre átomo e campo na cavidade, sem a necessidade de se tratar o problema perturbativamente. Podemos caracterizar o modelo estudado nesse

¹Do inglês *Cavity Quantum Electrodynamics*.

²cf. seção complementar C_{III} de [1].

trabalho como uma extensão do modelo de Jaynes-Cummings, em que o átomo é tratado como um oscilador harmônico e se acopla a um número arbitrariamente grande de modos normais do campo quantizado. Além disso, neste modelo, é possível resolver o tal “paradoxo de Jaynes-Cummings” por meio de uma mudança nas coordenadas que descrevem o oscilador e o campo. As novas coordenadas, denominadas *vestidas* ou *renormalizadas*, fornecem uma representação quântica na qual o vácuo do sistema é, por definição, estacionário, sem a necessidade de se fazer a aproximação de onda girante. Com isso, as soluções obtidas nessa representação são válidas também para sistemas fora de ressonância.

Os trabalhos originais sobre coordenadas vestidas utilizam o tratamento hamiltoniano habitual da Mecânica Quântica. Nossa proposta com este trabalho é fazer uma revisão dos mesmos, utilizando o formalismo lagrangeano, por meio de integrais funcionais (Dirac-Feynman), baseando-nos no trabalho pioneiro [3]. A organização do texto é a seguinte:

- para deixar o texto mais auto-contido, dedicaremos os capítulos 1 e 2 para introduzir e rever alguns tópicos de integração funcional em Mecânica Quântica, necessários para se compreender o desenvolvimento a ser feito nos capítulos seguintes;
- no capítulo 3, faremos uma breve revisão sobre os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings, com o intuito de melhor inserir o nosso trabalho no contexto da CQED;
- o capítulo 4 é dedicado à apresentação, análise e diagonalização do modelo de acoplamento linear entre um oscilador e um conjunto de modos normais de um campo, nosso objeto de estudo;
- por fim, no capítulo 5, discutiremos o problema da estabilidade do vácuo no modelo de acoplamento linear, introduziremos a representação das coordenadas vestidas e calcularemos as probabilidades de transição previstas pelo modelo.

1 A interpretação de Dirac-Feynman para a Mecânica Quântica

1.1 O papel da ação na Mecânica Clássica

Como veremos, no desenvolvimento do formalismo de integrais funcionais para a Mecânica Quântica, a *ação* desempenha um papel central. Para uma melhor contextualização deste desenvolvimento, recordaremos aqui alguns tópicos importantes da Mecânica Clássica. Para mais detalhes, recomendamos [4].

1.1.1 O princípio de Hamilton

Uma das formas mais elegantes de se descrever a evolução temporal de um sistema mecânico clássico é através do *princípio de Hamilton*. Segundo este princípio, todo sistema mecânico com s graus de liberdade — denotemos as coordenadas por q_1, q_2, \dots, q_s e o conjunto de todas elas por \mathbf{q}^s — é descrito por uma função $\mathcal{L}(\mathbf{q}^s, \dot{\mathbf{q}}^s, t)$, denominada *lagrangeana* do sistema em questão, que satisfaz à seguinte condição:

Dentre todas as possíveis trajetórias pelas quais o sistema pode evoluir de posições determinadas \mathbf{q}_1^s , num instante t_1 , para outras posições determinadas \mathbf{q}_2^s , num instante t_2 , a que é efetivamente seguida é tal que o funcional

$$S[\mathbf{q}^s(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\mathbf{q}^s(t), \dot{\mathbf{q}}^s(t), t) dt, \quad (1.1)$$

denominado *ação lagrangiana*, ou simplesmente *ação*, assume um valor *extremo*.

Resolvendo a condição acima utilizando Cálculo Variacional, obtemos as conhecidas *equações de Euler-Lagrange* para o movimento do sistema:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.2)$$

1.1.2 As equações de Hamilton

Dada a lagrangeana de um sistema, na qual as coordenadas e as velocidades figuram como variáveis independentes, podemos, na maioria dos casos, construir uma função alternativa em que as coordenadas e os momentos desempenham tal papel. Para tanto, calculamos uma transformada de Legendre substituindo as velocidades pelos momentos.

A diferencial total da lagrangeana é

$$d\mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i. \quad (1.3)$$

Definindo os momentos $p_i := \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_i$ e utilizando as equações de Lagrange, podemos reescrever (1.3) como

$$d\mathcal{L} = \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i. \quad (1.4)$$

Escrevendo agora o segundo termo de (1.4) como

$$\sum_i p_i d\dot{q}_i = d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i dp_i \quad (1.5)$$

e substituindo em (1.4), obtemos:

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}\right) = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i. \quad (1.6)$$

A expressão sob o diferencial no primeiro termo de (1.6) é a função que procuramos, denominada *hamiltoniana* do sistema:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}^s, \mathbf{p}^s, t) := \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}. \quad (1.7)$$

Da equação

$$d\mathcal{H} = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i, \quad (1.8)$$

obtemos as conhecidas *equações de Hamilton*,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.9a)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad (1.9b)$$

que são as equações de movimento do sistema expressas neste novo formalismo.

Neste desenvolvimento, a dependência temporal foi omitida por simplicidade. Incluindo-a, obteríamos

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}.$$

Além disto, é fácil verificar — tomando a derivada total da hamiltoniana em relação ao tempo e utilizando as equações (1.9) — que a derivada total da hamiltoniana em relação ao tempo reduz-se a

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}.$$

É possível obter as equações (1.9), via Cálculo Variacional, a partir de um *princípio de Hamilton modificado*:

Suponhamos que, nos instantes t_1 e t_2 , o sistema ocupa posições determinadas, que indicaremos pelos conjuntos de coordenadas \mathbf{q}_1^s e \mathbf{q}_2^s , e momentos correspondentes \mathbf{p}_1^s e \mathbf{p}_2^s , respectivamente. Dentre todas as possíveis trajetórias pelas quais o sistema pode evoluir de $(\mathbf{q}_1^s, \mathbf{p}_1^s, t_1)$ a $(\mathbf{q}_2^s, \mathbf{p}_2^s, t_2)$, a que é efetivamente seguida é tal que o funcional

$$\begin{aligned} S[\mathbf{q}^s(t), \mathbf{p}^s(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}(\mathbf{q}^s(t), \mathbf{p}^s(t), t) \right] dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i p_i dq_i - \mathcal{H}(\mathbf{q}^s(t), \mathbf{p}^s(t), t) dt \end{aligned} \quad (1.10)$$

assume um valor extremo.

Por analogia a (1.1), o funcional dado por (1.10) costuma ser denominado *ação hamiltoniana*.

1.1.3 Transformações canônicas

A forma das equações de Euler-Lagrange (1.2) é invariante por transformações de coordenadas do tipo $Q_i = Q_i(\mathbf{Q}, t)$, chamadas *transformações pontuais*. Do mesmo modo, existe uma classe de transformações de coordenadas e momentos, $Q_i = Q_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ e $P_i = P_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, que deixa invariante a forma das equações de Hamilton (1.9). As transformações pertencentes a essa classe são conhecidas como *transformações canônicas*. Claramente, transformações pontuais são casos particulares de transformações canônicas.

Nas novas variáveis \mathbf{Q}^s e \mathbf{P}^s , temos uma nova hamiltoniana \mathcal{H} , da qual extraímos as se-

guintes equações de Hamilton:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial P_i}, \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (1.11a)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial Q_i}, \quad (1.11b)$$

bem como a seguinte expressão para a ação hamiltoniana:

$$S[\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i P_i dQ_i - \mathcal{K}(\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t), t) dt. \quad (1.12)$$

O princípio de Hamilton aplicado a (1.12) é equivalente àquele aplicado a (1.10). No entanto, esta equivalência estabelece a seguinte relação:

$$\sum_i P_i dQ_i - \mathcal{K} dt = \sum_i p_i dq_i - \mathcal{H} dt - dF_1, \quad (1.13)$$

onde F_1 é uma função das antigas e das novas coordenadas, bem como do tempo. Como F_1 determina completamente uma transformação canônica, é chamada *função geratriz* da transformação em questão. Isolando dF_1 em (1.13), segue

$$dF_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t) = \sum_i p_i dq_i - \sum_i P_i dQ_i + (\mathcal{K} - \mathcal{H}) dt, \quad (1.14)$$

donde obtemos as seguintes equações:

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \quad (1.15a)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \quad (1.15b)$$

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (1.15c)$$

Ademais, para que F_1 defina, de fato, uma transformação canônica $(\mathbf{q}^s, \mathbf{p}^s) \mapsto (\mathbf{Q}^s, \mathbf{P}^s)$, é necessário que esta seja inversível. Logo, a matriz hessiana de F_1 deve ser também inversível, ou seja,

$$\det(D^2 F_1) \neq 0, \quad \text{onde} \quad (D^2 F_1)_{ij} = \frac{\partial^2 F_1}{\partial q_i \partial Q_j}.$$

Um exemplo ilustrativo de função geratriz do tipo F_1 é o seguinte:

$$F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}) = \sum_i q_i Q_i. \quad (1.16)$$

Calculando (1.15) para (1.16), encontramos $Q_i = p_i$ e $P_i = -q_i$. Esta transformação canônica é conhecida como *transformação de dualidade*, pois leva, a menos de um sinal, coordenadas em

momentos e vice-versa.

Podemos ainda, aplicando transformadas de Legendre apropriadas em F_1 , encontrar mais três funções geratrizes, que denotaremos por F_2 , F_3 e F_4 :

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = F_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}(\mathbf{P}), t) + \sum_i P_i Q_i(\mathbf{P}) \quad (1.17a)$$

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \quad (1.17b)$$

$$Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \quad (1.17c)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_2}{\partial t} \quad (1.17d)$$

$$F_3(\mathbf{p}, \mathbf{Q}, t) = F_1(\mathbf{q}(\mathbf{p}), \mathbf{Q}, t) - \sum_i p_i q_i(\mathbf{p}) \quad (1.18a)$$

$$q_i = \frac{\partial F_3}{\partial p_i} \quad (1.18b)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \quad (1.18c)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_3}{\partial t} \quad (1.18d)$$

$$F_4(\mathbf{p}, \mathbf{P}, t) = F_1(\mathbf{q}(\mathbf{p}), \mathbf{Q}(\mathbf{P}), t) + \sum_i P_i Q_i(\mathbf{P}) - \sum_i p_i q_i(\mathbf{p}) \quad (1.19a)$$

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \quad (1.19b)$$

$$Q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial P_i} \quad (1.19c)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H} + \frac{\partial F_4}{\partial t} \quad (1.19d)$$

Transformações pontuais são um caso particular de transformações canônicas cuja função geratriz é do tipo F_2 . Com efeito, a partir da seguinte função geratriz:

$$F_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{q}, t) P_i,$$

onde f_i são funções diferenciáveis das antigas coordenadas e do tempo, encontramos, aplicando (1.17c) e (1.17d), os resultados $Q_i = f_i(\mathbf{q}, t)$ e $P_i = \left(\frac{\partial f_i}{\partial q_i}\right)^{-1} p_i$. Em particular, para $f_i(\mathbf{q}, t) = q_i$, temos $Q_i = q_i$ e $P_i = p_i$, que nada mais é do que uma transformação de identidade.

1.1.4 A equação de Hamilton-Jacobi

Assim como as equações de Euler-Lagrange e de Hamilton, a equação de Hamilton-Jacobi constitui um novo ponto de partida para um método geral de integração das equações de movimento. A novidade é que a grandeza que desempenha o papel central no formalismo de Hamilton-Jacobi, é a ação (ou *uma* ação, conforme a linha de raciocínio que seguiremos¹). Além disso, a equação de Hamilton-Jacobi guarda uma estreita relação com a equação de Schrödinger independente do tempo.

Procuramos uma transformação canônica $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ tal que as novas coordenadas e momentos sejam *constantes* — não necessariamente constantes de movimento, mas constantes de integração das equações de movimento. Escolheremos, como as novas variáveis, as condições iniciais para as posições e momentos, $\mathbf{Q} = \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$ e $\mathbf{P} = \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$. Precisamos agora encontrar a nova forma para a hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t)$. Como Q_i e P_i são constantes, as equações de Hamilton reduzir-se-ão a

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_i} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_i} = 0.$$

Logo, a nova hamiltoniana não pode depender nem de \mathbf{Q} , nem de \mathbf{P} , mas apenas do tempo. Tal dependência pode ser absorvida por um termo aditivo dependente do tempo na função geratriz, sem prejuízo de suas outras propriedades. Assim, podemos tomar, sem perda de generalidade, $\mathcal{H} = 0$, donde segue, de qualquer uma das equações (1.15c), (1.17d), (1.18d) ou (1.19d),

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0, \quad (1.20)$$

onde F é a função geratriz da transformação que buscamos. Por conveniência, escolheremos uma função geratriz do tipo F_2 e a denotaremos por S , por razões que ficarão mais claras a seguir. Por (1.17b), obtemos

$$p_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t) = \frac{\partial S}{\partial q_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t) \quad (1.21a)$$

e, por (1.17c),

$$q_{i0} = \frac{\partial S}{\partial p_{i0}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t). \quad (1.21b)$$

¹cf. §2.1 da referência [5].

Combinando (1.20) e (1.21), obtemos a chamada *equação de Hamilton-Jacobi*:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \nabla S(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t), t) + \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t) = 0, \quad (1.22)$$

onde $(\nabla S)_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$. Vemos que (1.22) é uma equação diferencial parcial de primeira ordem, não-linear, a $s + 1$ variáveis, t, q_1, q_2, \dots, q_s . Assim, uma solução completa desta equação depende de $s + 1$ constantes de integração. Por outro lado, haja vista que S figura na equação apenas através de suas derivadas, uma destas constantes deve ser um termo aditivo na solução completa, fixado por uma escolha apropriada do valor inicial de $S(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t)$. É razoável considerar que as outras s constantes sejam os novos momentos \mathbf{p}_0 . A função $S(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t)$ é conhecida como *função principal de Hamilton*.

Uma vez conhecida a função principal de Hamilton, as equações (1.21b) permitem expressar as coordenadas \mathbf{q}^s em função do tempo e de $2s$ constantes, \mathbf{q}_0 e \mathbf{p}_0 . A partir dessas relações, portanto, podemos obter as equações de movimento do sistema. Em seguida, com o auxílio das equações (1.21a), podemos obter os momentos em função do tempo.

Um ponto a ser observado aqui é que a função principal de Hamilton é, de certo modo, uma “ação”. Com efeito,

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\partial S}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i = -\mathcal{H} + \sum_i p_i \dot{q}_i = \\ &= \mathcal{L}(\mathbf{q}(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t), \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t), t). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Integrando (1.23), encontramos:

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{p}_0, t) - S_0 = \int_0^t \mathcal{L}(\mathbf{q}(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t'), \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t'), t') dt', \quad (1.24)$$

onde $S_0 = S(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, 0)$ é uma constante a ser fixada. Constatamos aqui o “parentesco” entre $S - S_0$ e a ação lagrangeana (1.1). É possível mostrar que a ação lagrangeana também é solução de uma equação de Hamilton-Jacobi e, por conseguinte, função geratriz de uma transformação canônica que fornece as equações de movimento. A principal diferença entre as duas, entretanto, é que $S - S_0$ é *única*, enquanto a ação lagrangeana, em geral, *não o é*.

1.2 Operadores de evolução temporal. Propagadores

Lembremos que, na descrição de Schrödinger para a Mecânica Quântica, os vetores de estado $|\psi(t)\rangle$ evoluem de acordo com a equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle. \quad (1.25)$$

Por simplicidade, nosso foco estará em hamiltonianas que não dependam explicitamente do tempo, $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Neste caso, a solução formal da equação de Schrödinger é

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \mathbf{H}\right) |\psi_0\rangle, \quad (1.26)$$

onde $|\psi_0\rangle := |\psi(t_0)\rangle$.

O operador linear $\mathbf{U}(t, t_0) : |\psi_0\rangle \mapsto |\psi(t)\rangle$ é denominado *operador de evolução temporal*:

$$\mathbf{U}(t, t_0) := \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \mathbf{H}\right). \quad (1.27)$$

Este operador é unitário, pois \mathbf{H} é hermiteano. Também é claro que uma composição de operadores de evolução para intervalos de tempo consecutivos é igual ao operador de evolução para o intervalo de tempo composto, *i.e.*,

$$\mathbf{U}(t_3, t_2) \mathbf{U}(t_2, t_1) = \mathbf{U}(t_3, t_1). \quad (1.28)$$

Uma vez que $\mathbf{U}(t, t_0)$ é uma função apenas de $t - t_0$, obtemos:

$$\mathbf{U}(\Delta t_1) \mathbf{U}(\Delta t_2) = \mathbf{U}(\Delta t_1 + \Delta t_2) = \mathbf{U}(\Delta t_2) \mathbf{U}(\Delta t_1), \quad (1.29)$$

ou seja, operadores de evolução temporal $\mathbf{U}(\Delta t)$ comutam para todo Δt .

No autoespaço do operador posição \mathbf{q} , o estado $|\psi(t)\rangle$ é descrito por uma função de onda $\psi(\mathbf{q}, t)$ dada por:

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle \iff |\psi(t)\rangle = \int \psi(\mathbf{q}, t) |\mathbf{q}\rangle d\mathbf{q}, \quad (1.30)$$

onde $|\mathbf{q}\rangle$ é o autoestado do operador \mathbf{q} com autovalor \mathbf{q} .

O operador de evolução temporal mapeia uma função de onda inicial $\psi(\mathbf{q}, t_0)$ em $\psi(\mathbf{q}, t)$, que pode ser expressa como

$$\psi(\mathbf{q}, t) = \langle \mathbf{q} | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \left\langle \mathbf{q} \left| \mathbf{U}(t, t_0) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |q_0\rangle \langle q_0| dq_0 \right) \right| \psi_0 \right\rangle = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{q} | \mathbf{U}(t, t_0) | q_0 \rangle \langle q_0 | \psi_0 \rangle dq_0 = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} K(\mathbf{q}, t | q_0, t_0) \psi(q_0, t_0) dq_0, \tag{1.31}
\end{aligned}$$

onde a função

$$K(\mathbf{q}, t | q_0, t_0) := \langle \mathbf{q} | \mathbf{U}(t, t_0) | q_0 \rangle, \tag{1.32}$$

denominada *propagador*², é o elemento de matriz do operador de evolução temporal na base dos autoestados de \mathbf{q} . O propagador é interpretado como a amplitude de probabilidade da transição entre um estado inicial $|\psi_0\rangle$ e um estado final $|\psi(t)\rangle$.

Uma propriedade muito importante do propagador, que será utilizada nas próximas seções, é a seguinte: consideremos três instantes $t_1 \leq t_2 \leq t_3$ e, a cada instante t_i , associemos uma posição q_i . De acordo com (1.31), podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\psi(q_3, t_3) &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(q_3, t_3 | q_2, t_2) \psi(q_2, t_2) dq_2 = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} K(q_3, t_3 | q_2, t_2) \left[\int_{-\infty}^{+\infty} K(q_2, t_2 | q_1, t_1) \psi(q_1, t_1) dq_1 \right] dq_2 = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} K(q_3, t_3 | q_2, t_2) K(q_2, t_2 | q_1, t_1) dq_2 \right] \psi(q_1, t_1) dq_1 \iff \\
\iff K(q_3, t_3 | q_1, t_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(q_3, t_3 | q_2, t_2) K(q_2, t_2 | q_1, t_1) dq_2, \tag{1.33}
\end{aligned}$$

ou seja, a amplitude de probabilidade para o intervalo de tempo $[t_1, t_3]$ se decompõe numa soma sobre as infinitas possibilidades de se introduzir um estado intermediário no instante t_2 e se construir a composição das amplitudes de probabilidade nos intervalos $[t_1, t_2]$ e $[t_2, t_3]$.

1.3 O propagador como uma integral funcional

1.3.1 Buscando uma formulação lagrangeana para a Mecânica Quântica: uma breve história sobre o trabalho de Feynman

Integração funcional constitui uma terceira representação da Mecânica Quântica, além das representações de Heisenberg (operadores) e Schrödinger (função de onda). Elas são devidas a Feynman, que desenvolveu, na década de 1940, uma abordagem que Dirac considerou bre-

²Feynman introduziu a notação $K(\mathbf{q}, t | q_0, t_0)$, pois o propagador aparece como o núcleo (*kernel*) da equação integral (1.31).

vemente em 1932. Nesta seção, vamos discutir as motivações que levaram Dirac e Feynman a associar integrais funcionais — cujo integrando é $\exp([i/\hbar] S)$, onde S é a ação — à Mecânica Quântica.

Na Matemática, Wiener já estudara integrais funcionais na década de 1920, mas estas possuíam, como integrando, uma exponencial real. As integrais de Wiener são integrais funcionais euclidianas que estão bem definidas matematicamente, mas as integrais de Feynman, por carregarem uma exponencial imaginária, não possuem uma fundamentação matemática sólida. Não obstante, as integrais de Feynman vêm sendo utilizadas com sucesso em diversas áreas da Física, como Física de Partículas, Física Atômica e Molecular, Óptica e Mecânica Estatística.

Em diversas aplicações, integrais funcionais são utilizadas em Teoria de Perturbação — em particular, para aproximações semiclássicas — e, nestes casos, não há problemas matemáticos sérios. Em outras aplicações, como o cálculo de matrizes densidade em Mecânica Estatística, são usadas integrais funcionais euclidianas e, aqui, estas coincidem com as integrais funcionais de Wiener. Contudo, para os cálculos não-perturbativos de integrais funcionais em espaços de Minkowski, ainda falta uma fundamentação matemática completamente rigorosa. Os problemas aumentam para dimensões maiores que quatro. Feynman estava ciente deste problema, mas as idéias físicas que surgiram das integrais funcionais são tão convincentes que ele — e outros pesquisadores — não consideraram este problema preocupante.

Nossa breve história começa com Dirac, que escreveu, em 1932, um artigo para um *journal* soviético³ [6], no qual ele tentou encontrar uma descrição da Mecânica Quântica baseada no formalismo lagrangeano, em vez do atualmente utilizado formalismo hamiltoniano. Todos os trabalhos da época em Mecânica Quântica — incluindo o trabalho em Teoria Quântica de Campos — começaram com a equação de Schrödinger ou com os métodos de operadores de Heisenberg, nos quais a hamiltoniana desempenha um papel central. Para a Mecânica Quântica, não havia problemas, mas para teorias de campos relativísticos, uma abordagem baseada na hamiltoniana tinha o inconveniente de se perder a invariância manifesta de Lorentz⁴.

Dirac considerou o propagador (1.32) e levantou a questão sobre a possibilidade de se encontrar uma expressão para este elemento de matriz na qual figurasse a ação em vez da hamiltoniana. Ele sabia que, na Mecânica Clássica, a evolução temporal de um sistema pode ser escrita como uma transformação canônica, da qual a ação clássica $S[q(t); t_I, t_F]$, calculada ao longo da trajetória clássica começando no ponto q_I , no instante t_I , e terminando no ponto q_F , no instante t_F , é a função geratriz (*cf.* §1.1.4). Em seu artigo de 1932, Dirac escreveu que o

³O artigo foi recebido em 1932, mas publicado em 1933.

⁴Embora, para a Eletrodinâmica Quântica, tem-se mostrado que resultados físicos são, não obstante, relativisticamente invariantes.

propagador *corresponde a* $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t); t_I, t_F]\right)$. Ele usou as palavras “corresponde a” para expressar que deve haver correções de nível quântico, de tal modo que a igualdade entre os dois termos não se verifica. Embora Dirac tenha escrito essas idéias em 1932, elas foram por muito tempo ignoradas, até que Feynman começasse seus estudos sobre o papel da ação na Mecânica Quântica.

No final da década de 1930, Feynman começou a estudar como formular uma abordagem da Mecânica Quântica baseada na ação. Sua motivação era um trabalho desenvolvido com Wheeler, seu orientador de Doutorado: uma teoria de Eletrodinâmica Quântica da qual o campo eletromagnético fora eliminado. Deste modo, eles esperavam evitar problemas de autoaceleração e autoenergia infinita de um elétron, devido às interações deste elétron com o campo eletromagnético, e que Lienard, Wiechert, Abraham e Lorentz tentaram, em vão, resolver. A “teoria de Feynman-Wheeler” [7] resultante surgiu em uma descrição das interações entre dois elétrons na qual não se fazia referência a nenhum campo. Esta é chamada de *teoria de ação à distância*, na qual esta demora um intervalo de tempo finito e não-nulo para percorrer a distância entre um elétron e os outros. Essas teorias são não-locais no espaço e no tempo.

Schwarzschild [8], Tetrode [9] e Fokker [10, 11, 12] estudaram tal teoria de ação à distância e uma expressão para a ação clássica deste sistema foi encontrada, eliminando o problema de autoenergia infinita. Feynman e Wheeler passaram então a quantizar este sistema, mas Feynman notou que um tratamento hamiltoniano era desesperançosamente complicado. Assim, Feynman começou a procurar por uma abordagem da Mecânica Quântica em que ele pudesse evitar o uso da hamiltoniana. O objeto natural a ser usado era a ação. Naquela ocasião, Feynman foi informado sobre o trabalho de Dirac de 1932 e, obviamente, ficou intrigado sobre a expressão misteriosa “corresponde a”. Com seu espírito pragmático, tipicamente norte-americano, ele testou a hipótese de Dirac para um exemplo muito simples: uma lagrangeana do tipo

$$\mathcal{L}(\dot{q}, q) = \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \quad (1.34)$$

e um intervalo de tempo $t_{n+1} - t_n = \epsilon$ muito pequeno. A linha de raciocínio adotada na próxima seção segue o desenvolvimento original de Feynman, que pode ser encontrado, por exemplo, na seção 4.1 da referência [13].

1.3.2 Uma formulação lagrangeana para o propagador a tempos curtos

Para o exemplo supracitado, Feynman escreveu a evolução temporal da função de onda $\psi(q, t)$ como

$$\begin{aligned}\psi(q_{n+1}, t_{n+1}) &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \epsilon \mathcal{L}\left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon}, \frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right)\right] \psi(q_n, t_n) dq_n = \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{i m \epsilon}{2 \hbar} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{i \epsilon}{\hbar} V\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right)\right] \psi(q_n, t_n) dq_n.\end{aligned}\quad (1.35)$$

onde $\mathcal{N}(\epsilon)$ é um fator de normalização que pode, em princípio, depender de ϵ . Introduzindo a variável $x = q_{n+1} - q_n$ na integral, obtemos:

$$\psi(q_{n+1}, t_n + \epsilon) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} x^2\right) \exp\left[-\frac{i \epsilon}{\hbar} V\left(q_n + \frac{x}{2}\right)\right] \psi(q_{n+1} - x, t) dx. \quad (1.36)$$

No trabalho original [13], utiliza-se, neste ponto da dedução, o argumento de que apenas valores pequenos de x contribuirão significativamente para a integral em (1.36), o que justificaria as expansões de baixa ordem em x que faremos a seguir. Vamos mostrar, entretanto, que tal argumento não é necessário e que aquelas expansões em x surgem naturalmente quando expandimos (1.36) até primeira ordem em ϵ .

Com efeito, fazendo expansões de ordem arbitrária em x na Eq. (1.36), teremos uma combinação linear de integrais do tipo $\int_{-\infty}^{+\infty} x^n \exp(-ax^2) dx$, com $a := m/(2i\hbar\epsilon)$ e $n \in \mathbb{Z}$. Estas integrais podem ser calculadas explicitamente⁵ e seu valor é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^n \exp(-ax^2) dx = \begin{cases} 0, & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ (n-1)!! \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left(\frac{1}{2a}\right)^{n/2}, & \text{se } n \text{ é par} \end{cases}, \quad (1.37)$$

onde $k!!$ denota o duplo fatorial de k — para $k \gg 1$ ímpar, temos $k!! = k \times (k-2) \times (k-4) \times \dots \times 5 \times 3 \times 1$.

Substituindo o valor definido anteriormente para a , temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} x^2\right) dx = (2k-1)!! \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}} \left(\frac{i\hbar\epsilon}{m}\right)^k \quad \forall k \in \mathbb{Z}. \quad (1.38)$$

⁵Para n ímpar, o cálculo é trivial. Para n par, o cálculo pode ser feito facilmente utilizando o seguinte “truque”:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k} \exp(-ax^2) dx = (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2) dx.$$

Vemos aqui que, para mantermos os termos de primeira ordem em ϵ , devemos preservar apenas os termos das expansões em x que resultem em integrais do tipo (1.38) com $k \leq 1$. Olhando com cuidado o membro da direita em (1.36), concluiremos, sem muita dificuldade, que devemos fazer uma expansão de segunda ordem em $\psi(q_{n+1} - x, t_n)$ e uma de ordem zero⁶ em $V(q_n + \frac{x}{2})$.

Procedendo às expansões em (1.36) e substituindo o resultado obtido em (1.38), vem:

$$\begin{aligned} \psi(q_{n+1}, t_n) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(q_{n+1}, t_n) &= \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} x^2\right) \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n)\right] \left[\psi(q_{n+1}, t_n) - x \frac{\partial \psi}{\partial q}(q_{n+1}, t_n) + \frac{x^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}(q_{n+1}, t_n)\right] dx = \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(q_n)\right] \left[\psi(q_{n+1}, t_n) + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}(q_{n+1}, t_n)\right]. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Desprezando o termo de segunda ordem em ϵ e rearranjando os demais termos, obtemos:

$$\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(q_{n+1}, t_n) = \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}(q_{n+1}, t_n) + \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n) + \frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}} - 1\right] \psi(q_{n+1}, t_n). \quad (1.40)$$

Multiplicando ambos os membros de (1.40) por $i\hbar/\epsilon$ e tomando o limite para $\epsilon \rightarrow 0$, obtemos, finalmente,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(q_n, t_n) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}(q_n, t_n) + \left[V(q_n) + i\hbar \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}} - 1\right)\right] \psi(q_n, t_n), \quad (1.41)$$

que nada mais é do que a equação de Schrödinger para o problema considerado, **contanto que a seguinte condição seja satisfeita:**

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{1}{\mathcal{N}} \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}} - 1\right) = 0. \quad (1.42)$$

A condição (1.42) restringe muito as possíveis escolhas para o fator de normalização $\mathcal{N}(\epsilon)$, mas não é forte o bastante para determiná-lo univocamente. Discussões à parte, uma escolha trivial para o fator de normalização é

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{2i\pi\hbar\epsilon}{m}}. \quad (1.43)$$

⁶Cumpramos ressaltar aqui que, como faremos uma expansão de ordem zero no potencial de ponto médio $V\left(\frac{q_{n+1}+q_n}{2}\right)$, escolher um dos valores $V(q_n)$ ou $V(q_{n+1})$ para a expansão torna-se uma mera questão de arbitrariedade. Ao longo deste trabalho, usaremos um valor ou outro, conforme nossa conveniência.

Assim, verificamos que o propagador a tempos curtos está, de fato, diretamente relacionado a $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right)$, como Dirac havia suposto. Em particular, fazendo a escolha (1.43), concluímos que

$$K(q_{n+1}, t_{n+1} | q_n, t_n) \approx \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\epsilon} (q_{n+1} - q_n)^2 - \epsilon V(q_n) \right]\right). \quad (1.44)$$

1.3.3 O propagador a tempos longos: uma formulação lagrangeana para a integral funcional

Agora que já conhecemos uma expressão para o propagador a tempos curtos em função da lagrangeana (1.34), uma pergunta natural a se fazer é a seguinte: *como estender aquele resultado para um intervalo de tempo arbitrário?* Para construir tal extensão, faremos uso combinado de (1.44) e do importante resultado (1.33) na página 21.

