

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física Gleb Wataghin

Dissertação de Mestrado

Uma proposta de cálculo do propagador da
equação de Schrödinger para o potencial
degrau, via decomposição de trajetórias

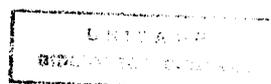
Aluno: Túlio Oliveira de Carvalho
Orientador: Prof. Amir Ordacgi Caldeira

9 de Julho de 1992

*Este exemplar corresponde à redação final
da tese defendida pelo aluno Túlio Oliveira
de Carvalho e aprovada pela comissão
juladora*

11/05/93

Amir



Conteúdo

1	Pequena Revisão	8
2	O método PDX	12
2.1	Aplicabilidade do Método PDX	18
2.2	Os casos $(x - x_\sigma).(x' - x_\sigma) > 0$	21
2.3	Conclusão	23
3	O Cálculo do propagador para $V(x) = V_0\theta(x)$	25
3.1	Verificação da equação de Schrödinger	28
3.1.1	O propagador restrito e suas derivadas	29
3.1.2	Verificando para $x > 0$	30
3.1.3	Verificando para $x < 0$	31
3.2	Obtenção de $K(0, -it; 0)$	33
3.3	Obtenção de $K(x, -it; 0)$	34
3.4	Consistência intermediária	35
3.4.1	O limite da parede opaca: $V_0 \rightarrow +\infty$	35
3.4.2	O limite da partícula livre: $V_0 \rightarrow 0$	38
3.4.3	A condição de contorno: $t \rightarrow 0^+$	40
3.4.4	A continuidade: $x \rightarrow 0$	41
3.5	A simetria do propagador com respeito à troca de x por x'	41
3.6	Obtenção de $K(x, -it; x')$	43
3.7	Consistência do resultado final	49

3.8	O limite da parede opaca: $V_0 \rightarrow +\infty$	49
3.8.1	Análise assintótica de $K_4(x, -it; x')$ e $K_4(x, t; x')$	50
3.8.2	Sobre K_2 e K_3 , nova análise para tempo imaginário	52
3.9	O limite da partícula livre	53
3.10	Verificação da condição inicial	54
3.11	A continuidade do propagador e de sua derivada	55
4	Conclusões	57
4.1	Sobre os problemas de Reflexão e Transmissão de pacotes	58
4.2	Sobre o problema da barreira quadrada	59
A	Resultados elementares	61
A.1	Detalhes da representação do propagador como uma integral de trajetória	61
A.2	Demonstração de uma identidade	62
A.3	A derivada da função de Green restrita	65
B	Primeira Convolução	66
C	Detalhes da obtenção de $K(x, -it; x')$	71
C.1	Representação integral útil de um produto de convolução	71
C.2	Trabalhando os termos	75
D	Estudo detalhado do limite assintótico de $A(x, x', u)$	82
D.1	Pontos de sela	85
D.2	Diagonalização das Hessianas	86
D.3	Conclusão, forma final de $A(x, x', u)$	88

Dissertação apresentada no Instituto de
Física Gleb Wataghin da
Universidade Estadual de Campinas
como parte dos requisitos
necessários para obtenção do
Título de Mestre em Física.

Abstract

A calculation of the exact propagator for the Hamiltonian:

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V_0\theta(q)$$

is proposed. The consistency of the result with some other known propagators is verified. Possible applications are outlined.

Abstract

Um cálculo exato do propagador para a Hamiltoniana:

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V_0\theta(q)$$

é proposto. A consistência do resultado com outros propagadores conhecidos é verificada. Possíveis aplicações são delineadas.

Agradecimentos

Este trabalho foi em parte financiado pelo Conselho Nacional de Pesquisa, CNPq, e pela Fundação de Amparo ao Ensino e à Pesquisa da Unicamp.

Este trabalho foi concluído usando também das instalações da Escola Federal de Engenharia de Itajubá – EFEI.

Contei com muita ajuda neste trabalho, da mamãe e da família distantes, que me deram o famoso financiamento parcial. Quero agradecer ao João e à Elis, ao Mané, à Sandra e também ao prof. Edison a fundamental ajuda me emprestando seus micros. Obrigado aos colegas Marquinho, Bettega, Marcos Gomes e Bajay e àqueles que assistiram minhas prévias mais lentas. Quero agradecer ao prof. Oliveira pela sua contudente crítica à primeira versão deste trabalho. Agradeço ao prof. Marcus pelo seu envolvimento e apoio, com uma crítica mais suave, na parte final do trabalho e também à prof^a Kyoko. Agradeço ao prof. Amir pelas discussões, obstinadas, mas não obstantes.

Ao grande companheiro, Gian, com suas revisões silenciosas.

E à digníssima esposa Ana, pelo nada que é o cotidiano.

Dedico esta dissertação e todo o trabalho que tive ao meu pai, Nicolau, sempre a dizer que “*o dia de amanhã é escuro*”.

Apesar disso, cumpre lembrar que a opinião que temos uns dos outros, as relações de amizade, de família, nada têm de fixo senão em aparência, mas são eternamente móveis como o mar. Daí tantos rumores de divórcio entre dois esposos que pareciam tão perfeitamente unidos e que pouco depois falam carinhosamente um do outro, tantas infâmias ditas por um amigo acerca de um amigo de quem o julgávamos inseparável e com quem o encontraremos reconciliado antes de ter tido tempo de refazer-nos da surpresa; tantas alianças desfeitas em tão pouco tempo entre os povos.

Marcel Proust

Introdução

Sobre um sistema físico genérico e sua dinâmica ou evolução temporal, tem havido, desde sempre, curiosidade e interesse científicos.

Em Mecânica Quântica, dispomos de duas versões para encarar este problema: a diferencial e a integral. Grosso modo, a versão diferencial – encarada na equação diferencial de Schrödinger – nos permite o conhecimento da evolução *passo a passo* (infinitesimal) de um sistema quântico, contanto que saibamos do estado deste sistema em algum instante. A versão integral – cuja figura representativa é o ‘propagador espaço-tempo’, ‘Núcleo de Feynman’ ou mesmo ‘função de Green espaço-tempo’, sinônimos – nos permite o conhecimento do estado de um sistema quântico em qualquer instante e posição, ainda com a mesma informação inicial: o estado do sistema em certo instante e certa posição.

Contrapondo assim uma à outra, pode parecer que as vantagens da versão integral são indiscutíveis: temos a mesma informação a dar $|\psi(t_0)\rangle$ e muito mais que tirar: $\forall t > t_0$, $|\psi(t)\rangle$. Mas por que vias? O propagador¹, que também temos que conhecer de início.

Tentaremos elucidar os dois parágrafos anteriores com alguns conceitos elementares de Mecânica Quântica. Assim, vamos aos símbolos:

A equação de Schrödinger, numa forma geral, pode ser escrita como

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle, \quad (0.1)$$

¹Usaremos ‘propagador’ tout-court querendo dizer ‘propagador espaço-tempo’.

onde $\hat{\mathcal{H}}$ é a hamiltoniana do sistema quântico.

Fazendo uma integração desta equação de t_0 a $t_0 + \Delta t$, usando o teorema do valor médio para integrais, temos

$$\begin{aligned} |\psi(t_0 + \Delta t)\rangle - |\psi(t_0)\rangle &= -\frac{i\Delta t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\psi(t^*)\rangle \\ &\doteq -\frac{i\Delta t}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\psi(t_0)\rangle, \end{aligned} \quad (0.2)$$

onde a aproximação é tanto melhor quanto menor fizermos Δt e $t^* \in (t_0, t_0 + \Delta t)$.

Portanto dado um estado inicial para o sistema quântico: $|\psi(t_0)\rangle$, temos $|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle$, via equação de Schrödinger; de diferenças finitas, para ser preciso.

Este procedimento pode ser continuado, chamando $t_1 = t_0 + \Delta t$ e obtendo uma aproximação para $|\psi(t_0 + 2\Delta t)\rangle$, etc. Note entretanto, que a aproximação vai se tornando cada vez pior.

A função de Green espaço-tempo é também solução da equação de Schrödinger. Mantendo esta última na forma de operadores, temos que a primeira será solução de

$$\hat{\mathcal{H}} \hat{K}(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{K}(t) \quad (0.3)$$

$$\text{com } \hat{K}(0) = \mathbf{1}, \quad (0.4)$$

como condição inicial. Esta condição distingue a função de Green de todas as outras soluções da eq.(0.1). Quando $\hat{\mathcal{H}}$ é independente do tempo, tem-se

$$\hat{K}(t) = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \text{ para } t > 0, \text{ e} \quad (0.5)$$

$$\hat{K}(t) \equiv 0 \text{ para } t < 0 \quad (0.6)$$

onde nos restringimos à solução que obedece ao princípio da causalidade.

Conhecendo $|\psi(t_0)\rangle$, temos

$$|\psi(t)\rangle = \hat{K}(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t_0)}{\hbar}} |\psi(t_0)\rangle, \quad (0.7)$$

o que pode ser verificado imediatamente substituindo $|\psi(t)\rangle$ acima na eq.(0.1).

Portanto dado um estado inicial para o sistema quântico: $|\psi(t_0)\rangle$, temos $|\psi(t)\rangle$ para todo $t > t_0$.

Os outros dois nomes para a função de Green se devem ao trabalho de Feynman [1], e só podem ser apreciados quando tomamos uma representação de coordenada para $\hat{K}(t)$. Vamos nos restringir a um sistema quântico de uma partícula em uma dimensão, definindo

$$K(x, t; x') = \langle x | \hat{K}(t) | x' \rangle . \quad (0.8)$$

E assim, da eq.(0.7)

$$\begin{aligned} \langle x | \psi(t) \rangle &= \int \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} | x' \rangle \langle x' | \psi(t_0) \rangle dx' \\ \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' K(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0) \end{aligned} \quad (0.9)$$

Acima tem-se uma equação integral para $\psi(x, t)$ totalmente equivalente à equação de Schrödinger. Em equações integrais da forma

$$f(z) = \int dz' K(z, z') f(z') , \quad (0.10)$$

$K(z, z')$ é chamado o ‘núcleo’². Assim se explica o nome núcleo de Feynmann.

Há uma analogia com transformações lineares que, se não nos permite a compreensão, ao menos traz alguma familiaridade com este núcleo. Repare que na eq.(0.7) o estado $|\psi(t)\rangle$ é obtido da transformação unitária $e^{-i\frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$ aplicada ao estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$. Podemos portanto escrevê-la abreviadamente assim

$$v' = T v .$$

Conforme já comentado T é um operador unitário no nosso caso e, portanto, todos os seus autovalores têm norma um. Procurar soluções para

$$T v = \lambda v \quad (0.11)$$

²O nome é a tradução de *kernel* em inglês, que empresta sua primeira letra à função $K(z, z')$.