Consideremos um sistema unidimensional que evolui de uma posição q_I , num instante t_I , para uma posição q_F , num instante t_F . Dividamos o intervalo $[t_I, t_F]$ em N subintervalos $[t_n, t_{n+1}]$, onde $t_0 := t_I$, $t_n = t_0 + n\epsilon \forall n \in \mathbb{Z} \cap [0, N]$ e $\epsilon = (t_F - t_I) / N \ll 1$ — posteriormente, tomaremos o limite para $N \rightarrow \infty$. Além disso, para cada instante t_n , associemos uma posição q_n , lembrando que as posições $q_0 := q_I$ e $q_N := q_F$ são fixas.

Utilizando a propriedade (1.33) recursivamente para N subintervalos de tempo, chegaremos ao seguinte resultado:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=0}^{N-1} K(q_{n+1}, t_{n+1} | q_n, t_n) dq_{N-1} dq_{N-2} \cdots dq_1, \quad (1.45)$$

que denotaremos, por simplicidade, por

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} K(q_{n+1}, t_{n+1} | q_n, t_n) \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \quad (1.46)$$

Substituindo (1.44) em (1.46), vem:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2\epsilon} (q_{n+1} - q_n)^2 - \epsilon V(q_n) \right]\right) \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \quad (1.47)$$

Introduzindo uma função interpoladora diferenciável $q(t)$ tal que $q(t_n) = q_n \forall n \in \mathbb{Z} \cap [0, N]$, podemos, ao tomar o limite para $N \rightarrow \infty$, substituir o somatório no argumento da expo-

nencial em (1.47) por uma integral em t :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V(q_n) \right] = \frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(t) - V(q) \right] dt \quad (1.48)$$

Além disto, no limite para $N \rightarrow \infty$, obtemos uma medida de integração de dimensão infinita que é simbolicamente denotada por:

$$\mathcal{D}[q(t)] := \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \prod_{k=1}^{N-1} dq_k \quad (1.49)$$

Introduzindo estes novos elementos, denotaremos (1.47) por:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \int_{q(t_I)=q_I}^{q(t_F)=q_F} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right) \mathcal{D}[q(t)]. \quad (1.50)$$

Cumprе ressaltar aqui que (1.50) é apenas uma maneira formal de representar a expressão (1.47), à qual deveremos recorrer sempre que precisarmos calcular essas integrais.

A expressão (1.50) subentende uma integração sobre infinitos valores intermediários q_n . Podemos, então, interpretá-la naturalmente como uma integração sobre *todas as funções* $q(t)$ tais que $q(t_I) = q_I$ e $q(t_F) = q_F$ ou, ainda, sobre *todas as possíveis trajetórias* pelas quais um sistema pode partir da posição q_I , no instante t_I , e chegar à posição q_F , no instante t_F — esta, aliás, é a interpretação original de Feynman. Por esta ou aquela interpretação, uma integral como (1.50) é comumente denominada *integral de trajetória* (do inglês *path integral*) ou *integral funcional*, respectivamente⁷.

A expressão (1.50) também é conhecida como *fórmula de Feynman-Kac*, pois foi o matemático Kac que demonstrou que uma integral análoga a essa, mas com um argumento real para a exponencial, está rigorosamente bem definida do ponto de vista matemático. Integrais desta última classe têm aplicações em outras áreas, como Mecânica Estatística (integral de Feynman para a matriz densidade) e Processos Estocásticos (integral de Wiener). Um ponto que pode parecer controverso é o resultado (1.43). Até aqui, duas questões permanecem em aberto:

1. **O resultado (1.43) é passível de demonstração?** Lembremos que, nos nossos cálculos, era necessário apenas que aquela igualdade se verificasse assintoticamente, mas acabamos impondo a igualdade irrestrita em (1.43).

⁷Nos trabalhos de língua inglesa, é mais comum encontrar a expressão *integral de trajetória*, enquanto que, nos de língua portuguesa, a expressão *integral funcional* é mais utilizada.

2. **Existe uma forma de se calcular o fator de normalização \mathcal{N} para uma lagrangeana qualquer?** Para o cálculo que acabamos de fazer, partimos de uma lagrangeana “simples” (1.34) na página 23.

Sobre a questão 2, Feynman escreveu, no final de sua tese de doutorado [14]:

A point of vagueness is the normalization factor, \mathcal{N} . No rule has been given to determine it for a given action expression. This question is related to the difficult mathematical question as to the conditions under which the limiting process of subdividing the time scale (...) actually converges.

Na verdade, a resposta para esta questão é um tanto desapontadora, como veremos mais adiante. Por ora, vamos responder a questão 1 (a saber: a resposta é *sim*) e, ao mesmo tempo, mostrar que é possível deduzir o resultado (1.50) a partir do formalismo de operadores da Mecânica Quântica, estabelecendo completamente a equivalência entre este novo formalismo e os demais já conhecidos. Como ilustração, vamos introduzir, no desenvolvimento que segue, uma ferramenta matemática muito útil em problemas de integração funcional: a *fórmula do produto de Trotter*⁸.

1.3.4 A integral funcional deduzida a partir do formalismo de operadores. A fórmula do produto de Trotter

Nesta seção, seguiremos essencialmente o desenvolvimento feito no capítulo 1 da referência [16]. Um desenvolvimento similar pode ser encontrado na seção 1.4 da referência [17].

Vamos recordar o significado do propagador no formalismo de operadores da Mecânica Quântica. Combinando as equações (1.27) na página 20 e (1.32), temos:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \left\langle q_F \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (t_F - t_I) \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right) \right| q_I \right\rangle \quad (1.51)$$

Para o exemplo que tratamos, a lagrangeana (1.34), o operador hamiltoniano correspondente é

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \mathbf{V}(\mathbf{q}) \quad (1.52)$$

que, para simplificar, denotaremos por

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V}, \quad (1.53)$$

⁸Alguns trabalhos, como [15], referem-se a essa fórmula, estendida a outros contextos, como *de Lie-Trotter*. Outros ainda, como *de Kato-Trotter*.

O próximo passo seria, naturalmente, decompor a exponencial acima num produto de exponenciais a tempos curtos. Além disso, para o nosso exemplo, gostaríamos de separar as exponenciais de \mathbf{T} e \mathbf{V} , mas não podemos fazer isso de maneira irrestrita, pois \mathbf{T} e \mathbf{V} não comutam. Não obstante, o seguinte resultado, que usaremos agora, permanece válido:

Teorema 1.1 (Fórmula do produto de Trotter). *Sejam \mathbf{A} e \mathbf{B} dois operadores auto-adjuntos. Então vale:*

$$\exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\exp\left(\frac{1}{N} \mathbf{A}\right) \exp\left(\frac{1}{N} \mathbf{B}\right) \right]. \quad (1.54)$$

Aplicando (1.54) em (1.51) e introduzindo $\epsilon := (t_F - t_I)/N$, temos:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle q_F \left| \left[\exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{T}\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{V}\right) \right]^N \right| q_I \right\rangle. \quad (1.55)$$

Assim como fizemos na dedução da propriedade (1.33), introduzamos aqui, entre as repetições do operador exponencial, $N - 1$ decomposições da identidade na representação das coordenadas,

$$\mathbf{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |q_n\rangle \langle q_n| dq_n \quad n = 1, 2, \dots, N-1,$$

de modo que (1.55) fica reduzida a

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \left\langle q_{n+1} \left| \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{T}\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{V}\right) \right| q_n \right\rangle \prod_{k=1}^{N-1} dq_k, \quad (1.56)$$

onde $q_0 := q_I$ e $q_N := q_F$. Para reduzir o operador de energia cinética, introduzamos N decomposições da identidade na representação dos momentos,

$$\mathbf{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p_n\rangle \langle p_n| dp_n \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1.$$

Com isto, (1.56) fica:

$$\begin{aligned} K(q_F, t_F | q_I, t_I) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \left\langle q_{n+1} \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{T}} \right| p_n \right\rangle \left\langle p_n \left| e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{V}} \right| q_n \right\rangle dp_n \prod_{k=1}^{N-1} dq_k = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m}} e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n)} \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | q_n \rangle dp_n \prod_{k=1}^{N-1} dq_k. \end{aligned} \quad (1.57)$$

Introduzindo o já conhecido resultado para a função de onda do momento na representação de coordenadas,

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipq}{\hbar}\right),$$

em (1.57), vem:

$$\begin{aligned}
K(q_F, t_F | q_I, t_I) &= \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m}\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n)\right) \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} [q_{n+1} - q_n] p_n\right) dp_n \prod_{k=1}^{N-1} dq_k = \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} [q_{n+1} - q_n] p_n - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m}\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n)\right) \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{N-1} dq_k. \quad (1.58)
\end{aligned}$$

As integrais nas variáveis de momento p_n , em (1.58), são do tipo gaussiano e podem ser calculadas explicitamente:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} [q_{n+1} - q_n] p_n - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m}\right) \frac{dp_n}{2\pi\hbar} &= \\
&= \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} [q_{n+1} - q_n]^2\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{i\epsilon}{2\hbar m} \left[p_n - \frac{\hbar m}{\epsilon} (q_{n+1} - q_n)\right]^2\right) \frac{dp_n}{2\pi\hbar} = \\
&= \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} [q_{n+1} - q_n]^2\right) \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\epsilon}} \frac{1}{2\pi\hbar} = \\
&= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} [q_{n+1} - q_n]^2\right). \quad (1.59)
\end{aligned}$$

Substituindo (1.59) em (1.58), vem:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} [q_{n+1} - q_n]^2 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(q_n)\right) \right] \left(\prod_{k=1}^{N-1} dq_k \right), \quad (1.60)$$

o que, após alguma manipulação, conduz precisamente ao resultado (1.47). Logo, o resultado imposto em (1.43) é correto para o propagador dado pelo hamiltoniano (1.52) e corresponde à integração nas variáveis de momento.

Para concluir esta seção, notemos que o desenvolvimento feito até (1.57) vale não só para o hamiltoniano (1.52), mas para qualquer hamiltoniano da forma $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{T}(\mathbf{p}) + \mathbf{V}(\mathbf{q})$. Neste caso, a partir de (1.57), teríamos:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \{p_n (q_{n+1} - q_n) - \epsilon [T(p_n) + V(q_n)]\}\right) \left(\prod_{k=0}^{N-1} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \right) \prod_{\ell=1}^{N-1} dq_\ell, \quad (1.61)$$

que seria, então, a forma mais geral para o propagador como uma integral funcional construída a partir de um hamiltoniano do tipo $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{T}(\mathbf{p}) + \mathbf{V}(\mathbf{q})$. No entanto, como veremos na próxima seção, o resultado (1.61) pode ser estendido para uma classe ainda maior de hamiltoniano

nianos (que, virtualmente, compreende todos os casos).

1.3.5 O propagador a tempos longos: a formulação hamiltoniana para a integral funcional

Começamos com a conjectura de Dirac, passamos pelo trabalho de Feynman, que justifica aquela conjectura, e, até este ponto, conseguimos justificar as idéias de Feynman com base no consagrado formalismo de operadores da Mecânica Quântica, estabelecendo a equivalência entre a descrição *geométrica* de Dirac-Feynman e as conhecidas descrições *algébrica* de Heisenberg e *analítica* de Schrödinger. Nesta seção, vamos generalizar nossos resultados para uma classe muito maior de hamiltonianos (o que, como dito anteriormente, engloba praticamente todos os casos) e, indiretamente, dar uma resposta àquela questão 2.

Mais precisamente, vamos mostrar que é possível encontrar uma expressão análoga a (1.61) para qualquer hamiltoniano da forma⁹

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_j \alpha_j \mathbf{p}^{a_j} \mathbf{q}^{b_j} \quad \alpha_j \in \mathbb{C}, \quad \{j, a_j, b_j\} \subset \mathbb{Z}, \quad (1.62)$$

ou que possa ser colocado nesta forma com um reordenamento os operadores \mathbf{p} e \mathbf{q} , valendo-se, quando necessário, da relação de comutação $[\mathbf{q}, \mathbf{p}] = i\hbar \mathbf{I}$ — por exemplo, um hamiltoniano $\mathbf{H} = \mathbf{q} \mathbf{p}^2 \mathbf{q}$ seria reescrito como $\mathbf{H} = \mathbf{p}^2 \mathbf{q}^2 + 2i\hbar \mathbf{p} \mathbf{q}$.

Num caso mais geral que o tratado na seção anterior, a fórmula do produto de Trotter mostra-se inútil. Mesmo assim, é possível utilizar a propriedade (1.28) na página 20 e seguir um desenvolvimento análogo ao que conduziu a (1.57). Neste caso, obtemos:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \langle q_{n+1} | p_n \rangle \left\langle p_n \left| \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right) \right| q_n \right\rangle dp_n \prod_{k=1}^{N-1} dq_k. \quad (1.63)$$

Calcular o elemento de matriz $\langle p_n | \exp(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})) | q_n \rangle$, em geral, não é tarefa fácil. Não obstante, fazer este cálculo no limite para $\epsilon \rightarrow 0$ é relativamente simples. Com efeito, neste limite, podemos expandir as exponenciais até primeira ordem em ϵ :

$$\begin{aligned} \left\langle p_n \left| \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right) \right| q_n \right\rangle &\approx \left\langle p_n \left| \mathbf{I} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right| q_n \right\rangle = \\ &= \langle p_n | q_n \rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \left\langle p_n \left| \sum_j \alpha_j \mathbf{p}^{a_j} \mathbf{q}^{b_j} \right| q_n \right\rangle = \end{aligned}$$

⁹É possível deduzir o mesmo resultado para outras escolhas de ordenamento do hamiltoniano, mas para o nosso desenvolvimento, optamos pelo ordenamento (1.62).

$$\begin{aligned}
&= \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_j \alpha_j p_n^{a_j} q_n^{b_j} \right) \langle p_n | q_n \rangle = \\
&=: \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} H(p_n, q_n) \right] \langle p_n | q_n \rangle \approx \\
&\approx \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} H(p_n, q_n)\right) \langle p_n | q_n \rangle. \tag{1.64}
\end{aligned}$$

Substituindo (1.64) em (1.63), temos:

$$\begin{aligned}
K(q_F, t_F | q_I, t_I) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | q_n \rangle \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} H(p_n, q_n)\right) dp_n \prod_{k=1}^{N-1} dq_k = \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_n [q_{n+1} - q_n]\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} H(p_n, q_n)\right) \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{N-1} dq_k,
\end{aligned}$$

o que, após alguma manipulação, conduz ao resultado definitivo:

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} [p_n (q_{n+1} - q_n) - \epsilon H(p_n, q_n)]\right) \prod_{k=0}^{N-1} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \prod_{\ell=1}^{N-1} dq_\ell, \tag{1.65}$$

que denotaremos formalmente por

$$K(q_F, t_F | q_I, t_I) = \int_{q(t_I)=q_I}^{q(t_F)=q_F} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} p dq - H(p, q) dt\right) \mathcal{D}[p(t)] \mathcal{D}[q(t)]. \tag{1.66}$$

Esta é a forma mais geral para o propagador, no formalismo integral funcional, para um sistema cujo hamiltoniano não depende explicitamente do tempo. Note que a expressão no argumento da exponencial é uma “ação hamiltoniana”. Além disso, as condições de contorno para $p(t)$, $q(t)$ são aquelas que figuram no enunciado do princípio de Hamilton. Integrais funcionais para os propagadores calculadas a partir da ação hamiltoniana são comumente citadas como *integrais funcionais sobre o espaço de fases* do sistema, enquanto que as calculadas a partir da ação lagrangiana são ditas *integrais funcionais sobre o espaço de configurações* do sistema.

Ao final desse desenvolvimento, concluímos que o formalismo integral funcional é, de fato, um *método de quantização*, uma vez que ele define as amplitudes de transição quânticas $|\psi(t_I)\rangle \rightarrow |\psi(t_F)\rangle$ diretamente através da hamiltoniana “clássica” $H(p, q)$, sem a necessidade de utilizar funções de onda ou operadores \mathbf{p}, \mathbf{q} .

Observemos que, em (1.65), a integração nos momentos se dá sempre em uma dimensão a mais do que a integração nas coordenadas. Devido a isto, a expressão (1.66) para o propagador não é invariante por transformações canônicas.

Neste ponto, já podemos dar uma resposta à questão 2, deixada em aberto por Feynman:

- Se o hamiltoniano tiver a forma (1.52), quadrática em p , é possível derivar a formulação lagrangeana (1.50) para o propagador, a partir de (1.66), integrando explicitamente sobre os momentos.
- Porém, se o hamiltoniano contém termos que **não** são quadráticos em p , é **impossível** derivar uma formulação lagrangeana para o propagador a partir de (1.66). A formulação hamiltoniana é a única disponível para estes casos.

1.3.6 Integrais funcionais para sistemas com vários graus de liberdade

Todo o desenvolvimento que realizamos refere-se a sistemas com apenas um grau de liberdade. No entanto, valendo-se do formalismo de operadores (e de sua extensão tensorial), podemos generalizar os resultados para sistemas com vários graus de liberdade, lembrando que alguns sistemas requerem um cuidado especial devido à possibilidade de haver estados emaranhados. Por ora, vamos tratar apenas de estados não-emaranhados.

Para fixar idéias, consideremos um sistema com s graus de liberdade. Recordemos que, de acordo com o formalismo de operadores, a cada grau de liberdade do sistema corresponde um espaço de estados — que denotaremos por $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_s$ — e que o espaço de estados do sistema como um todo, \mathcal{H} , é o produto tensorial dos espaços referentes a cada grau de liberdade, ou seja,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_s =: \bigotimes_{\alpha=1}^s \mathcal{H}_\alpha \quad (1.67)$$

Se o sistema parte de uma configuração $\mathbf{q}_I := (q_I^{(1)}, q_I^{(2)}, \dots, q_I^{(s)})$ num instante t_I , e evolui para uma configuração $\mathbf{q}_F := (q_F^{(1)}, q_F^{(2)}, \dots, q_F^{(s)})$ num instante t_F , o propagador que descreve esta evolução pode ser escrito como

$$K(\mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I) = \left(\bigotimes_{\beta=1}^s \langle q_F^{(\beta)} | \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t_F - t_I) \mathbf{H} \right) \left(\bigotimes_{\alpha=1}^s | q_I^{(\alpha)} \rangle \right) \quad (1.68)$$

Procedendo analogamente ao caso de sistemas com um grau de liberdade, ou seja, dividindo o intervalo de tempo $[t_I, t_F]$ em N subintervalos $[t_n, t_{n+1}]$, decompondo o operador de evolução temporal como um produto de operadores em cada subintervalo e introduzindo resoluções da identidade no espaço das coordenadas e dos momentos,

$$\mathbf{1} = \int \left(\bigotimes_{\gamma=1}^s | q_n^{(\gamma)} \rangle \right) \left(\bigotimes_{\delta=1}^s \langle q_n^{(\delta)} | \right) \left(\prod_{j=1}^s dq_n^{(j)} \right) \quad n = 1, 2, \dots, N-1 \quad (1.69)$$

$$\mathbf{1} = \int \left(\bigotimes_{\delta=1}^s |p_n^{(\delta)}\rangle \right) \left(\bigotimes_{\gamma=1}^s \langle p_n^{(\gamma)}| \right) \left(\prod_{\ell=1}^s dp_n^{(\ell)} \right) \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1.70)$$

podemos escrever

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I) &= \\ &= \int \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right) \left[\prod_{\gamma=1}^s \langle q_{n+1}^{(\gamma)} | p_n^{(\gamma)} \rangle \langle p_n^{(\gamma)} | q_n^{(\gamma)} \rangle dp_n^{(\gamma)} \right] \right\} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \prod_{j=1}^s dq_k^{(j)} \right) = \\ &= \int \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon H(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right) \left[\prod_{\gamma=1}^s \exp\left(\frac{i}{\hbar} [q_{n+1}^{(\gamma)} - q_n^{(\gamma)}] p_n^{(\gamma)}\right) \frac{dp_n^{(\gamma)}}{2\pi\hbar} \right] \right\} \left(\prod_{k=1}^{N-1} \prod_{j=1}^s dq_k^{(j)} \right) = \\ &= \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \sum_{\gamma=1}^s [q_{n+1}^{(\gamma)} - q_n^{(\gamma)}] p_n^{(\gamma)} - \epsilon H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right\}\right) \prod_{j=1}^s \left(\prod_{\ell=0}^{N-1} \frac{dp_\ell^{(j)}}{2\pi\hbar} \right) \left(\prod_{k=1}^{N-1} dq_k^{(j)} \right). \quad (1.71) \end{aligned}$$

O resultado (1.71) guarda a mesma forma do resultado (1.65) obtido para sistemas com um grau de liberdade. Por isso, vamos denotá-lo formalmente de uma maneira similar:

$$K(\mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I) = \int_{\mathbf{q}(t_I)=\mathbf{q}_I}^{\mathbf{q}(t_F)=\mathbf{q}_F} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \sum_{k=1}^s p^{(k)} dq^{(k)} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) dt\right) \prod_{j=1}^s \mathcal{D}[p^{(j)}(t)] \mathcal{D}[q^{(j)}(t)]. \quad (1.72)$$

Em particular, para uma hamiltoniana da forma

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{\gamma=1}^s \frac{p^{(\gamma)2}}{2m^{(\gamma)}} + V(\mathbf{q}), \quad (1.73)$$

a integração nas variáveis de momento em (1.71) pode ser feita explicitamente, o que nos dá:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I) &= \prod_{j=1}^s \left(\frac{m^{(j)}}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^{N/2} \\ &\times \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \sum_{\gamma=1}^s \frac{m^{(\gamma)}}{2\epsilon} [q_{n+1}^{(\gamma)} - q_n^{(\gamma)}]^2 - \epsilon V(\mathbf{q}_n) \right\}\right) \left(\prod_{k=1}^{N-1} dq_k^{(j)} \right). \quad (1.74) \end{aligned}$$

Como no caso anterior, a integral funcional em (1.74) guarda a mesma forma daquela em (1.47) na página 26. Assim, vamos denotá-la formalmente de um modo similar:

$$K(\mathbf{q}_F, t_F | \mathbf{q}_I, t_I) = \int_{\mathbf{q}(t_I)=\mathbf{q}_I}^{\mathbf{q}(t_F)=\mathbf{q}_F} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left\{ \sum_{\gamma=1}^s \frac{m^{(\gamma)}}{2} [\dot{q}^{(\gamma)}]^2 - V(\mathbf{q}) \right\} dt\right) \prod_{j=1}^s \mathcal{D}[q^{(j)}(t)]. \quad (1.75)$$

1.3.7 Transformações de coordenadas em integrais funcionais: alguns comentários

Como podemos intuir, o cálculo de integrais funcionais é, em geral, uma tarefa bastante árdua, haja vista que apenas algumas classes de integrais funcionais podem ser calculadas exatamente. Métodos de integração típicos de integrais comuns nem sempre podem ser adaptados para o cálculo de integrais funcionais porque, nestas, o integrando e a medida de integração estão, de certo modo, “amarrados”. Na expressão (1.47), por exemplo, os limites para o integrando e para a medida de integração não podem, em princípio, ser tomados de modo independente. Por isso, o símbolo $\mathcal{D}[q(t)]$ que figura em (1.50) não tem sentido próprio — pelo contrário, não passa de uma simples notação.

Para ilustrar esta dificuldade, vamos considerar o método de integração mais fundamental que conhecemos: o método de mudança de variáveis. É possível implementar um método de transformação de coordenadas para o cálculo de integrais funcionais? Vamos discutir aqui apenas as integrais sobre o espaço de configurações e veremos que, para estas, desenvolver um método de transformação de coordenadas pode ser algo bastante complexo.

Para integrais comuns, o método de mudança de variáveis é muito bem estabelecido: se temos uma integral expressa nas variáveis x_1, x_2, \dots, x_s e queremos expressá-la em termos de novas variáveis y_1, y_2, \dots, y_s , devemos fazer:

$$\int f(x_1, x_2, \dots, x_s) dx_1 dx_2 \dots dx_s = \int f(y_1, y_2, \dots, y_s) |\det \mathcal{J}| dy_1 dy_2 \dots dy_s, \quad (1.76)$$

onde \mathcal{J} é a matriz jacobiana da transformação $(y_1, y_2, \dots, y_s) \mapsto (x_1, x_2, \dots, x_s)$, cujos elementos são dados por $\mathcal{J}_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial y_j}$.

Uma tentativa ingênua de adaptar este método à integração funcional consiste, essencialmente, em encontrar um análogo à matriz jacobiana. Se temos uma integral funcional expressa em termos das coordenadas $q^{(1)}(t), q^{(2)}(t), \dots, q^{(s)}(t)$ e queremos expressá-la em termos de novas coordenadas $r^{(1)}(t), r^{(2)}(t), \dots, r^{(s)}(t)$, devemos esperar que o análogo à matriz jacobiana, que deve aparecer em (1.47), seja a seguinte matriz:

$$\mathcal{J}^* := \begin{pmatrix} \mathcal{J}_1^1 & \mathcal{J}_1^2 & \dots & \mathcal{J}_1^{N-1} \\ \mathcal{J}_2^1 & \mathcal{J}_2^2 & \dots & \mathcal{J}_2^{N-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathcal{J}_{N-1}^1 & \mathcal{J}_{N-1}^2 & \dots & \mathcal{J}_{N-1}^{N-1} \end{pmatrix}, \quad (1.77)$$

onde os blocos \mathcal{J}_n^m são definidos por

$$(\mathcal{J}_n^m)_{ij} := \frac{\partial q_m^{(i)}}{\partial r_n^{(j)}} \quad (1.78)$$

e os índices subscritos referem-se à discretização temporal das coordenadas, rotuladas pelos índices sobrescritos. É razoável supor aqui que as variáveis discretizadas $q_m^{(i)}$ sejam independentes de $r_n^{(j)}$ se forem tomadas em instantes diferentes, ou seja, se $m \neq n$. Admitindo esta hipótese, as matrizes \mathcal{J}_n^m são nulas para $m \neq n$ e \mathcal{J}^* assume uma forma diagonal por blocos (para eliminar redundâncias, os índices sobrescritos dos blocos \mathcal{J}_n^m serão omitidos no que segue):

$$\mathcal{J}^* = \begin{pmatrix} \mathcal{J}_1 & \mathbf{0}_{s \times s} & \cdots & \mathbf{0}_{s \times s} \\ \mathbf{0}_{s \times s} & \mathcal{J}_2 & \cdots & \mathbf{0}_{s \times s} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0}_{s \times s} & \mathbf{0}_{s \times s} & \cdots & \mathcal{J}_{N-1} \end{pmatrix} \iff |\det \mathcal{J}^*| = \prod_{n=1}^{N-1} |\det \mathcal{J}_n|. \quad (1.79)$$

Seguindo essa linha de raciocínio, temos que o elemento de integração em (1.47) deve transformar-se, sob a mudança

$$\left(q^{(1)}(t), q^{(2)}(t), \dots, q^{(s)}(t) \right) \mapsto \left(r^{(1)}(t), r^{(2)}(t), \dots, r^{(s)}(t) \right),$$

como

$$\prod_{n=1}^{N-1} \prod_{\alpha=1}^s dq_n^{(\alpha)} \mapsto \prod_{n=1}^{N-1} |\det \mathcal{J}_n| \prod_{\alpha=1}^s dr_n^{(\alpha)}. \quad (1.80)$$

No entanto, como dissemos no início, esta abordagem é ingênua, pois não leva em conta o integrando, e fracassa para a maioria das transformações de coordenadas usuais, como a transformação de coordenadas retangulares para esféricas — para se ter uma idéia da dificuldade em se implementar transformações de coordenadas em integrais funcionais, indicamos, como exemplo, a referência [18]. Não obstante, ela funciona para um caso muito especial, a saber: quando a transformação $\{q^{(\alpha)}\} \mapsto \{r^{(\alpha)}\}$ é **linear**. Neste caso, as matrizes \mathcal{J}_n são todas iguais e independentes de n . Em particular, se a transformação de coordenadas tiver determinante 1 (como é o caso das transformações ortogonais), teremos

$$\prod_{n=1}^{N-1} \prod_{\alpha=1}^s dq_n^{(\alpha)} \mapsto \prod_{n=1}^{N-1} \prod_{\alpha=1}^s dr_n^{(\alpha)}. \quad (1.81)$$

Podemos dizer então que a medida de integração funcional sobre o espaço de configurações é *invariante* sob transformações lineares de coordenadas cujo jacobiano vale 1. Este resultado,

apesar de ser muito restritivo, nos será de muita valia quando calcularmos o propagador do sistema de osciladores harmônicos acoplados.

1.4 Integração funcional e o princípio de Hamilton

Como já vimos, na Mecânica Clássica, apenas uma trajetória ligando os pontos (t_I, q_I) e (t_F, q_F) é relevante: a que extremiza a ação. Por outro lado, o formalismo integral funcional da Mecânica Quântica traz consigo a idéia de que **todas** as possíveis trajetórias ligando os referidos pontos contribuem para a amplitude de transição quântica $\langle q_I, t_I | q_F, t_F \rangle$ — e contribuem com **igual peso**. O que diferencia a contribuição de uma possível trajetória para outra é a **fase**, dada pela ação calculada para aquela trajetória.

Então, como podemos obter o resultado clássico a partir deste formalismo? Aproximamo-nos do limite clássico quando a ação $S \gg \hbar$. Neste caso, uma pequena variação (pequena no sentido clássico) da ação ao se mudar de uma possível trajetória para outra implicará uma grande variação na fase da contribuição daquelas trajetórias para a amplitude de transição quântica. Assim, no limite clássico, as contribuições de todas as trajetórias para as quais a ação difere de seu valor extremo tendem a um cancelamento mútuo, de modo que apenas as trajetórias vizinhas daquela que extremiza a ação contribuirão significativamente. Este resultado é o mais próximo que podemos chegar, com este formalismo quântico, do princípio de Hamilton.

Há também uma formulação análoga à do princípio de Hamilton baseada no formalismo de operadores para sistemas quânticos. Esta, devida a Schwinger, pode ser encontrada em [19] ou [20].

2 Alguns exemplos de aplicação das integrais funcionais

Neste capítulo, aplicaremos o formalismo integral funcional para calcular o propagador em alguns exemplos conhecidos: a partícula livre, o oscilador harmônico simples, o oscilador harmônico forçado e o sistema de osciladores harmônicos acoplados. Introduziremos um método para o cálculo das integrais funcionais que se mostra muito útil para estes exemplos, em que o potencial é linear ou quadrático nas coordenadas.

Daqui para diante, quando necessário, fica subentendido que as condições de contorno adotadas são $q(t_I) = q_I$ e $q(t_F) = q_F$, onde tomaremos, com frequência, $t_I = 0$ e $t_F = T$.

2.1 Alguns resultados úteis

Antes de tratarmos dos problemas em si, demonstraremos aqui algumas proposições que nos serão úteis.

Teorema 2.1. *Seja um sistema unidimensional descrito por uma lagrangeana $\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q)$. Para uma possível trajetória $q(t)$, seja $Q(t) = q(t) - q_{cl}(t)$, onde $q_{cl}(t)$ é a trajetória clássica do sistema, ou seja, aquela que satisfaz ao princípio de Hamilton. Seja ainda $\tilde{V}(q_{cl}, Q)$ uma função definida como:*

$$\tilde{V}(q_{cl}, Q) = V(q) - V(q_{cl}) - Q \left. \frac{\partial V}{\partial q} \right|_{q=q_{cl}}. \quad (2.1)$$

A ação calculada para a trajetória $q(t)$ pode ser escrita como

$$S = S_{cl} + \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{Q}^2 - \tilde{V}(q_{cl}, Q) \right] dt, \quad (2.2)$$

onde S_{cl} é a ação calculada para a trajetória clássica $q_{cl}(t)$.