é encontrar o núcleo da ‘transformação linear’ $(T - \lambda \mathbf{1})$:

$$(T - \lambda \mathbf{1})v = \mathbf{0} .$$

No nosso caso, quem são? São os autoestados. De fato, se

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}|\psi_E(t_0)\rangle &= E|\psi_E(t_0)\rangle \quad \text{então} \\ |\psi_E(t)\rangle &= e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t_0)}{\hbar}}|\psi_E(t_0)\rangle = e^{-i\frac{E(t-t_0)}{\hbar}}|\psi_E(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (0.12)$$

Isto nos sugere escrever a eq.(0.8) na forma

$$\begin{aligned} K(x, t; x') &= \sum_{E, E'} \langle x | \psi_{E'} \rangle \langle \psi_{E'} | \hat{K}(t) | \psi_E \rangle \langle \psi_E | x' \rangle \\ &= \sum_{E, E'} \psi_{E'}(x) e^{-i\frac{E t}{\hbar}} \delta_{E, E'} \psi_E^*(x') \\ &= \sum_E \psi_E(x) e^{-i\frac{E t}{\hbar}} \psi_E^*(x') , \end{aligned} \quad (0.13)$$

onde E e E' estão no espectro de $\hat{\mathcal{H}}$, contínuo, discreto ou ambos.

Lembrando que, no caso de problemas de espalhamento, o espectro de $\hat{\mathcal{H}}$ é contínuo, temos

$$K(x, t; x') = \int_0^{+\infty} \psi_E(x) e^{-i\frac{E t}{\hbar}} \psi_E^*(x') dE , \quad (0.14)$$

onde escolhemos o limite inferior do espectro sendo zero sem perda de generalidade. Esta última equação será usada no decorrer do trabalho.

Há que se explicar ainda o nome ‘propagador espaço-tempo’. Isto já é um pouco mais difícil, mas o ponto de partida é o mesmo, a eq.(0.7):

$$|\psi(t)\rangle = \hat{K}(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t_0)}{\hbar}}|\psi(t_0)\rangle \quad (0.15)$$

Misturamos as noções diferencial e integral, escrevendo-a para um intervalo de tempo Δt pequeno:

$$|\psi(\Delta t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}\Delta t}{\hbar}}|\psi_0\rangle$$

$$|\psi(2\Delta t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} |\psi_0\rangle$$

Em geral,

$$|\psi(N\Delta t)\rangle = \underbrace{e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \dots e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}}}_{N \text{ vezes}} |\psi_0\rangle$$

Chamando $t = N\Delta t$, vemos que $\hat{K}(t)$ foi escrito de uma outra maneira

$$\hat{K}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \dots e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \quad (0.16)$$

Para obter uma representação de coordenada para $\hat{K}(t)$ agora, inserimos $N - 1$ identidades entre cada par de exponenciais. Assim

$$K(x, t; x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_N \rangle \times \\ \times \langle x_N | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | \dots | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x' \rangle \quad (0.17)$$

Podemos vislumbrar na equação acima a descrição de $K(x, t; x')$ em termos de trajetórias. No integrando, cada termo do tipo

$$\langle x_i | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_{i-1} \rangle$$

representaria a *propagação* da partícula de x_{i-1} até x_i no intervalo de tempo Δt . Temos assim uma poligonal, uma trajetória no chamado espaço de

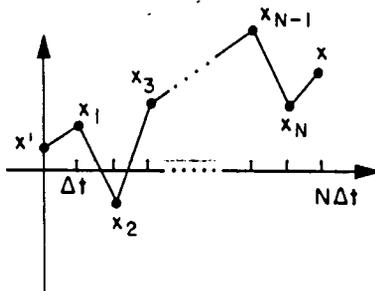


Figura 0.1: Uma trajetória no espaço-tempo.

configuração estendido: $0tx$.

E o que fazem as integrações de $-\infty$ a $+\infty$ sobre cada x_i $i = 1, \dots, N$? Quando $\Delta t \rightarrow 0$, elas esgotam todo o semiplano direito de $0tx$, fazendo-nos contar todas as trajetórias contínuas possíveis de x' até x .

Este punhado de integrações³ sobre todo o eixo x , para cada $t_i = i\Delta t$, define uma medida sobre o espaço de trajetórias contínuas e chegamos à integral de trajetória

$$K(x, t; x') = \int_{x(0)=x'}^{x(t)=x} e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]} \mathcal{D}x(\tau), \quad (0.18)$$

onde $S[x(\tau)] = \int_0^t L(x, \dot{x}) d\tau$ é a ação da trajetória $x(\tau)$. Os detalhes de como aparece a ação na exponencial estão no apêndice A.

A integral de trajetória acima é o ponto de partida de Feynmann para obter a Mecânica Quântica não-relativística [3], às vezes chamada formulação Lagrangeana da **MQ**. No já clássico *Quantum Mechanics and Path Integrals*, a exposição está em ordem inversa. Postula-se que o propagador é da forma (0.18) e se demonstra que

$$K(x, t; x') = \langle x | e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} | x' \rangle. \quad (0.19)$$

A integral de trajetória é um caso particular das chamadas integrais funcionais

$$\int_{f(0)=f_0}^{f(z)=f} \mathcal{F}[f(z')] \mathcal{D}f(z'), \quad (0.20)$$

onde \mathcal{F} é um funcional da função $f(z')$ e $\mathcal{D}f(z')$ é a medida no espaço de funções contínuas $f(z')$. O movimento browniano clássico já era descrito em termos de integrais funcionais, antes dos trabalhos de Feynmann relacionando-as com a Mecânica Quântica⁴.

³Há ainda um fator de normalização para cada integral. Veja ap.A e [2] para mais detalhes.

⁴Um trecho de [4]: “Wiener, who first introduced this measure during the early twenties did it in a much less abstract way. ...

Wiener’s method, although extremely appealing, has certain disadvantages and is out of

Vimos, portanto, como relacionar evolução temporal de um sistema quântico e trajetórias no espaço-tempo. O papel das trajetórias clássicas, entre todas as trajetórias possíveis ligando dois pontos no espaço-tempo, é interessante e vamos detalhar isto no próximo capítulo.

Por ‘trajetória clássica’ referimo-nos à solução das equações de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(x, \dot{x})}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial \mathcal{L}(x, \dot{x})}{\partial x} = 0 \quad (0.21)$$

para x , \dot{x} e t complexos, em geral; com as condições de contorno $x(0) = x'$ e $x(t) = x$. Na equação acima (0.21), $\mathcal{L}(x, \dot{x})$ é a Lagrangeana da partícula. O sentido usual do termo ‘trajetória clássica’ se remete a soluções da eq. (0.21) para x , \dot{x} e t reais.

Lembremos que, em certos sistemas quânticos, há as chamadas ‘regiões classicamente proibidas’ no espaço de configuração. Genericamente, o objetivo desta dissertação é calcular um propagador para um sistema quântico com esta característica.

fashion today.

However it should not be forgotten that it was Wiener who had the idea first, and, because of this, his contribution to the subject is still the greatest.” Do cap.IV, Integration in Function Spaces and some applications.

Capítulo 1

Pequena Revisão

Até bem pouco tempo, os únicos propagadores calculados exatamente eram aqueles relacionados às Lagrangeanas quadráticas. Além disto, estes propagadores sempre podem ser postos na forma

$$K(x, t; x') = \sum_n \left(\frac{\partial^2 S_n(x, t; x')}{\partial x \partial x'} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i S_n(x, t; x')}{\hbar} \right) \quad (1.1)$$

onde $S_n(x, t; x')$ é a ação ao longo de uma trajetória clássica, e ainda com x , \dot{x} e t reais.

Em 1964, por exemplo, M. Clutton-Brock [5] demonstra que o propagador de qualquer sistema fica completamente determinado por ações de trajetórias clássicas

$$K(q'', t; q') = A \sum_{cl} \frac{\partial(Q, P)}{\partial(q', q'')} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(q'', P, t; q', P) \right] \quad (1.2)$$

contanto que se descubra uma transformação de coordenadas na qual a Hamiltoniana se anule identicamente. Afirma-se no artigo que é sempre possível em princípio encontrar esta transformação canônica. Entretanto, esta forma de raciocínio apenas transfere o problema cálculo do propagador como solução da equação de Schrödinger (ou de uma integral de trajetória), para o problema de determinação de uma transformação canônica, que é em geral tão ou mais difícil.

Balian e Bloch [6] exploram a versão da mecânica quântica de Feynman a fim de obter soluções da equação de Schrödinger em termos de trajetórias clássicas. Este procedimento se restringe ao estudo do limite $\hbar \rightarrow 0$, semi-clássico.

No trabalho de Balian, entretanto, já se dá conta da possível dificuldade que se teria para obter as trajetórias clássicas nas regiões ditas classicamente proibidas. Nestas regiões o prolongamento do domínio das soluções permitindo que x , \dot{x} e/ou t sejam complexos é imprescindível. Além desta dificuldade, aparecem simultaneamente as questões sobre o significado da parte imaginária de x , \dot{x} e t .

Como se sabe desde os primeiros trabalhos de Feynman, considerar apenas as trajetórias clássicas para se obter um propagador constitui-se num método de aproximação semiclassical ($\hbar \rightarrow 0$). Em 1982, B. Holstein demonstra que a solução de um problema de Mecânica Quântica via integrais de trajetória (contando-se as contribuições para o propagador apenas das trajetórias clássicas) resulta numa aproximação, no mínimo tão boa quanto a correspondente solução via WKB [7]. Ainda mais, para se obter uma aproximação melhor do que via WKB, deve-se estender o sentido de trajetória clássica para o domínio complexo.

O problema de tunelamento é analisado em outros trabalhos (via integrais de trajetória), por D. McLaughlin [8] e por B. Holstein [9], em que se usa o sentido de trajetória clássica definido acima. Para se obter a solução de (0.21) na(s) região(ões) classicamente proibida(s), é necessário que se permita que o tempo tenha uma parte imaginária não-nula, isto é, dada a Lagrangeana

$$L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) . \quad (1.3)$$

Se $E < V(q)$ resolve-se

$$\frac{d^2 q}{d(it)^2} - \frac{\partial V}{\partial q} = 0 , \quad (1.4)$$

o que equivale a uma inversão do potencial: $V'(q) = -V(q)$ para $E < V$.

Em [10], há um tratamento do problema da reflexão a energias acima da barreira nesta mesma linha, permitindo que o tempo tenha parte imaginária não-nula, mas também com a coordenada q assumindo valores complexos [10].

Convém salientar que, de fato, Holstein obtém a mesma aproximação que o método WKB para o coeficiente de transmissão no caso do tunelamento [9], e uma aproximação exponencial no caso da reflexão para energias acima da barreira (neste problema, o método WKB reproduz o resultado clássico: transmissão total).

Não há consenso sobre o que significa “tempo imaginário”, mas esta noção também é usada por M. Büttiker e R. Landauer [11] para o tempo de travessia no tunelamento. A não atribuição de um significado plausível para estes parâmetros, até onde sabemos, torna, portanto, frágil uma defesa da busca de trajetórias clássicas para problemas como tunelamento, penetração de barreira e reflexão acima da barreira; pelo menos por mim que, como já disse, não saberia justificar.

Em resumo, a receita que prescreve:

- determine as trajetórias clássicas e
- escreva o propagador na forma (1.1)

para potenciais espalhadores (como a barreira), tem tido um sucesso relativo. Sim, pois o que se obtém para os parâmetros de interesse, quais sejam, os coeficientes de reflexão e transmissão, já se tem por outro método semiclássico, o WKB.

Num artigo de 1982, L. Schulman obtém exatamente o propagador espaço tempo para a barreira delta, colocada ao longo do semi-eixo y -negativo no plano x - y [12], uma parede. Uma propriedade interessante deste propagador é que $K(\vec{b}, t; \vec{a})$ não se anula numa situação em que não há uma trajetória clássica ligando os pontos \vec{a} e \vec{b} .

Este resultado abre perspectivas para se tentar calcular exatamente outros

propagadores, como para o problema da barreira quadrada. Esta dissertação explora esta perspectiva.

Em [13], B. Gaveau e L. Schulman obtêm vários outros propagadores, agora em uma dimensão, entre os quais aquele para a barreira delta:

$$K(x, t; y) = K_0(x, t; y) - a \int_0^\infty du e^{-au} K_0(|x| + |y| + u, t; 0) \quad (1.5)$$

onde $K_0(x, t; y)$ é o propagador livre e $V(x) = a\delta(x)$. Novamente, não se pode escrever $K(x, t; y)$, acima, em termos da expressão (1.1).

O desenvolvimento do cálculo é baseado, em grande parte, no método da “expansão por decomposição de caminhos” [14], que, no meu entender, se apresenta justo para resolver este tipo de problema, sendo “uma nova (1985) técnica em integrais de trajetória que nos permite quebrar o espaço de configuração em regiões disjuntas e expressar a dinâmica do sistema como um todo em termos daquela de suas partes.” É curioso que A. Auerbach e S. Kivelson não tenham já apresentado estes cálculos, restritos que ficaram à verificação de coerência do método com resultados de problemas unidimensionais, como o poço infinito e a partícula livre.

Este cálculo, na sua maior parte apresentado nos apêndices, é um passeio pelas tabelas de integrais e alguns livros de funções especiais. No capítulo 3, exponho o método PDX, no que me é útil, e verifico sua aplicabilidade. Na introdução ao capítulo 4, exponho um algoritmo do cálculo.

Capítulo 2

O método PDX

Há muitos problemas em mecânica quântica, notadamente aqueles em que o fenômeno de tunelamento está presente, em que o espaço de configuração se divide naturalmente em duas ou mais regiões distintas (classicamente permitida ou proibida). O método da **expansão por decomposição de caminhos** (PDX) [14] se inspira em e faz uso desta característica.

A formulação da Mecânica Quântica via integrais de trajetória nos permite relacionar o propagador $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')$ com as ações sobre todos os caminhos ligando \mathbf{x}' a \mathbf{x} no tempo t . O PDX se baseia na observação de que, havendo uma superfície Σ que quebra o espaço de configuração em duas regiões distintas, podemos dividir qualquer caminho em duas partes: de 0 a τ e de τ a t , sendo τ o instante em que, pela última vez, o caminho atravessou Σ . Assim, o pedaço de 0 a τ será um caminho que vai de \mathbf{x}' a \mathbf{x}_σ ($\mathbf{x}_\sigma \in \Sigma$) e o outro, de \mathbf{x}_σ a \mathbf{x} , sem jamais ‘tocar’ Σ . Por isto entendemos a decomposição de caminhos.

Como veremos, este raciocínio resulta numa expressão que iguala a função de Green $K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}')$ a uma convolução – sobre o instante τ de último cruzamento sobre Σ – e uma integração – sobre a superfície Σ – da própria função de Green $K(\mathbf{x}_\sigma, t; \mathbf{x}')$ e da derivada da, assim definida, “função de Green restrita” $K^r(\mathbf{x}, t - \tau; \mathbf{x}_\sigma)$.

Farei uma exposição do método primeiramente como está em [14], em seguida, nas subseções, verifico a aplicabilidade ao problema do potencial degrau.

Como já disse, a função de Green restrita é dada, por construção, no formalismo de Feynman, pela soma de

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[\mathbf{x}(\tau')]} , \quad (2.1)$$

onde $\tau \leq \tau' \leq t$ e $\mathbf{x}(\tau') \cap \Sigma = \emptyset$.

O propagador, ou função de Green, pode ser expresso em termos da integral de trajetória de Feynman [3]

$$K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}') = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \exp\left(\frac{iS[\mathbf{x}(t)]}{\hbar}\right) , \quad (2.2)$$

onde \mathbf{x} é um vetor no espaço de configuração \mathcal{C} , e S é o funcional de ação

$$S[\mathbf{x}] = \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}) \right] . \quad (2.3)$$

Antes de fazer o cálculo do propagador com a discretização do tempo como de costume, calcula-se o propagador para tempo imaginário

$$K(\mathbf{x}, -it; \mathbf{x}')$$

(Wick-rotated Green function). Com isto, evita-se alguns problemas de integrais gaussianas em princípio divergentes para tempo real. A função de Green para tempo imaginário é um objeto melhor definido matematicamente, por estar embasado na medida de Wiener para o movimento browniano [15]. Calculo o propagador para tempo imaginário, assumindo que é sempre possível obtê-lo para tempo real por prolongamento analítico.

A rotação de Wick leva $S \rightarrow iS$ com

$$S[x] = \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) \right] . \quad (2.4)$$

Onde já consideramos o problema em uma dimensão com uma superfície consistindo de um ponto x_σ .

Subdivide-se o intervalo $[0, t]$ em N subintervalos iguais e define-se a integral de trajetória como o limite quando $N \rightarrow \infty$:

$$K_N(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \times \\ \times \exp \left[-\frac{S(0, N+1)}{\hbar} \right], \quad (2.5)$$

$$K(x, -it; x') = \lim_{N \rightarrow \infty} K_N(x, -it; x'), \quad (2.6)$$

onde $S(n_1, n_2)$ é a versão discretizada da ação

$$S(n_1, n_2) = \sum_{j=n_1}^{n_2} \frac{m(x_{j+1} - x_j)^2}{2\epsilon} + V(x_j)\epsilon \quad (2.7)$$

e $\epsilon = \frac{t}{N+1}$ é o intervalo de tempo.

Como sempre, a trajetória consiste da poligonal que une os pontos x_i e x_{i+1} , com $i = 0, \dots, N$, $x_1 = x'$ e $x_{N+1} = x$ (os índices especificam o instante de tempo, note que são $N + 2$ instantes).

Até aqui, nada de novo. Consideramos agora a ordem entre os pontos x' , x_σ e x , são quatro casos:

i. $x' < x_\sigma < x$

ii. $x < x_\sigma < x'$

-qualquer trajetória passa por x_σ pelo menos uma vez e, em geral, um número ímpar de vezes;

iii. $x' < x_\sigma$ e $x < x_\sigma$

iv. $x' > x_\sigma$ e $x > x_\sigma$

-qualquer trajetória passa por x_σ um número par de vezes (incluindo zero vezes).

Vamos nos ater ao primeiro caso, em que podemos classificar as trajetórias em grupos disjuntos \mathcal{P}_n , com $n = 0, \dots, N$ de modo que \mathcal{P}_n consista de todas

as trajetórias para as quais, dados

$$x_0$$

$$x_1$$

⋮

$$x_j \rightarrow j \text{ é o maior valor para o qual } x_j < x_\sigma \Rightarrow j = n .$$

⋮

$$x_{N+1} ,$$

onde $x_0 < x_\sigma < x_{N+1}$.

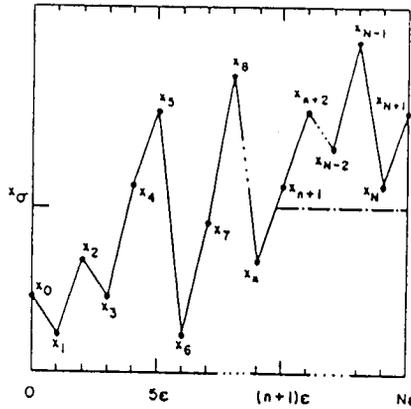


Figura 2.1: Uma trajetória típica para $x' < x_\sigma < x$.

Assim reagrupando, podemos escrever para K_N

$$K_N(x, -it; x') = \sum_{n=0}^N K_{N,n}(x, -it; x')$$

onde $K_{N,n}$ é a soma sobre todos os caminhos da classe \mathcal{P}_n :

$$K_{N,n} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S(0, n-1) \right] \times \\ \times \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_n \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_{n+1} \cdots \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_N \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S(n-1, N+1) \right] \quad (2.8)$$

Como $S(n-1, N+1)$ depende de x_{n-1} , a expressão acima ainda não pode ser escrita como o produto de dois grupos de integrais independentes. Usaremos outro truque.

Começamos por reescrever $S(n-1, N+1)$:

$$S(n-1, N+1) = S(n-1, n) + \frac{m(x_{n+1} - x_n)^2}{2\epsilon} + V(x_n)\epsilon + S(n+1, N+1) \quad (2.9)$$

Usamos a identidade

$$\begin{aligned} & \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\epsilon}(x_{n+1} - x_n)^2\right] = \\ & \int_0^\epsilon d\tau \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar\tau}(x_\sigma - x_n)^2\right] \times \\ & \times \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{m}{2\pi\hbar(\epsilon - \tau)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar(\epsilon - \tau)}(x_{n+1} - x)^2\right] \right] \Bigg|_{x=x_\sigma} \end{aligned} \quad (2.10)$$

que vale para $x_n < x_\sigma < x_{n+1}$ (o que, de fato, faz parte da definição dos caminhos que contribuem em $K_{N,n}$). Esta identidade tem uma verificação trivial (veja apêndice A.1).

Complicamos $K_{N,n}$:

$$\begin{aligned} K_{N,n} &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(n+1)}{2}} \int_0^\epsilon d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_n \\ & \times \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S(0, n) - \frac{m(x_\sigma - x_n)^2}{2\hbar\tau} - \frac{V(x_n)\epsilon}{\hbar}\right] \times \\ & \times \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(N-n-1)}{2}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(\epsilon - \tau)}\right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_{n+1} \cdots \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_N \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S(n+1, N+1) - \frac{m(x_{n+1} - x)^2}{2\hbar(\epsilon - \tau)}\right] \end{aligned} \quad (2.11)$$

Agora aproximamos

$$V(x_n)\epsilon \doteq V(x_n)\tau + V(x_\sigma)(\epsilon - \tau), \quad (2.12)$$

e definimos

$$S^\dagger(0, n+1) \equiv S(0, n) + \frac{m(x_\sigma - x_n)^2}{2\tau} + V(x_n)\tau, \quad (2.13)$$

$$S^\dagger(n, N+1) \equiv \frac{m(x_\sigma - x_{n+1})^2}{2\hbar(\epsilon - \tau)} + V(x_\sigma)(\epsilon - \tau) + S(n+1, N+1) \quad (2.14)$$

E estamos para simplificar $K_{N,n}$

$$\begin{aligned} K_{N,n} &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(n+1)}{2}} \int_0^\epsilon d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_n \\ &\quad \times \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S^\dagger(0, n+1)\right] \times \\ &\quad \times \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(N-n-1)}{2}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(\epsilon - \tau)}\right)^{\frac{1}{2}} \times \\ &\quad \times \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_{n+1} \cdots \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_N \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S^\dagger(n, N+1)\right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Usando a simetria de $S^\dagger(0, n+1)$ com respeito à troca $x_n - x_\sigma \rightarrow x_\sigma - x_n$ (veja 2.14) e que $(x_\sigma - x_n)$ é da ordem de $\tau^{1/2}$ para que o integrando seja substancialmente não nulo (veja 2.11), podemos estender a integral em x_n para $+\infty$, ganhando um fator $\frac{1}{2}$.