Demonstração. Por definição, temos $Q(t_I) = Q(t_F) = 0$. A ação calculada para $q(t)$, escrita em

função de q_{cl} e Q , fica:

$$S = \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{q}_{cl}^2 + \frac{m}{2} \dot{Q}^2 + m \dot{q}_{cl} \dot{Q} - V(q_{cl} + Q) \right] dt. \quad (2.3)$$

Introduzindo a identidade $\dot{q}_{cl} \dot{Q} = \frac{d}{dt} (\dot{q}_{cl} Q) - \ddot{q}_{cl} Q$ em (2.3), temos:

$$S = \underbrace{m \dot{q}_{cl} Q \Big|_{t_I}^{t_F}}_0 + \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{q}_{cl}^2 + \frac{m}{2} \dot{Q}^2 - m \ddot{q}_{cl} Q - V(q_{cl} + Q) \right] dt. \quad (2.4)$$

Introduzindo (2.1) em (2.4), temos:

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{q}_{cl}^2 - V(q_{cl}) + \frac{m}{2} \dot{Q}^2 - \tilde{V}(q_{cl}, Q) - Q \underbrace{\left(m \ddot{q}_{cl} + \frac{\partial V}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}} \right)}_0 \right] dt = \\ &= \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{q}_{cl}^2 - V(q_{cl}) \right] dt + \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{Q}^2 - \tilde{V}(q_{cl}, Q) \right] dt = \\ &= S_{cl} + \int_{t_I}^{t_F} \left[\frac{m}{2} \dot{Q}^2 - \tilde{V}(q_{cl}, Q) \right] dt. \quad \square \end{aligned}$$

Corolário 2.1. Nas condições do *teorema 2.1*, se a função energia potencial é da forma $V(q) = V_0(q) + j(t) q$, então, fazendo a expansão $q(t) = q_{cl}(t) + Q(t)$, a ação calculada para $q(t)$ pode ser escrita como (2.2), onde

$$\tilde{V}(q_{cl}, Q) = V_0(q) - V_0(q_{cl}) - Q \frac{\partial V_0}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}}. \quad (2.5)$$

Demonstração. Basta provar que, neste caso, a função $\tilde{V}(q_{cl}, Q)$, definida em (2.1), reduz-se a (2.5). Com efeito:

$$\begin{aligned} \tilde{V}(q_{cl}, Q) &= V(q) - V(q_{cl}) - Q \frac{\partial V}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}} = \\ &= V_0(q) + j(t) q - V_0(q_{cl}) - j(t) q_{cl} - Q \left[\frac{\partial V_0}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}} + j(t) \right] = \\ &= V_0(q) - V_0(q_{cl}) - Q \frac{\partial V_0}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}} - j(t) \underbrace{[q - q_{cl} - Q]}_0 = \\ &= V_0(q) - V_0(q_{cl}) - Q \frac{\partial V_0}{\partial q} \Big|_{q=q_{cl}}. \quad \square \end{aligned}$$

O *corolário 2.1* nos diz algo interessante: segundo a descrição de Dirac-Feynman, a influência de uma força externa $j(t)$ na amplitude de probabilidade de um sistema quântico manifesta-se apenas na ação calculada para a sua trajetória clássica.

O **teorema 2.1** é particularmente útil para o cálculo de propagadores apenas em alguns casos, a saber: quando o potencial $V(q)$ for constante, linear ou quadrático em q . Isto se deve ao seguinte resultado:

Teorema 2.2. *No contexto do **teorema 2.1**, para um potencial do tipo*

$$V(q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) q^n, \quad (2.6)$$

a função $\tilde{V}(q_{cl}, Q)$ independe de q_{cl} se, e somente se, $c_n(t) \equiv 0 \quad \forall n \geq 3$.

Demonstração. Procedamos ao cálculo de $\tilde{V}(q_{cl}, Q)$ neste caso:

$$\begin{aligned} \tilde{V}(q_{cl}, Q) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) (q_{cl} + Q)^n - \sum_{m=0}^{\infty} c_m(t) q_{cl}^m - \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell c_{\ell}(t) q_{cl}^{\ell-1} Q = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} q_{cl}^{n-k} Q^k - \sum_{m=0}^{\infty} c_m(t) q_{cl}^m - \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell c_{\ell}(t) q_{cl}^{\ell-1} Q = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \left[\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} q_{cl}^{n-k} Q^k - q_{cl}^n - n q_{cl}^{n-1} Q \right] = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \left[\sum_{k=2}^n \binom{n}{k} q_{cl}^{n-k} Q^k \right]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Vemos em (2.7) que, para os termos de ordem $n \geq 3$, a dependência de q_{cl} persiste. Logo, para que $\tilde{V}(q_{cl}, Q)$ não dependa de q_{cl} , devemos impor $c_n(t) \equiv 0 \quad \forall n \geq 3$. \square

Neste capítulo, trataremos apenas de exemplos que satisfaçam ao **teorema 2.2**, os quais envolvem formas quadráticas. Para o cálculo de integrais funcionais desta classe, os dois a seguir mostram-se bastante úteis.

Lema 2.1. *Sejam \mathcal{Q} uma matriz $n \times 1$, com entradas Q_1, Q_2, \dots, Q_n , e \mathcal{A} , uma matriz simétrica $n \times n$ (ambas matrizes reais). Então, para qualquer parâmetro complexo α , vale*

$$\int \exp(-\alpha \mathcal{Q}^T \mathcal{A} \mathcal{Q}) \prod_{i=1}^n dQ_i = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{A}}}. \quad (2.8)$$

Demonstração. Como \mathcal{A} é simétrica, então, de acordo com um conhecido da Álgebra Linear, existe uma matriz ortogonal \mathcal{J} que diagonaliza \mathcal{A} . Assim, fazendo uma mudança de variáveis $\mathcal{Q} \rightarrow \bar{\mathcal{Q}}$ em que \mathcal{J} é a matriz jacobiana, $\mathcal{Q} = \mathcal{J} \bar{\mathcal{Q}}$, obtemos:

$$\int \exp(-\alpha \mathcal{Q}^T \mathcal{A} \mathcal{Q}) \prod_{i=1}^n dQ_i = \int \exp\left(-\alpha \sum_{j=1}^n \lambda_j \bar{Q}_j^2\right) \underbrace{|\det \mathcal{J}|}_1 \prod_{i=1}^n d\bar{Q}_i =$$

$$= \prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha \lambda_i \bar{Q}_i^2) d\bar{Q}_i,$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ são os autovalores (não-nulos) de \mathcal{A} . Cada uma das integrais acima nos dá:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha \lambda_j \bar{Q}_j^2) d\bar{Q}_j = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha \lambda_j}}.$$

Substituindo este resultado no produtório acima, temos:

$$\int \exp(-\alpha \mathcal{Q}^T \mathcal{A} \mathcal{Q}) \prod_{i=1}^n dQ_i = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{n/2} \left(\prod_{j=1}^n \lambda_j\right)^{-1/2} = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{n/2} \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{A}}}. \quad \square$$

Em particular, para os problemas tratados neste capítulo, a matriz \mathcal{A} assume a forma

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & -d & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -d & 1 & -d & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -d & 1 & -d & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -d & 1 & -d & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -d & 1 & -d \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -d & 1 \end{pmatrix}_{n \times n}, \quad d \in \mathbb{R} \quad (2.9)$$

Para esta classe de matrizes, mostraremos o seguinte resultado:

Lema 2.2. *O determinante de uma matriz \mathcal{A}_n da forma (2.9) vale¹*

$$\det \mathcal{A}_n = \begin{cases} \frac{n+1}{2^n}, & \text{se } d = \frac{1}{2} \\ \frac{\lambda_+^{n+1} - \lambda_-^{n+1}}{\lambda_+ - \lambda_-}, & \text{se } d \neq \frac{1}{2} \end{cases}, \quad \text{onde } \lambda_{\pm} := \frac{1 \pm \sqrt{1-4d^2}}{2}. \quad (2.10)$$

Demonstração. Desenvolvendo o determinante de \mathcal{A}_n segundo o método de Laplace, encontraremos a seguinte relação de recorrência:

$$\det \mathcal{A}_1 = 1; \quad (2.11)$$

$$\det \mathcal{A}_2 = 1 - d^2; \quad (2.12)$$

$$\det \mathcal{A}_n = \det \mathcal{A}_{n-1} - d^2 \det \mathcal{A}_{n-2} \quad \forall n > 2. \quad (2.13)$$

¹Verifica-se facilmente, com o auxílio do de L'Hospital, que

$$\lim_{d \rightarrow 1/2} \frac{\lambda_+^{n+1} - \lambda_-^{n+1}}{\lambda_+ - \lambda_-} = \frac{n+1}{2^n}.$$

Para $d = 1/2$, o valor de $\det \mathcal{A}_n$ pode ser facilmente verificado por indução a partir de (2.13). O caso $d \neq 1/2$, por outro lado, demanda um pouco mais de esforço.

Primeiramente, notemos que as relações (2.11), (2.12) e (2.13) podem ser unificadas na seguinte equação matricial:

$$\begin{pmatrix} \det \mathcal{A}_n \\ \det \mathcal{A}_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -d^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \det \mathcal{A}_{n-1} \\ \det \mathcal{A}_{n-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -d^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \forall n > 1 \quad (2.14)$$

Para $d \neq 1/2$, a matriz

$$\mathcal{B} := \begin{pmatrix} 1 & -d^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

é diagonalizável. Sua forma diagonal é

$$\mathcal{D} := \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \iff \mathcal{D}^{n-1} = \begin{pmatrix} \lambda_+^{n-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{n-1} \end{pmatrix}$$

e uma possível matriz \mathcal{P} que a diagonaliza é

$$\mathcal{P} := \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \iff \mathcal{P}^{-1} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_- \\ -1 & \lambda_+ \end{pmatrix}.$$

Podemos agora calcular \mathcal{B}^{n-1} :

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{n-1} &= \mathcal{P} \mathcal{D}^{n-1} \mathcal{P}^{-1} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+ & \lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^{n-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda_- \\ -1 & \lambda_+ \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^n - \lambda_-^n & -\lambda_+^n \lambda_- + \lambda_+ \lambda_-^n \\ \lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} & -\lambda_+^{n-1} \lambda_- + \lambda_+ \lambda_-^{n-1} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^n - \lambda_-^n & -\lambda_+ \lambda_- \left[\lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} \right] \\ \lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} & -\lambda_+ \lambda_- \left[\lambda_+^{n-2} - \lambda_-^{n-2} \right] \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^n - \lambda_-^n & -d^2 \left[\lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} \right] \\ \lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} & -d^2 \left[\lambda_+^{n-2} - \lambda_-^{n-2} \right] \end{pmatrix} \quad (2.15) \end{aligned}$$

Substituindo (2.15) em (2.14) e notando que $\lambda_{\pm} - d^2 = \lambda_{\pm}^2$, temos:

$$\begin{pmatrix} \det \mathcal{A}_n \\ \det \mathcal{A}_{n-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^n - \lambda_-^n & -d^2 \left[\lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} \right] \\ \lambda_+^{n-1} - \lambda_-^{n-1} & -d^2 \left[\lambda_+^{n-2} - \lambda_-^{n-2} \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \left(\lambda_+^{n-1} [\lambda_+ - d^2] - \lambda_-^{n-1} [\lambda_- - d^2] \right) = \\
&= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^{n+1} - \lambda_-^{n+1} \\ \lambda_+^n - \lambda_-^n \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

o que nos remete imediatamente à segunda parte de (2.10). \square

2.2 A partícula livre

A lagrangeana para a partícula livre é dada por

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{q}^2. \quad (2.16)$$

O propagador, dado por (1.50), fica

$$K(q_F, T | q_I, 0) = \int_{q(0)=q_I}^{q(T)=q_F} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} \dot{q}^2 dt\right) \mathcal{D}[q(t)]. \quad (2.17)$$

Pelo teorema 2.2, fazendo a expansão $q(t) = q_{cl}(t) + Q(t)$, podemos escrever o propagador como²

$$K(q_F, T | q_I, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} \dot{Q}^2 dt\right) \mathcal{D}[Q(t)]. \quad (2.18)$$

A trajetória clássica da partícula é dada por:

$$\ddot{q}_{cl} = 0 \iff q_{cl}(t) = \frac{q_F - q_I}{T} t + q_I. \quad (2.19)$$

A ação S_{cl} calculada para a trajetória clássica (2.19) fica:

$$\begin{aligned}
S_{cl} &= \int_0^T \frac{m}{2} \left(\frac{q_F - q_I}{T} \right)^2 dt = \\
&= \frac{m}{2} \left(\frac{q_F - q_I}{T} \right)^2 T = \\
&= \frac{m}{2T} (q_F - q_I)^2.
\end{aligned} \quad (2.20)$$

Para calcularmos a integral funcional em (2.18), dividamos o intervalo de tempo $[0, T]$ em

²Nota-se que, com a mudança de “variável” $q(t) = q_{cl}(t) + Q(t)$, a medida de integração funcional fica $\mathcal{D}[q(t)] = \mathcal{D}[Q(t)]$.

N partes iguais:

$$t_n = n \epsilon, \quad \epsilon = \frac{T}{N}, \quad Q_n = Q(t_n)$$

$$Q_0 = Q_N = 0$$

A integral funcional fica:

$$\begin{aligned} \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} \dot{Q}^2 dt\right) \mathcal{D}[Q(t)] &= \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{N/2} \int \exp\left(\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{n=0}^{N-1} (Q_{n+1} - Q_n)^2\right) \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{N/2} \int e^{\frac{im}{\hbar\epsilon} [Q_1^2 - Q_1 Q_2 + Q_2^2 - Q_2 Q_3 + \dots + Q_{N-2}^2 - Q_{N-2} Q_{N-1} + Q_{N-1}^2]} \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k. \end{aligned} \quad (2.21)$$

A expressão entre colchetes em (2.21) pode ser colocada na forma matricial $Q^T \mathcal{A} Q$, onde \mathcal{A}_{N-1} é da forma (2.9) com $d = 1/2$. A integral funcional pode então ser facilmente calculada com o auxílio dos lemas demonstrados anteriormente:

$$\begin{aligned} \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} \dot{Q}^2 dt\right) \mathcal{D}[Q(t)] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon}\right)^{N/2} \int \exp\left(\frac{im}{\hbar\epsilon} Q^T \mathcal{A} Q\right) \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k = \\ \text{pelo lema 2.1} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{N/2} \left(\frac{i\pi\hbar\epsilon}{m}\right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{A}_{N-1}}} = \\ \text{pelo lema 2.2} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}} 2^{\frac{1-N}{2}} \sqrt{\frac{2^{N-1}}{N}} = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar N \epsilon}} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar T}}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Substituindo (2.20) e (2.22) em (2.18), obtemos finalmente:

$$K(q_F, T | q_I, 0) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar T}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar T} (q_F - q_I)^2\right), \quad (2.23)$$

que é precisamente o resultado conhecido para o propagador da partícula livre, que pode ser obtido muito mais facilmente a partir do formalismo de Schrödinger.

2.3 O oscilador harmônico simples

2.3.1 Oscilador livre

Começamos pela lagrangeana para o oscilador harmônico, dada por

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2). \quad (2.24)$$

Fazendo a expansão $q(t) = q_{cl}(t) + Q(t)$, temos, pelo [teorema 2.2](#),

$$K(q_F, T | q_I, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} [\dot{Q}^2 - \omega^2 Q^2]\right) \mathcal{D}[Q(t)]. \quad (2.25)$$

Para calcular S_{cl} , precisamos encontrar a equação da trajetória clássica $q_{cl}(t)$. Resolvendo a equação do movimento, encontramos:

$$\ddot{q}_{cl} + \omega^2 q_{cl} = 0 \iff q_{cl}(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \quad (2.26)$$

Apliquemos as condições de contorno a [\(2.26\)](#):

$$q_{cl}(0) = q_I \iff A = q_I$$

$$q_{cl}(T) = q_F \iff q_I \cos(\omega T) + B \sin(\omega T) = q_F \iff B = \frac{q_F}{\sin(\omega T)} - \frac{q_I \cos(\omega T)}{\sin(\omega T)}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} q_{cl}(t) &= \frac{1}{\sin(\omega T)} \{q_I \sin[\omega (T-t)] + q_F \sin(\omega t)\} \implies \\ \implies \dot{q}_{cl}(t) &= \frac{\omega}{\sin(\omega T)} \{q_I \cos[\omega (T-t)] + q_F \cos(\omega t)\}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Calculemos a ação S_{cl} para a trajetória dada por [\(2.27\)](#):

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \frac{m \omega^2}{2 \sin^2(\omega T)} \int_0^T \left\{ q_I^2 \cos[2 \omega (T-t)] + q_F^2 \cos(2 \omega t) - 2 q_I q_F \cos[\omega (T-2t)] \right\} dt = \\ &= \frac{m \omega^2}{2 \sin^2(\omega T)} \left\{ -q_I^2 \frac{\sin[2 \omega (T-t)]}{2 \omega} + q_F^2 \frac{\sin(2 \omega T)}{2 \omega} + 2 q_I q_F \frac{\sin[\omega (T-2t)]}{2 \omega} \right\}_0^T = \\ &= \frac{m \omega}{4 \sin^2(\omega T)} \left[q_I^2 \sin(2 \omega T) + q_F^2 \sin(2 \omega T) - 4 q_I q_F \sin(\omega T) \right] = \\ &= \frac{m \omega}{2 \sin(\omega T)} \left[(q_I^2 + q_F^2) \cos(\omega T) - 2 q_I q_F \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Resta-nos calcular a integral funcional em [\(2.25\)](#). Dividindo o intervalo de tempo em N

partes iguais, do mesmo modo e com a mesma notação do problema anterior, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
& \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} [\dot{Q}^2 - \omega^2 Q^2]\right) \mathcal{D}[Q(t)] = \\
& = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{(Q_{n+1} - Q_n)^2}{\epsilon} - \epsilon \omega^2 Q_n^2\right]\right) \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k = \\
& = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} \sum_{n=0}^{N-1} \left[Q_{n+1}^2 - 2 Q_{n+1} Q_n + (1 - \omega^2 \epsilon^2) Q_n^2\right]\right) \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k = \\
& = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon}\right)^{N/2} e^{\frac{i m}{2 \hbar \epsilon} (2 - \omega^2 \epsilon^2) [Q_1^2 - \frac{2 Q_1 Q_2}{2 - \omega^2 \epsilon^2} + Q_2^2 - \frac{2 Q_2 Q_3}{2 - \omega^2 \epsilon^2} + \dots + Q_{N-1}^2]} \prod_{k=1}^{N-1} dQ_k. \quad (2.29)
\end{aligned}$$

A expressão entre colchetes na última passagem de (2.29) pode ser colocada na forma matricial $Q^T \mathcal{A} Q$, onde \mathcal{A} é da forma (2.9) com $d = 1/(2 - \epsilon^2 \omega^2)$. De acordo com o lema 2.1, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
& \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} [\dot{Q}^2 - \omega^2 Q^2]\right) \mathcal{D}[Q(t)] = \\
& = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon}\right)^{N/2} \left[\frac{2 i \pi \hbar \epsilon}{m (2 - \epsilon^2 \omega^2)}\right]^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\det \mathcal{A}_{N-1}}} = \\
& = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon \det \mathcal{A}_{N-1}}} (2 - \epsilon^2 \omega^2)^{\frac{1-N}{2}}, \quad (2.30)
\end{aligned}$$

onde, de acordo com o lema 2.2, temos (lembrando que, neste problema, $d > 1/2$):

$$\det \mathcal{A}_{N-1} = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad \lambda_{\pm} = \frac{1 \pm i \sqrt{4d^2 - 1}}{2} \quad (2.31)$$

Expandindo λ_{\pm} até primeira ordem em torno de $\epsilon = 0$, obtemos³:

$$\begin{aligned}
\sqrt{4d^2 - 1} &= \omega \epsilon + \frac{3}{8} \omega^3 \epsilon^3 + \frac{23}{128} \omega^5 \epsilon^5 + \frac{91}{1024} \omega^7 \epsilon^7 + \mathcal{O}(\epsilon^9) \implies \\
\implies \lambda_{\pm} &= \frac{1 \pm i \omega \epsilon}{2} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \approx \frac{1}{2} \exp(\pm i \omega \epsilon). \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Substituindo (2.32) em (2.31), vem:

$$\det \mathcal{A}_{N-1} = \frac{1}{2^N} \frac{\exp(i \omega N \epsilon) - \exp(-i \omega N \epsilon)}{i \omega \epsilon} =$$

³Chama a atenção o fato de a expansão de $\sqrt{4d^2 - 1}$ em torno de $\epsilon = 0$ ser ímpar, embora a função, ela mesma, seja par. Ocorre que a função em questão não é diferenciável em $\epsilon = 0$ e que, nessa vizinhança, comporta-se como $|\omega \epsilon|$.

$$= \frac{1}{2^{N-1}} \frac{\text{sen}(\omega T)}{\omega \epsilon}. \quad (2.33)$$

Substituindo (2.33) em (2.30), vem:

$$\begin{aligned} \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} [\dot{Q}^2 - \omega^2 Q^2]\right) \mathcal{D}[Q(t)] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2 i \pi \hbar \epsilon} \frac{2^{N-1} \omega \epsilon}{\text{sen}(\omega T)}} (2 - \omega^2 \epsilon^2)^{\frac{1-N}{2}} = \\ &= \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \pi \hbar \text{sen}(\omega T)}} \underbrace{\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\omega^2 \epsilon^2}{2}\right)^{\frac{1-N}{2}}}_1 = \\ &= \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \pi \hbar \text{sen}(\omega T)}}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Substituindo (2.28) e (2.34) em (2.25), obtemos finalmente:

$$K(q_F, T | q_I, 0) = \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \pi \hbar \text{sen}(\omega T)}} \exp\left(\frac{i m \omega}{2 \hbar \text{sen}(\omega T)} \left[(q_I^2 + q_F^2) \cos(\omega T) - 2 q_I q_F \right]\right). \quad (2.35)$$

Notemos que o propagador (2.23) para a partícula livre é obtido de (2.35) no limite para $\omega \rightarrow 0$, como era esperado.

2.3.2 Oscilador sujeito a uma força externa dependente do tempo

Para um oscilador harmônico simples sujeito a uma força externa $j(t)$, a lagrangeana é

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2) + j q. \quad (2.36)$$

Fazendo a expansão $q(t) = q_{cl}(t) + Q(t)$, temos, pelo [teorema 2.2](#),

$$\begin{aligned} K(q_F, T | q_I, 0) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) \int_{Q(0)=0}^{Q(T)=0} \exp\left(\frac{i m}{2 \hbar} [\dot{Q}^2 - \omega^2 Q^2]\right) \mathcal{D}[Q(t)] = \\ \text{por (2.34)} \quad &= \sqrt{\frac{m \omega}{2 i \pi \hbar \text{sen}(\omega T)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Mais uma vez, para calcular S_{cl} , precisamos encontrar a solução $q_{cl}(t)$ da equação do movimento

$$m \ddot{q}_{cl} + m \omega^2 q_{cl} = j(t). \quad (2.38)$$

A equação (2.38) e as condições de contorno não-homogêneas $q_{cl}(0) = q_I$ e $q_{cl}(T) = q_F$ constituem um problema de Sturm. Para resolvê-lo completamente, devemos encontrar, pri-

meiramente, a solução $q_S(t)$ do problema de Sturm definido por (2.38) e pelas condições de contorno homogêneas $q_S(0) = q_S(T) = 0$.

Para determinar $q_S(t)$, devemos tomar duas soluções linearmente independentes $u_1(t)$ e $u_2(t)$ da equação homogênea $\ddot{u} + \omega^2 u = 0$, satisfazendo às condições de contorno homogêneas $u_1(0) = 0$ e $u_2(T) = 0$. Por exemplo, podemos tomar

$$u_1(t) = \text{sen}(\omega t) \quad (2.39)$$

$$u_2(t) = \text{sen}[\omega (T - t)] \quad (2.40)$$

e, com elas, construir a função de Green $G(t, t')$ dada por

$$G(t, t') = \begin{cases} \frac{u_1(t) u_2(t')}{m W(t)}, & \text{para } 0 \leq t \leq t' \leq T \\ \frac{u_1(t') u_2(t)}{m W(t)}, & \text{para } 0 \leq t' \leq t \leq T \end{cases}, \quad (2.41)$$

em que $W(t)$ é o wronskiano definido por $W(t) = u_1(t) u_2'(t) - u_1'(t) u_2(t)$. Para $u_1(t) = \text{sen}(\omega t)$ e $u_2(t) = \text{sen}[\omega (T - t)]$, temos:

$$\begin{aligned} W(t) &= \text{sen}(\omega t) (-\omega) \cos[\omega (T - t)] - \omega \cos(\omega t) \text{sen}[\omega (T - t)] = \\ &= -\omega \{ \text{sen}(\omega t) \cos[\omega (T - t)] + \cos(\omega t) \text{sen}[\omega (T - t)] \} = \\ &= -\omega \text{sen}[\omega (t + T - t)] = \\ &= -\omega \text{sen}(\omega T). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Substituindo (2.39), (2.40) e (2.42) em (2.41), obtemos:

$$G(t, t') = \begin{cases} -\frac{\text{sen}(\omega t) \text{sen}[\omega (T - t')]}{m \omega \text{sen}(\omega T)}, & \text{para } 0 \leq t \leq t' \leq T \\ -\frac{\text{sen}(\omega t') \text{sen}[\omega (T - t)]}{m \omega \text{sen}(\omega T)}, & \text{para } 0 \leq t' \leq t \leq T \end{cases}, \quad (2.43)$$

Conhecendo-se a função de Green do problema de Sturm em questão, o de Green atesta que a solução $q_S(t)$ que procuramos é dada por

$$q_S(t) = \int_0^T G(t, t') j(t') dt' \quad (2.44)$$

Uma vez que determinamos a solução do problema de Sturm com condições de contorno homogêneas, para encontrar a solução completa do nosso problema, poderíamos partir de uma função arbitrária $h(t)$, duas vezes diferenciável, que satisfaça às condições de contorno não-homogêneas $h(0) = q_I$ e $h(T) = q_F$. Para simplificar, vamos exigir, além disso, que $h(t)$ seja

solução da equação homogênea $\ddot{h} + \omega^2 h = 0$ — que, a propósito, já determinamos quando resolvemos o oscilador livre: a função dada por (2.27), que denotaremos aqui por $q_H(t)$. Assim, a solução completa $q_{cl}(t)$ do nosso problema é

$$q_{cl}(t) = q_H(t) + q_S(t) = \frac{1}{\text{sen}(\omega T)} [q_I \text{sen}[\omega (T - t)] + q_F \text{sen}(\omega t)] + \int_0^T G(t, t') j(t') dt'. \quad (2.45)$$

Calculemos a ação S_{cl} para esta trajetória:

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_0^T \left\{ \frac{m}{2} [(\dot{q}_H^2 + \dot{q}_S^2 + 2 \dot{q}_H \dot{q}_S) - \omega^2 (q_H^2 + q_S^2 + 2 q_H q_S)] + j(t) (q_H + q_S) \right\} dt = \\ &= \underbrace{\frac{m}{2} \dot{q}_S q_S \Big|_0^T}_0 + \int_0^T \left\{ \frac{m}{2} (\dot{q}_H^2 - \omega^2 q_H^2) - m q_S \underbrace{(\ddot{q}_H + \omega^2 q_H)}_0 + \frac{m}{2} (\dot{q}_S^2 - \omega^2 q_S^2) + j(t) (q_H + q_S) \right\} dt = \\ &= \underbrace{\frac{m}{2} \dot{q}_S q_S \Big|_0^T}_0 + \int_0^T \left\{ \frac{m}{2} (\dot{q}_H^2 - \omega^2 q_H^2) - \frac{q_S}{2} \underbrace{[m \ddot{q}_S + m \omega^2 q_S - j(t)]}_0 + j(t) (q_H + \frac{q_S}{2}) \right\} dt = \\ &= \frac{m \omega}{2 \text{sen}(\omega T)} [(q_I^2 + q_F^2) \cos(\omega T) - 2 q_I q_F] + \int_0^T q_H(t) j(t) dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^T j(t) G(t, t') j(t') dt' dt. \quad (2.46) \end{aligned}$$

Substituindo (2.46) em (2.37), obtemos finalmente:

$$\begin{aligned} K(q_F, T | q_I, 0) &= K_0(q_F, T | q_I, 0) \\ &\quad \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^T q_H(t) j(t) dt\right) \exp\left(\frac{i}{2\hbar} \int_0^T \int_0^T j(t) G(t, t') j(t') dt' dt\right), \quad (2.47) \end{aligned}$$

onde $K_0(q_F, T | q_I, 0)$ é dado por (2.35).

2.4 O conjunto não-degenerado de osciladores harmônicos acoplados

Como exemplo de sistema com vários graus de liberdade, consideremos um conjunto não-degenerado de s osciladores harmônicos acoplados. No caso geral, a lagrangiana de tal sistema é dada pela seguinte forma quadrática:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathcal{X}}{dt} \right)^T \mathcal{M} \frac{d\mathcal{X}}{dt} - \frac{1}{2} \mathcal{X}^T \mathcal{K} \mathcal{X}, \quad (2.48)$$

em que o fator $1/2$ foi explicitado por conveniência. $\mathcal{X}_{s \times 1}$ é a matriz das coordenadas de cada oscilador — os deslocamentos em relação às respectivas posições de equilíbrio. $\mathcal{M}_{s \times s}$ e $\mathcal{K}_{s \times s}$ são matrizes simétricas e positivas definidas (tomemos, por simplicidade, \mathcal{M} diagonal; neste caso, suas entradas não-nulas, que denotaremos m_1, m_2, \dots, m_s , são as massas dos osciladores). Como \mathcal{K} é simétrica, o sistema pode ser desacoplado por meio de uma transformação ortogonal de coordenadas $\mathcal{X} = \mathcal{J}\mathcal{Q}$, onde $\mathcal{J}_{s \times s}$ é a matriz ortogonal que diagonaliza \mathcal{K} . As entradas da matriz $\mathcal{Q}_{s \times 1}$, que denotaremos Q_1, Q_2, \dots, Q_s , são chamadas *coordenadas normais* do sistema ($Q_\alpha(t) = A_\alpha e^{i\Omega_\alpha t}$). As entradas não-nulas da matriz diagonal $\mathcal{J}^\top \mathcal{K} \mathcal{J}$ serão denotadas $m_\alpha \Omega_\alpha^2/2$, $\alpha = 1, 2, \dots, s$, cujos termos Ω_α são as frequências dos chamados *modos normais de vibração* do sistema. A lagrangeana do sistema desacoplado, expressa em termos das suas coordenadas normais, fica:

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^s \frac{m_\alpha}{2} \left(\dot{Q}_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2 Q_\alpha^2 \right). \quad (2.49)$$

Conforme mencionado anteriormente, transformações ortogonais de coordenadas são viáveis de se implementar em integrais funcionais, além de deixar invariante a medida de integração funcional. Assim, o propagador para este sistema pode ser obtido facilmente em termos das coordenadas normais, com o auxílio do resultado (2.35) na página 47:

$$\begin{aligned} K(\mathcal{X}_F, t_F | \mathcal{X}_I, t_I) &= \int_{\mathcal{X}(t_I)=\mathcal{X}_I}^{\mathcal{X}(t_F)=\mathcal{X}_F} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left[\left(\frac{d\mathcal{X}}{dt} \right)^\top \mathcal{M} \frac{d\mathcal{X}}{dt} - \mathcal{X}^\top \mathcal{K} \mathcal{X} \right] dt} \prod_{\alpha=1}^s \mathcal{D}[x_\alpha(t)] \iff \\ \iff K(Q_F, t_F | Q_I, t_I) &= \prod_{\alpha=1}^s \int_{Q(t_I)=Q_I}^{Q(t_F)=Q_F} \exp\left(\frac{i m_\alpha}{2\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left(\dot{Q}_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2 Q_\alpha^2 \right) dt \right) \mathcal{D}[Q_\alpha(t)] = \\ &= \prod_{\alpha=1}^s \sqrt{\frac{m_\alpha \Omega_\alpha}{2i\pi\hbar \sin(\Omega_\alpha T)}} \\ &\quad \times \exp\left(\frac{i m_\alpha \Omega_\alpha}{2\hbar \sin(\Omega_\alpha T)} \left[(Q_{\alpha I}^2 + Q_{\alpha F}^2) \cos(\Omega_\alpha T) - 2 Q_{\alpha I} Q_{\alpha F} \right] \right). \end{aligned} \quad (2.50)$$

A grande dificuldade em se resolver este exemplo para o caso geral é justamente o cálculo das frequências normais Ω_α . Para alguns casos particulares, no entanto, é possível obtê-las com certa facilidade. Por exemplo, consideremos uma cadeia de s osciladores harmônicos idênticos.