O resultado é o seguinte

$$\begin{aligned} K_{N,n}(x, -it; x') &= \int_0^\epsilon d\tau K_n(x_\sigma, -i(n\epsilon + \tau); x') \times \\ &\quad \times \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{N-n}^\tau(x, -i(t - n\epsilon - \tau); y) \right] \Big|_{y=x_\sigma} (1 + O(\epsilon^{\frac{3}{2}})). \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde K_N^τ é definido da mesma maneira que K_N em (2.5), exceto pelo fato de que as integrais sobre x_j têm um limite inferior x_σ em vez de $-\infty$.

Os termos indicados por $O(\epsilon^{\frac{3}{2}})$ são devidos ao potencial em S . Desprezamos, na dedução acima, os termos proporcionais a $\frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x=x_n}$:

$$V(x_n)\epsilon = [V(x_n)\tau + V(x_\sigma)(\epsilon - \tau)] - \frac{dV(x)}{dx} \Big|_{x=x_n} (x_\sigma - x_n)(\epsilon - \tau) + \dots^1 \quad (2.17)$$

A contribuição para $K_{N,n}$ dada pelo termo da primeira derivada em (2.17) é $O(\epsilon^{\frac{3}{2}})$ em comparação com o anterior, pois na integral em x_n o integrando só

¹Note que, para a nossa aplicação, $\frac{dV(x)}{dx} = V_0\delta(x)$.

é consideravelmente não-nulo na região $(x_n - x_\sigma) \sim \epsilon^{1/2}$. No limite $N \rightarrow +\infty$, este termo pode ser ignorado. Além disto neste limite, pelo fato de termos dividido t em N subintervalos *iguais*, $K_n \rightarrow K$ e $K_{N-n}^r \rightarrow K^r$, e a soma sobre n com a integral sobre τ são substituídas por uma única integral sobre $t' = n\epsilon + \tau$. Esta, por sua vez, resulta na expressão, do método PDX, para $K(x, -it; x')$:

$$K(x, -it; x') = \int_0^t dt' K(x_\sigma, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K^r(x, -i(t-t'); y)|_{y=x_\sigma} . \quad (2.18)$$

2.1 Aplicabilidade do Método PDX

Nesta seção, analiso cada um dos passos, que considero mais importantes, do raciocínio que leva à decomposição de caminhos e à eq.(2.18). Lembremos que

$$V(x) = V_0 \theta(x - x_\sigma) .$$

No caso $x' < x_\sigma < x$, temos a classificação de trajetórias mantida, e assim

$$K_N(x, -it; x') = \sum_{n=0}^N K_{N,n}(x, -it; x')$$

onde $K_{N,n}$ é a soma sobre todos os caminhos da classe \mathcal{P}_n .

O primeiro ‘problema’ aparente surge ao fazermos a aproximação

$$V(x_n)\epsilon \doteq V(x_n)\tau + V(x_\sigma)(\epsilon - \tau) . \quad (2.19)$$

Fizemos esta aproximação tendo em vista a dependência do integrando em (2.11) com $e^{-\frac{\alpha(x_\sigma - x_n)^2}{\tau}}$, fazendo com que $(x_n - x_\sigma) \sim \tau^{1/2} \leq \epsilon^{1/2}$, para que este fosse substancialmente não-nulo.

Para $V(x) = V_0 \theta(x - x_\sigma)$ (ou, em geral, $V(x) = V'(x)\theta(x - x_\sigma)$, onde $V'(x)$ pode ter outras descontinuidades de primeira espécie) a ‘série’ completa de $V(x_n)$ contém termos em $\delta(x - x_\sigma)$, $\delta'(x - x_\sigma)$ e $\delta^j(x - x_\sigma)$, estes por sua vez, multiplicados por $(x_n - x_\sigma)^{j+1}$.

Como

$$e^{-V(x_n)\epsilon/\hbar} \doteq 1 - V(x_n)\epsilon/\hbar \quad (2.20)$$

está no integrando e todos sabemos que

$$\begin{aligned} \int (x - x_\sigma)\delta(x - x_\sigma) dx &= 0 \\ \int (x - x_\sigma)^2\delta'(x - x_\sigma) dx &= 0 \\ \int (x - x_\sigma)^{j+1}\delta^j(x - x_\sigma) dx &= 0, \end{aligned}$$

concluo que isto não leva a problema algum.

Logo em seguida, obtendo 2.15, quero estender a integral em x_n até $+\infty$. Ocorre que, no caso $V(x) = V_0\theta(x - x_\sigma)$, não temos a simetria do integrando com respeito à troca $x_n - x_\sigma \rightarrow x_\sigma - x_n$.

Analiso a expressão

$$\begin{aligned} Tr &\equiv \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(n+1)}{2}} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_n \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S^\dagger(0, n+1)\right], \quad (2.21) \end{aligned}$$

comparando-a com

$$\begin{aligned} K_n(x_\sigma, -i(n\epsilon + \tau); x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{(n+1)}{2}} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \exp\left[-\frac{1}{\hbar}S^\dagger(0, n+1)\right]. \quad (2.22) \end{aligned}$$

Ora, claramente

$$K_n(x_\sigma, -i(n\epsilon + \tau); x') = (1 + e^{-V_0\tau/\hbar})Tr. \quad (2.23)$$

E quando $N \rightarrow \infty$ (número de intervalos de tempo), tenho que $\epsilon \rightarrow 0$ e $\tau \leq \epsilon$. O fator $\frac{1}{2}$ é obtido analogamente. Assim, o 'problema' é de novo apenas aparente.

Basicamente, tudo isto se repete para $x < x_\sigma < x'$, onde mudam os limites de integração em 2.8, pois agora os caminhos serão classificados segundo a frase

$$\begin{array}{l}
 x_0 \\
 x_1 \\
 \vdots \\
 x_j \rightarrow j \text{ é o maior valor para o qual } x_j > x_\sigma \Rightarrow j = n . \\
 \vdots \\
 x_{N+1} ,
 \end{array}$$

onde $x_0 > x_\sigma > x_{N+1}$.

Assim, 2.8 se torna

$$\begin{aligned}
 K_{N,n} = & \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_{n-1} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S(0, n-1) \right] \times \\
 & \times \int_{x_\sigma}^{+\infty} dx_n \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_{n+1} \cdots \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_N \exp \left[-\frac{1}{\hbar} S(n-1, N+1) \right] \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

e, portanto, $K^r(x, -i(t-t'); y)$ em 2.18 deve ser tomado para $x < x_\sigma$. Além disto, na hora de usarmos a identidade que decompõe os caminhos, eq.(2.10) (veja apêndice A.1), temos um sinal $-$ (menos) em eq.(2.18).

Concluindo os dois primeiros casos, definindo

$$K_0^r(x, -it; y) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \left\{ e^{-\frac{m}{2\hbar t}(x-y)^2} - e^{-\frac{m}{2\hbar t}(x+y)^2} \right\} , \quad (2.25)$$

temos

$$\begin{aligned}
 K(x, -it; x') = & [\theta(x) - \theta(-x)] \int_0^t dt' K(x_\sigma, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \times \\
 & \frac{\partial}{\partial y} \exp(-V_0(t-t')\theta(x)/\hbar) K_0^r(x, -i(t-t'); y)|_{y=x_\sigma} . \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

A diferença: $\theta(x) - \theta(-x) = \text{ sinal de } x$, pode ser também entendida se a colocamos multiplicando a derivada parcial em y . Note que tomo y com o mesmo sinal de x sempre, pois estou trabalhando com o propagador *restrito*. Assim o sinal de x é igual ao sinal de y na expressão para $K(x, -it; x')$. A derivada parcial toma o caráter direcional: à esquerda ou à direita, quando nela embutimos o sinal de y . Este fato, tomarmos a derivada *normal* à superfície escolhida para dividir o espaço de configuração, decorre de sua orientação no caso geral (multidimensional) e também neste caso em que temos a superfície sendo apenas um ponto. Esta questão não é de fato discutida em [14].

2.2 Os casos $(x - x_\sigma).(x' - x_\sigma) > 0$

Apesar de que os detalhes acima analisados tenham sua importância, nesta seção somos conduzidos a uma generalização da equação apresentada em [14]. Como naquele trabalho se está interessado apenas na questão do tunelamento, estes casos lá não são estudados a fundo.

A simples classificação de trajetórias em classes disjuntas permite que se obtenha uma parte do propagador para $(x - x_\sigma)(x' - x_\sigma) > 0$ trivialmente: uma surpresa rara nestes cálculos.

Note que a classificação se baseia, em última análise, no número de vezes que uma certa trajetória atravessa a superfície x_σ . Para x e x' menores que x_σ , qualquer trajetória ligando x e x' cruza x_σ um número par de vezes. Há, no entanto, uma classe de trajetórias $\mathcal{P}(\emptyset)$ que jamais cruza x_σ e para a qual o cálculo que fizemos não vale. (Pois que a fatoração em dois grupos de integrais de $K_{N,n}$ precisa de que $x_{n+1} > x_\sigma > x_n$ ou $x_{n+1} < x_\sigma < x_n$, veja eq.(2.9), eq.(2.10) e apêndice A.1).

De fato, a decomposição desta classe de caminhos não faz sentido, tendo em vista que a única referência para fazê-la é a superfície x_σ , jamais tangida.

Assim, a classificação

$$\begin{aligned}
 & x_0 \\
 & x_1 \\
 & \vdots \\
 & x_j \rightarrow j \text{ é o maior valor para o qual } x_j > x_\sigma \Rightarrow j = n . \\
 & \vdots \\
 & x_{N+1} ,
 \end{aligned}$$

onde $x_0, x_{N+1} < x_\sigma$. só vale para o caso que eu tiver algum cruzamento e, por conseguinte,

$$K_N(x, -it; x') = K_N^*(x, -it; x') + \sum_{n=1}^N K_{N,n}(x, -it; x') \quad (2.27)$$

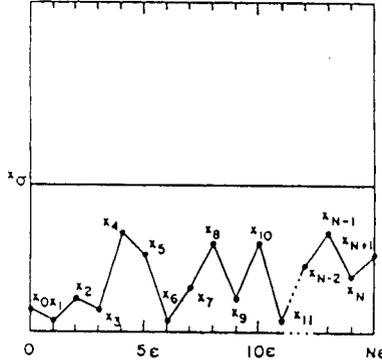


Figura 2.2: Uma trajetória da classe $\mathcal{P}(\emptyset)$.

Fazendo o cálculo de $K_N^*(x, -it; x')$ descobre-se sua simplicidade

$$\begin{aligned}
 K_N^*(x, -it; x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{x_\sigma} dx_N \times \\
 &\quad \times \exp \left[-\frac{S(0, N+1)}{\hbar} \right] ,
 \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde as integrais só vão até x_σ por construção.

Esta é simplesmente a definição do propagador restrito e que, no caso deste cálculo, vale [16]

$$K^*(x, -it; y) = K_0^r(x, -it; y), \quad (2.29)$$

onde $K^*(x, -it; x') = \lim_{N \rightarrow \infty} K_N^*(x, -it; x')$.

Portanto, para x e x' menores que x_σ

$$\begin{aligned} K(x, -it; x') &= K_0^r(x, -it; x') + \\ &+ [\theta(x) + \theta(-x)] \int_0^t dt' K(x_\sigma, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K_0^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=x_\sigma}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Evidentemente, para x e x' maiores que x_σ , o mesmo se repete no que diz respeito às classes de trajetórias que ligam x e x' . Tenho, no caso, um resultado análogo:

$$\begin{aligned} K(x, -it; x') &= e^{-V_0 t/\hbar} K_0^r(x, -it; x') + [\theta(x) + \theta(-x)] \times \\ &\times \int_0^t dt' K(x_\sigma, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} e^{-V_0(t-t')/\hbar} K_0^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=x_\sigma}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

2.3 Conclusão

Posso agora escrever todos os resultados numa só fórmula, obtendo

$$\begin{aligned} K(x, -it; x') &= \\ &[\theta(x) - \theta(-x')]^2 e^{-V_0 \theta(x)t/\hbar} K_0^r(x, -it; x') + [\theta(x) - \theta(-x)] \times \\ &\times \int_0^t dt' K(x_\sigma, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} e^{-V_0 \theta(x)(t-t')/\hbar} K_0^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=x_\sigma}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

O acréscimo do primeiro termo é a principal generalização que obtivemos. Possivelmente esta diferença justifique a ausência de aplicação do método

PDX ao cálculo do propagador para o problema do degrau ou da barreira em [14]. Por outro lado, convém repetir, esta diferença inexistente nos casos de tunelamento ou transmissão.

Note que esta é uma equação integral para $K(x, -it; x')$ com núcleo conhecido. Contém um produto de convolução, o que já sugere o uso de teorema da convolução para as transformadas de Laplace. Vamos escolher a superfície $x_\sigma = 0$ e, portanto, conhecendo $K(0, -it'; x')$ podemos obter $G(x, E; x')$ tomando a transformada de Laplace da eq.(2.32). Há uma semelhança inusitada entre esta equação e aquela da teoria de perturbação dependente do tempo [15]:

$$K(x, t; x') = \tilde{K}_0(x, t; x') - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi K(\xi, t'; x') V_i(\xi) \tilde{K}_0(x, (t - t'); \xi) ,$$

onde

$$V_i(\xi) = -[\theta(x) - \theta(-x)] \frac{\hbar^2}{2m} \delta'(\xi)$$

O capítulo seguinte propõe um cálculo para $K(x, -it; x')$.

Capítulo 3

O Cálculo do propagador para

$$V(x) = V_0\theta(x)$$

Resolver a eq.(0.3) é trivial, como se viu. Isto não basta para obtermos o propagador. Colocar $\hat{K}(t)$ na representação de coordenada, isto é, escrever o propagador em termos de funções de x , x' e t é tarefa bem mais intrincada. Por outro lado, interpretar fisicamente o propagador só é possível a partir desta. Mesmo depois de obtida a representação $K(x, t; x')$, não é trivial estabelecer sua unicidade, pois que o operador $\hat{\mathcal{H}}$ não é limitado em problemas de espalhamento. Para isto, é necessário acrescentar hipóteses para a solução de (0.3)¹. Devo acrescentar que as soluções para a eq.(0.3), numa forma explícita, não são numerosas.

Por conta de reunir toda a informação sobre a dinâmica do sistema: $\hat{\mathcal{H}}$, ao tratarmos de problemas que carecem de simetrias globais (como o momento para a partícula livre ou a ação para o oscilador harmônico), além da energia; parece-me intuitivo que teremos grandes dificuldades na determinação do propagador.

¹Um exemplo desta situação é o propagador da partícula livre, mais detalhes na sec.3.1

A Hamiltoniana para o potencial degrau

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V_0\theta(q) \quad (3.1)$$

representa, dentro desta visão intuitiva, o exemplo mais simples da complicação que é tirarmos a simetria translacional.

Ainda sobre a eq.(0.3), podemos obter sua transformada de Fourier:

$$\hat{\mathcal{H}}\hat{G}_E = E\hat{G}_E, \quad (3.2)$$

onde \hat{G}_E é a transformada de \hat{K} . Evidentemente, para obtermos a equação acima a partir de (0.3), é necessário que \mathcal{H} não dependa do tempo. Esta hipótese não se aplica a problemas forçados, ou sem conservação de energia. Pretende-se, num projeto mais arrojado, aplicar os resultados que vamos apresentar a problemas como o tunelamento dissipativo².

Este projeto incluiria também a determinação do propagador exato para a Hamiltoniana da barreira quadrada

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V_0\theta\left(\frac{a}{2} - |q|\right) \quad (3.3)$$

O cálculo do propagador para (3.3) esbarra na mesma dificuldade da Hamiltoniana do potencial degrau: a descontinuidade finita do potencial. Por isto vamos concentrar nossa atenção a este último problema, que já tem o elemento da quebra de simetria translacional embutido, e é um pouco mais simples.

Uma vez que se estabeleça uma forma de cálculo do propagador para o potencial degrau, muitos problemas interessantes de potenciais constantes por partes poderão ser atacados (como aquele para (3.3), cuja forma de cálculo se delinea nas conclusões). O argumento que leva ao cálculo é bastante simples, mas o cálculo não tanto.

A Hamiltoniana (3.1) é um dos primeiros exemplos para solução da equação de Schrödinger independente do tempo nos livros de Mecânica Quântica

²Veja [17, 18, 19] para obter mais detalhes.

Elementar. Por esta razão, este cálculo pode causar tédio ao leitor, sendo extremamente longo. Escolhi a apresentação mais leve que imaginei, colocando os cálculos mais longos, ou menos importantes, em apêndices. Entretanto, não é intenção mascarar um possível (sempre possível) “erro de contas”. Pelo contrário, os passos considerados fundamentais, serão devidamente salientados. Como já comentado no capítulo anterior, estarei sempre trabalhando com o propagador em tempo imaginário (Wick-rotated). Para que as integrais, freqüentemente integrais de Fresnel, convirjam, é necessário que ao parâmetro tempo seja dado uma parte imaginária negativa (portanto não-nula). Pude mostrar que o resultado final para a representação de coordenada do propagador obedecerá às condições de consistência ou compatibilidade, estabelecidas logo abaixo, apenas quando $t = t' - it''$, com t'' real e positivo³.

Apresento agora um breve resumo, até melhor dizer ‘algoritmo’, dos cálculos que irei desenvolver:

1. Verifico que o propagador satisfazendo a equação integral (2.32) satisfaz a equação de Schrödinger. Um condição sine qua non para começar os cálculos.
2. Partindo dos autoestados normalizados do problema⁴, calculo

$$K(0, -it; 0) = \int_0^\infty \psi_E(0) e^{-Et/\hbar} \psi_E^*(0) dE \quad (3.4)$$

3. Usando a eq.(2.32), obtenho

$$K(x, -it; 0) = [\theta(x) - \theta(-x)] \int_0^t dt' K(0, -it'; 0) \left. \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K^r(x, -i(t-t'); y) \right|_{y=0}, \quad (3.5)$$

onde, conforme já foi exposto,

$$K^r(x, -it; y) = e^{-\beta(x)t} K_0^r(x - it; y)$$

³Em princípio, considerava-se possível mostrar as condições de consistência com outros resultados conhecidos sem este artifício. Ao longo do texto, podem ocorrer algumas afirmações ainda neste sentido, que devem ser desconsideradas.

⁴Estes autoestados normalizados, pasme, foram obtidos de um trabalho concomitante de M. Aguiar, não publicado. Desconhecemos outra fonte.

e

$$\xi = \frac{V_0}{\hbar} \quad (3.6)$$

$$\beta(x) = \xi\theta(x) . \quad (3.7)$$

4. Primeiro exame de consistência com resultados conhecidos:

- i. $\lim_{\xi \rightarrow +\infty} K(x, -it; 0) = 0$
- ii. $\lim_{\xi \rightarrow 0} K(x, -it; 0) = K_0(x, -it; 0)$
- iii. $\lim_{t \rightarrow 0^+} K(x, -it; 0) = \delta(x)$
- iv. $\lim_{x \rightarrow 0} K(x, -it; 0) = K(0, -it; 0)$

5. Observando que, para a Hamiltoniana (3.1)

$$K(x', -it; 0) = K(0, -it; x') ;$$

6. uso novamente a eq.(2.32) para obter

$$K(x, -it; x') = [\theta(x) - \theta(-x')]^2 e^{-\beta(x)t} K_0^r(x, -it; x') + [\theta(x) - \theta(-x)] \times \\ \times \int_0^t dt' K(0, -it'; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta(x)(t-t')} K_0^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=0} .$$

7. O resultado é novamente analisado, verificando-se a consistência com os limites $t \rightarrow 0^+$, $V_0 \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow +\infty$ e continuidade de propagador e de sua derivada.

3.1 Verificação da equação de Schrödinger

Obtive no capítulo anterior uma equação integral para o propagador. Nesta seção, mostro que o propagador, se a eq.(2.32) puder ser ‘resolvida’, satisfaz imediatamente a equação de Schrödinger dependente do tempo.

Em vez de lidar com aquela profusão de funções teta, no entanto, proponho um estudo dos quatro casos possíveis de ordenamento entre os pontos

x , x' e $x_\sigma = 0$. Isto pode tornar a apresentação mais longa, mas os cálculos ficam mais inteligíveis. É bastante natural que as funções teta, do ponto de vista de equações integrais, sejam um bom instrumento de sumarização das fórmulas. Por outro lado, seriam um estorvo quando se tomasse a segunda derivada: o operador $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ aplicado a $K(x, t; x')$, se se mantêm as funções teta, produz nada menos que dezoito termos!

As condições de contorno $t \rightarrow 0^+$, a continuidade de $K(x, t; x')$ são verificadas a posteriori. A continuidade da derivada de $K(x, t; x')$ é implicada pela continuidade do próprio propagador, o que pode ser visto integrado-se a equação de Schrödinger de $-\epsilon$ a ϵ .

Divido esta verificação em seções apenas para ganhar clareza na exposição. Para começar mostro que o propagador restrito satisfaz a equação de Schrödinger para a partícula livre, uma trivialidade muito útil⁵.