Neste caso, teremos $m_1 = m_2 = \dots = m_s =: m$ e

$$\mathcal{K} = m \omega^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}_{s \times s}. \quad (2.51)$$

A matriz ortogonal \mathcal{J} que diagonaliza \mathcal{K} é tal que suas entradas são dadas por

$$J_{j\alpha} = \sqrt{\frac{2}{s+1}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi j \alpha}{s+1}\right) \quad (2.52)$$

e as frequências normais são dadas por

$$\Omega_\alpha = 2 \omega \operatorname{sen}\left[\frac{\pi \alpha}{2(s+1)}\right]. \quad (2.53)$$

Obter estes resultados diretamente pela diagonalização de \mathcal{K} pode ser muito trabalhoso. Em vez disso, vamos obtê-los resolvendo as equações de movimento dos osciladores,

$$\ddot{x}_j + \omega^2 (-x_{j-1} + 2x_j - x_{j+1}) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, s \quad (2.54)$$

$$x_0 = x_{s+1} = 0, \quad (2.55)$$

introduzindo o seguinte *ansatz*:

$$x_j^{(\alpha)}(t) = \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) A_\alpha e^{i\Omega_\alpha t} \quad (2.56)$$

Substituindo (2.56) em (2.54), temos:

$$\begin{aligned} A_\alpha e^{i\omega t} \left(-\Omega_\alpha^2 \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) + \omega^2 \{-\operatorname{sen}[(j-1) \phi_\alpha] + 2 \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) - \operatorname{sen}[(j+1) \phi_\alpha]\} \right) &= 0 \iff \\ \iff \Omega_\alpha^2 &= \frac{\omega^2}{\operatorname{sen}(j \phi_\alpha)} \{2 \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) - \operatorname{sen}[(j-1) \phi_\alpha] - \operatorname{sen}[(j+1) \phi_\alpha]\} = \\ &= \frac{\omega^2}{\operatorname{sen}(j \phi_\alpha)} [2 \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) - 2 \operatorname{sen}(j \phi_\alpha) \cos \phi_\alpha] = \\ &= 2 \omega^2 (1 - \cos \phi_\alpha) = 4 \omega^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\phi_\alpha}{2}\right), \end{aligned} \quad (2.57)$$

onde o parâmetro ϕ_α é obtido pela condição (2.55):

$$\operatorname{sen}[(s+1) \phi_\alpha] = 0 \iff \phi_\alpha = \frac{\pi \alpha}{s+1} \quad \alpha = 1, 2, \dots, s. \quad (2.58)$$

A solução geral é então dada por

$$x_j(t) = \sum_{\alpha=1}^s x_j^{(\alpha)}(t) = \sum_{\alpha=1}^s \operatorname{sen}\left(\frac{\pi j \alpha}{s+1}\right) A_\alpha e^{i\Omega_\alpha t} =: \sum_{\alpha=1}^s \tilde{J}_{j\alpha} A_\alpha e^{i\Omega_\alpha t}. \quad (2.59)$$

Na expressão acima, podemos, sem perda de generalidade, introduzir um fator de normalização N de tal modo que a matriz \mathcal{J} , cujos elementos são definidos por $J_{j\alpha} = \sqrt{N} \tilde{J}_{j\alpha}$, seja ortogonal. Valendo-se da seguinte identidade⁴:

$$\sum_{\alpha=1}^s \operatorname{sen}\left(\frac{\pi j \alpha}{s+1}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi \ell \alpha}{s+1}\right) = \frac{s+1}{2} \delta_{j\ell}, \quad (2.60)$$

concluimos que $N = \frac{2}{s+1}$.

⁴cf. apêndice D, fórmula (D3b), de [21].

3 *Tópicos em CQED: os modelos de Rabi e Jaynes-Cummings*

Há 61 anos, uma pequena observação publicada por Edward Purcell¹ [22] abriria as portas para uma nova área de pesquisa em Física Quântica. Pela primeira vez, cogitou-se a hipótese de que o acoplamento entre a matéria e o vácuo poderia ter seu comportamento alterado se confinarmos o átomo numa cavidade refletora. Tal idéia foi retomada e complementada na década de 1980, com um trabalho de Daniel Kleppner [23] em que se discutem as possibilidades de se conseguir uma facilitação (*enhancement*) ou inibição (*inhibition*) da emissão espontânea de átomos confinados em cavidades refletoras com elevado fator de qualidade. A este trabalho, sucederam diversos resultados experimentais em que se observou tal fenômeno, hoje conhecido como *efeito Purcell*, tanto no domínio² de microondas como no domínio óptico.

O trabalho pioneiro de comprovação do efeito Purcell encontra-se em [24], em que se observou uma facilitação da emissão espontânea no domínio de microondas. A inibição da mesma foi observada pouco tempo depois, ainda no domínio de microondas, em trabalhos como [25, 26]. O primeiro trabalho de observação, no domínio óptico, da inibição da emissão espontânea, encontra-se em [27].

Nascia assim a *Eletrodinâmica Quântica em Cavidades*, ou CQED (do inglês *Cavity Quantum Electrodynamics*), um ramo da Óptica Quântica que tem produzido interessantes resultados até hoje. Mais detalhes sobre os trabalhos em CQED na década de 80 podem ser encontrados em [28].

¹Prêmio Nobel de Física em 1952.

²Classificaremos os experimentos como pertencentes ao domínio óptico ou de microondas conforme as frequências de radiação envolvidas (relacionadas a uma dada transição atômica, por exemplo) estejam na faixa do visível ou de radiofrequência (microondas), respectivamente.

3.1 O problema de um conjunto de cargas interagindo com um campo eletromagnético

Consideremos o problema de um conjunto de partículas carregadas interagindo com um campo eletromagnético. A lagrangeana e a correspondente hamiltoniana de tal sistema são dadas por

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} [\dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) - U(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] \quad (3.1)$$

$$\mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \quad (3.2)$$

$$\mathcal{H}_{\mathcal{L}} = \sum_{\alpha} [\mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} U(\mathbf{r}_{\alpha}, t), \quad (3.3)$$

onde cada partícula, indexada por α , têm massa m_{α} , carga q_{α} , e está localizada em \mathbf{r}_{α} . O campo é descrito pelos potenciais U e \mathbf{A} e o termo V_{Coul} é a energia potencial de interação coulombiana entre as partículas.

3.1.1 Transformações de *gauge* e representações quânticas alternativas

Uma propriedade interessante deste sistema diz respeito a como a lagrangeana (3.1) se transforma frente a uma mudança de *gauge*. Consideremos uma transformação definida por uma função χ que dependa apenas de \mathbf{r} e t ,

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \quad (3.4)$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t). \quad (3.5)$$

Aplicando a transformação definida por (3.4) e (3.5) em (3.1), teremos:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}' &= \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} [\dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}'(\mathbf{r}_{\alpha}, t) - U'(\mathbf{r}_{\alpha}, t)] = \\ &= \mathcal{L} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} \left[\frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \nabla\chi(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right] = \\ &= \mathcal{L} + \frac{d}{dt} \left[\sum_{\alpha} q_{\alpha} \chi(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Vemos em (3.6) que a nova lagrangeana, obtida pela transformação de *gauge* definida por $\chi(\mathbf{r}, t)$, difere da original por uma derivada total em relação ao tempo. Como é conhecido da Mecânica Clássica, \mathcal{L} e \mathcal{L}' são ditas *equivalentes*, no sentido de que ambas descrevem a mesma dinâmica, pois geram as mesmas equações de movimento. Os momentos canonicamente

conjugados às coordenadas \mathbf{r}_α transformam-se do seguinte modo:

$$\mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}'} = m_\alpha \dot{\mathbf{r}}_\alpha + q_\alpha \mathbf{A}'(\mathbf{r}_\alpha, t) = \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} + q_\alpha \nabla\chi(\mathbf{r}_\alpha, t). \quad (3.7)$$

Os novos momentos, portanto, diferem dos antigos. Ou seja, apesar de \mathcal{L} e \mathcal{L}' serem equivalentes, cada uma define seu próprio espaço de fases — e, conseqüentemente, sua própria representação [quântica]. Denotemos por sobrescritos (1) e (2) as representações definidas a partir de \mathcal{L} e \mathcal{L}' , respectivamente.

Segundo a descrição de Schrödinger, os operadores fundamentais que satisfazem as relações canônicas de comutação são $\mathbf{X}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha \mathbf{I}$ (posição) e $\mathbf{P}_\alpha = -i\hbar \nabla_\alpha$ (momento). Em termos destes operadores e levando em conta a relação (3.7), temos, para a representação (1),

$$\begin{cases} \mathbf{r}_\alpha^{(1)} = \mathbf{X}_\alpha \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}}^{(1)} = \mathbf{P}_\alpha \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}'}^{(1)} = \mathbf{P}_\alpha + q_\alpha \nabla\chi(\mathbf{X}_\alpha, t) \end{cases} \quad (3.8)$$

e, para a representação (2),

$$\begin{cases} \mathbf{r}_\alpha^{(2)} = \mathbf{X}_\alpha \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}}^{(2)} = \mathbf{P}_\alpha - q_\alpha \nabla\chi(\mathbf{X}_\alpha, t) \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}'}^{(2)} = \mathbf{P}_\alpha \end{cases} \quad (3.9)$$

É possível mostrar que se passa da representação (1) para (2) por meio da seguinte transformação unitária:

$$\mathbf{T} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_\alpha q_\alpha \chi(\mathbf{X}_\alpha, t)\right). \quad (3.10)$$

Por exemplo, é possível verificar diretamente, aplicando (3.10) em (3.8) e (3.9), que:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_\alpha^{(2)} &= \mathbf{T} \mathbf{r}_\alpha^{(1)} \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{r}_\alpha^{(1)} \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}}^{(2)} &= \mathbf{T} \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}}^{(1)} \mathbf{T}^{-1} \\ \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}'}^{(2)} &= \mathbf{T} \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}'}^{(1)} \mathbf{T}^{-1}. \end{aligned}$$

3.1.2 A aproximação de grandes comprimentos-de-onda

Nos exemplos de nosso interesse, a extensão espacial do conjunto de partículas é muito menor que as distâncias que caracterizam as variações espaciais de \mathbf{U} e \mathbf{A} , como o comprimento-

de-onda da radiação incidente. Nestas condições, é válida a chamada *aproximação de grandes comprimentos-de-onda*, em que expandimos a expressão da lagrangeana do sistema em potências de \mathbf{r}_α — o que gera uma expansão multipolar para o sistema de cargas em torno da posição \mathbf{R} do conjunto de partículas, que trataremos como um parâmetro —, retendo apenas os termos de ordem mais baixa. Com a hipótese adicional de que a carga total do sistema é nula, restar-nos-á apenas termos de ordem dipolar na lagrangeana. O momento de dipolo [elétrico] do conjunto de cargas é dado por

$$\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{R}).$$

Com esta aproximação, a lagrangeana e a hamiltoniana ficam reduzidas a

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \dot{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) - \mathbf{d} \cdot \nabla U(\mathbf{R}, t) \quad (3.11)$$

$$\mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) \quad (3.12)$$

$$\mathcal{H}_{\mathcal{L}} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} - \mathcal{L} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha\mathcal{L}} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V_{\text{Coul}} + \mathbf{d} \cdot \nabla U(\mathbf{R}, t). \quad (3.13)$$

3.1.3 O gauge de Göppert-Mayer

Podemos simplificar consideravelmente as expressões acima escolhendo criteriosamente um *gauge* no qual teremos novos potenciais $U'(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t)$ tais que $\mathbf{A}'(\mathbf{R}, t) = \mathbf{0}$. Este, conhecido como *gauge de Göppert-Mayer*³, é determinado pela seguinte função:

$$\chi(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t).$$

Com esta mudança de *gauge*, os potenciais se transformam do seguinte modo:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) \quad (3.14)$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) + \mathbf{r} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{R}, t). \quad (3.15)$$

Na origem, os novos potenciais ficam reduzidos a

$$\mathbf{A}'(\mathbf{R}, t) = \mathbf{0} \quad (3.16)$$

$$\nabla U'(\mathbf{R}, t) = \nabla U(\mathbf{R}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) = -\mathbf{E}(\mathbf{R}, t). \quad (3.17)$$

³Maria Göppert-Mayer, prêmio Nobel de Física em 1963.

Substituindo (3.16) e (3.17) em (3.11), (3.12) e (3.13), vem:

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \frac{d}{dt} [-\mathbf{d} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R})] = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \quad (3.18)$$

$$\mathbf{p}_{\alpha \mathcal{L}'} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \quad (3.19)$$

$$\mathcal{H}_{\mathcal{L}'} = \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{p}_{\alpha \mathcal{L}'}^2}{2 m_{\alpha}} + V_{\text{Coul}} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{R}, t). \quad (3.20)$$

Observando as equações (3.18), (3.19) e (3.20), fica clara a praticidade do *gauge* de Göppert-Mayer para tratarmos de sistemas em que a aproximação de grandes comprimentos-de-onda é válida, pois, além de simplificar as equações, o termo de interação na hamiltoniana do sistema assume uma forma muito conveniente, explicitando o acoplamento entre o momento de dipolo e o campo elétrico. A representação quântica associada ao *gauge* de Göppert-Mayer nessa aproximação é, por vezes, denominada *representação de Göppert-Mayer* (ou *de dipolo elétrico*).

3.1.4 Reformulação do problema para um campo quantizado

O tratamento feito acima pode ser estendido para o caso em que o próprio campo é um sistema quântico, com sua própria dinâmica. Neste caso, é comum partirmos do *gauge* de Coulomb, no qual o hamiltoniano do sistema se escreve como

$$\mathbf{H} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_j \hbar \omega_j \left(\mathbf{a}_j^{\dagger} \mathbf{a}_j + \frac{1}{2} \right), \quad (3.21)$$

onde \mathbf{a}_j^{\dagger} e \mathbf{a}_j são, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação de fótons no modo j , com frequência ω_j e vetor de onda \mathbf{k}_j , e

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_j \sqrt{\frac{\hbar}{2 \epsilon_0 V \omega_j}} \left(\mathbf{a}_j \exp(i \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{a}_j^{\dagger} \exp(-i \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \right) \hat{\mathbf{e}}_j,$$

onde $\hat{\mathbf{e}}_j$ são versores ortogonais a \mathbf{k}_j e V é o volume do domínio em que o campo e as cargas estão situados.

Para todos os modos em que a aproximação de grandes comprimentos-de-onda é válida, temos $|\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_{\alpha}| \ll 1$, o que nos permite substituir $\mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})$ por $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ em (3.21). Inspirados pelos resultados (3.18), (3.19) e (3.20) no caso semi-clássico, faremos uma mudança de representação análoga à transformação de Göppert-Mayer, dada pelo seguinte operador unitário:

$$\mathbf{T} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right) =$$

$$= \exp \left(\sum_j \left[\lambda_j^* \mathbf{a}_j - \lambda_j \mathbf{a}_j^\dagger \right] \right), \quad (3.22)$$

com

$$\lambda_j = \frac{i}{\sqrt{2 \epsilon_0 \hbar \omega_j V}} \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \mathbf{d}.$$

É possível mostrar — indicamos, como referência, a seção complementar A_{IV}, §2, de [29] — que, na nova representação [de dipolo elétrico], o hamiltoniano do sistema se escreve como:

$$\mathbf{H}' = \underbrace{\sum_\alpha \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + \mathbf{V}_{\text{Coul}} + \mathbf{e}_{\text{dip}}}_{\mathbf{H}'_p} + \underbrace{\sum_j \hbar \omega_j \left(\mathbf{a}_j^\dagger \mathbf{a}_j + \frac{1}{2} \right)}_{\mathbf{H}'_c} - \mathbf{d} \cdot \frac{\mathbf{D}'(\mathbf{R})}{\epsilon_0}, \quad (3.23)$$

onde \mathbf{e}_{dip} é a auto-energia do dipolo e $\mathbf{D}'(\mathbf{r})$ é o deslocamento elétrico. É possível mostrar ainda que o operador que descreve o deslocamento elétrico na representação de dipolo é, a menos da constante ϵ_0 , o mesmo que descreve o campo elétrico transverso⁴ $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$ na representação original:

$$\frac{\mathbf{D}'(\mathbf{r})}{\epsilon_0} = \mathbf{T} \frac{\mathbf{D}(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) = i \sum_j \sqrt{\frac{\hbar \omega_j}{2 \epsilon_0 V}} \left(\mathbf{a}_j \exp(i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) - \mathbf{a}_j^\dagger \exp(-i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}) \right) \hat{\mathbf{e}}_j. \quad (3.24)$$

Por isso, muitos autores costumam escrever (3.23) como

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H}'_p + \mathbf{H}'_c - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}). \quad (3.25)$$

Mas há que se ter cuidado com a notação introduzida em (3.25), pois o operador $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ não descreve, nesta representação, o campo elétrico transverso em \mathbf{R} .

Vemos, portanto, que o hamiltoniano (3.23) na representação de dipolo assume, como no caso semi-clássico, uma forma muito conveniente, em que temos explicitamente o hamiltoniano das partículas (\mathbf{H}'_p), o do campo livre (\mathbf{H}'_c) e o de interação dipolar, que é linear no campo.

3.2 O modelo de Rabi

O modelo de Rabi é uma versão simplificada do resultado obtido em (3.20), em que teremos, em vez de um conjunto de partículas, um único átomo de dois níveis, $|g\rangle$ (fundamental, com energia nula) e $|e\rangle$ (excitado, com energia $\hbar \omega_0$), e um campo elétrico clássico oscilante, da

⁴Dizemos que um campo vetorial $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ é *transverso* se $\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = 0$ — ou *longitudinal*, se $\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$ — para todo \mathbf{r} . Todo campo vetorial $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ pode ser escrito, de maneira única, como $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_\perp(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_\parallel(\mathbf{r})$, em que $\mathbf{F}_\perp(\mathbf{r})$ é transverso e $\mathbf{F}_\parallel(\mathbf{r})$, longitudinal.

forma $\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t)$. O hamiltoniano do sistema é dado por:

$$\mathbf{H} = \hbar \omega_0 |e\rangle \langle e| - \mathbf{W} \cos(\omega t), \quad \mathbf{W} := \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0.$$

O estado geral do sistema é dado pelo vetor

$$|\psi(t)\rangle = C_g(t) |g\rangle + C_e(t) e^{-i\omega_0 t} |e\rangle. \quad (3.26)$$

Substituindo (3.26) na equação de Schrödinger, encontraremos as seguintes equações para C_g e C_e :

$$\begin{cases} \dot{C}_g = -i\Omega_1 e^{i\omega_0 t} \cos(\omega t) C_e = -\frac{i}{2}\Omega_1 \left[e^{i(\omega_0+\omega)t} + e^{i(\omega_0-\omega)t} \right] C_e \\ \dot{C}_e = -i\Omega_1 e^{-i\omega_0 t} \cos(\omega t) C_g = -\frac{i}{2}\Omega_1 \left[e^{-i(\omega_0-\omega)t} + e^{-i(\omega_0+\omega)t} \right] C_g \end{cases}, \quad (3.27)$$

onde $\Omega_1 := \frac{1}{\hbar} \langle e | \mathbf{W} | g \rangle$, a *constante de acoplamento* do sistema átomo-campo, é suposta real.

Na situação de quase-ressonância, ou seja, quando $\omega \approx \omega_0$, a contribuição dos termos que oscilam com frequência $(\omega_0 + \omega)$ no sistema (3.27) é desprezível frente aos que oscilam com $(\omega_0 - \omega)$. Assim, é comum, nesta situação, fazermos a chamada *aproximação de onda girante* (RWA, do inglês *rotating wave approximation*), que consiste em desprezar os termos que oscilam com $(\omega_0 + \omega)$. Integrando (3.27) na aproximação de onda girante e escolhendo a condição inicial $|\psi(0)\rangle = |g\rangle$, encontraremos:

$$C_e(t) = -i \frac{\Omega_1}{\Omega} \exp\left(\frac{i\delta t}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right),$$

onde $\delta := \omega_0 - \omega$ é denominada *dessintonia* e

$$\Omega := \sqrt{\Omega_1^2 + \delta^2}$$

é a *frequência de Rabi* do sistema (vários autores costumam chamar Ω de frequência de Rabi *generalizada*, reservando o nome *frequência de Rabi* para o termo Ω_1). Nessas condições, a probabilidade de se encontrar o átomo no estado $|e\rangle$ no instante t , para uma dada dessintonia δ , é dada por

$$P_e^\delta(t) = |C_e(t)|^2 = \left(\frac{\Omega_1}{\Omega}\right)^2 \text{sen}^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \left(\frac{\Omega_1}{\Omega}\right)^2 \left[\frac{1 - \cos(\Omega t)}{2}\right]. \quad (3.28)$$

Vemos, em (3.28), que a probabilidade de se encontrar o átomo no seu estado excitado oscila no tempo, com frequência Ω , o que é conhecido como *oscilação de Rabi*. Ainda, na situação de ressonância ($\delta = 0$), vemos que $\max(P_e^\delta) = 1$, o que é a situação ideal para se observar as

oscilações de Rabi.

3.3 O modelo de Jaynes-Cummings

Podemos dizer que o modelo de Jaynes-Cummings [30] está para (3.25) assim como o modelo de Rabi está para (3.20). Este modelo trata da situação mais simples, em que temos o mesmo átomo de dois níveis do caso anterior, agora acoplado a um único modo normal do campo eletromagnético quantizado, com vetor de onda \mathbf{k} e frequência ω (denotaremos por $|n\rangle$ o estado de Fock⁵ do campo com n fótons). Levando em conta a expressão (3.24) e escolhendo a origem do sistema de coordenadas de tal forma que $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = -\pi$, o operador $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R})$ se escreve como

$$\mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger) \hat{\mathbf{e}}.$$

Como o operador de dipolo \mathbf{d} descreve uma grandeza vetorial — ou seja, que se transforma como um vetor sob transformações de paridade —, devemos ter $\langle g|\mathbf{d}|g\rangle = \langle e|\mathbf{d}|e\rangle = 0$. Por outro lado, vamos supor que $\langle e|\mathbf{d}|g\rangle =: \mathbf{d}_{eg}$ seja real, de modo que possamos escrever $\mathbf{d} = \mathbf{d}_{eg} (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)$. Atribuindo à energia do estado $|g\rangle$ o valor 0, o hamiltoniano do átomo livre é dada por $\mathbf{H}_p = \hbar\omega_0 |e\rangle\langle e|$.

O hamiltoniano completo do sistema é dado, então, por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_p + \mathbf{H}_c - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) = \\ &= \hbar\omega_0 |e\rangle\langle e| + \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{\mathbf{I}}{2} \right) - \mathbf{d}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{e}} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|) (\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger). \end{aligned} \quad (3.29)$$

É mais conveniente reescrever a expressão (3.29) do seguinte modo:

$$\mathbf{H} = \hbar\omega_0 |e\rangle\langle e| + \hbar\omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{\mathbf{I}}{2} \right) + \mathbf{H}_{\text{RWA}} + \mathbf{H}', \quad (3.30)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{RWA}} &:= g (|e\rangle\langle g| \mathbf{a} + |g\rangle\langle e| \mathbf{a}^\dagger) \\ \mathbf{H}' &:= g (|g\rangle\langle e| \mathbf{a} + |e\rangle\langle g| \mathbf{a}^\dagger) \\ g &:= -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} \mathbf{d}_{eg} \cdot \hat{\mathbf{e}}, \end{aligned}$$

sendo g a constante de acoplamento do sistema (não confundir com o estado $|g\rangle$). Podemos

⁵cf. §A.2.

interpretar os hamiltonianos de interação \mathbf{H}_{RWA} e \mathbf{H}' do seguinte modo:

- \mathbf{H}_{RWA} descreve o decaimento do átomo com a emissão de um fóton, ou a excitação com a absorção de um fóton.
- \mathbf{H}' descreve o **decaimento** do átomo com a **absorção** de um fóton, ou a **excitação** com a **emissão** de um fóton.

O hamiltoniano \mathbf{H}' descreve, portanto, um comportamento “estranho” do sistema. Não obstante, na situação de [quase-]ressonância, a contribuição deste — que oscila com frequência $(\omega_0 + \omega)$, segundo a descrição de Heisenberg — é desprezível em comparação com a de \mathbf{H}_{RWA} — que oscila com frequência $(\omega_0 - \omega)$. Assim, é razoável aqui, nessa situação, fazermos uma aproximação que consiste em desprezar \mathbf{H}' em (3.30). Tal aproximação é análoga à RWA no modelo de Rabi e, por isso, é tratada pelo mesmo nome. Com esta aproximação, o hamiltoniano do sistema assume a seguinte forma, conhecida como *hamiltoniano de Jaynes-Cummings*:

$$\mathbf{H} = \hbar \omega_0 |e\rangle \langle e| + \hbar \omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{\mathbf{I}}{2} \right) + g \left(|e\rangle \langle g| \mathbf{a} + |g\rangle \langle e| \mathbf{a}^\dagger \right). \quad (3.31)$$

O termo de interação em (3.31) acopla os estados $|e\rangle \otimes |n\rangle$ e $|g\rangle \otimes |n+1\rangle$, com um elemento de matriz $\langle e| \otimes \langle n| \mathbf{H}_{\text{RWA}} |g\rangle \otimes |n+1\rangle = \langle g| \otimes \langle n+1| \mathbf{H}_{\text{RWA}} |e\rangle \otimes |n\rangle = g \sqrt{n+1}$.

Calculando as autoenergias de (3.31), encontraremos:

$$E_{\pm}(n) = \hbar \left[\left(n + \frac{3}{2} \right) \omega - \frac{\delta}{2} \pm \frac{\Omega(n)}{2} \right],$$

onde $\Omega(n) = \sqrt{\delta^2 + \Omega_1^2 (n+1)}$, $\Omega_1 = 2g$ e $\delta = \omega - \omega_0$ são análogos aos termos de mesma notação introduzidos na seção 3.2. Note que a frequência de Rabi generalizada do sistema é proporcional à diferença entre as suas autoenergias:

$$\Omega(n) = \frac{E_+ - E_-}{\hbar}. \quad (3.32)$$

Os autoestados do sistema, denotados aqui como $|1(n)\rangle$ e $|2(n)\rangle$ (com autoenergia $E_+(n)$ e $E_-(n)$, respectivamente), são dados em termos de $|e\rangle \otimes |n\rangle$ e $|g\rangle \otimes |n+1\rangle$ como:

$$\begin{aligned} |1(n)\rangle &= \sin \theta |g\rangle \otimes |n+1\rangle + \cos \theta |e\rangle \otimes |n\rangle & 0 \leq \theta < \frac{\pi}{2} \\ |2(n)\rangle &= \cos \theta |g\rangle \otimes |n+1\rangle - \sin \theta |e\rangle \otimes |n\rangle, \end{aligned}$$

com $\cotg(2\theta) = -\delta/\Omega_1$. Os estados $|1(n)\rangle$ e $|2(n)\rangle$ são conhecidos na literatura como *estados vestidos* do sistema e este processo de diagonalização do hamiltoniano (3.31), como *método do*

átomo vestido.

Resolvendo este sistema para um estado inicial $|\psi(0)\rangle = |e\rangle \otimes |n\rangle$, encontraremos, para um instante t qualquer, a seguinte expressão para o estado $|\psi(t)\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{it}{\hbar} \mathbf{H}} |\psi(0)\rangle = e^{i[(n+\frac{3}{2})\omega - \frac{\delta}{2}]t} \left[e^{-\frac{i\Omega(n)t}{2}} \cos\theta |1(n)\rangle - e^{\frac{i\Omega(n)t}{2}} \sin\theta |2(n)\rangle \right] = \\ &= e^{i[(n+\frac{3}{2})\omega - \frac{\delta}{2}]t} \left[\left(e^{-\frac{i\Omega(n)t}{2}} \cos^2\theta + e^{\frac{i\Omega(n)t}{2}} \sin^2\theta \right) |e\rangle \otimes |n\rangle \right. \\ &\quad \left. - i \sin\left(\frac{\Omega(n)t}{2}\right) \sin(2\theta) |g\rangle \otimes |n+1\rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para o caso particular de dessintonia nula ($\delta = 0 \iff \theta = \pi/4$), a expressão (3.33) assume uma forma mais simples:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i(n+\frac{3}{2})\omega t} \left[\cos\left(\frac{\Omega_1 \sqrt{n+1}}{2} t\right) |e\rangle \otimes |n\rangle - i \sin\left(\frac{\Omega_1 \sqrt{n+1}}{2} t\right) |g\rangle \otimes |n+1\rangle \right]. \quad (3.34)$$

A probabilidade de se encontrar o sistema no estado $|e\rangle \otimes |n\rangle$ num instante t , para o caso ressonante, é dada por:

$$P_e(t) = |\langle e| \otimes \langle n| \psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_1 \sqrt{n+1}}{2} t\right) = \frac{1 + \cos(\Omega_1 \sqrt{n+1} t)}{2}. \quad (3.35)$$

Vemos, de (3.35), que o sistema experimenta oscilações de Rabi, assim como no caso semi-clássico. Em cada oscilação de Rabi, o átomo emite um fóton na cavidade e o reabsorve. Uma consequência imediata — e muito interessante — deste resultado é que tais trocas de energia no sistema ocorrem mesmo se o campo na cavidade estiver inicialmente em seu estado de vácuo. Por esta razão, o termo Ω_1 é frequentemente chamado de *freqüência de Rabi do vácuo*. É possível mostrar ainda que, se o campo estiver inicialmente num estado coerente $|\alpha e^{-i\omega t}\rangle$, com número médio de fótons $\langle n \rangle = \alpha^2$, podemos tratar o campo classicamente, como no modelo de Rabi, dado que:

$$\langle \alpha e^{-i\omega t} | \mathbf{E}_\perp(\mathbf{R}) | \alpha e^{-i\omega t} \rangle = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t), \quad \mathbf{E}_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} (2\sqrt{\langle n \rangle}) \hat{\mathbf{e}}.$$

Um comentário final sobre o modelo de Jaynes-Cummings sem a aproximação de onda girante: fazendo um tratamento perturbativo do termo de interação em (3.30), obtemos, no caso não-ressonante, um deslocamento das energias dos estados $|g\rangle \otimes |n+1\rangle$ e $|e\rangle \otimes |n\rangle$, conhecido como *deslocamento de Bloch-Siegert*, deduzido na seção complementar A_{IV}, §4-b, de [1].

3.4 Experimentos em CQED no regime de acoplamento forte

O modelo de Jaynes-Cummings é o mais empregado para descrever a dinâmica de sistemas em CQED realizados em laboratório atualmente. O modelo de Rabi, por sua vez, tem uma importante aplicação no chamado interferômetro de Ramsey⁶ [31, 32, 33]. Estes modelos pressupõem a ausência de emissão espontânea do átomo enquanto estiver interagindo com o campo na cavidade. Experimentalmente, podemos satisfazer, ao menos durante um certo tempo, esta condição preparando-se o sistema de tal modo que sua constante de acoplamento — em outras palavras, sua frequência de Rabi — seja suficientemente maior do que a taxa de emissão espontânea do átomo na cavidade. Assim, o átomo experimentará algumas oscilações de Rabi antes de decair espontaneamente. Tal regime de acoplamento entre o átomo e o campo na cavidade é denominado *regime de acoplamento forte*.

A década de 1990 marca, em CQED, o advento dos experimentos no regime de acoplamento forte. Em particular, para um acoplamento quase-ressonante, podemos tratar o átomo como um sistema de dois níveis acoplado a um único modo normal do campo e aplicar o modelo de Jaynes-Cummings para descrever sua evolução temporal. Diga-se de passagem, esta é uma das mais importantes realizações experimentais de um sistema de dois níveis, importância esta já atribuída aos sistemas de *spin* 1/2, e só vem corroborar a afirmação de que tais sistemas, os mais simples da Física Quântica, não se limitam ao seu caráter didático e não devem ser menosprezados por um estudante de Física.

Como exemplo de “caso de sucesso” do modelo de Jaynes-Cummings, podemos citar o grupo do prof. Serge Haroche, do Laboratoire Kastler Brossel⁷ [34], que é hoje o que mais se destaca em CQED no domínio de microondas. Com seus trabalhos no regime de acoplamento forte, este grupo conseguiu desenvolver, a partir do fenômeno das oscilações de Rabi e com o auxílio do interferômetro de Ramsey, toda uma técnica para produzir e explorar estados emaranhados átomo-campo. Dentre os frutos desta técnica, podemos citar a produção de estados EPR átomo-átomo [35] e a medição não-destrutiva de um único fóton (SP-QND, do inglês *single photon quantum nondemolition*) dentro da cavidade [36], cuja dinâmica condicional pode ser explorada para demonstrar uma porta lógica quântica [37].⁸ Os trabalhos do grupo na década de 90 estão bem documentados em artigos de revisão como [39] e [40].

⁶Norman Ramsey, prêmio Nobel de Física em 1989.

⁷Laboratoire Kastler Brossel (UMR 8552) é uma *Unité mixte de recherche* da École normale supérieure, da Université Pierre et Marie Curie e do CNRS.

⁸Por outro lado, na linha de interações fora de ressonância, encontra-se a grande contribuição do grupo na década de 90: a preparação de superposições de estados coerentes do campo (sistema mesoscópico) na cavidade — como no paradoxo do(a) “gato(a) de Schrödinger” — e a observação de sua descoerência [38].

4 O modelo de acoplamento linear

4.1 Apresentação do modelo

Nosso objeto de estudo para o que segue é um modelo de acoplamento linear entre um oscilador harmônico, cuja coordenada é $q_0(t)$ e cuja frequência natural é $\bar{\omega}_0$, e N modos normais de um campo, descritos por coordenadas $q_k(t)$ e frequências ω_k , onde $k = 1, 2, \dots, N$. O hamiltoniano quântico deste sistema é dado por:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{p}_0^2 + \bar{\omega}_0^2 \mathbf{q}_0^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left(\mathbf{p}_k^2 + \omega_k^2 \mathbf{q}_k^2 \right) - \mathbf{q}_0 \sum_{k=1}^N c_k \mathbf{q}_k, \quad (4.1)$$

É comum reescrever um hamiltoniano como (4.1) introduzindo operadores de criação, \mathbf{a}_μ^\dagger , e aniquilação, \mathbf{a}_μ , de *quanta* de energia (cf. apêndice A). Neste modelo, tais operadores são definidos como

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\bar{\omega}_0}} \left(\mathbf{a}_0^\dagger + \mathbf{a}_0 \right) & \mathbf{q}_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(\mathbf{a}_k^\dagger + \mathbf{a}_k \right) \\ \mathbf{p}_0 &= i\sqrt{\frac{\hbar\bar{\omega}_0}{2}} \left(\mathbf{a}_0^\dagger - \mathbf{a}_0 \right) & \mathbf{p}_k &= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} \left(\mathbf{a}_k^\dagger - \mathbf{a}_k \right). \end{aligned}$$

Fazendo esta substituição em (4.1), temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \hbar\bar{\omega}_0 \left(\mathbf{a}_0^\dagger \mathbf{a}_0 + \frac{\mathbf{1}}{2} \right) + \sum_{k=1}^N \hbar\omega_k \left(\mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{a}_k + \frac{\mathbf{1}}{2} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar}{2} \left(\mathbf{a}_0^\dagger + \mathbf{a}_0 \right) \sum_{k=1}^N \frac{c_k}{\sqrt{\bar{\omega}_0 \omega_k}} \left(\mathbf{a}_k^\dagger + \mathbf{a}_k \right) = \\ &= \hbar\bar{\omega}_0 \left(\mathbf{a}_0^\dagger \mathbf{a}_0 + \frac{\mathbf{1}}{2} \right) + \sum_{k=1}^N \hbar\omega_k \left(\mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{a}_k + \frac{\mathbf{1}}{2} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar}{2} \sum_{k=1}^N \frac{c_k}{\sqrt{\bar{\omega}_0 \omega_k}} \left(\mathbf{a}_0^\dagger \mathbf{a}_k + \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_k^\dagger + \mathbf{a}_0 \mathbf{a}_k + \mathbf{a}_0^\dagger \mathbf{a}_k^\dagger \right). \quad (4.2) \end{aligned}$$

Para $N = 1$, esperamos obter resultados similares aos do modelo de Jaynes-Cummings.

Os autoestados do hamiltoniano (4.1) na ausência de acoplamento, ou seja, para $c_k = 0 \forall k$, são estados de Fock $|n_0\rangle \otimes |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle$, onde n_0 é o número de *quanta* de energia do oscilador ($n_0 = 0$ corresponde ao seu estado fundamental) e n_k ($k = 1, 2, \dots, N$) é o número de fótons no modo k . As funções de onda correspondentes são dadas por

$$\begin{aligned} \Psi_{n_0 n_1 n_2 \dots n_N}(q_0, q_1, q_2, \dots, q_N) &= \langle q_0 | \otimes \langle q_1 | \otimes \langle q_2 | \otimes \cdots \otimes \langle q_N | n_0 \rangle \otimes |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle = \\ &= \prod_{\mu=0}^N \langle q_\mu | n_\mu \rangle = \prod_{\mu=0}^N \psi_{n_\mu}(q_\mu), \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde $\psi_{n_\mu}(q_\mu)$ é dado por (A.15) na página 105.

Como o hamiltoniano (4.1) é quadrático nos momentos e não apresenta vínculos, podemos expressar o propagador do sistema como uma integral funcional sobre o espaço de configurações:

$$K(\mathcal{X}_F, t_F | \mathcal{X}_I, t_I) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \mathcal{L} dt\right) \prod_{\mu=0}^N \mathcal{D}[q_\mu(t)], \quad (4.4)$$

onde a matriz $\mathcal{X}_{1 \times (N+1)}$ tem entradas $q_0, q_1, q_2, \dots, q_N$ e \mathcal{L} é a lagrangeana do modelo em questão, dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left(\dot{q}_k^2 - \omega_k^2 q_k^2 \right) + q_0 \sum_{k=1}^N c_k q_k. \quad (4.5)$$

A lagrangeana (4.5) pode ser obtida a partir de um modelo de acoplamento linear entre o oscilador harmônico ($q_0(t), \bar{\omega}_0$) e um campo escalar não-massivo, estando o conjunto confinado numa cavidade esférica de raio R , centrada na posição de equilíbrio do oscilador (*cf.* apêndice B). Naquele caso, teremos:

$$\omega_k = \frac{k\pi c}{R} \quad (4.6a)$$

$$c_k = \eta \omega_k \quad (4.6b)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{2\pi g c}{R}}, \quad (4.6c)$$

onde g é a constante de acoplamento do modelo e c é a velocidade da luz no vácuo. Esta escolha de parâmetros mostrar-se-á útil para cálculos no limite para $N \rightarrow \infty$.

A lagrangeana (4.5), por ser uma forma quadrática, pode ser reescrita na seguinte forma

matricial:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathcal{X}}{dt} \right)^T \frac{d\mathcal{X}}{dt} - \frac{1}{2} \mathcal{X}^T \mathcal{K} \mathcal{X}, \quad (4.7)$$

onde $\mathcal{K}_{(N+1) \times (N+1)}$ é dada por

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \bar{\omega}_0^2 & -c_1 & -c_2 & \cdots & -c_N \\ -c_1 & \omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ -c_2 & 0 & \omega_2^2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -c_N & 0 & 0 & \cdots & \omega_N^2 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Uma propriedade importante de \mathcal{K} é a seguinte:

Teorema 4.1. *O determinante de \mathcal{K} vale:*

$$\det \mathcal{K} = \left[\bar{\omega}_0^2 - \sum_{\ell=1}^N \left(\frac{c_\ell}{\omega_\ell} \right)^2 \right] \prod_{k=1}^N \omega_k^2. \quad (4.9)$$

Para tanto, mostremos um resultado auxiliar:

Lema 4.1. *Seja \mathcal{K}_p o menor de ordem $p+1$, $p \leq N$, de \mathcal{K} definido como:*

$$\mathcal{K}_p = \begin{pmatrix} \bar{\omega}_0^2 & -c_1 & -c_2 & \cdots & -c_p \\ -c_1 & \omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ -c_2 & 0 & \omega_2^2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -c_p & 0 & 0 & \cdots & \omega_p^2 \end{pmatrix}.$$

O determinante de \mathcal{K}_p vale:

$$\det \mathcal{K}_p = \left[\bar{\omega}_0^2 - \sum_{\ell=1}^p \left(\frac{c_\ell}{\omega_\ell} \right)^2 \right] \prod_{k=1}^p \omega_k^2.$$

Demonstração. Para $p=0$, este resultado é imediato. Para qualquer outro $p \leq N$, mostremos o resultado por indução:

$$\det \mathcal{K}_p = \omega_p^2 \begin{vmatrix} \bar{\omega}_0^2 & -c_1 & -c_2 & \cdots & -c_{p-1} \\ -c_1 & \omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ -c_2 & 0 & \omega_2^2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -c_{p-1} & 0 & 0 & \cdots & \omega_{p-1}^2 \end{vmatrix} +$$

$$\begin{aligned}
& (-1)^{p+2} (-c_p) \begin{vmatrix} -c_1 & \omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ -c_2 & 0 & \omega_2^2 & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -c_{p-1} & 0 & 0 & \cdots & \omega_{p-1}^2 \\ -c_p & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{vmatrix} = \\
& = \omega_p^2 \left[\bar{\omega}_0^2 - \sum_{\ell=1}^{p-1} \left(\frac{c_\ell}{\omega_\ell} \right)^2 \right] \prod_{k=1}^{p-1} \omega_k^2 + (-1)^p (-c_p) (-1)^{p+1} (-c_p) \prod_{j=1}^{p-1} \omega_j^2 = \\
& = \left[\bar{\omega}_0^2 - \sum_{\ell=1}^{p-1} \left(\frac{c_\ell}{\omega_\ell} \right)^2 \right] \prod_{k=1}^p \omega_k^2 - c_p^2 \prod_{j=1}^{p-1} \omega_j^2 = \\
& = \left[\bar{\omega}_0^2 - \sum_{\ell=1}^p \left(\frac{c_\ell}{\omega_\ell} \right)^2 \right] \prod_{k=1}^p \omega_k^2. \quad \square
\end{aligned}$$

Demonstração do teorema 4.1. Tomando $p = N$ no lema 4.1, obtemos o resultado (4.9). \square

4.2 Transformação para coordenadas normais

A lagrangeana (4.5) pode ser diagonalizada introduzindo coordenadas normais Q_μ , que denotaremos coletivamente pela matriz Q , obtidas a partir da transformação ortogonal apropriada \mathcal{T} , cujas entradas denotaremos por t_i^j :

$$\mathcal{X} = \mathcal{T}Q \quad (4.10a)$$

$$\mathcal{T}^\top \mathcal{K} \mathcal{T} =: \mathcal{D} = \text{diag}(\Omega_0^2, \Omega_1^2, \Omega_2^2, \dots, \Omega_N^2) \quad (4.10b)$$

Procedamos agora ao cálculo de \mathcal{T} e das autofreqüências Ω_r^2 (autovalores de \mathcal{K}). Aplicando a transformação (4.10) a (4.5), obtemos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \frac{1}{2} \sum_{r=0}^N \sum_{s=0}^N t_0^r t_0^s (\dot{Q}_r \dot{Q}_s - \bar{\omega}_0^2 Q_r Q_s) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{r=0}^N \sum_{s=0}^N \left[t_k^r t_k^s (\dot{Q}_r \dot{Q}_s - \omega_k^2 Q_r Q_s) + c_k (t_0^r t_k^s + t_k^r t_0^s) Q_r Q_s \right] = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{r=0}^N \sum_{s=0}^N \left\{ \underbrace{\left(t_0^r t_0^s + \sum_{k=1}^N t_k^r t_k^s \right)}_{\delta_{rs}} \dot{Q}_r \dot{Q}_s \right. \\
&\quad \left. + \left[-\bar{\omega}_0^2 t_0^r t_0^s + \sum_{k=1}^N \left(-\omega_k^2 t_k^r t_k^s + c_k t_0^r t_k^s + c_k t_k^r t_0^s \right) \right] Q_r Q_s \right\} =
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{r=0}^N \dot{Q}_r^2 - \sum_{r=0}^N \sum_{s=0}^N \left[\left(\bar{\omega}_0^2 t_0^r - \sum_{k=1}^N c_k t_k^r \right) t_0^s + \sum_{k=1}^N \left(\omega_k^2 t_k^r - c_k t_0^r \right) t_k^s \right] Q_r Q_s \right\}. \quad (4.11)$$

Para efetivarmos a diagonalização da lagrangeana, é necessário que o termo entre colchetes em (4.11) seja reduzido a $\Omega_r^2 \delta_{rs}$. Para tanto, a transformação \mathcal{T} deve satisfazer às equações

$$\bar{\omega}_0^2 t_0^r - \sum_{k=1}^N c_k t_k^r = \Omega_r^2 t_0^r \quad (4.12a)$$

$$\omega_k^2 t_k^r - c_k t_0^r = \Omega_r^2 t_k^r. \quad (4.12b)$$

De (4.12b), obtemos:

$$t_k^r = \frac{c_k}{\omega_k^2 - \Omega_r^2} t_0^r \quad (4.13)$$

Por outro lado, como \mathcal{T} é ortogonal, podemos escrever:

$$(t_0^r)^2 + \sum_{k=1}^N (t_k^r)^2 = 1. \quad (4.14)$$

Substituindo (4.13) em (4.14) e isolando t_0^r , obtemos:

$$t_0^r = \left[1 + \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{(\omega_k^2 - \Omega_r^2)^2} \right]^{-1/2}. \quad (4.15)$$

A transformação \mathcal{T} fica então completamente determinada pelas expressões (4.13) e (4.15), bem como pela equação das autofreqüências Ω_r , que encontraremos a seguir.

4.3 A equação das autofreqüências

Substituindo (4.13) em (4.12a) e cancelando t_0^r — que é estritamente não-nulo — nos dois membros, encontramos a seguinte equação em Ω^2 ,

$$\bar{\omega}_0^2 - \Omega^2 = \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{\omega_k^2 - \Omega^2}, \quad (4.16)$$

cujas raízes são as autofreqüências $\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N$. Introduzindo o seguinte parâmetro:

$$\omega_0^2 = \bar{\omega}_0^2 - \sum_{k=1}^N \left(\frac{c_k}{\omega_k} \right)^2, \quad (4.17)$$

podemos escrever (4.16) de outro modo:

$$\begin{aligned} \omega_0^2 - \Omega^2 &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{c_k^2}{\omega_k^2 - \Omega^2} - \frac{c_k^2}{\omega_k^2} \right) = \\ &= \Omega^2 \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{\omega_k^2 (\omega_k^2 - \Omega^2)}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Com a definição (4.17), obtemos, de (4.9), uma relação muito importante entre as autofreqüências $\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N$ e as freqüências $\omega_0, \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$, a saber:

$$\prod_{\mu=0}^N \omega_{\mu} = \prod_{r=0}^N \Omega_r. \quad (4.19)$$

Façamos uma breve discussão sobre as possibilidades para as autofreqüências:

1. Se $\omega_0^2 \geq 0$, então a equação (4.18) admite apenas raízes não-negativas¹. Em particular, se $\omega_0^2 > 0$, então teremos apenas raízes estritamente positivas e neste caso, o sistema oscila harmonicamente em todos os seus modos.
2. Por outro lado, se $\omega_0^2 < 0$, a equação (4.18) possui uma única raiz negativa. Para comprovar esta afirmação, introduzamos, para simplificar a notação, a seguinte função:

$$B(\Omega^2) = \omega_0^2 - \Omega^2 \left[1 + \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{\omega_k^2 (\omega_k^2 - \Omega^2)} \right]. \quad (4.20)$$

De imediato, verificamos que

$$B(0) = \omega_0^2 < 0, \text{ por hipótese} \quad (4.21)$$

$$\lim_{\Omega^2 \rightarrow +\infty} B(\Omega^2) = -\infty \quad (4.22)$$

$$\lim_{\Omega^2 \rightarrow -\infty} B(\Omega^2) = +\infty. \quad (4.23)$$

De (4.21), (4.22) e (4.23), concluímos que B possui pelo menos uma raiz negativa. Para

¹Com efeito, se supusermos $\Omega^2 < 0$, veremos que o segundo membro de (4.18) é negativo, enquanto o primeiro membro, não. Logo, $\Omega^2 < 0$ não pode ser raiz da equação.

verificarmos que ela é única, analisemos a derivada de B:

$$\begin{aligned} \frac{dB}{d\Omega^2} &= -1 - \sum_{\ell=1}^N \frac{c_\ell^2}{\omega_\ell^2 (\omega_\ell^2 - \Omega^2)} - \Omega^2 \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{\omega_k^2 (\omega_k^2 - \Omega^2)^2} = \\ &= -1 - \sum_{k=1}^N \frac{c_k^2}{(\omega_k^2 - \Omega^2)^2} < 0, \forall \Omega^2. \end{aligned}$$

Logo, a função B é monotonicamente decrescente e, portanto, possui uma única raiz.

O caso 2 não nos interessa, pois não admite estados estacionários. Assim, daqui para frente, assumiremos $\omega_0 = \sqrt{\bar{\omega}_0^2 - \sum_{k=1}^N (c_k/\omega_k)^2} > 0$ para garantir que todas as autofreqüências sejam estritamente positivas.

Um último ponto a ser levantado aqui diz respeito à convergência da equação (4.18) no limite para $N \rightarrow \infty$, que está condicionada à forma das constantes de acoplamento c_1, c_2, \dots, c_N . Há uma discussão sobre isso (§II da referência [41]) para o caso em que essas constantes assumem uma forma geral do tipo $c_k = \eta \omega_k^n$. Nessa discussão, é mostrado que, para $n \geq 1$, faz-se necessária uma renormalização na freqüência $\bar{\omega}_0$ do oscilador para eliminar as divergências na equação das autofreqüências. No entanto, essa freqüência renormalizada coincide com ω_0 , definida em (4.17), apenas no caso $n = 1$, que nos remete imediatamente a (4.6b) na página 65.

Para o que segue, consideraremos apenas o caso $c_k = \eta \omega_k$.

4.4 A representação quântica das coordenadas normais

O operador hamiltoniano do sistema, na representação das coordenadas (e momentos) normais, se escreve como

$$\mathbf{H}_c = \frac{1}{2} \sum_{r=0}^N (\mathbf{P}_r^2 + \Omega_r^2 \mathbf{Q}_r^2),$$

ou ainda, em termos de operadores de criação e aniquilação coletivos,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_r &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega_r}} (\Omega_r \mathbf{Q}_r + i\mathbf{P}_r) \\ \mathbf{A}_r^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega_r}} (\Omega_r \mathbf{Q}_r - i\mathbf{P}_r), \end{aligned}$$

se expressa como

$$\mathbf{H}_c = \sum_{r=0}^N \hbar \Omega_r \left(\mathbf{A}_r^\dagger \mathbf{A}_r + \frac{1}{2} \right). \quad (4.24)$$

Identificamos, de (4.24), que os estados estacionários do sistema (autoestados de \mathbf{H}_c), são estados de Fock coletivos, que denotaremos por $|N_0\rangle_c \otimes |N_1\rangle_c \otimes |N_2\rangle_c \otimes \cdots \otimes |N_N\rangle_c$. As funções de onda correspondentes a tais estados são dadas por produtos de funções do tipo (A.15) na página 105 com $b = \Omega_r$:

$$\Phi_{N_0 N_1 N_2 \dots N_N}(Q_0, Q_1, Q_2, \dots, Q_N) = \prod_{r=0}^N \left(\frac{\Omega_r}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{H_{N_r} \left(\sqrt{\frac{\Omega_r}{\hbar}} Q_r \right)}{\sqrt{2^{N_r} N_r!}} \exp \left(-\frac{\Omega_r Q_r^2}{2\hbar} \right), \quad (4.25)$$

cujas respectivas autoenergias são

$$E_{N_0 N_1 N_2 \dots N_N} = \sum_{r=0}^N \hbar \Omega_r \left(N_r + \frac{1}{2} \right). \quad (4.26)$$

Aplicando a transformação \mathcal{T} ao propagador do sistema, dado por (4.4), obtemos

$$\mathcal{K}(Q_F, t_F | Q_I, t_I) = \prod_{r=0}^N \int \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left(\dot{Q}_r^2 - \Omega_r^2 Q_r^2 dt \right) \right) \mathcal{D}[Q_r(t)]. \quad (4.27)$$

Substituindo o resultado para o propagador de um oscilador harmônico unidimensional (2.35) em (4.27), vem

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(Q_F, t_F | Q_I, t_I) &= \prod_{r=0}^N \left\{ \sqrt{\frac{\Omega_r}{2\pi i \hbar \sin[\Omega_r(t_F - t_I)]}} \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left(\frac{i\Omega_r}{2\hbar \sin[\Omega_r(t_F - t_I)]} \left\{ (Q_{rI}^2 + Q_{rF}^2) \cos[\Omega_r(t_F - t_I)] - 2Q_{rI} Q_{rF} \right\} \right) \right\}. \quad (4.28) \end{aligned}$$

4.5 As autofreqüências e a matriz de transformação em alguns casos particulares

Para concluir este capítulo, vamos calcular explicitamente a matriz de transformação e as autofreqüências do modelo para dois casos particulares: o caso $N = 1$, por sua simplicidade e proximidade ao modelo de Jaynes-Cummings, e o caso $N \rightarrow \infty$, que será útil no final do capítulo 5.

4.5.1 Caso $N = 1$

A situação mais simples para o modelo em questão se dá quando $N = 1$, ou seja, quando o oscilador está acoplado a um único modo normal do campo. Neste caso, a lagrangeana (4.5) fica reduzida a

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\dot{q}_0^2 + (\omega_0^2 + \eta^2) q_0^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\dot{q}_1^2 + \omega_1^2 q_1^2 \right) + \eta \omega_1 q_0 q_1. \quad (4.29)$$

A equação das autofrequências (4.18) se escreve como:

$$\begin{aligned} \omega_0^2 + \eta^2 - \Omega^2 - \frac{\eta^2 \omega_1^2}{\omega_1^2 - \Omega^2} &= 0 \iff \\ \iff \Omega^4 - (\omega_0^2 + \eta^2 + \omega_1^2) \Omega^2 + \omega_0^2 \omega_1^2 &= 0, \end{aligned}$$

cujas soluções são

$$\Omega_0 = \sqrt{\frac{\omega_0^2 + \eta^2 + \omega_1^2}{2} - \sqrt{\left(\frac{\omega_0^2 + \eta^2 + \omega_1^2}{2}\right)^2 - \omega_0^2 \omega_1^2}} \quad (4.30a)$$

$$\Omega_1 = \sqrt{\frac{\omega_0^2 + \eta^2 + \omega_1^2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\omega_0^2 + \eta^2 + \omega_1^2}{2}\right)^2 - \omega_0^2 \omega_1^2}}. \quad (4.30b)$$

A matriz de transformação para coordenadas normais, dada por (4.13) e (4.15), por sua vez, se escreve da seguinte forma:

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \frac{\omega_1^2 - \Omega_0^2}{\sqrt{(\omega_1^2 - \Omega_0^2)^2 + \eta^2 \omega_1^2}} & \frac{\omega_1^2 - \Omega_1^2}{\sqrt{(\omega_1^2 - \Omega_1^2)^2 + \eta^2 \omega_1^2}} \\ \frac{\eta \omega_1}{\sqrt{(\omega_1^2 - \Omega_0^2)^2 + \eta^2 \omega_1^2}} & \frac{\eta \omega_1}{\sqrt{(\omega_1^2 - \Omega_1^2)^2 + \eta^2 \omega_1^2}} \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

onde Ω_0 e Ω_1 são dadas por (4.30a) e (4.30b), respectivamente. Note que, como \mathcal{T} é ortogonal, devemos ter $t_0^0 = t_1^1$ e $t_0^1 = -t_1^0$.

4.5.2 Caso $N \rightarrow \infty$

Supondo que os parâmetros do modelo sejam dados por (4.6), é possível calcular o segundo membro da equação (4.18) no limite para $N \rightarrow \infty$, com o auxílio da seguinte fórmula:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 - x^2} = \frac{1 - \pi x \cotg(\pi x)}{2x^2}. \quad (4.32)$$

Com efeito, introduzindo (4.32) em (4.18), onde $\pi\chi = R\Omega_r/c$, vem:

$$\omega_0^2 - \Omega_r^2 = \eta^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Omega_r^2}{\omega_k^2 - \Omega_r^2} = \frac{\eta^2}{2} \left[1 - \frac{R\Omega_r}{c} \cotg\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) \right],$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \cotg\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) &= \frac{2c\Omega_r}{R\eta^2} + \frac{c}{R\Omega_r} \left(1 - \frac{2\omega_0^2}{\eta^2}\right) = \\ &= \frac{\Omega_r}{\pi g} + \frac{c}{R\Omega_r} \left(1 - \frac{R\omega_0^2}{\pi g c}\right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

É possível ainda calcular, no limite para $N \rightarrow \infty$, o termo t_0^r em (4.15). Para tanto, basta notarmos que

$$F(\Omega_r) := \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\omega_k^2}{(\omega_k^2 - \Omega_r^2)^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_k^2 - \Omega_r^2} + \frac{\Omega_r}{2} \frac{d}{d\Omega} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_k^2 - \Omega^2} \right) \Big|_{\Omega=\Omega_r}. \quad (4.34)$$

Substituindo (4.32) em (4.34), temos:

$$\begin{aligned} F(\Omega_r) &= \frac{1}{2\Omega_r^2} \left[1 - \frac{R\Omega_r}{c} \cotg\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) \right] + \frac{\Omega_r}{2} \frac{d}{d\Omega} \left[\frac{1}{2\Omega_r^2} - \frac{R}{2c\Omega_r} \cotg\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) \right] \Big|_{\Omega=\Omega_r} = \\ &= -\frac{R}{4c\Omega_r} \cotg\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) + \left(\frac{R}{2c}\right)^2 \left[1 + \cotg^2\left(\frac{R\Omega_r}{c}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Substituindo (4.33) em (4.35) e fazendo alguma simplificação, vem:

$$F(\Omega_r) = \frac{1}{2\eta^2} + \frac{R^2}{4c^2} - \frac{2\omega_0^2}{\eta^4} - \frac{\omega_0^2}{2\eta^2\Omega_r^2} + \frac{\omega_0^4}{\eta^4\Omega_r^2} + \frac{\Omega_r^2}{\eta^4}. \quad (4.36)$$

Introduzindo (4.36) em (4.15) e fatorando, obtemos finalmente:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} t_0^r = \left[\frac{3}{2} + \frac{R^2\eta^2}{4c^2} - \frac{2\omega_0^2}{\eta^2} - \frac{\omega_0^2}{2\Omega_r^2} + \frac{\omega_0^4}{\eta^2\Omega_r^2} + \frac{\Omega_r^2}{\eta^2} \right]^{-1/2} = \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} &= \Omega_r \left[\frac{1}{\eta^2} (\omega_0^2 - \Omega_r^2)^2 + \frac{1}{2} (3\Omega_r^2 - \omega_0^2) + \frac{R^2\eta^2}{4c^2} \Omega_r^2 \right]^{-1/2} = \\ &= \Omega_r \left[\frac{R}{2\pi g c} (\omega_0^2 - \Omega_r^2)^2 + \frac{1}{2} (3\Omega_r^2 - \omega_0^2) + \frac{\pi g R}{2c} \Omega_r^2 \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

As entradas t_k^r ($k = 1, 2, \dots$) de \mathcal{T} são obtidas substituindo (4.38) em (4.13):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} t_k^r = \frac{\eta\omega_k\Omega_r}{\omega_k^2 - \Omega_r^2} \left[\frac{1}{\eta^2} (\omega_0^2 - \Omega_r^2)^2 + \frac{1}{2} (3\Omega_r^2 - \omega_0^2) + \frac{R^2\eta^2}{4c^2} \Omega_r^2 \right]^{-1/2}. \quad (4.39)$$

5 *Formulação das coordenadas vestidas*

5.1 O problema da estabilidade do vácuo e a aproximação de onda girante

Recordando o que foi visto na seção 3.3, no modelo de Jaynes-Cummings, o hamiltoniano do sistema era dado por

$$\mathbf{H} = \hbar \omega_0 |e\rangle \langle e| + \hbar \omega \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{\mathbf{1}}{2} \right) + \mathbf{H}_{\text{RWA}} + \mathbf{H}', \quad (3.30)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{RWA}} &:= g \left(|e\rangle \langle g| \mathbf{a} + |g\rangle \langle e| \mathbf{a}^\dagger \right) \\ \mathbf{H}' &:= g \left(|g\rangle \langle e| \mathbf{a} + |e\rangle \langle g| \mathbf{a}^\dagger \right). \end{aligned}$$

Um fato importante a ser observado aqui é que o estado $|g\rangle \otimes |0\rangle$, que corresponde ao estado fundamental do sistema *sem interação*, é autoestado do hamiltoniano *com interação* — e, portanto, estável — na aproximação de onda girante, mas **não no caso geral**, uma vez que $\mathbf{H}_{\text{RWA}} |g\rangle \otimes |0\rangle = \mathbf{0}$, mas $\mathbf{H}' |g\rangle \otimes |0\rangle \neq \mathbf{0}$. Ora, a instabilidade do estado $|g\rangle \otimes |0\rangle$ significaria que, em princípio, de acordo com (3.30), fótons poderiam ser “criados do nada”, o que contradiz a experiência.