3.1.1 O propagador restrito e suas derivadas

$$\frac{\partial}{\partial x} K_0^r(x, t; x') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left[\frac{im(x-x')}{\hbar t} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} - \frac{im(x+x')}{\hbar t} e^{\frac{im(x+x')^2}{2\hbar t}} \right] \quad (3.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_0^r(x, t; x') = -\frac{i\hbar}{t} K_0^r(x, t; x') + \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left[\frac{m(x-x')^2}{2\hbar t^2} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} - \frac{m(x+x')^2}{2\hbar t^2} e^{\frac{im(x+x')^2}{2\hbar t}} \right] \quad (3.9)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_0^r(x, t; x') = -\frac{i\hbar}{t} K_0^r(x, t; x') +$$

⁵Isto ocorre por que o propagador restrito satisfaz a mesma equação e uma condição de Dirichlet no ponto $x = 0$.

$$\begin{aligned}
& +i\hbar\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2}\frac{-im(x-x')^2}{2\hbar t^2}e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} - \\
& -i\hbar\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2}\frac{-im(x+x')^2}{2\hbar t^2}e^{\frac{im(x+x')^2}{2\hbar t}}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Comparando as expressões (3.10) e (3.9) vemos claramente que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}K_0^r(x,t;x') = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K_0^r(x,t;x') \tag{3.11}$$

Deixe-me agora reescrever a eq.(2.32) para tempo real:

$$\begin{aligned}
K(x,t;x') &= [\theta(x) - \theta(-x')]^2 e^{-iV_0\theta(x)t/\hbar}K_0^r(x,t;x') + [\theta(x) - \theta(-x)] \times \\
&\times \int_0^t dt' K(0,t';x')\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial y} e^{-iV_0\theta(x)(t-t')/\hbar}K_0^r(x,t-t';y)\Big|_{y=0} .
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Usarei o propagador para tempo real apenas nesta seção, a fim de não precisar de escrever a equação de Schrödinger para tempo imaginário.

3.1.2 Verificando para $x > 0$

E $x' > 0$

Temos

$$\begin{aligned}
K(x,t;x') &= e^{-iV_0t/\hbar}K_0^r(x,t;x') + \\
&+ \int_0^t dt' K(0,t';x')\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial y} e^{-iV_0(t-t')/\hbar}K_0^r(x,t-t';y)\Big|_{y=0}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Assim, usando a regra de Leibnitz para a derivação de uma integral definida e a eq.(3.11):

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x,t;x') &= V_0K(x,t;x') - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}K(x,t;x') + \\
&+ K(0,t;x')\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial y} \{\delta(x-y) - \delta(x+y)\} ,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

pois

$$\lim_{t' \rightarrow t^-} K_0^r(x, t - t'; y) = \delta(x + y) - \delta(x - y) .$$

Analizando o último termo de (3.14) temos, depois de calculada a derivada em y :

$$\frac{i\hbar}{m} K(0, t; x') \delta'(x)$$

que se anula pois

$$f(x) \delta'(x) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} \delta(x) . \quad (3.15)$$

Queda, portanto, verificado este caso:

Se $x > 0$ e $x' > 0$, então

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K(x, t; x') + V_0 K(x, t; x') = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x') \quad (3.16)$$

Ou $x' < 0$

Não há diferença em comparação com o cálculo anterior, exceto pela ausência do primeiro termo de $K(x, t; x')$, mas é fácil ver que

Se $x > 0$ e $x' < 0$, então

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K(x, t; x') + V_0 K(x, t; x') = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x') \quad (3.17)$$

3.1.3 Verificando para $x < 0$

E $x' < 0$

Neste caso, tenho

$$K(x, t; x') = K_0^r(x, t; x') + \int_0^t dt' K(0, t'; x') \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K_0^r(x, t - t'; y)|_{y=0} . \quad (3.18)$$

As derivadas com respeito a x são análogas pois o que muda neste caso em relação ao caso x e x' maiores que zero é a dependência temporal. Calculando

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x') &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_0^r(x, t; x') + \\
 &+ \frac{i\hbar}{2m} K(0, t; x') \frac{\partial}{\partial y} [\delta(x - y) - \delta(x + y)] + \\
 &+ \int_0^t dt' K(0, t'; x') \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} K_0^r(x, t - t'; y) \Big|_{y=0}, \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

que usando a eq.(3.15), na análise do segundo termo da equação acima, permite a conclusão:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K(x, t; x') \quad (3.20)$$

Queda, portanto, demonstrado

Se $x < 0$ e $x' < 0$, então

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K(x, t; x') = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x') \quad (3.21)$$

Ou $x' > 0$

Novamente, não existe diferença entre este caso e o anterior, a não ser a ausência do primeiro termo de $K(x, t; x')$. É importante notar que este termo, só aparecendo quando os pontos inicial e final estão do mesmo lado da descontinuidade do potencial, não implica na descontinuidade do propagador. De fato, quando x' passa pelo zero, mantendo x fixo, o primeiro termo vai a zero continuamente, pois $K_0^r(x, t; x')$ se anula quando x ou x' são iguais a zero.

A conclusão da verificação do problema de valor inicial em duas variáveis apresento na seção 3.7.

3.2 Obtenção de $K(0, -it; 0)$

$$K(0, -it; 0) = \int_0^\infty \psi_E(0) e^{-Et/\hbar} \psi_E^*(0) dE, \quad (3.22)$$

onde iremos usar os autoestados normalizados

$$E < V_0$$

$$\psi_E(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E} \right)^{1/4} \begin{cases} \cos(kx - \varphi) & \text{se } x < 0 \\ \cos \varphi e^{-\nu x} & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (3.23)$$

onde

$$\cos \varphi = \sqrt{\frac{E}{V_0}} \quad \text{e} \quad \sin \varphi = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{V_0}} \quad (3.24)$$

$$E > V_0$$

$${}_1\psi_E(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E} \right)^{1/4} \left(\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^{1/2} \begin{cases} \cos kx & \text{se } x < 0 \\ \cos \mu x & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

$${}_2\psi_E(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E} \right)^{1/4} \left(\frac{\sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^{1/2} \begin{cases} \sin kx & \text{se } x < 0 \\ \frac{k}{\mu} \sin \mu x & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

Onde

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \mu = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad \nu = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3.27)$$

Portanto,

$$K(0, -it; 0) = \int_0^{V_0} \frac{\sqrt{E}}{V_0} \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} e^{-Et/\hbar} dE + \int_{V_0}^\infty \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} \frac{e^{-Et/\hbar}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} dE \quad (3.28)$$

$$K(0, -it; 0) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 V_0^2} \right)^{1/2} \left\{ \int_0^\infty \sqrt{E} e^{-Et/\hbar} dE - e^{-V_0 t/\hbar} \int_0^\infty \sqrt{E} e^{-Et/\hbar} \right\} \quad (3.29)$$

As integrais são transformadas de Laplace de \sqrt{E} , que obtenho de [20], p.135, eq.(17):

$$\int_0^\infty \sqrt{E} e^{-Et/\hbar} dE = \left(\frac{t}{\hbar}\right)^{-3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Concluindo,

$$K(0, -it; 0) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{V_0 t} (1 - e^{-V_0 t/\hbar}) \quad (3.30)$$

3.3 Obtenção de $K(x, -it; 0)$

Uso o resultado acima e a eq.(2.32):

$$K(x, -it; 0) = \int_0^t K(0, -it'; 0) \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=0} dt'. \quad (3.31)$$

Do apêndice A.2,

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K_0^r(x, -i(t-t'); y) \Big|_{y=0} = \frac{x}{(t-t')} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t-t')}\right)^{1/2} e^{-\frac{m}{2\hbar(t-t')}x^2}$$

Usando o cálculo do apêndice B para $\mathcal{I}(t)$, onde

$$K(x, -it; 0) = \frac{mx}{2\pi\hbar} \mathcal{I}(t),$$

obtenho

$$\begin{aligned} K(x, -it; 0) = & \frac{(1 - e^{-\xi t})}{\xi t} \left(1 - \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) K_0(x, -it; 0) - \\ & \frac{e^{-\beta(-x)t} \alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty K_0(|x| + s, -it; 0) \left(1 - \frac{m(|x| + s)^2}{\hbar t}\right) \times \\ & \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde $\beta(x)$ já foi definido acima e

$$\alpha^2(x) = \frac{2m(\beta(x) - \beta(-x))}{\hbar} \quad (3.33)$$

3.4 Consistência intermediária

Agora⁶ é conveniente se verificar algumas propriedades de $K(x, -it; 0)$:

3.4.1 O limite da parede opaca: $V_0 \rightarrow +\infty$

Quando V_0 é muito grande, $\xi = V_0/\hbar$ é muito grande e temos para $x > 0$:

$$\alpha(x) = \alpha_0 = \sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}},$$

e para $x < 0$:

$$\alpha(x) = i\alpha_0 = i\sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}}.$$

Na eq.(3.32), vemos que o primeiro termo é $O(\xi^{-1})$ e portanto, vai a zero na medida que ξ cresce, independentemente do fato de t ser real positivo ou imaginário negativo.

Convém observar que tanto t quanto x são finitos, não nulos, nos cálculos desta seção. Os limites para zero serão tomados posteriormente e, se se desejar tomar dois limites ao mesmo tempo, por exemplo $t \rightarrow 0^+$ e $\xi \rightarrow +\infty$, basta fazer primeiro o tempo ir a zero.

Analisando o segundo termo, para $x > 0$:

$$K(x, -it; 0) \sim -\frac{\alpha_0 x}{\xi t} \int_0^\infty K_0(|x| + s, -it; 0) \left(1 - \frac{m(|x| + s)^2}{\hbar t}\right) \times \\ \times \frac{J_1(\alpha_0(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds$$

⁶Esta seção foi escrita por denotar, em parte, o procedimento de pesquisa. Era necessário, antes de se continuar com a outra convolução já enunciada no algoritmo, que se fizesse uma checagem para se ter certeza que as contas iam bem até aqui. Evidentemente esta seção já não tem grande importância, pois a consistência do resultado final também já foi escrita e obtida.

Como J_1 é uma função limitada e assintoticamente

$$J_1(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos(z - 3\pi/4) \leq \sqrt{\frac{2}{\pi z}}, \quad (3.34)$$

podemos concluir que o segundo termo é $\sim O(\xi^{-3/4})$, e que portanto se anula para $\xi \rightarrow +\infty$.

Para $x < 0$

$$K(x, -it; 0) \sim -\frac{e^{-\xi t} i \alpha_0 x}{\xi t} \int_0^\infty K_0(|x| + s, -it; 0) \left(1 - \frac{m(|x| + s)^2}{\hbar t}\right) \times \\ \times \frac{J_1(i \alpha_0 (s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds$$

Temos a exponencial $e^{-\xi t}$ multiplicando a integral, cujo integrando explode mais lentamente, pois

$$J_1(i \alpha_0 z) = i I_1(\alpha_0 z) \quad (3.35)$$

$$\sim \frac{e^{\alpha_0 z}}{\sqrt{2\pi \alpha_0 z}} \quad (3.36)$$

$$= \frac{e^{z' \sqrt{\xi}}}{\sqrt{2\pi z' \sqrt{\xi}}}, \quad (3.37)$$

quando $\alpha_0 z$, real, é grande⁷.

Portanto, na forma como está, i.e., para tempo imaginário,

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} K(x, -it; 0) \rightarrow 0.$$

Demonstro agora que $K(x, t; 0)$ também se anula quando $\xi \rightarrow +\infty$. Isto considero necessário para se evitar que um parâmetro sem sentido físico⁸,

⁷Esta comparação entre as duas exponenciais, crescente e decrescente, pode não satisfazer os puristas; por isto, na segunda verificação de consistência, seção 3.8, obtenho um argumento mais formal do porquê este termo vai a zero para tempo imaginário.

⁸Sem atribuição física nesta dissertação. Artificio inescapável em qualquer cálculo de propagadores para potenciais espalhadores em uma dimensão.

tempo imaginário negativo, tenha um papel relevante do ponto de vista físico. Por outro lado, considerando que a demonstração acima é razoavelmente imediata, mantive-a para assegurar que o comportamento é semelhante, não contradizendo a assunção que fizemos de que é sempre possível se obter $K(x, t; 0)$ de $K(x, -it; 0)$, por prolongamento analítico.