A resposta para este aparente paradoxo é que o estado $|g\rangle \otimes |0\rangle$ **não é** o verdadeiro estado fundamental (vácuo) do sistema interagente, cujo hamiltoniano é (3.30). Não obstante, no domínio de validade da aproximação de onda girante, o estado de vácuo do sistema pode ser descrito **aproximadamente** por $|g\rangle \otimes |0\rangle$. Encontrar a expressão para o verdadeiro estado fundamental do sistema no modelo de Jaynes-Cummings sem a RWA pode não ser uma tarefa fácil — para tanto, talvez tenhamos de recorrer a expansões perturbativas no termo \mathbf{H}' .

Consideremos agora o hamiltoniano (4.24) na página 71, do modelo que estamos estudando. A experiência nos diz que, se o estado do sistema for $|\mathfrak{n}\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle$, este é instável,

sendo que o oscilador pode, eventualmente, decair para estados menos excitados, distribuindo a energia liberada entre os modos do campo (emissão espontânea). Podemos tentar descrever este processo introduzindo os termos de acoplamento entre o átomo e os modos do campo que figuram em (4.1).

Procedendo assim, a instabilidade do estado $|n\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$ fica evidente — pois este já não é mais autoestado do hamiltoniano completo —, mas surge um impasse: o estado de vácuo, descrito por $|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle$, ou seja, o oscilador em seu estado fundamental e o campo em seu estado de vácuo, **também** é instável. Portanto, surge aqui a mesma inconsistência comentada para o modelo de Jaynes-Cummings.

Para corrigir este problema sem abandonar completamente o modelo, a primeira providência que poderíamos tomar é fazer a aproximação de onda girante, desprezando os dois últimos termos dentro do somatório em (4.2). Fazendo isto, no entanto, acabamos limitando a aplicabilidade do modelo a um domínio em que a aproximação de onda girante seja válida — paralelamente, no modelo de Jaynes-Cummings, a aproximação de onda girante é válida para um campo quase-ressonante com a transição atômica.

A motivação para introduzir as coordenadas vestidas consiste, justamente, em resolver este impasse: como modificar o problema, **sem** a necessidade da aproximação de onda girante, para que o estado de vácuo — ou melhor dizendo, aquilo que esperamos ser o estado de vácuo — do sistema seja estável?

5.2 Proposição das coordenadas vestidas

Para resolver o problema da estabilidade de vácuo discutido anteriormente, Malbouisson *et al.* propuseram as chamadas *coordenadas vestidas*¹ [2, 41, 42], ou *renormalizadas*² [43, 44]. Aqui, as duas denominações serão tratadas como sinônimos.

A proposta consiste no seguinte. Partindo da hipótese inicial de que as coordenadas normais (coletivas) provêm uma representação quântica correta para o modelo, buscaremos um novo conjunto de coordenadas, as coordenadas vestidas, denotadas aqui por $\bar{q}_0, \bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N$, que descreva corretamente, no lugar das coordenadas originais $q_0, q_1, q_2, \dots, q_N$, os estados individuais do oscilador e do campo. Concomitantemente, nesta nova representação, o estado de vácuo deve ser autoestado do hamiltoniano completo (*i.e.*, com os termos de interação) do sistema. Desse modo, interpretaremos as coordenadas $\bar{q}_0, \bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N$ como as *verdadeiras*

¹Não confundir com a idéia de átomo vestido, mencionada na seção 3.3.

²Por analogia aos métodos de renormalização em Teoria Quântica de Campos.

coordenadas físicas que descrevem o oscilador e o campo, se estes interagem entre si de acordo com o modelo de acoplamento linear.

Nesta nova representação, identificada pelo subscrito d , os estados que descrevem separadamente o oscilador e o campo são estados de Fock $|n_0\rangle_d \otimes |n_1\rangle_d \otimes |n_2\rangle_d \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle_d$. Para tal estado, temos o oscilador em seu estado n_0 -excitado e cada modo normal $k = 1, 2, \dots, N$ do campo com n_k fótons.

Analisando o hamiltoniano (4.1), vemos que os parâmetros do modelo que caracterizam individualmente o oscilador e o campo são as frequências $\omega_0, \omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$. Assim, gostaríamos que a função de onda associada ao estado $|n_0\rangle_d \otimes |n_1\rangle_d \otimes |n_2\rangle_d \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle_d$ seja da seguinte forma:

$$\begin{aligned} {}_d\langle \bar{q}_0 | \otimes {}_d\langle \bar{q}_1 | \otimes {}_d\langle \bar{q}_2 | \otimes \cdots \otimes {}_d\langle \bar{q}_N | n_0\rangle_d \otimes |n_1\rangle_d \otimes |n_2\rangle_d \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle_d &= \prod_{\mu=0}^N {}_d\langle \bar{q}_\mu | n_\mu \rangle_d = \\ &= \prod_{\mu=0}^N \psi_{n_\mu}(\bar{q}_\mu) =: \Psi_{n_0 n_1 n_2 \dots n_N}(\bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N), \end{aligned} \quad (5.1a)$$

onde $\psi_{n_\mu}(\bar{q}_\mu)$ são dadas por (A.15) na página 105 com³ $b = \omega_\mu$:

$$\psi_{n_\mu}(\bar{q}_\mu) = \left(\frac{\omega_\mu}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \frac{H_{n_\mu}\left(\sqrt{\frac{\omega_\mu}{\hbar}} \bar{q}_\mu\right)}{\sqrt{2^{n_\mu} n_\mu!}} \exp\left(-\frac{\omega_\mu \bar{q}_\mu^2}{2\hbar}\right). \quad (5.1b)$$

5.3 Determinação das coordenadas vestidas

As coordenadas vestidas são determinadas impondo-se as seguintes condições:

- a função de onda do vácuo do sistema, $\Psi_{000\dots 0}(\bar{q}_0, \bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N)$ deve
 - ser uma das autofunções do hamiltoniano do sistema;
 - corresponder a um estado de energia mínima;
- na ausência de acoplamento ($\eta = 0$), as coordenadas vestidas devem convergir para as coordenadas originais.

Estas condições são satisfeitas impondo-se que as funções de vácuo das famílias (4.25) e (5.1) sejam, ao menos, proporcionais entre si, *i.e.*,

$$\Psi_{000\dots 0}(\bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N) \propto \Phi_{000\dots 0}(Q_1, Q_2, \dots, Q_N) \iff$$

³Note que usaremos o parâmetro ω_0 (e não $\bar{\omega}_0$) para rotular a função de onda referente ao oscilador.

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_{\mu=0}^N \omega_{\mu} \bar{q}_{\mu}^2\right) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_{r=0}^N \Omega_r Q_r^2\right) \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow \sum_{\mu=0}^N \omega_{\mu} \bar{q}_{\mu}^2 = \sum_{r=0}^N \Omega_r Q_r^2 + A,
\end{aligned} \tag{5.2}$$

onde A é uma constante, que podemos tomar igual a 0, sem perda de generalidade. Definindo matrizes diagonais de ordem $N+1$, \mathcal{D}_{ω} e \mathcal{D}_{Ω} , cujos autovalores sejam, respectivamente, $\sqrt{\omega_{\mu}}$ e $\sqrt{\Omega_r}$, bem como uma matriz $\bar{\mathcal{X}}_{(N+1) \times 1}$, cujas entradas sejam $\bar{q}_0, \bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_N$, podemos reescrever (5.2), na forma matricial, como

$$\bar{\mathcal{X}}^T \mathcal{D}_{\omega} \mathcal{D}_{\omega} \bar{\mathcal{X}} = \mathcal{Q}^T \mathcal{D}_{\Omega} \mathcal{D}_{\Omega} \mathcal{Q}. \tag{5.3}$$

A igualdade (5.3) é satisfeita se $\mathcal{D}_{\omega} \bar{\mathcal{X}}$ e $\mathcal{D}_{\Omega} \mathcal{Q}$ estiverem relacionadas por uma transformação ortogonal \mathcal{M} :

$$\mathcal{D}_{\omega} \bar{\mathcal{X}} = \mathcal{M} \mathcal{D}_{\Omega} \mathcal{Q} \Leftrightarrow \bar{\mathcal{X}} = \mathcal{D}_{\omega}^{-1} \mathcal{M} \mathcal{D}_{\Omega} \mathcal{Q}. \tag{5.4}$$

Lembrando que, na ausência de acoplamento, as coordenadas originais, normais e vestidas devem coincidir, vemos que existe uma restrição sobre a escolha da transformação \mathcal{M} , a saber: naquelas condições, esta deve convergir para uma identidade. Qualquer transformação do tipo $\mathcal{U} \mathcal{T} \mathcal{U}^{-1}$ ou $\mathcal{U} \mathcal{T}^{-1} \mathcal{U}^{-1}$, onde \mathcal{U} é uma matriz ortogonal, atende a essas exigências. Por uma questão de simplicidade — e respeitando a analogia entre as novas coordenadas $\bar{\mathcal{X}}$ e as antigas \mathcal{X} — escolheremos $\mathcal{M} = \mathcal{T}$. Substituindo em (5.4), chegamos a uma transformação, que denotaremos como $\bar{\mathcal{T}}$, relacionando diretamente as coordenadas normais e vestidas:

$$\mathcal{Q} = \bar{\mathcal{T}}^{-1} \bar{\mathcal{X}}; \quad \bar{\mathcal{T}} = \mathcal{D}_{\omega}^{-1} \mathcal{T} \mathcal{D}_{\Omega}. \tag{5.5}$$

Podemos interpretar $\bar{\mathcal{T}}$ como uma versão “corrigida” da transformação \mathcal{T} , “correção” esta necessária para obtermos as coordenadas vestidas que resolvem o nosso paradoxo. Uma consequência imediata de (4.19) e da ortogonalidade de \mathcal{T} é a seguinte:

$$\begin{cases} \det \mathcal{D}_{\Omega} = \det \mathcal{D}_{\omega} \\ \det \mathcal{T} = 1 \end{cases} \implies \det \bar{\mathcal{T}} = 1,$$

ou seja, a transformação $\bar{\mathcal{T}}$ deixa invariante a medida de integração funcional. No entanto, $\bar{\mathcal{T}}$ não é uma transformação ortogonal — com efeito, $\bar{\mathcal{T}} \bar{\mathcal{T}}^T = \mathcal{D}_{\omega}^{-1} \mathcal{T} \mathcal{D}_{\Omega}^2 \mathcal{T}^{-1} \mathcal{D}_{\omega}^{-1} =: \mathcal{C} = \mathcal{C}^T$

difere da matriz identidade. Denotaremos as entradas da matriz \mathcal{C} recém-definida como

$$C_{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{\omega_\mu \omega_\nu}} \sum_{r=0}^N \Omega_r t_r^\mu t_r^\nu \quad (5.6)$$

e as de sua inversa \mathcal{C}^{-1} , por

$$Z_{\mu\nu} = \sqrt{\omega_\mu \omega_\nu} \sum_{r=0}^N \frac{t_r^\mu t_r^\nu}{\Omega_r}. \quad (5.7)$$

Com essa definição de \mathcal{C} , obtemos a seguinte relação auxiliar:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{T}}^{-T} \mathcal{D} \bar{\mathcal{T}}^{-1} &= \mathcal{D}_\omega \mathcal{T}^{-1} \mathcal{D}_\Omega^{-1} \mathcal{D}_\Omega^4 \mathcal{D}_\Omega^{-1} \mathcal{T} \mathcal{D}_\omega = \\ &= \mathcal{D}_\omega \left(\mathcal{D}_\omega \mathcal{D}_\omega^{-1} \right) \mathcal{T}^{-1} \mathcal{D}_\Omega^2 \mathcal{T} \left(\mathcal{D}_\omega^{-1} \mathcal{D}_\omega \right) \mathcal{D}_\omega = \\ &= \mathcal{D}_\omega^2 \left(\mathcal{D}_\omega^{-1} \mathcal{T}^{-1} \mathcal{D}_\Omega^2 \mathcal{T} \mathcal{D}_\omega^{-1} \right) \mathcal{D}_\omega^2 = \\ &= \mathcal{D}_\omega^2 \mathcal{C} \mathcal{D}_\omega^2, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde $\bar{\mathcal{T}}^{-T}$ é uma notação abreviada para $(\bar{\mathcal{T}}^T)^{-1}$ — que, por sua vez, é igual a $(\bar{\mathcal{T}}^{-1})^T$.

Substituindo $\mathcal{X} = \mathcal{T} \bar{\mathcal{T}}^{-1} \bar{\mathcal{X}}$ na expressão (4.4) e utilizando (5.8), podemos escrever:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\bar{\mathcal{X}}_F, t_F | \bar{\mathcal{X}}_I, t_I) &= \int \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left[\left(\frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt} \right)^T \bar{\mathcal{T}}^{-T} \bar{\mathcal{T}}^{-1} \frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt} - \bar{\mathcal{X}}^T \bar{\mathcal{T}}^{-T} \mathcal{D} \bar{\mathcal{T}}^{-1} \bar{\mathcal{X}} \right] dt \right) \mathcal{D}[\bar{\mathcal{X}}(t)] = \\ &= \int \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \left[\left(\frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt} \right)^T e^{-1} \frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt} - \bar{\mathcal{X}}^T \mathcal{D}_\omega^2 \mathcal{C} \mathcal{D}_\omega^2 \bar{\mathcal{X}} \right] dt \right) \mathcal{D}[\bar{\mathcal{X}}(t)] = \\ &= \int \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_I}^{t_F} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N [Z_{\mu\nu} \dot{\bar{q}}_\mu \dot{\bar{q}}_\nu - C_{\mu\nu} \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu] dt \right) \prod_{\mu=0}^N \mathcal{D}[\bar{q}_\mu(t)]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Aplicando a transformação (5.5) diretamente em (4.28), obtemos a seguinte expressão para o propagador do sistema:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\bar{\mathcal{X}}_F, t_F | \bar{\mathcal{X}}_I, t_I) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{r=0}^N \left\{ \frac{\omega_r}{2\pi i \hbar \text{sen}[\Omega_r (t_F - t_I)]} \right\}^{1/2} \\ &\times \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \sum_{s=0}^N \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N \frac{\sqrt{\omega_\mu \omega_\nu} t_s^\mu t_s^\nu}{\text{sen}[\Omega_r (t_F - t_I)]} \left\{ (\bar{q}_{\mu F} \bar{q}_{\nu F} + \bar{q}_{\mu I} \bar{q}_{\nu I}) \cos[\Omega_s (t_F - t_I)] - 2 \bar{q}_{\mu F} \bar{q}_{\nu I} \right\} \right) \end{aligned} \quad (5.10)$$

Observando a forma de (5.9), identificamos que a lagrangeana do sistema, escrita em termos de coordenadas vestidas, é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_d\left(\bar{\mathbf{x}}, \frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt}\right) &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt}\right)^T e^{-1} \frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} - \bar{\mathbf{x}}^T \mathcal{D}_\omega^2 e \mathcal{D}_\omega^2 \bar{\mathbf{x}} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N [Z_{\mu\nu} \dot{\bar{q}}_\mu \dot{\bar{q}}_\nu - C_{\mu\nu} \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu]. \end{aligned} \quad (5.11)$$

O momento canonicamente conjugado à coordenada \bar{q}_μ pode ser obtido de (5.11) como

$$\bar{p}_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}_d}{\partial \dot{\bar{q}}_\mu} = \sum_{\nu=0}^N Z_{\mu\nu} \dot{\bar{q}}_\nu, \quad (5.12)$$

Podemos inverter a relação (5.12), obtendo:

$$\dot{\bar{q}}_\mu = \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} \bar{p}_\nu. \quad (5.13)$$

Assim, com o auxílio de (5.13), podemos calcular a transformada de Legendre de (5.11), obtendo a hamiltoniana do sistema em coordenadas vestidas:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_d &= \sum_{\mu=0}^N \bar{p}_\mu \dot{\bar{q}}_\mu - \mathcal{L}_d = \sum_{\mu=0}^N \bar{p}_\mu \dot{\bar{q}}_\mu - \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N Z_{\mu\nu} \dot{\bar{q}}_\nu \dot{\bar{q}}_\mu}_{\bar{p}_\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \bar{p}_\mu \dot{\bar{q}}_\mu + \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} (\bar{p}_\mu \bar{p}_\nu + \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu). \end{aligned} \quad (5.14)$$

O operador hamiltoniano correspondente a \mathcal{H}_d na representação das coordenadas vestidas se escreve, então, como

$$\mathbf{H}_d = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} (\bar{p}_\mu \bar{p}_\nu + \omega_\mu \omega_\nu \bar{q}_\mu \bar{q}_\nu). \quad (5.15)$$

Introduzindo operadores de criação, $\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger$, e aniquilação, $\bar{\mathbf{a}}_\mu$, nessa representação, o hamiltoniano (5.15) se escreve como

$$\mathbf{H}_d = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} \left[-\frac{\sqrt{\omega_\mu \omega_\nu}}{2} (\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger - \bar{\mathbf{a}}_\mu) (\bar{\mathbf{a}}_\nu^\dagger - \bar{\mathbf{a}}_\nu) + \frac{\sqrt{\omega_\mu \omega_\nu}}{2} (\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger + \bar{\mathbf{a}}_\mu) (\bar{\mathbf{a}}_\nu^\dagger + \bar{\mathbf{a}}_\nu) \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N C_{\mu\nu} \sqrt{\omega_\mu \omega_\nu} \left(\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger \bar{\mathbf{a}}_\nu + \bar{\mathbf{a}}_\mu \bar{\mathbf{a}}_\nu^\dagger \right) = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^N \sum_{\nu=0}^N \sum_{r=0}^N \hbar \Omega_r t_r^\mu t_r^\nu \left(\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger \bar{\mathbf{a}}_\nu + \bar{\mathbf{a}}_\mu \bar{\mathbf{a}}_\nu^\dagger \right) = \\
&= \sum_{r=0}^N \hbar \Omega_r \left\{ \sum_{\mu=0}^N \left[(t_r^\mu)^2 \bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger \bar{\mathbf{a}}_\mu + \sum_{\nu < \mu} t_r^\mu t_r^\nu \left(\bar{\mathbf{a}}_\mu^\dagger \bar{\mathbf{a}}_\nu + \bar{\mathbf{a}}_\mu \bar{\mathbf{a}}_\nu^\dagger \right) \right] + \frac{\mathbf{1}}{2} \right\}. \quad (5.16)
\end{aligned}$$

Fica evidente aqui, com a expressão (5.16), que o estado de vácuo, na representação de coordenadas vestidas, $|0\rangle_d \otimes |0\rangle_d \otimes \cdots \otimes |0\rangle_d$, é um autoestado do hamiltoniano completo do sistema e, portanto, estacionário, precisamente como buscávamos. É nessa representação que devemos, portanto, calcular amplitudes e probabilidades de transição, por exemplo. Isto será feito a seguir.

5.4 Cálculo das amplitudes de transição

Seja o estado inicial do sistema, no instante $t = 0$, dado por $|\mathcal{M}\rangle_d := \bigotimes_{\mu=0}^N |m_\mu\rangle_d$. Qual é a amplitude de probabilidade de o sistema ser encontrado, num instante t arbitrário, no estado $|\mathcal{N}\rangle_d := \bigotimes_{\nu=0}^N |n_\nu\rangle_d$? Tal amplitude, que denotaremos por $\mathbb{A}_{0:m_0 \dots 1:m_1 \dots N:m_N}^{0:n_0 \dots 1:n_1 \dots N:n_N}(t)$, é dada por

$$\mathbb{A}_{0:m_0 \dots 1:m_1 \dots N:m_N}^{0:n_0 \dots 1:n_1 \dots N:n_N}(t) = {}_d \left\langle \mathcal{N} \left| \exp\left(\frac{it}{\hbar} \mathbf{H}\right) \right| \mathcal{M} \right\rangle_d. \quad (5.17)$$

Introduzindo duas decomposições da identidade em termos de autoestados de posição em coordenadas vestidas, que denotaremos coletivamente por $\bar{\mathcal{X}}$ e $\bar{\mathcal{Y}}$, podemos reescrever (5.17) como

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}_{0:m_0 \dots 1:m_1 \dots N:m_N}^{0:n_0 \dots 1:n_1 \dots N:n_N}(t) &= \int {}_d \langle \mathcal{N} | \bar{\mathcal{Y}} \rangle_d \left\langle \bar{\mathcal{Y}} \left| \exp\left(\frac{it}{\hbar} \mathbf{H}\right) \right| \bar{\mathcal{X}} \right\rangle_d {}_d \langle \bar{\mathcal{X}} | \mathcal{M} \rangle_d d\bar{\mathcal{X}} d\bar{\mathcal{Y}} = \\
&= \int \left(\prod_{\nu=0}^N \psi_{n_\nu}(\bar{y}_\nu) \right) K(\bar{\mathcal{Y}}, t | \bar{\mathcal{X}}, 0) \left(\prod_{\mu=0}^N \psi_{m_\mu}(\bar{x}_\mu) \right) d\bar{\mathcal{X}} d\bar{\mathcal{Y}}. \quad (5.18)
\end{aligned}$$

onde $\psi_{m_\mu}(\bar{x}_\mu)$ e $\psi_{n_\nu}(\bar{y}_\nu)$ são dadas por (A.15) na página 105 e $K(\bar{\mathcal{Y}}, t | \bar{\mathcal{X}}, 0)$ é dado por (5.10).

Calculemos inicialmente as amplitudes de transição do tipo $\mathbb{A}_{0:0 \dots \mu:0 \dots \nu:n \dots N:0}^{0:0 \dots \mu:m \dots \nu:0 \dots N:0}(t)$, que denotaremos abreviadamente por $\mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t)$. Neste caso, teremos:

$${}_d \langle \bar{\mathcal{X}} | \mathcal{M} \rangle_d = \left[\prod_{\alpha=0}^N \left(\frac{\omega_\alpha}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \right] \frac{H_m \left(\sqrt{\frac{\omega_\mu}{\hbar}} \bar{x}_\mu \right)}{\sqrt{2^m m!}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\beta=0}^N \frac{\omega_\beta}{\hbar} \bar{x}_\beta^2 \right) \quad (5.19a)$$

$${}_d \langle \bar{\mathcal{Y}} | \mathcal{N} \rangle_d = \left[\prod_{\alpha=0}^N \left(\frac{\omega_\alpha}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \right] \frac{H_n \left(\sqrt{\frac{\omega_\nu}{\hbar}} \bar{y}_\nu \right)}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\beta=0}^N \frac{\omega_\beta}{\hbar} \bar{y}_\beta^2 \right). \quad (5.19b)$$

Substituindo (5.19) em (5.18) e fazendo a transformação (5.5) para coordenadas normais, vem:

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) &= \left(\prod_{\alpha=0}^N \sqrt{\frac{\omega_{\alpha}}{\pi \hbar}} \right) \frac{1}{\sqrt{2^{m+n} m! n!}} \int \exp \left(\sum_{r=0}^N -\frac{\Omega_r}{2\hbar} (X_r^2 + Y_r^2) \right) K(y, t | X, 0) \\ &\quad \times H_n \left(\sum_{r=0}^N \sqrt{\frac{\Omega_r}{\hbar}} Y_r \right) H_m \left(\sum_{s=0}^N \sqrt{\frac{\Omega_s}{\hbar}} X_s \right) dX dy, \quad (5.20) \end{aligned}$$

onde $K(y, t | X, 0)$ é dado por (4.28). Calculemos os dois primeiros termos da integral em (5.20):

$$\begin{aligned} &\exp \left(\sum_{r=0}^N -\frac{\Omega_r}{2\hbar} (X_r^2 + Y_r^2) \right) K(y, t | X, 0) = \\ &= \left(\prod_{r=0}^N \sqrt{\frac{\Omega_r}{2\pi i \hbar \text{sen}(\Omega_r t)}} \right) \exp \left(\sum_{r=0}^N \left[\frac{i \cos(\Omega_r t)}{\text{sen}(\Omega_r t)} - 1 \right] \frac{\Omega_r}{2\hbar} (X_r^2 + Y_r^2) - \sum_{s=0}^N \frac{\Omega_s}{\hbar} \frac{X_s Y_s}{\text{sen}(\Omega_s t)} \right) = \\ &= \left(\prod_{r=0}^N \sqrt{\frac{\Omega_r}{2\pi i \hbar \text{sen}(\Omega_r t)}} \right) \exp \left(\sum_{r=0}^N \frac{\Omega_r}{2\hbar} \frac{[i e^{i\Omega_r t} (X_r^2 + Y_r^2) - 2X_r Y_r]}{\text{sen}(\Omega_r t)} \right). \quad (5.21) \end{aligned}$$

Substituindo (5.21) em (5.20) e fazendo a mudança de variáveis $\chi_r = \sqrt{\frac{\Omega_r}{\hbar}} Y_r$, $\xi_r = \sqrt{\frac{\Omega_r}{\hbar}} X_r$, obtemos, com o auxílio de (4.19):

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) &= \left[\prod_{r=0}^N \frac{1}{\pi \sqrt{2i \text{sen}(\Omega_r t)}} \right] \frac{1}{\sqrt{2^{m+n} m! n!}} \\ &\quad \times \int H_n \left(\sum_{r=0}^N t_r^r \chi_r \right) \exp \left(\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \frac{e^{i\Omega_r t}}{\text{sen}(\Omega_r t)} \chi_r^2 \right) F_{\mu}(\chi_0, \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N, t) \prod_{r=0}^N d\chi_r, \quad (5.22) \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} F_{\mu}(\chi_0, \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N, t) &= \int H_m \left(\sum_{s=0}^N t_{\mu}^s \xi_s \right) \exp \left(\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \frac{e^{i\Omega_r t}}{\text{sen}(\Omega_r t)} \xi_r^2 - 2\chi_r \xi_r \right) \prod_{s=0}^N d\xi_s = \\ &= H_m \left(\sum_{s=0}^N t_{\mu}^s i \text{sen}(\Omega_s t) \frac{\partial}{\partial \chi_s} \right) \left[\int \exp \left(\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \frac{e^{i\Omega_r t}}{\text{sen}(\Omega_r t)} \xi_r^2 - 2\chi_r \xi_r \right) \prod_{s=0}^N d\xi_s \right]. \quad (5.23) \end{aligned}$$

Calculando as integrais gaussianas em (5.23), obtemos

$$\begin{aligned} F_{\mu}(\chi, t) &= \left[\prod_{r=0}^N \frac{\sqrt{2\pi i \text{sen}(\Omega_s t)}}{e^{\frac{i}{2}\Omega_s t}} \right] \\ &\quad \times H_m \left(\sum_{s=0}^N t_{\mu}^s i \text{sen}(\Omega_s t) \frac{\partial}{\partial \chi_s} \right) \left[\exp \left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \frac{e^{-i\Omega_r t}}{\text{sen}(\Omega_r t)} \chi_r^2 \right) \right]. \quad (5.24) \end{aligned}$$

Utilizando a identidade (40) de [45],

$$H_n \left(\sum_{r=0}^N t_\mu^r z_r \right) = n! \sum_{l \in \Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\mu^r)^{l_r}}{l_r!} H_{l_r}(z_r) \right]$$

$$\Lambda[n] := \left\{ (l_0, l_1, l_2, \dots, l_N) \in \mathbb{N}^{N+1} \mid \sum_{r=0}^N l_r = n \right\},$$

e substituindo (5.24) em (5.22), vem:

$$A_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(\mathbf{t}) = \pi^{-(N+1)/2} e^{-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t} \sqrt{\frac{m!n!}{2^{m+n}}} \sum_{s \in \Lambda[m]} \sum_{l \in \Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\nu^r)^{l_r} (t_\mu^r)^{s_r}}{l_r! s_r!} I_{l_r s_r} \right], \quad (5.25)$$

onde

$$I_{l_r s_r} := \int \exp\left(\frac{i e^{i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) H_{l_r}(\chi_r) H_{s_r}\left(i \operatorname{sen}(\Omega_r t) \frac{\partial}{\partial \chi_r}\right) \left[\exp\left(-\frac{i e^{-i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) \right] d\chi_r =$$

$$= \int e^{-\chi_r^2} H_{l_r}(\chi_r) \left\{ \exp\left(\frac{i e^{-i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) H_{s_r}\left(i \operatorname{sen}(\Omega_r t) \frac{\partial}{\partial \chi_r}\right) \left[\exp\left(-\frac{i e^{-i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) \right] \right\} d\chi_r. \quad (5.26)$$

Repetindo os cálculos acima, mas integrando primeiro nas coordenadas χ , obteríamos um resultado análogo a (5.25), mas com $I_{l_r s_r}$ substituída por

$$I'_{l_r s_r} := \int e^{-\xi_r^2} H_{s_r}(\xi_r)$$

$$\times \left\{ \exp\left(\frac{i e^{-i\Omega_r t} \xi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) H_{l_r}\left(i \operatorname{sen}(\Omega_r t) \frac{\partial}{\partial \xi_r}\right) \left[\exp\left(-\frac{i e^{-i\Omega_r t} \xi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) \right] \right\} d\xi_r. \quad (5.27)$$

Como o resultado final deve ser independente da ordem de integração, concluímos que $I_{l_r s_r} = I'_{l_r s_r}$. Por outro lado, comparando (5.26) e (5.27), concluímos que $I_{l_r s_r} = I_{s_r l_r}$.

Para calcular $I_{l_r s_r}$, valemo-nos do **teorema A.1** na página 104. As expressões entre chaves em (5.26) e (5.27) são polinômios de grau s_r em χ_r e ξ_r , respectivamente. Se $l_r > s_r$, teremos, por **teorema A.1**, que $I_{l_r s_r} = 0$. Por outro lado, como $I_{l_r s_r} = I_{s_r l_r}$, concluímos que, para $l_r < s_r$, também teremos $I_{l_r s_r} = 0$. Assim, a única integral não-nula é aquela em que $l_r = s_r$.

Ainda valendo-se do **teorema A.1**, vemos que o único termo entre chaves em (5.26) cuja contribuição é não-nula é o de grau máximo. Uma vez que o monômio de maior grau em $H_n(x)$, de acordo com o **corolário A.1**, é $(2x)^n$, temos:

$$I_{l_r s_r} = [2i \operatorname{sen}(\Omega_r t)]^{s_r} \int e^{-\chi_r^2} H_{l_r}(\chi_r) \exp\left(\frac{i e^{-i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) \frac{\partial^{s_r}}{\partial \chi_r^{s_r}} \exp\left(-\frac{i e^{-i\Omega_r t} \chi_r^2}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}\right) d\chi_r =$$

$$\begin{aligned}
&= [2i \operatorname{sen}(\Omega_r t)]^{s_r} \left(\sqrt{-\frac{i e^{-i\Omega_r t}}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}} \right)^{s_r} \int e^{-\chi_r^2} H_{l_r}(\chi_r) H_{s_r} \left(\sqrt{\frac{i e^{-i\Omega_r t}}{2 \operatorname{sen}(\Omega_r t)}} \chi_r \right) d\chi_r = \\
&= e^{-i s_r \Omega_r t} 2^{s_r} \int e^{-\chi_r^2} H_{l_r}(\chi_r) \chi_r^{s_r} d\chi_r = \\
&= e^{-i s_r \Omega_r t} 2^{s_r} s_r! \sqrt{\pi} \delta_{l_r s_r}.
\end{aligned} \tag{5.28}$$

onde, na segunda e terceira passagens, utilizamos a seguinte propriedade, obtida a partir do **lema A.1**:

$$e^{ax^2} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-ax^2} = (-\sqrt{a})^n H_n(\sqrt{a}x) \sim (-2a)^n x^n.$$

Substituindo (5.28) em (5.25), obtemos:

$$\mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) = e^{-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t} \sqrt{\frac{m!n!}{2^{m+n}}} \sum_{\Lambda[m]} \sum_{\Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\nu^r)^{l_r} (t_\mu^r)^{s_r}}{l_r!} 2^{s_r} e^{-i\Omega_r s_r t} \delta_{l_r s_r} \right].$$

Na equação acima, temos deltas de Kronecker dentro de um produtório. Este, portanto, será nulo a menos que $l_r = s_r$ **para todo** r , o que implica, nesta mesma equação, $n = \sum_{r=0}^N l_r = \sum_{r=0}^N s_r = m$. Em suma, $\mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) = 0$ se $n \neq m$, enquanto que, para $n = m$, teremos, utilizando mais uma vez a identidade (40) de [45]:

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}_{\mu:n \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t\right) \frac{n!}{2^n} \sum_{\Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\mu^r t_\nu^r e^{-i\Omega_r t})^{l_r}}{l_r!} 2^{l_r} \right] = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t\right) \frac{n!}{2^n} 2^n \sum_{\Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\mu^r t_\nu^r e^{-i\Omega_r t})^{l_r}}{l_r!} \right] = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t\right) \underbrace{n! \sum_{\Lambda[n]} \prod_{r=0}^N \left[\frac{(t_\mu^r t_\nu^r e^{-i\Omega_r t})^{l_r}}{l_r!} \right]}_n = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t\right) \left(\sum_{r=0}^N t_\mu^r t_\nu^r e^{-i\Omega_r t} \right)^n,
\end{aligned}$$

ou, de modo mais sucinto,

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}_{\mu:m \nu:0}^{\mu:0 \nu:n}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{r=0}^N \Omega_r t\right) [f_{\mu \rightarrow \nu}(t)]^n \delta_{mn} = \\
&= \exp\left(-\frac{i E_{00\dots 0} t}{\hbar}\right) [f_{\mu \rightarrow \nu}(t)]^n \delta_{mn},
\end{aligned} \tag{5.29}$$

onde $E_{00\dots 0}$ é a energia do vácuo e

$$f_{\mu \rightarrow \nu}(t) := \sum_{r=0}^N t_\mu^r t_\nu^r e^{-i\Omega_r t}. \tag{5.30}$$

É importante notar que (5.29) é nula para $n \neq m$. Isto significa este modelo de acoplamento linear prevê uma espécie de *regra de seleção* que proíbe, por exemplo, que um átomo no seu segundo estado excitado decaia para o seu estado fundamental emitindo **um único** fóton.

Vemos, de (5.29), que $|f_{\mu \rightarrow \nu}(t)|^2$ é a probabilidade de ocorrer uma transição de um *quantum* de energia do modo μ para o modo ν (note que $f_{\mu \rightarrow \nu}(t) = f_{\nu \rightarrow \mu}(t)$). Isto é corroborado pela seguinte propriedade de $f_{\mu \rightarrow \nu}(t)$:

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=0}^N |f_{\mu \rightarrow \nu}(t)|^2 &= \sum_{\nu=0}^N \left(\sum_{s=0}^N t_{\mu}^s t_{\nu}^s e^{i\Omega_s t} \right) \left(\sum_{r=0}^N t_{\mu}^r t_{\nu}^r e^{-i\Omega_r t} \right) = \\ &= \sum_{r=0}^N \sum_{s=0}^N e^{i(\Omega_s - \Omega_r)t} t_{\mu}^r t_{\mu}^s \underbrace{\sum_{\nu=0}^N t_{\nu}^r t_{\nu}^s}_{\delta_{rs}} = \\ &= \sum_{r=0}^N (t_{\mu}^r)^2 = 1, \end{aligned} \quad (5.31)$$

ou ainda, escrita de um modo mais sugestivo,

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 + \sum_{k=1}^N |f_{0 \rightarrow k}(t)|^2 = 1 \quad (5.32)$$

$$|f_{k_1 \rightarrow 0}(t)|^2 + \sum_{k_2=1}^N |f_{k_1 \rightarrow k_2}(t)|^2 = 1. \quad (5.33)$$

5.5 As regras de soma

A probabilidade de que o sistema, inicialmente no estado $|\mathcal{M}\rangle_d$ seja encontrado, num instante t , no estado $|\mathcal{N}\rangle_d$, será denotada por

$$\mathbb{P}_{0:m_0 \ 1:m_1 \ \dots \ N:m_N}^{0:n_0 \ 1:n_1 \ \dots \ N:n_N}(t) = \left| \mathbb{A}_{0:m_0 \ 1:m_1 \ \dots \ N:m_N}^{0:n_0 \ 1:n_1 \ \dots \ N:n_N}(t) \right|^2.$$

Tomando $\mu = \nu = 0$ e $m = n = 1$ em (5.29), obtemos $\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) = |f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2$ para a probabilidade de o átomo permanecer no seu primeiro estado excitado. Analogamente, $\mathbb{P}_{0:1 \ k:0}^{0:0 \ k:1}(t) = |f_{0 \rightarrow k}(t)|^2$ é a probabilidade de o átomo decair do seu primeiro estado excitado, emitindo um fóton no modo k . Obviamente, para este caso, temos:

$$\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) + \sum_{k=1}^N \mathbb{P}_{0:1 \ k:0}^{0:0 \ k:1}(t) = 1, \quad (5.34)$$

que é precisamente o resultado (5.32). Do mesmo modo, podemos escrever (5.33) como

$$\mathbb{P}_{0:0\ k_1:1}^{0:1\ k_1:0}(t) + \sum_{k_2=1}^N \mathbb{P}_{k_1:1\ k_2:0}^{k_1:0\ k_2:1}(t) = 1 \quad (5.35)$$

onde $\mathbb{P}_{0:0\ k_1:1}^{0:1\ k_1:0}(t) = |f_{k_1 \rightarrow 0}(t)|^2$ é a probabilidade de o átomo, em seu estado fundamental, absorver um fóton do modo k_1 , bem como $\mathbb{P}_{k_1:1\ k_2:0}^{k_1:0\ k_2:1}(t) = |f_{k_1 \rightarrow k_2}(t)|^2$ é a probabilidade de o átomo permanecer no seu estado fundamental, espalhando um fóton do modo k_1 para um outro modo k_2 .

Observemos que as equações (5.34) e (5.35) foram obtidas utilizando apenas o fato de que \mathcal{T} é uma transformação ortogonal. Esta mesma estratégia pode ser empregada para calcular outras probabilidades.

Por exemplo, se o átomo estiver inicialmente no seu *segundo* estado excitado e o campo, no seu estado de vácuo, há três possibilidades para a evolução do sistema até um instante t , haja vista a regra de seleção prevista pelo modelo, sobre a qual discutimos anteriormente:

- o átomo permanece no seu segundo estado excitado — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:2}^{0:2}(t)$;
- o átomo decai para o seu primeiro estado excitado, emitindo um fóton num modo arbitrário k — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:2\ k:0}^{0:1\ k:1}(t)$;
- o átomo decai para o seu estado fundamental, emitindo dois fótons em modos arbitrários k_1 e k_2 — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:2\ k_1:0\ k_2:0}^{0:0\ k_1:1\ k_2:1}(t)$.

Obviamente, devemos ter

$$\mathbb{P}_{0:2}^{0:2}(t) + \sum_{k=1}^N \mathbb{P}_{0:2\ k:0}^{0:1\ k:1}(t) + \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \mathbb{P}_{0:2\ k_1:0\ k_2:0}^{0:0\ k_1:1\ k_2:1}(t) = 1. \quad (5.36)$$

Tomando o quadrado de (5.35), encontramos:

$$\left(\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t)\right)^2 + 2\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \sum_{k=1}^N \mathbb{P}_{0:1\ k:0}^{0:0\ k:1}(t) + \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N \mathbb{P}_{0:1\ k_1:0}^{0:0\ k_1:1}(t) \mathbb{P}_{0:1\ k_2:0}^{0:0\ k_2:1}(t) = 1. \quad (5.37)$$

Podemos agora identificar (5.36) com (5.37). Fazendo isso, obtemos:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{0:2}^{0:2}(t) &= \left(\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t)\right)^2 = |f_{0 \rightarrow 0}(t)|^4 \\ \mathbb{P}_{0:2\ k:0}^{0:1\ k:1}(t) &= 2\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \mathbb{P}_{0:1\ k:0}^{0:0\ k:1}(t) = 2|f_{0 \rightarrow 0}(t) f_{0 \rightarrow k}(t)|^2 \\ \mathbb{P}_{0:2\ k_1:0\ k_2:0}^{0:0\ k_1:1\ k_2:1}(t) &= \mathbb{P}_{0:1\ k_1:0}^{0:0\ k_1:1}(t) \mathbb{P}_{0:1\ k_2:0}^{0:0\ k_2:1}(t) = |f_{0 \rightarrow k_1}(t) f_{0 \rightarrow k_2}(t)|^2. \end{aligned}$$

Consideremos ainda um segundo exemplo, em que, inicialmente, o átomo está no seu primeiro estado excitado e há um fóton num modo k_1 do campo. As possibilidades de evolução deste sistema são as seguintes:

- o átomo absorve aquele fóton, indo para o seu segundo estado excitado — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:1 k_1:1}^{0:2 k_1:0}(t)$;
- o átomo permanece no seu primeiro estado excitado, espalhando o fóton para um outro modo k_2 — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0}^{0:1 k_1:0 k_2:1}(t)$;
- o átomo decai para o seu estado fundamental, emitindo um fóton no modo k_2 e espalhando o outro fóton para um modo k_3 — com probabilidade $\mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0 k_3:0}^{0:0 k_1:0 k_2:1 k_3:1}(t)$.

Devemos ter:

$$\mathbb{P}_{0:1 k_1:1}^{0:2 k_1:0}(t) + \sum_{k_2=1}^N \mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0}^{0:1 k_1:0 k_2:1}(t) + \sum_{k_2=1}^N \sum_{k_3=1}^N \mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0 k_3:0}^{0:0 k_1:0 k_2:1 k_3:1}(t) = 1. \quad (5.38)$$

Por outro lado, tomando o produto de (5.34) por (5.35), vem:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \mathbb{P}_{0:0 k_1:1}^{0:1 k_1:0}(t) + \sum_{k_2=1}^N \left[\mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \mathbb{P}_{k_1:1 k_2:0}^{k_1:0 k_2:1}(t) + \mathbb{P}_{0:0 k_1:1}^{0:1 k_1:0}(t) \mathbb{P}_{0:1 k_2:0}^{0:0 k_2:1}(t) \right] + \\ \sum_{k_2=1}^N \sum_{k_3=1}^N \mathbb{P}_{0:1 k_2:0}^{0:0 k_2:1}(t) \mathbb{P}_{k_1:1 k_3:0}^{k_1:0 k_3:1}(t) = 1. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Como fizemos antes, podemos identificar (5.38) com (5.39) — tomando o cuidado de simetrizar o último termo no primeiro membro desta em relação aos modos k_2 e k_3 . Fazendo isso, encontramos:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{0:1 k_1:1}^{0:2 k_1:0}(t) &= \mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \mathbb{P}_{0:0 k_1:1}^{0:1 k_1:0}(t) = |f_{0 \rightarrow 0}(t) f_{0 \rightarrow k_1}(t)|^2 \\ \mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0}^{0:1 k_1:0 k_2:1}(t) &= \mathbb{P}_{0:1}^{0:1}(t) \mathbb{P}_{k_1:1 k_2:0}^{k_1:0 k_2:1}(t) + \mathbb{P}_{0:0 k_1:1}^{0:1 k_1:0}(t) \mathbb{P}_{0:1 k_2:0}^{0:0 k_2:1}(t) = \\ &= |f_{0 \rightarrow 0}(t) f_{k_1 \rightarrow k_2}(t)|^2 + |f_{k_1 \rightarrow 0}(t) f_{0 \rightarrow k_2}(t)|^2 \\ \mathbb{P}_{0:1 k_1:1 k_2:0 k_3:0}^{0:0 k_1:0 k_2:1 k_3:1}(t) &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{P}_{0:1 k_2:0}^{0:0 k_2:1}(t) \mathbb{P}_{k_1:1 k_3:0}^{k_1:0 k_3:1}(t) + \mathbb{P}_{0:1 k_3:0}^{0:0 k_3:1}(t) \mathbb{P}_{k_1:1 k_2:0}^{k_1:0 k_2:1}(t) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(|f_{0 \rightarrow k_2}(t) f_{k_1 \rightarrow k_3}(t)|^2 + |f_{0 \rightarrow k_3}(t) f_{k_1 \rightarrow k_2}(t)|^2 \right). \end{aligned}$$

Empregando essa estratégia extensivamente, podemos obter as probabilidades associadas a qualquer processo de radiação, ou absorção, do sistema. Esse raciocínio foi introduzido em [43], em que foi denominado *regras de soma*. Assim

Para concluir este capítulo, aplicaremos os resultados obtidos até aqui a dois exemplos em CQED. Daqui para diante, adotaremos a escolha de parâmetros (4.6) na página 65.

5.6 Oscilador “confinado” numa cavidade arbitrariamente grande

O primeiro trabalho sobre coordenadas vestidas [2] trata o exemplo de um oscilador (partícula) “confinado” numa cavidade de raio R arbitrariamente grande e acoplado ao campo eletromagnético, o que deve fornecer, no caso limite, os mesmos resultados — ou, ao menos, resultados muito próximos — dos já conhecidos para a partícula livre. Consideraremos aqui o caso particular em que o átomo está inicialmente no seu primeiro estado excitado e o campo na cavidade, no seu estado de vácuo.

Lembrando que $\eta = \sqrt{2g\Delta\omega}$, onde $\Delta\omega = \pi c/R$ e notando que, no limite para $R \rightarrow \infty$, o espectro de frequências torna-se contínuo, ou seja, temos $\Delta\omega \rightarrow 0$ com $(\Delta\Omega/\Delta\omega) \rightarrow 1$, obtemos, de (4.38) na página 73, o seguinte resultado para t_0^r :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} t_0^r = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{\sqrt{2g}\Omega_r \sqrt{\Delta\Omega}}{\sqrt{(\Omega_r^2 - \omega_0^2)^2 + \pi^2 g^2 \Omega_r^2}}. \quad (5.40)$$

Como vimos em (5.29), a amplitude de probabilidade de o átomo permanecer excitado é, a menos de uma fase, dada por

$$f_{0 \rightarrow 0}(t) = \sum_{r=1}^{\infty} (t_0^r)^2 e^{-i\Omega_r t}. \quad (5.41)$$

No limite para $R \rightarrow \infty$, utilizando o resultado (5.40), podemos transformar o somatório em (5.41) numa integral:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} f_{0 \rightarrow 0}(t) = \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{2g\Omega_r^2 e^{-i\Omega_r t} \Delta\Omega}{(\Omega_r^2 - \omega_0^2)^2 + \pi^2 g^2 \Omega_r^2} = \int_0^{\infty} \frac{2g\Omega^2 e^{-i\Omega t}}{(\Omega^2 - \omega_0^2)^2 + \pi^2 g^2 \Omega^2} d\Omega. \quad (5.42)$$

A partir deste ponto, será útil introduzir um parâmetro κ definido como

$$\kappa := \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\pi^2 g^2}{4}}. \quad (5.43)$$

Podemos desenvolver a integral em (5.42) em termos de κ , obtendo os seguintes resultados:

$\kappa^2 > 0$

$$f_{0 \rightarrow 0}(t) = \left(1 - \frac{i\pi g}{2\kappa}\right) e^{-(\pi g/2 + i\kappa)t} + 2iJ(t),$$

$$\kappa^2 = 0$$

$$f_{0 \rightarrow 0}(t) = \left(1 - \frac{\pi g t}{2}\right) e^{-\pi g t/2} + 2iJ(t),$$

$$\kappa^2 < 0$$

$$f_{0 \rightarrow 0}(t) = \left[\left(1 + \frac{\pi g}{2\omega_0}\right) e^{-(\pi g/2 + |\kappa|)t} + \left(1 + \frac{\pi g}{2|\kappa|}\right) e^{-(\pi g/2 - |\kappa|)t} \right] + 2iJ(t),$$

onde

$$J(t) := 2g \int_0^\infty \frac{y^2 e^{-yt}}{(y^2 + \omega_0^2)^2 + \pi^2 g^2 y^2} dy.$$

Os casos extremos $\kappa^2 \gg 0$ e $\kappa^2 \ll 0$ correspondem, respectivamente, às situações que denominaremos *acoplamento fraco* ($g \ll \omega_0$) e *acoplamento forte* ($g \gg \omega_0$) entre o átomo e a cavidade. A integral $J(t)$ pode ser calculada na aproximação para tempos longos ($\omega_0 t \gg 1$), com o auxílio do teorema de Cauchy, resultando em

$$J(t) \approx \frac{4g}{\omega_0^4 t^3}.$$

Nesta aproximação, a probabilidade de decaimento reduz-se a um dos seguintes resultados:

$$\kappa^2 > 0$$

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left(1 + \frac{\pi^2 g^2}{4\omega_0^2}\right) e^{-\pi g t} - \frac{8g}{\omega_0^4 t^3} \left[\sin(\kappa t) + \frac{\pi g}{2\kappa} \cos(\kappa t) \right] e^{-\pi g t/2} + \frac{16g^2}{\omega_0^8 t^6}, \quad (5.44)$$

$$\kappa^2 = 0$$

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left(1 - \frac{\pi g t}{2}\right)^2 e^{-\pi g t} + \frac{16g^2}{\omega_0^8 t^6},$$

$$\kappa^2 < 0$$

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left[\cosh(|\kappa|t) - \frac{\pi g}{2|\kappa|} \sinh(|\kappa|t) \right]^2 e^{-\pi g t} + \frac{16g^2}{\omega_0^8 t^6}. \quad (5.45)$$

Para um acoplamento fraco, obtemos de (5.44) que a probabilidade de a partícula permanecer excitada após um tempo $t \gg 1/\omega_0$ obedece à conhecida lei de decaimento exponencial,

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 \approx e^{-\pi g t}.$$

Por outro lado, para um acoplamento forte, obtemos de (5.45), uma outra lei de decaimento exponencial:

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 \approx \left(\frac{\omega_0}{\pi^2 g^2}\right) \exp\left(-\frac{2\omega_0^2}{\pi g} t\right).$$

5.7 Oscilador confinado numa cavidade pequena

Consideremos agora um sistema em que a partícula é colocada no centro de uma cavidade de raio R (ou entre dois espelhos planos separados por uma distância $L = 2R$) muito menor que o comprimento de coerência, $R \ll c/g$. Uma análise numérica sobre o espectro de autofrequências revela que, para valores pequenos de R , todas as soluções de (4.33), exceto Ω_0 , estão muito próximas dos valores correspondentes às assíntotas da curva $\cotg(\Omega R/c)$ — que correspondem aos modos $\omega_k = \pi c k/R$ do campo. Quanto maior o valor da solução em questão, mais próxima ela está da assíntota correspondente. Assim, para resolver (4.33) na página 73 para as autofrequências maiores, é razoável expandir a função $\cotg(\Omega_k R/c)$ em torno dos valores correspondentes às assíntotas. Podemos escrever, então,

$$\Omega_k = \frac{\pi c}{R} (k + \epsilon_k), \quad k \geq 1, \quad 0 < \epsilon_k \ll 1 \quad (5.46)$$

em (4.33), obtendo:

$$\cotg(\pi \epsilon_k) = \frac{c}{g R} (k + \epsilon_k) + \frac{1}{\pi (k + \epsilon_k)} \left(1 - \frac{R \omega_0^2}{\pi g c} \right), \quad (5.47)$$

Expandindo (5.47) até primeira ordem em ϵ_k , encontramos:

$$\begin{aligned} \cotg \pi \epsilon_k &\approx \frac{1}{\pi \epsilon_k} = \frac{c k}{g R} + \frac{1}{\pi k} \left(1 - \frac{R \omega_0^2}{\pi g c} \right) + O(\epsilon_k) \iff \\ &\iff \epsilon_k = \frac{\pi g c R k}{\pi^2 c^2 k^2 + \pi g c R - \omega_0^2 R^2} \approx \frac{\pi g c R k}{\pi^2 c^2 k^2 - \omega_0^2 R^2}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Para resolver (4.33) em relação a Ω_0 , assumiremos, por ora, que esta satisfaz a condição $R\Omega_0/c \ll 1$. Podemos então expandir a equação em Ω_0 e reter os termos de até segunda ordem, obtendo:

$$\begin{aligned} \cotg\left(\frac{R\Omega_0}{c}\right) &\approx \frac{1 - \left(\frac{R\Omega_0}{c}\right)^2}{\frac{R\Omega_0}{c}} = \frac{\Omega_0}{\pi g} + \frac{c}{R\Omega_0} \left(1 - \frac{R \omega_0^2}{\pi g c} \right) \iff \\ &\iff \Omega_0 = \frac{\omega_0}{\sqrt{1 + \frac{\pi g R}{c}}}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Para garantir consistência entre o resultado (5.49) e a condição $R\Omega_0/c \ll 1$, a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$\begin{aligned} \frac{R\Omega_0}{c} &= \frac{R\omega_0}{\sqrt{c^2 + \pi g c R}} \ll 1 \iff \\ &\iff \omega_0^2 R^2 - \pi g c R - c^2 \ll 0, \end{aligned}$$

que é equivalente a esta:

$$R \ll \frac{c}{g} f, \quad f = \frac{\pi}{2} \left(\frac{g}{\omega_0} \right)^2 \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4}{\pi^2} \left(\frac{\omega_0}{g} \right)^2} \right], \quad (5.50)$$

o que, por sua vez, é consistente com a hipótese inicial de que a cavidade é pequena.

Calculemos agora a probabilidade de que a partícula, inicialmente no seu primeiro estado excitado com a cavidade no seu estado de vácuo, permaneça excitada. Calculando o módulo quadrado de (5.41), vem:

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left(t_0^0 \right)^4 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \left(t_0^0 \right)^2 \left(t_0^k \right)^2 \cos[(\Omega_k - \Omega_0) t] \\ + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left(t_0^k \right)^2 \left(t_0^\ell \right)^2 \cos[(\Omega_k - \Omega_\ell) t]. \quad (5.51)$$

É interessante notar que os termos oscilantes em (5.51) o fazem com respectivas freqüências que são sempre dadas por uma diferença entre duas autofreqüências do sistema. Nós obtivemos um resultado parecido quando calculamos a freqüência de Rabi de um sistema descrito pelo modelo de Jaynes-Cummings (*cf.* §3.3 na página 60). Naquela ocasião, constatáramos que a freqüência de Rabi era proporcional à diferença entre as autoenergias do sistema. Assim, podemos dizer que o sistema aqui estudado também evolui, de certo modo, por “oscilações de Rabi”.

Acoplamento fraco Para um acoplamento fraco, uma situação fisicamente interessante surge. De (4.38) e (4.13), valendo-se dos valores aproximados das autofreqüências obtidos para cavidades pequenas (5.46) — desprezando-se o termo corretivo ϵ_k dado por (5.48) — e (5.49) — posta sob a forma $\Omega_0^2 \approx \omega_0^2$ —, obtemos:

$$\left(t_0^0 \right)^2 \approx \frac{1}{1 + \frac{\pi g R}{2c}} \approx 1 - \frac{\pi g R}{2c} \quad (5.52)$$

$$\left(t_0^k \right)^2 \approx \frac{2}{\frac{\pi c k^2}{g R} + 3 + \frac{\pi g R}{c}} \approx \frac{2 g R}{\pi c k^2}. \quad (5.53)$$

Utilizando (5.52) e (5.53) em (5.51), obtemos:

$$|f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left(1 - \frac{\pi \delta}{2} \right)^2 + 4 \left(\frac{\delta}{\pi} - \frac{\delta^2}{2} \right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \cos[(\Omega_k - \Omega_0) t]$$

$$+ \frac{4}{\pi^2} \delta^2 \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 \ell^2} \cos[(\Omega_k - \Omega_\ell) t],$$

onde $\delta = Rg/c \ll 1$. Com o passar do tempo, a probabilidade de que a partícula permaneça excitada oscila, chegando a um valor mínimo dado por

$$\min |f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = 1 - \frac{5\pi}{3} \delta + \frac{14\pi^2}{9} \delta^2 \geq \frac{31}{56} > \frac{1}{2}.$$

Podemos observar aqui que, nessas condições, a probabilidade de que a partícula decaia é pequena: para $\omega_0 \approx 4 \times 10^4 \text{ Hz}$ (vermelho visível), $R \approx 10^{-6} \text{ m}$ e $\delta \approx 10^{-2}$, esta probabilidade é de apenas 3%! Este resultado é consistente com as observações experimentais de inibição da emissão espontânea na década de 1980.

Acoplamento forte Neste caso, podemos deduzir, de (5.49) e (5.50), que $\Omega_0 \approx \omega_0$ e obtemos de (4.38) e (4.13):

$$\left(t_0^0\right)^2 \approx \frac{1}{1 + \frac{\pi g R}{2c}} = \frac{2}{2 + \pi \delta}, \quad (5.54)$$

enquanto para $(t_k^0)^2$ ainda vale a aproximação (5.53) do regime de acoplamento fraco. Substituindo (5.53) e (5.54) em (5.51), obtemos:

$$\begin{aligned} |f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 &= \left(\frac{2}{2 + \pi \delta}\right)^2 + \frac{2}{2 + \pi \delta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\delta}{\pi k^2} \cos[(\Omega_k - \Omega_0) t] + \\ &\quad \frac{4}{\pi^2} \delta^2 \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{k^2 \ell^2} \cos[(\Omega_k - \Omega_\ell) t]. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Vemos em (5.55) que a probabilidade de que a partícula permaneça excitada, como no caso anterior, oscila, assumindo um valor mínimo dado por

$$\min |f_{0 \rightarrow 0}(t)|^2 = \left(\frac{2}{2 + \pi \delta}\right)^2 - \left(\frac{2}{2 + \pi \delta}\right) \frac{\pi \delta}{3} - \frac{\pi^2 \delta^2}{9}. \quad (5.56)$$

A condição de não-negatividade de (5.56) impõe, para valores *fixos* de g e ω_0 , um limite superior para δ — que denotaremos por δ_{\max} —, o que corresponde a um limite superior para o raio R da cavidade, acima do qual nossa aproximação perde seu sentido físico. Diferentemente do que ocorre no regime de acoplamento fraco, neste caso, a partícula pode decair completamente.

Conclusões e perspectivas

Apresentamos aqui um modelo de acoplamento linear entre um oscilador harmônico e um conjunto de modos normais de um campo escalar não-massivo, estudado em trabalhos como [2, 42]. Diferentemente destes, a abordagem utilizada aqui foi a de integrais funcionais (interpretação de Dirac-Feynman), tal como foi introduzida em [3], que nos permitiu utilizar o formalismo lagrangiano para obter as propriedades quânticas do modelo.

Fazendo um paralelo com o modelo de Jaynes-Cummings, amplamente aplicado em CQED e ao qual nosso modelo se assemelha quando consideramos o acoplamento com um único modo normal do campo, discutimos o problema da estabilidade do estado de vácuo do sistema, problema este que surge quando partimos da representação quântica das coordenadas originais do sistema, *i.e.*, das coordenadas com que escrevemos inicialmente sua hamiltoniana clássica. Mostramos que neste caso, porém, contornamos o problema reescrevendo as equações pertinentes ao modelo numa nova representação quântica — a representação das coordenadas vestidas, devidamente introduzidas no texto —, a qual postulamos ser a verdadeira representação que descreve individualmente os estados do oscilador e do campo. Com isso, pudemos descrever o sistema sem a necessidade de recorrer à aproximação de onda girante.

De acordo com a nossa interpretação a respeito das coordenadas vestidas, podemos dizer que a representação das coordenadas originais não está propriamente errada, mas descreve algum grau de emaranhamento entre o oscilador e o campo, tal como temos na representação de coordenadas normais que diagonalizam o hamiltoniano do sistema, em vez de descrevê-los individualmente. Não obstante, vimos que a representação das coordenadas vestidas converge para a das coordenadas originais quando “desligamos” o acoplamento entre o oscilador e o campo.

Uma vez conhecido o propagador do sistema, pudemos calcular as amplitudes de transição. Fazendo estes cálculos, pudemos desenvolver uma estratégia de regras de soma, com a qual computamos probabilidades de transição mais complexas como composições de probabilidades de transição de 1 fóton, sem precisar calcular diretamente as integrais que nos dão as amplitudes de transição (que envolvem produtos de diversos polinômios de Hermite).

Como exemplo de aplicação em CQED do que foi desenvolvido aqui, consideramos um sistema, confinado numa cavidade esférica, constituído de um oscilador, inicialmente em seu

estado 1-excitado, acoplado a um campo, inicialmente em seu estado de vácuo, e computamos a probabilidade de o oscilador decair para seu estado fundamental, em duas situações. Por um lado, para uma cavidade infinitamente grande, obtivemos a conhecida taxa de decaimento exponencial de um átomo livre. Por outro lado, para uma cavidade suficientemente pequena, observamos que o oscilador permanece quase-estável sem decair, resultado este compatível com as observações experimentais de inibição da emissão espontânea de um átomo numa cavidade pequena [25, 26, 27].

Para dar continuidade a este trabalho, sugerimos alguns caminhos:

- Estudar mais detalhadamente o exemplo do oscilador confinado numa cavidade pequena e verificar se o modelo de acoplamento linear prevê a facilitação da emissão espontânea, verificada experimentalmente pela primeira vez em [24].
- Estudar mais detalhadamente a versão simplificada do modelo de acoplamento linear no caso $N = 1$ (oscilador acoplado a um único modo normal do campo), calcular as probabilidades de transição neste caso, ao menos para um acoplamento quase-ressonante, e comparar os resultados com os do modelo de Jaynes-Cummings.
- Estender o tratamento feito aqui para um modelo de acoplamento não-linear (os primeiros passos dados neste sentido foram dados em [46, 44], para um termo de acoplamento de quarta ordem). Neste caso, inevitavelmente, será necessário recorrer a uma expansão perturbativa na integral funcional (diagramas de Feynman) para o propagador do sistema. Uma possível abordagem neste caso, diferentemente do que foi feito nos trabalhos supracitados, seria introduzir o termo de acoplamento não-linear diretamente no hamiltoniano (5.15) na representação de coordenadas vestidas e aí fazer a expansão.
- Obter e estudar a matriz densidade reduzida do modelo através das coordenadas vestidas.