Recorde-se que, até para se obter o propagador da partícula livre, é preciso escrever o tempo com uma parte imaginária negativa não nula. Este procedimento é chamado regularização das integrais gaussianas.

Conforme já expus anteriormente, o primeiro termo vai a zero com ξ^{-1} , e só temos que analisar o segundo termo, para tempo real positivo. Reescrevo-o numa forma mais apropriada para fazer este estudo assintótico:

$$K(x, t; 0) \sim -\frac{e^{-i\beta(-x)t}\alpha(x)x}{i\xi t} \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial u} \right\} \times \\ \times \int_0^\infty K_0(|x| + s, t; 0) \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds, \quad (3.38)$$

onde

$$K_0(|x| + s, t; 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{imu^2}{2\hbar t} (|x| + s)^2 \right) \quad (3.39)$$

Portanto,

$$K(x, t; 0) \sim -\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \frac{e^{-i\beta(-x)t}\alpha(x)x}{i\xi t} \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial u} \right\} \times \\ \times \exp\left(\frac{imu^2}{2\hbar t} x^2 \right) \int_0^\infty \exp\left(\frac{imu^2}{2\hbar t} (2|x|s + s^2) \right) \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \\ K(x, t; 0) \sim -\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \frac{e^{i\beta(-x)t}\alpha(x)x}{i\xi t} \left[1 + \frac{\partial}{\partial u} \right] \exp\left(\frac{imu^2}{2\hbar t} x^2 \right) I(\alpha),$$

onde a definição de $I(\alpha)$ está implícita. Fazendo a mudança de variáveis:

$$v^2 = \alpha(x)(s^2 + 2|x|s) \quad (3.40)$$

$$s = -|x| + \frac{\sqrt{v^2 + \alpha^2(x)x^2}}{\alpha(x)} \text{ pois } s > 0 \quad (3.41)$$

$$ds = \frac{v dv}{\alpha(x)\sqrt{v^2 + \alpha^2(x)x^2}} \quad (3.42)$$

$$I(\alpha) = \int_0^\infty \exp\left(\frac{imu^2v^2}{2\hbar\alpha^2(x)t}\right) \frac{J_1(v)}{\sqrt{\alpha^2(x)x^2 + v^2}} dv \quad (3.43)$$

Para que $J_1(v)$ tenha um valor significativo, para ξ grande, devemos ter

$$v^2 \ll \alpha(x)^2 x^2 .$$

Assim, obtemos, usando [21], pág.30, eq.(12),

$$I(\alpha) \approx \int_0^{+\infty} \exp\left(\frac{imu^2v^2}{2\hbar\alpha^2(x)t}\right) J_1(v) dv \quad (3.44)$$

$$I(\alpha) \approx \frac{mu^2}{\hbar\alpha^2(x)t} \exp\left(-i\frac{\pi}{2} - i\frac{\hbar\alpha^2(x)t}{2mu^2}\right) \quad (3.45)$$

$$(3.46)$$

Portanto,

$$K(x, t, x') \approx \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \frac{e^{-i\beta(-x)t} \alpha(x)x}{i\xi t} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t} - i[\beta(x) - \beta(-x)]t\right), \quad (3.47)$$

que vai a zero com $O(\xi^{-1/2})$.

Este fato interessante conclui o limite mais complicado de se calcular.

3.4.2 O limite da partícula livre: $V_0 \rightarrow 0$

Para $V_0 \rightarrow 0$ temos $\xi \rightarrow 0$ e primeiro termo tende para

$$\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{mx^2}{\hbar t}\right) \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) .$$

No segundo termo,

$$J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) \sim \frac{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}}{2} \quad (3.48)$$

Usando da simplificação que fizemos no cálculo anterior, veja eq.(3.39), temos para o segundo termo (ST):

$$ST \approx -\frac{\alpha(x)x}{\xi t} \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial u} \right\} \int_0^\infty K_0((|x|+s)u, t; 0) \frac{\alpha(x)}{2} ds, \quad (3.49)$$

$$ST \approx -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{mx[\theta(x) - \theta(-x)]}{\hbar t} \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial u} \right\} I(u) \Big|_{u=1}. \quad (3.50)$$

Onde

$$I(u) = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{mu^2(|x|+s)^2}{2\hbar t}\right) ds \quad (3.51)$$

De [22], p.307, eq.(3.322.2)

$$I(u) = \sqrt{\frac{\pi\hbar t}{2m}} \frac{1}{u} \left(1 - \phi\left(\sqrt{\frac{mx^2}{2\hbar t}} u\right) \right) \quad (3.52)$$

$$I'(u) = -\sqrt{\frac{\pi\hbar t}{2m}} \frac{1}{u^2} \left(1 - \phi\left(\sqrt{\frac{mx^2}{2\hbar t}} u\right) \right) - \sqrt{\frac{\pi\hbar t}{2m}} \frac{1}{u} \sqrt{\frac{mx^2}{2\hbar t}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{mx^2 u^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.53)$$

onde ϕ é a função erro.

Podemos agora concluir que

$$I(1) + I'(1) = -|x| \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.54)$$

Portanto o segundo termo, quando $\xi \rightarrow 0$, se simplifica para

$$ST \approx \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{mx|x|[\theta(x) - \theta(-x)]}{\hbar t} \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar t}\right), \quad (3.55)$$

que, somado ao primeiro termo resulta no propagador livre. Isto é interessante. Queda portanto demonstrado o segundo limite mais complicado de se calcular.

3.4.3 A condição de contorno: $t \rightarrow 0^+$

No que concerne ao primeiro termo, o limite $t \rightarrow 0^+$ deve ser tomado da seguinte maneira:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{mx^2}{\hbar t} \right) \exp \left(-\frac{mx^2}{2\hbar t} \right) \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} =$$

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{mx^2}{\hbar t} \right) \exp \left(-\frac{mx^2}{2\hbar t} \right) \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t}, \quad (3.56)$$

que resulta na mesma expressão que obtive no caso $\xi \rightarrow 0$, exceto pelo limite ainda por fazer.

Convém salientar que a função

$$\frac{\exp \left(-\frac{mx^2}{2\hbar t} \right)}{t^{1/2}},$$

não sendo regular na origem, me obriga a lançar mão da teoria de funções generalizadas para obter a igualdade acima: “o limite do produto é igual ao produto de limites”. Precisaré novamente deste mecanismo para avaliar o limite do segundo termo, que passo a deduzir:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} ST = - \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{e^{i\beta(-x)t} \alpha(x)x}{i\xi t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{\partial}{\partial u} \right\} e^{-\frac{mx^2}{2\hbar t}} \times$$

$$\times \int_0^\infty \lim_{t \rightarrow 0^+} \exp \left(-\frac{m(s^2 + 2|x|s)}{2\hbar t} \right) \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds. \quad (3.57)$$

O integrando vai a zero rapidamente se $s^2 + 2|x|s$ não está próximo de zero. Isto nos permite tomar no argumento de J_1 a mesma aproximação que tivemos para $\xi \rightarrow 0$, ainda que por outra razão.

Visto que

$$s^2 + 2|x|s \approx 0 \Rightarrow$$

$$J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) \approx \frac{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}}{2},$$

o resto do cálculo se repete como em 3.4.2, não sendo necessário reescrevê-lo. Obtemos enfim

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} K(x, -it; 0) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) = \delta(x). \quad (3.58)$$

3.4.4 A continuidade: $x \rightarrow 0$

Este limite é imediato: o segundo termo vai a zero por estar multiplicado por x e o primeiro termo fornece o resultado desejado.

$$\lim_{x \rightarrow 0} K(x, -it; 0) = K(0, -it; 0) \quad (3.59)$$

Isto conclui a seção 3.4.

3.5 A simetria do propagador com respeito à troca de x por x'

Expressando o propagador em termos das autofunções que temos normalizadas, pode-se demonstrar a propriedade

$$x \cdot x' \geq 0 \Rightarrow K(x', -it; x) = K(x, -it; x'). \quad (3.60)$$

Basta notar que elas são reais, assim, por exemplo, para x e x' menores ou iguais a zero:

$$\begin{aligned} K(x', -it; x) &= \int_0^{V_0} c_1(E) \cos(kx) \cos(kx') e^{-Et} dE + \\ &\quad \int_{V_0}^{\infty} c_2(E) \cos(kx) \cos(kx') e^{-Et} dE + \\ &\quad \int_{V_0}^{\infty} c_3(E) \sin(kx) \sin(kx') e^{-Et} dE \\ &= K(x, -it; x'), \end{aligned} \quad (3.61)$$

o que vale também para x e x' maiores que zero (as únicas mudanças são a troca de k por μ e, na primeira integral, a troca das autofunções $c(E) \cos(kx)$

por $\tilde{c}(E)e^{-\nu x}$. Note que o fato de estarmos com o propagador para tempo imaginário não influenciou de nenhuma maneira a demonstração.

Portanto,

$$K(x', -it; 0) = K(0, -it; x') . \quad (3.62)$$

Em geral, para problemas de potenciais contínuos por pedaços, as autofunções são proporcionais a funções exponenciais reais e funções oscilatórias⁹. Se entendemos por funções **essencialmente reais** aquelas que satisfazem:

$$\psi^*(x) = e^{i\varphi}\psi(x) ;$$

podemos dizer que as funções exponenciais são reais e as funções oscilatórias podem ser escolhidas como múltiplas de seno e cosseno, também reais.

O argumento que leva à eq.(3.61) vale portanto para qualquer potencial seccionalmente constante, i.e.,

$$\text{Se } V(x) = V(x') \text{ e } \frac{\partial V}{\partial x} = 0 , \quad (3.63)$$

exceto num número finito de pontos, então

$$K(x, -it; x') = K(x', -it; x) \quad (3.64)$$

A fim de esclarecer melhor esta generalização, eq.(3.64), faço ainda um comentário sobre o propagador da partícula livre. De fato, ele está dentro das condições acima e obedece:

$$\forall x \forall x' \quad K(x, -it; x') = K(x', -it; x) \quad (3.65)$$

A propriedade que usei para mostrar isto foi o fato de que as autofunções podem ser escolhidas essencialmente reais:

$$\psi_k^*(x) = e^{i\varphi}\psi_k(x) .$$

Não é o caso de $u_k(x) = e^{ikx}$, também autofunção.

⁹Esta discussão está na primeira edição de [23]

Entretanto, a útil linearidade da equação de Schrödinger independente do tempo nos permite escolher duas autofunções linearmente independentes como quisermos dentro do subespaço de soluções.

Renovando o argumento, este subespaço é conhecido: para cada região onde o potencial é constante, são funções na forma $f(z, x) = a e^{zx} + b e^{\bar{z}x}$ com z real ou imaginário puro. Tomamos as autofunções

$$f(z, x) + f(\bar{z}, x) \quad \text{e} \quad f(z, x) - f(\bar{z}, x) ,$$

que são **essencialmente reais**.