Referências Bibliográficas

- [1] COHEN-TANNOUJDI, C.; DUPONT-ROC, J.; GRYNBERG, G. *Atom-Photon Interactions: Basic processes and applications*. New York: John Wiley & Sons, 1998.
- [2] ANDION, N. P.; MALBOUISSON, A. P. C.; MATTOS NETO, A. An exact approach to the oscillator radiation process in an arbitrarily large cavity. *Journal of Physics A*, v. 34, p. 3735–3749, 2001.
- [3] CASANA, R.; FLORES-HIDALGO, G.; PIMENTEL, B. M. Dressed coordinates: the path-integral approach. *Physica A*, v. 374, p. 600–610, 2007.
- [4] LANDAU, L.; LIFCHITZ, E. *Mécanique*. Moscou: Éditions de la Paix, 1960.
- [5] WREZINSKI, W. F. *Mecânica Clássica Moderna*. São Paulo: Edusp, 1997.
- [6] DIRAC, P. A. M. The lagrangian in quantum mechanics. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, v. 3, p. 64–72, 1933.
- [7] FEYNMAN, R. P.; WHEELER, J. A. Classical electrodynamics in terms of direct interparticle action. *Reviews of Modern Physics*, v. 17, p. 425–433, 1945.
- [8] SCHWARZSCHILD, K. *Göttinger Nachrichten*, v. 128, p. 132, 1903.
- [9] TETRODE, H. *Zeitschrift für Physik*, v. 10, p. 317, 1922.
- [10] FOKKER, A. D. Wederkeerigheid in de werking van geladen deeltjes. *Physica*, v. 9, p. 33–42, 1929.
- [11] FOKKER, A. D. *Zeitschrift für Physik*, v. 58, p. 386, 1929.
- [12] FOKKER, A. D. *Physica*, v. 12, p. 145, 1932.
- [13] FEYNMAN, R. P.; HIBBS, A. R. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1965.
- [14] FEYNMAN, R. P. *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*. Tese (Doutorado) — Princeton University, 1942.
- [15] ROEPSTORFF, G. *Path Integral Approach to Quantum Physics - An Introduction*. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
- [16] SCHULMAN, L. S. *Techniques and Applications of Path Integration*. New York: John Wiley & Sons, 1981.
- [17] KHANDEKAR, D. C.; LAWANDE, S. V.; BHAGWAT, K. V. *Path-Integral Methods and their Applications*. Singapore: World Scientific, 1993.

- [18] NARAIN, K. S.; TARSKI, J. Transformations of path integrals. *Journal of Physics A*, v. 17, p. 1173–1185, 1984.
- [19] SCHWINGER, J. The theory of quantized fields. i. *Physical Review*, v. 82, p. 914–927, 1951.
- [20] MOISEWITSCH, B. L. *Variational Principles*. New York: Dover, 2004.
- [21] ROYER, A. On the Fourier series representations of path integrals. *Journal of Mathematical Physics*, v. 25, p. 2873–2884, 1984.
- [22] PURCELL, E. M. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies. *Physical Review*, v. 69, p. 681, 1946.
- [23] KLEPPNER, D. Inhibited spontaneous emission. *Physical Review Letters*, v. 47, p. 233–236, 1981.
- [24] GOY, P. et al. Observation of cavity-enhanced single-atom spontaneous emission. *Physical Review Letters*, v. 50, p. 1903–1906, 1983.
- [25] GABRIELSE, G.; DEHMELT, H. Observation of inhibited spontaneous emission. *Physical Review Letters*, v. 55, p. 67–70, 1985.
- [26] HULET, R. G.; HILFER, E. S.; KLEPPNER, D. Inhibited spontaneous emission by a Rydberg atom. *Physical Review Letters*, v. 55, p. 2137–2140, 1985.
- [27] JHE, W. et al. Suppression of spontaneous decay at optical frequencies: Test of vacuum-field anisotropy in confined space. *Physical Review Letters*, v. 58, p. 666, 1987.
- [28] HAROCHE, S.; KLEPPNER, D. Cavity Quantum Electrodynamics. *Physics Today*, v. 42, p. 24–30, jan 1989.
- [29] COHEN-TANNOUDJI, C.; DUPONT-ROC, J.; GRYNBERG, G. *Photons and Atoms: Introduction to quantum electrodynamics*. New York: John Wiley & Sons, 1989.
- [30] JAYNES, E. T.; CUMMINGS, F. W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proceedings of the IEEE*, v. 51, p. 89–109, 1963.
- [31] RAMSEY, N. F. A molecular beam resonance method with separated oscillating fields. *Physical Review*, v. 78, p. 695–699, 1950.
- [32] RAMSEY, N. F. Experiments with separated oscillatory fields and hydrogen masers. *Reviews of Modern Physics*, v. 62, p. 541–552, 1980.
- [33] RAMSEY, N. F. The method of successive oscillatory fields. *Physics Today*, v. 33, p. 25, jul 1980.
- [34] HAROCHE, S. Disponível em: <<http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/>>. Acesso em: 2004.
- [35] HAGLEY, E. et al. Generation of Einstein-Podolsky-Rosen pairs of atoms. *Physical Review Letters*, v. 79, p. 1–5, 1997.

- [36] NOGUES, G. et al. Seeing a single photon without destroying it. *Nature (London)*, v. 400, p. 239–242, 1999.
- [37] RAUSCHENBEUTEL, A. et al. Coherent operation of a tunable quantum phase gate in Cavity QED. *Physical Review Letters*, v. 83, p. 5166–5169, 1999.
- [38] BRUNE, M. et al. Observing the progressive decoherence of the “meter” in a quantum measurement. *Physical Review Letters*, v. 77, p. 4887–4890, 1996.
- [39] NUSSENZVEIG, P. A. Mecânica quântica em ação: Experiências ilustrativas dos experimentos básicos. In: HUSSEIN, M. S.; SALINAS, S. R. A. (Org.). *100 Anos de Física Quântica*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2002. p. 101.
- [40] RAIMOND, J. M.; BRUNE, M.; HAROCHE, S. *Colloquium*: Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity. *Reviews of Modern Physics*, v. 73, p. 565–582, 2001.
- [41] FLORES-HIDALGO, G.; MALBOUISSON, A. P. C. Dressed-state approach to quantum systems. *Physical Review A*, v. 66, p. 042118, 2002.
- [42] FLORES-HIDALGO, G.; MALBOUISSON, A. P. C.; MILLA, Y. W. Stability of excited atoms in small cavities. *Physical Review A*, v. 65, p. 063414, 2002.
- [43] CASANA, R.; FLORES-HIDALGO, G.; PIMENTEL, B. M. *Sum rules* in the oscillator radiation processes. *Physics Letters A*, v. 337, p. 1–9, 2005.
- [44] FLORES-HIDALGO, G.; MILLA, Y. M. Dressed (renormalized) coordinates in a nonlinear system. *Journal of Physics A*, v. 38, p. 7527–7541, 2005.
- [45] ERDÉLYI, A. et al. *Higher Transcendental Functions*. New York: McGraw-Hill, 1953. 196 p.
- [46] FLORES-HIDALGO, G.; MALBOUISSON, A. P. C. Anharmonic oscillator radiation process in a large cavity. *Physics Letters A*, v. 311, p. 82–86, 2003.
- [47] BARATA, J. C. A. *Curso de Física-Matemática*. [s.n.], 2007. Livro on-line. Disponível em: <http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula>.

APÊNDICE A – Operadores de criação/aniquilação e estados de Fock

A.1 Ponto de partida: a relação canônica de comutação

Uma das equações mais fundamentais na Mecânica Quântica é a *relação canônica de comutação*. Dadas duas grandezas físicas canonicamente conjugadas — descritas pelos operadores hermiteanos \mathbf{q} e \mathbf{p} , respectivamente — a relação canônica de comutação diz que

$$[\mathbf{q}, \mathbf{p}] := \mathbf{q}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{q} = i\hbar\mathbf{I}. \quad (\text{A.1})$$

Por conveniência, vamos introduzir versões adimensionais dos operadores \mathbf{q} e \mathbf{p} , dadas, respectivamente, por $\mathbf{X} = \sqrt{\frac{b}{\hbar}}\mathbf{q}$ e $\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{b\hbar}}\mathbf{p}$, onde b é um parâmetro com a dimensão apropriada — por exemplo, para um oscilador harmônico unidimensional, em que \mathbf{q} e \mathbf{p} descrevem a sua posição e seu momento, respectivamente, b é o produto de sua massa pela sua frequência natural de oscilação.

Em termos de \mathbf{X} e \mathbf{P} , a equação (A.1) se escreve como

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\mathbf{I}. \quad (\text{A.2})$$

A.2 Os operadores de criação/aniquilação. Estados de Fock

A partir dos operadores \mathbf{X} e \mathbf{P} dados acima, definamos um novo operador, que denotaremos por \mathbf{a} , como

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{X} + i\mathbf{P}). \quad (\text{A.3})$$

O operador \mathbf{a} definido em (A.3) não é hermiteano. De fato, seu adjunto é dado por

$$\mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{X} - i\mathbf{P}) \quad (\text{A.4})$$

e satisfaz à seguinte relação de comutação, facilmente dedutível a partir de (A.2):

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{I}. \quad (\text{A.5})$$

A utilidade dos operadores \mathbf{a} e \mathbf{a}^\dagger aparece quando procuramos os autovalores n , e autovetores associados $|n\rangle$ tais que $\langle n|n\rangle = 1$, do operador hermiteano $\mathbf{n} := \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$, *i.e.*, que satisfaçam à equação

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} |n\rangle = n |n\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Dado algum estado que satisfaça a esta equação, obtém-se facilmente, utilizando (A.5), que

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger |n\rangle &= \mathbf{a}^\dagger (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{I}) |n\rangle = (n+1) \mathbf{a}^\dagger |n\rangle \\ \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a} |n\rangle &= (\mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger - \mathbf{I}) \mathbf{a} |n\rangle = \mathbf{a} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} - \mathbf{I}) |n\rangle = (n-1) \mathbf{a} |n\rangle, \end{aligned}$$

ou seja, $\mathbf{a}^\dagger |n\rangle$ e $\mathbf{a} |n\rangle$ também são autovetores do operador \mathbf{n} , com autovalores $n \pm 1$, respectivamente. Logo, os autovetores normalizados $|n \pm 1\rangle$ são obtidos a partir de $|n\rangle$ aplicando uma vez o operador \mathbf{a}^\dagger ou \mathbf{a} , respectivamente:

$$\begin{aligned} |n+1\rangle &= \frac{\mathbf{a}^\dagger}{\sqrt{n+1}} |n\rangle \\ |n-1\rangle &= \frac{\mathbf{a}}{\sqrt{n}} |n\rangle. \end{aligned}$$

Uma consequência do resultado acima é que o espectro de \mathbf{n} deve ser o próprio conjunto \mathbb{N} . Com efeito, impondo-se a não-negatividade da norma de $\mathbf{a} |n\rangle$, obtemos

$$\langle n | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} | n \rangle = n \geq 0.$$

Por outro lado, se existir um autovalor n não-inteiro, seria possível, aplicando sucessivamente o operador \mathbf{a} ao autovetor $|n\rangle$, obter um autovetor com norma negativa, o que seria um absurdo.

O autovetor $|0\rangle$, correspondente ao menor autovalor de \mathbf{n} , é tal que $\mathbf{a} |0\rangle$ é o vetor nulo e, portanto, encerra nossa seqüência descendente de autovalores e autovetores. A partir deste autovetor, podemos obter qualquer outro aplicando sucessivamente o operador \mathbf{a}^\dagger :

$$|n\rangle = \frac{(\mathbf{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (\text{A.7})$$

Podemos interpretar os objetos matemáticos acima do seguinte modo:

- Os autovalores n correspondem ao número de *quanta* (de energia, por exemplo) num

dado estado, associado aos operadores \mathbf{a} e \mathbf{a}^\dagger .

- O operador \mathbf{a} aniquila um *quantum* no estado em questão. O operador \mathbf{a}^\dagger , por sua vez, cria um *quantum* neste mesmo estado.
- O operador \mathbf{n} é tal que seu valor esperado, calculado num de seus autovetores, revela o número de *quanta* contidos em seu respectivo estado. Um autovetor de \mathbf{n} descreve um sistema cujo número de *quanta* no estado associado àquele operador é bem definido.

Por esta interpretação, \mathbf{a}^\dagger e \mathbf{a} são denominados operadores *de criação* e *aniquilação* bosônicos¹, respectivamente, enquanto \mathbf{n} é denominado *operador número*. No contexto do oscilador harmônico unidimensional, os *quanta* mencionados acima correspondem às oscilações elementares. Em Teoria Quântica de Campos, esses *quanta* são associados a bósons descritos pelos respectivos campos (*e.g.*, fótons).

Damos o nome de *espaço de Fock* ao espaço de Hilbert onde os vetores $|n\rangle$, bem como os operadores \mathbf{a} , \mathbf{a}^\dagger e \mathbf{n} , estão definidos. Os autoestados de \mathbf{n} são denominados *estados de Fock*. Em particular, o estado $|0\rangle$ é denominado *estado de vácuo*, ou simplesmente *vácuo*, do sistema em questão.

A.3 Operadores de criação/aniquilação na representação de Schrödinger

Na representação de Schrödinger, um estado $|\psi\rangle$ de um sistema unidimensional é descrito por uma função ψ , denominada *função de onda*, dada por $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, onde $|x\rangle$ é um autoestado de um dos operadores \mathbf{q} ou \mathbf{p} mencionados na seção A.1. Por conveniência, consideraremos $|x\rangle$ como um autoestado de \mathbf{q} . A ação dos operadores \mathbf{q} e \mathbf{p} no estado $|\psi\rangle$ é descrita, nesta representação, do seguinte modo:

$$\begin{aligned}\langle x|\mathbf{q}|\psi\rangle &= x\psi(x) \\ \langle x|\mathbf{p}|\psi\rangle &= -i\hbar \frac{d\psi}{dx}(x).\end{aligned}$$

¹Em Teoria Quântica de Campos, é comum definirmos também operadores de criação, \mathbf{b}^\dagger , e aniquilação, \mathbf{b} , *fermiônicos*. Estes diferem dos análogos bosônicos pela relação de comutação a que satisfazem:

$$\{\mathbf{b}, \mathbf{b}^\dagger\} := \mathbf{b}\mathbf{b}^\dagger + \mathbf{b}^\dagger\mathbf{b} = \mathbf{I}.$$

Do mesmo modo, para os operadores adimensionais \mathbf{X} e \mathbf{P} , temos:

$$\begin{aligned}\langle X|\mathbf{X}|\psi\rangle &= X\psi(X) \\ \langle X|\mathbf{P}|\psi\rangle &= -i\frac{d\psi}{dX}(X).\end{aligned}$$

onde $X = \sqrt{\frac{b}{\hbar}}x$. Para os operadores de criação, aniquilação e contagem, temos:

$$\langle X|\mathbf{a}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X + \frac{d}{dX}\right)\psi(X) \quad (\text{A.8a})$$

$$\langle X|\mathbf{a}^\dagger|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X - \frac{d}{dX}\right)\psi(X). \quad (\text{A.8b})$$

$$\langle X|\mathbf{n}|\psi\rangle = \frac{1}{2}\left(X - \frac{d}{dX}\right)\left(X + \frac{d}{dX}\right)\psi(X) = \frac{1}{2}\left(X^2 - 1 - \frac{d^2}{dX^2}\right)\psi(X). \quad (\text{A.8c})$$

A.4 Estados de Fock na representação de Schrödinger. Polinômios de Hermite

De posse dos resultados (A.8), podemos obter as funções de onda dos estados de Fock. Primeiramente, determinemos a função de onda do vácuo, $\psi_0(X) = \langle X|0\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle X|\mathbf{a}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X + \frac{d}{dX}\right)\psi_0(X) = 0 \iff \\ &\iff \frac{d\psi_0}{dX} + X\psi_0 = 0.\end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

A solução, normalizada na variável X , da equação (A.9) é

$$\psi_0(X) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-X^2/2},$$

enquanto que a mesma solução, agora normalizada na variável original x , é

$$\psi_0(x) = \left(\frac{b}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{bx^2}{2\hbar}\right).$$

Vamos agora aos demais estados de Fock. A equação correspondente a (A.6) na representação de Schrödinger é dada por:

$$\begin{aligned}\langle X|\mathbf{n}|\mathbf{n}\rangle &= n\langle X|\mathbf{n}\rangle =: n\psi_n(X) \iff \\ \iff \frac{1}{2}\left(X^2 - 1 - \frac{d^2}{dX^2}\right)\psi_n(X) &= n\psi_n(X) \iff\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2 \psi_n}{dX^2} - X^2 \psi_n + (2n+1) \psi_n = 0. \quad (\text{A.10})$$

Fazendo a substituição $\phi_n(X) = e^{X^2/2} \psi_n(X)$ em (A.10), obtemos para ϕ_n a equação

$$\frac{d^2 \phi_n}{dX^2} - 2X \frac{d\phi_n}{dX} + 2n \phi_n = 0. \quad (\text{A.11})$$

A equação (A.11) é a conhecida *equação de Hermite* da Física-Matemática. Suas soluções são os conhecidos *polinômios de Hermite*:

$$\phi_n(X) = H_n(X).$$

Alguns polinômios de Hermite são dados abaixo:

$$H_0(X) = 1$$

$$H_1(X) = 2X$$

$$H_2(X) = 4X^2 - 2$$

$$H_3(X) = 8X^3 - 12X$$

$$H_4(X) = 16X^4 - 48X^2 - 12$$

$$H_5(X) = 32X^5 - 160X^3 - 120X.$$

Uma maneira ilustrativa de se construir os polinômios de Hermite é considerando a equação (A.7). Escrita na representação de Schödinger, ela nos dá:

$$\begin{aligned} \psi_n(X) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n \psi_0(X) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n e^{-X^2/2} = \\ &= \left(\frac{1}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-X^2/2} \left[e^{X^2/2} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n e^{-X^2/2} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[e^{X^2/2} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n e^{-X^2/2} \right] \psi_0(X). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

O termo entre colchetes em (A.12) é precisamente o polinômio de Hermite de grau n , $H_n(X)$. Isto pode ser visto com o seguinte lema:

Lema A.1.

$$e^{X^2/2} \left(X - \frac{d}{dX} \right)^n e^{-X^2/2} = (-1)^n e^{X^2} \frac{d^n}{dX^n} e^{-X^2} = H_n(X). \quad (\text{A.13})$$

Demonstração. Consideremos as transformações

$$\begin{aligned} O_1 : f &\mapsto e^{X^2/2} \left(X - \frac{d}{dX} \right) \left[e^{-X^2/2} f(X) \right] \\ O_2 : f &\mapsto -e^{X^2} \frac{d}{dX} \left[e^{-X^2} f(X) \right]. \end{aligned}$$

Para O_1 , temos:

$$O_1(f(X)) = Xf(X) - \left(-Xf(X) + \frac{df}{dX} \right) = \left(2X - \frac{d}{dX} \right) f(X),$$

enquanto que, para O_2 , temos:

$$O_2(f(X)) = - \left(-2Xf(X) + \frac{df}{dX} \right) = \left(2X - \frac{d}{dX} \right) f(X).$$

Logo, para qualquer função f ao menos n vezes diferenciável,

$$O_1(f) = O_2(f) \implies O_1^n(f) = O_2^n(f).$$

Em particular, para $f = H_0 \equiv 1$, obtemos a igualdade (A.13). Por outro lado, o segundo membro da primeira igualdade de (A.13) é a conhecida *fórmula de Rodrigues* para os polinômios de Hermite (cf. §10.2.3 de [47]), o que nos remete à segunda igualdade. \square

Em suma, aplicando o lema A.1 em (A.12), podemos escrever, para as autofunções ψ_n normalizadas em X ,

$$\psi_n(X) = \frac{H_n(X)}{\sqrt{2^n n!}} \psi_0(X) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{1/4} \frac{H_n(X)}{\sqrt{2^n n!}} e^{-X^2/2}. \quad (\text{A.14})$$

A.5 Propriedades dos polinômios de Hermite: relação de recorrência e teoremas integrais

Uma consequência imediata do lema A.1 é a seguinte:

Corolário A.1 (Relação de recorrência entre polinômios de Hermite).

$$H_n(X) = 2X H_{n-1}(X) - \frac{dH_{n-1}}{dX}(X), \quad \forall n > 0.$$

Além disso, o monômio de maior grau de $H_n(X)$ é $(2X)^n$.

Demonstração. Na demonstração do **lema A.1**, obtivemos o resultado

$$H_n(X) = \left(2X - \frac{d}{dX}\right)^n H_0(X), \quad (*)$$

com $H_0(X) = 1$. Logo,

$$H_n(X) = \left(2X - \frac{d}{dX}\right) \left(2X - \frac{d}{dX}\right)^{n-1} H_0(X) = 2X H_{n-1}(X) - \frac{dH_{n-1}}{dX}(X).$$

Por outro lado, no desenvolvimento do segundo membro de (*), obteremos diversos termos com derivadas de diversas ordens, que resultarão em monômios de grau inferior a n . Assim, o único monômio de grau n em (*) é aquele em que não figuram derivadas, a saber: $(2X)^n$. \square

Uma última propriedade dos polinômios de Hermite que estudaremos aqui, e que é utilizada na seção 5.4, diz respeito a uma certa classe de integrais envolvendo polinômios de Hermite. Aqui, esta propriedade será útil para obtermos a relação de ortogonalidade entre polinômios de Hermite, necessária para uma correta normalização das autofunções $\psi_n(x)$.

Teorema A.1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^k H_n(X) dX = \begin{cases} 0, & \text{se } k < n \\ n! \sqrt{\pi}, & \text{se } k = n \\ 0, & \text{se } k > n \text{ e } k - n \text{ é ímpar} \\ \frac{(k-n-1)!!}{2^{(k-n)/2} (k-n)!} k! \sqrt{\pi}, & \text{se } k > n \text{ e } k - n \text{ é par.} \end{cases}$$

Demonstração. Utilizando a fórmula de Rodrigues para os polinômios de Hermite e integrando por partes uma vez, vem:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^k H_n(X) dX &= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} X^k \frac{d^n}{dX^n} e^{-X^2} dX = \\ &= (-1)^n \underbrace{X^k \frac{d^{n-1}}{dX^{n-1}} e^{-X^2}}_0 \Big|_{-\infty}^{+\infty} + (-1)^{n+1} k \int_{-\infty}^{+\infty} X^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dX^{n-1}} e^{-X^2} dX. \end{aligned}$$

Integrando por partes sucessivamente até um total de $\ell \leq \min(k, n)$ vezes, obtemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^k H_n(X) dX = (-1)^{n+\ell} \frac{k!}{(k-\ell)!} \int_{-\infty}^{+\infty} X^{k-\ell} \frac{d^{n-\ell}}{dX^{n-\ell}} e^{-X^2} dX. \quad (*)$$

Se $k < n$, então, tomando $\ell = k$ em (*), encontramos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^k H_n(X) dX = (-1)^{n+k} k! \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^{n-k}}{dX^{n-k}} e^{-X^2} dX = (-1)^{n+k} k! \frac{d^{n-k-1}}{dX^{n-k-1}} e^{-X^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0.$$

Por outro lado, se $k > n$, obtemos de (*), para $\ell = n$,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^k H_n(X) dX &= \frac{k!}{(k-n)!} \int_{-\infty}^{+\infty} X^{k-n} e^{-X^2} dX = \\ &= \begin{cases} 0, & \text{se } k-n \text{ é ímpar} \\ \frac{(k-n-1)!!}{2^{(k-n)/2} (k-n)!} k! \sqrt{\pi}, & \text{se } k-n \text{ é par.} \end{cases} \end{aligned}$$

Por fim, se $k = n$, temos, tomando $\ell = n$ em (*),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} X^n H_n(X) dX = n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-X^2} dX = n! \sqrt{\pi},$$

o que encerra a demonstração. □

Corolário A.2 (Relação de ortogonalidade entre polinômios de Hermite).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_k(\sqrt{a}x) H_n(\sqrt{a}x) e^{-ax^2} dx = 2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{a}} \delta_{kn}, \quad \forall a \in \mathbb{C}.$$

Demonstração. Mudando a variável de integração para $X = \sqrt{a}x$ e combinando o **corolário A.1** com o **teorema A.1**, obtemos o resultado desejado. □

De acordo com o **corolário A.2**, vemos que, de fato, as autofunções ψ_n dadas por (A.14) estão devidamente normalizadas em X . Para obtermos a normalização correta das mesmas na variável $x = \sqrt{\frac{\hbar}{b}} X$, basta utilizar o **corolário A.2** para $a = \sqrt{\frac{b}{\hbar}}$. Fazendo isso, encontramos:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{b}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \frac{H_n\left(\sqrt{\frac{b}{\hbar}}x\right)}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{bx^2}{2\hbar}\right). \quad (\text{A.15})$$

APÊNDICE B – Derivação da lagrangeana (4.5) a partir de um modelo oscilador-campo

B.1 Apresentação do modelo

O modelo a seguir considera um oscilador harmônico, descrito pela coordenada¹ $q_0(t)$, centrado na origem e com frequência natural $\bar{\omega}_0$, acoplado linearmente a um campo escalar não-massivo $\phi(\mathbf{r}, t)$, o sistema inteiro estando confinado em uma cavidade esférica de raio R , também centrada na origem. Segundo o modelo, a lagrangeana deste sistema é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \int \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi(\mathbf{r}, t) \partial^\mu \phi(\mathbf{r}, t) + 2\pi\sqrt{g}c q_0 \phi(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r}) \right] d^3r = \\ &= \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \int \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \left(\nabla \phi(\mathbf{r}, t) \right)^2 \right] + 2\pi\sqrt{g}c q_0 \phi(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r}) \right\} d^3r, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

onde c é a velocidade da luz e g é a constante de acoplamento do sistema.

As equações de Euler-Lagrange obtidas a partir de (B.1) são:

$$\ddot{q}_0 + \bar{\omega}_0^2 q_0 = 2\pi\sqrt{g}c \int \phi(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r}) d^3r \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi = 2\pi\sqrt{g}c q_0(t) \delta(\mathbf{r}). \quad (\text{B.3})$$

¹Por simplicidade, a massa m do oscilador está absorvida na coordenada q_0 . No desenvolvimento que segue, a massa pode ser recuperada, a qualquer momento, pela transformação canônica

$$\begin{aligned} q_0 &\mapsto \sqrt{m} q_0 \\ p_0 &\mapsto \frac{p_0}{\sqrt{m}}. \end{aligned}$$

B.2 Expansão do campo em modos normais

O campo ϕ deve satisfazer à condição de contorno $\phi(R\hat{\mathbf{r}}, t) = 0, \forall t$. Podemos expandir $\phi(\mathbf{r}, t)$ numa base ortonormal de funções $u_k(\mathbf{r})$ (modos normais de oscilação do campo) do seguinte modo:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = c \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) u_k(\mathbf{r}), \quad (\text{B.4})$$

onde as funções de base devem satisfazer à condição de contorno

$$u_k(R\hat{\mathbf{r}}) = 0 \quad \forall k. \quad (\text{B.5})$$

Podemos escolher estas funções como sendo soluções da seguinte equação de Helmholtz:

$$\nabla^2 u_k(\mathbf{r}) + \frac{\omega_k^2}{c^2} u_k(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{B.6})$$

Uma vez que o oscilador encontra-se sempre numa vizinhança em torno do centro da cavidade, ele sente os efeitos do campo praticamente da mesma forma em todas as direções, ou seja, podemos considerar que nosso problema possui simetria esférica. Levando em conta esta simetria, a equação (B.6), escrita em coordenadas esféricas, reduz-se a

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{du_k(r)}{dr} \right) + \frac{\omega_k^2}{c^2} u_k(r) = 0. \quad (\text{B.7})$$

As soluções de (B.7) (cf. §16.1.2 de [47]), que não devem divergir na origem, são funções de Bessel esféricas de ordem 0 definidas no intervalo $0 < \|\mathbf{r}\| \leq R$:

$$u_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_k} j_0 \left(\frac{\omega_k}{c} \|\mathbf{r}\| \right) = \frac{1}{N_k} \frac{\text{sen} \left(\frac{\omega_k}{c} \|\mathbf{r}\| \right)}{\frac{\omega_k}{c} \|\mathbf{r}\|}, \quad (\text{B.8})$$

onde N_k são fatores de normalização. Note que

$$\int u_k(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) d^3r = \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{0}} u_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_k}.$$

Aplicando a condição de contorno (B.5) a (B.8), obtemos a seguinte relação:

$$\frac{\omega_k}{c} R = k\pi \iff \omega_k = \frac{k\pi c}{R}.$$

A relação de ortogonalidade entre $u_k(\mathbf{r})$ e $u_\ell(\mathbf{r})$ é dada por:

$$\int u_k(\mathbf{r}) u_\ell(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{N_k N_\ell} \int_0^R j_0 \left(\frac{k\pi}{R} r \right) j_0 \left(\frac{\ell\pi}{R} r \right) 4\pi r^2 dr =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4\pi R^3}{N_k N_\ell} \int_0^1 j_0(k\pi z) j_0(\ell\pi z) z^2 dz = \\
&= \frac{4\pi R^3}{N_k N_\ell} \frac{1}{k\ell\pi^2} \underbrace{\int_0^1 \text{sen}(k\pi z) \text{sen}(\ell\pi z) dz}_{\frac{1}{2}\delta_{k\ell}} = \frac{2\pi R^3}{k^2\pi^2} \frac{\delta_{k\ell}}{N_k^2}. \quad (\text{B.9})
\end{aligned}$$

Fixando os fatores de normalização N_k de tal modo que o resultado (B.9) seja igual a $\delta_{k\ell}$, obtemos:

$$N_k = \sqrt{2\pi R} \frac{R}{k\pi}. \quad (\text{B.10})$$

Introduzindo (B.10) em (B.8), vem:

$$\mathbf{u}_k(\mathbf{r}) = \frac{\text{sen}\left(\frac{k\pi}{R} \|\mathbf{r}\|\right)}{\sqrt{2\pi R} \|\mathbf{r}\|}. \quad (\text{B.11})$$

Fazendo a expansão (B.4) em (B.1), segue:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \\
\frac{1}{2} \int \left[\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \dot{q}_k \dot{q}_\ell \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) - c^2 \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} q_k q_\ell \nabla \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \right] d^3\mathbf{r} \\
+ 2\pi c \sqrt{g\bar{c}} q_0 \sum_{k=1}^{\infty} q_k \underbrace{\int \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}_{1/N_k}. \quad (\text{B.12})
\end{aligned}$$

Integrando por partes o termo com o duplo gradiente em (B.12) e levando em conta a condição de contorno (B.5), temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \int \left[\dot{q}_k \dot{q}_\ell \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) + c^2 q_k q_\ell \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) \right] d^3\mathbf{r} \\
+ 2\pi \sqrt{g\bar{c}} q_0 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k\pi c}{R} \frac{q_k}{\sqrt{2\pi R}}. \quad (\text{B.13})
\end{aligned}$$

Substituindo $\nabla^2 \mathbf{u}_k$ pelo segundo membro da equação (B.6) em (B.13) e simplificando, obtemos finalmente:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left(\dot{q}_k \dot{q}_\ell - \omega_k^2 q_k q_\ell \right) \underbrace{\int \mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}_\ell(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}_{\delta_{k\ell}}$$

$$\begin{aligned}
& + \sqrt{\frac{2\pi g c}{R}} q_0 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k\pi c}{R} q_k = \\
= & \frac{1}{2} \left(\dot{q}_0^2 - \bar{\omega}_0^2 q_0^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\dot{q}_k^2 - \omega_k^2 q_k^2 \right) + \eta q_0 \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k q_k. \tag{B.14}
\end{aligned}$$

onde $\eta := \sqrt{\frac{2\pi g c}{R}}$. Vemos, portanto, que o nosso problema inicial, descrito pela lagrangeana **(B.1)**, devido à condição de contorno imposta ao campo $\phi(\mathbf{r}, t)$, torna-se bem mais simples mediante uma expansão do campo em modos normais, reduzindo-se a um problema de osciladores harmônicos acoplados.