3.6 Obtenção de $K(x, -it; x')$

Novamente usarei a eq.(2.32), com $x_\sigma = 0$:

$$K(x, -it; x') = [\theta(x) - \theta(-x')]^2 e^{-V_0\theta(x)t/\hbar} K_0^r(x, -it; x') + [\theta(x) - \theta(-x)] \times \\ \times \int_0^t d\tau K(0, -i\tau; x') \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} e^{-V_0\theta(x)(t-\tau)/\hbar} K_0^r(x, -i(t-\tau); y) \Big|_{y=0} .$$

Temos que calcular *apenas* o segundo termo, uma outra convolução no tempo. Não há motivo para desespero, entanto. Faço duas simplificações que ao menos tornam as fórmulas mais curtas:

$$\begin{aligned}
K(0, -i\tau; x') &= \frac{(1 - e^{-\xi\tau})}{\xi\tau} \left(1 - \frac{mx'^2}{\hbar\tau}\right) K_0(0, -i\tau; x') - \\
& - \frac{e^{-\beta(-x')\tau} \alpha(x') x'}{\xi\tau} \int_0^\infty K_0(|x'| + s', -i\tau; 0) \left(1 - \frac{m(|x'| + s')^2}{\hbar\tau}\right) \times \\
& \times \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' ,
\end{aligned} \tag{3.66}$$

A primeira simplificação já usei na seção anterior, escrevendo

$$\left(1 - \frac{mw^2}{\hbar\tau}\right) K_0(0, -i\tau; w) = \left[1 + \frac{\partial}{\partial u}\right] K_0(wu, -i\tau; 0) \Big|_{u=1} ,$$

onde $w = x'$ ou $w = |x'| + s'$. Com este truque passamos de seis para três termos.

O segundo termo de $K(0, -i\tau; x')$ reescrevo definindo um operador semelhante à transformada de Hankel:

$$\begin{aligned}
\Omega \frac{e^{-\beta(-x')\tau}}{\xi\tau} \left[1 + \frac{\partial}{\partial u}\right] \mathcal{O} \{K((|x'| + s')u, -i\tau; 0)\} &\equiv \\
\equiv \Omega \frac{e^{-\beta(-x')\tau}}{\xi\tau} \left[1 + \frac{\partial}{\partial u}\right] \int_0^\infty K_0((|x'| + s')u, -i\tau; 0) & \\
\frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' , & \tag{3.67}
\end{aligned}$$

onde

$$\Omega = -\alpha(x')x' . \tag{3.68}$$

Toda a dependência em τ fica assim evidenciada, o que importa para proceder à convolução.

Repetindo o resultado para a derivada do propagador restrito¹⁰:

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K_0^r(x, -i(t - \tau); y) \Big|_{y=0} = \frac{x}{(t - \tau)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t - \tau)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m}{2\hbar(t - \tau)}x^2} , \tag{3.69}$$

¹⁰Veja apêndice A.2.

temos que o segundo termo de $K(x, -it; x')$, o que me falta calcular, é dado por

$$\begin{aligned} & \int_0^t d\tau \frac{1 - e^{-\xi\tau}}{\xi\tau} K_0(0, -i\tau; x'u) x \frac{\theta(x) - \theta(-x)}{(t - \tau)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t - \tau)} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times e^{-\frac{m}{2\hbar(t - \tau)}x^2} + \Omega\mathcal{O} \left\{ \int_0^\tau d\tau \frac{e^{-\beta(-x')\tau}}{\xi\tau} K_0(0, -it; (|x'| + s')u) \times \right. \\ & \left. \times x \frac{\theta(x) - \theta(-x)}{(t - \tau)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(t - \tau)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mx^2}{2\hbar(t - \tau)} - \beta(x)(t - \tau)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Um momento de elegância neste cálculo ocorre agora, na observância da similaridade entre as três convoluções. Separo este segundo termo de $K(x, -it; x')$ em três partes ${}_1K$, ${}_2K$ e ${}_3K$:

$$\begin{aligned} {}_1K(x, -it; x'u) &= \frac{m|x|}{2\pi\xi\hbar} \int_0^t d\tau \frac{\exp\left(-\frac{mu^2x'^2}{2\hbar\tau}\right)}{[\tau(t - \tau)]^{3/2}} \\ &\times \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar(t - \tau)} - \beta(x)(t - \tau)\right) \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\begin{aligned} {}_2K(x, -it; x'u) &= \frac{m|x|}{2\pi\hbar\xi} e^{-\xi t} \int_0^t d\tau \frac{\exp\left(-\frac{mu^2x'^2}{2\hbar\tau}\right)}{[\tau(t - \tau)]^{3/2}} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar(t - \tau)} + \beta(-x)(t - \tau)\right) \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} {}_3K(x, -it; x'u) &= \frac{m|x|}{2\pi\hbar\xi} e^{-\beta(-x')t} \Omega\mathcal{O} \left\{ \int_0^t d\tau \frac{\exp\left(-\frac{mu^2(|x'| + s')^2}{2\hbar\tau}\right)}{[\tau(t - \tau)]^{3/2}} \times \right. \\ &\left. \times \exp\left(-\frac{mx^2}{2\hbar(t - \tau)} - [\beta(x) - \beta(-x')](t - \tau)\right) \right\} \end{aligned} \quad (3.73)$$

Não há truques nesta separação, apenas usei que a integral da soma de três funções é a soma de três integrais.

Definindo

$$a = \frac{mx^2}{2\hbar}, \quad b = \frac{mx'^2}{2\hbar} \quad e \quad (3.74)$$

$$c(s', x') = \frac{m(|x'| + s')^2}{2\hbar}; \quad (3.75)$$

temos Um exercício de observação evidencia a semelhança das convoluções.

$${}_1K(x, -it; x'u) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\xi} \int_0^t d\tau \frac{e^{-\frac{bu^2}{\tau}}}{\tau^{3/2}} \frac{e^{-\frac{a}{i-\tau} - \beta(x)(t-\tau)}}{(t-\tau)^{3/2}} \quad (3.76)$$

$${}_2K(x, -it; x'u) = e^{-\xi t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\xi} \int_0^t d\tau \frac{e^{-\frac{bu^2}{\tau}}}{\tau^{3/2}} \frac{e^{-\frac{a}{i-\tau} + \beta(-x)(t-\tau)}}{(t-\tau)^{3/2}} \quad (3.77)$$

$${}_3K(x - it; x'u) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-\beta(-x')t} \Omega \mathcal{O} \left\{ \frac{1}{\xi} \int_0^t d\tau \frac{e^{-\frac{c(s', x')u^2}{\tau}}}{\tau^{3/2}} \times \right. \\ \left. \times \frac{e^{-\frac{a}{i-\tau} - [\beta(x) - \beta(-x')](t-\tau)}}{(t-\tau)^{3/2}} \right\} \quad (3.78)$$

Figura 3.1: Desenho compacto das formas das convoluções

Elas diferem apenas nas constantes multiplicativas e nos parâmetros no integrando, mas a forma é rigorosamente a mesma, e proporcional a

$$\Lambda(d, u, a, g, t) \equiv \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\xi} \int_0^t \frac{\exp[-du^2/\tau]}{\tau^{3/2}} \frac{\exp[-g(t-\tau) - a/(t-\tau)]}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau, \quad (3.79)$$

O apêndice C.1 calcula uma representação integral para esta convolução. Obtemos ${}_1K$, ${}_2K$ e ${}_3K$:

$${}_1K(x, -it; x'u) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left\{ \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} \frac{e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}}}{\xi t} - \frac{\sqrt{\frac{2m\beta(x)}{\hbar}}|x|}{\xi t} \times \right. \\ \left. \text{continua...} \right.$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b}+\sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \times \\ & \times \left. \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m\beta(x)}{\hbar}}(s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\}, \end{aligned} \quad (3.80)$$

$$\begin{aligned} {}_2K(x, -it; x'u) &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left\{ \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} \frac{e^{-\frac{(u\sqrt{b}+\sqrt{a})^2}{t}}}{\xi t} - \frac{\sqrt{\frac{-2m\beta(-x)}{\hbar}}|x|}{\xi t} \times \right. \\ & \times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b}+\sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \times \\ & \left. \times \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{-2m\beta(-x)}{\hbar}}(s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\} e^{-\xi t} \end{aligned} \quad (3.81)$$

e

$$\begin{aligned} {}_3K(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \Omega \mathcal{O} \left\{ \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \right. \\ & \times \frac{e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')}+\sqrt{a})^2}{t}}}{\xi t} - \frac{\sqrt{\frac{2m(\beta(x)-\beta(-x'))}{\hbar}}|x|}{\xi t} \times \\ & \times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')}+\sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \\ & \left. \times \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m(\beta(x)-\beta(-x'))}{\hbar}}(s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\}. \end{aligned} \quad (3.82)$$

A relativa simplificação destas expressões se dá quando somo as duas primeiros e calculo $\left(1 + \frac{\partial}{\partial u}\right)_i K$. Este cálculo está separado no apêndice C.2, de modo que pronto chegamos ao resultado para $K(x, -it; x')$:

$$K(x, -it; x') = [\theta(x) - \theta(-x')]^2 e^{-\xi\theta(x)t} K_0^r(x, -it; x') + K_1(x, -it; x') + K_2(x, -it; x') + K_3(x, -it; x') + K_4(x, -it; x'), \quad (3.83)$$

onde K_0^r é o propagador restrito da partícula livre:

$$K_0^r(a, -it; b) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left\{ e^{-\frac{m(a-b)^2}{2\hbar t}} - e^{-\frac{m(a+b)^2}{2\hbar t}} \right\}$$

e

$$K_1(x, -it; x') = \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \left[1 - \frac{m[|x'| + |x|]^2}{\hbar t} \right] K_0(|x| + |x'|, -it; 0) \quad (3.84)$$

$$K_2(x, -it; x') = -e^{-\xi\theta(-x)t} \frac{\alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x'| + |x| + s]^2}{\hbar t} \right] \times \\ \times K_0(|x| + |x'| + s, -it; 0) \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (3.85)$$

$$K_3(x, -it; x') = -e^{-\xi\theta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x| + |x'| + s']^2}{\hbar t} \right] \times \\ \times K_0(|x| + |x'| + s', -it; 0) \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' \quad (3.86)$$

$$K_4(x, -it; x') = e^{-\xi\theta(-x')t} [\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'}{\hbar t} \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x| + |x'| + s + s']^2}{\hbar t} \right] K_0(|x| + |x'| + s + s', -it; 0) \times \\ \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds', \quad (3.87)$$

onde K_0 é o propagador da partícula livre:

$$K_0(a, -it; b) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\frac{m(a-b)^2}{2\hbar t}} \quad (3.88)$$

$\alpha(x) = \sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}}[\theta(x) - \theta(-x)]^{1/2}$, $\xi = V_0/\hbar$ e J_1 é a função de Bessel.

3.7 Consistência do resultado final

Nesta seção, faço estudos e considerações por vezes muito semelhantes aos da seção 3.4. Entretanto, duas das análises são inteiramente diferentes: o limite da parede opaca e a continuidade da derivada do propagador em $x = 0$. Começo pela parede opaca.

O limite da parede opaca é bastante complicado e, apesar de que se tenha conseguido mostrá-lo para tempo real – com parte imaginária nula – quando $x, x' < 0$, não foi obtido o resultado correspondente para $x, x' > 0$.

3.8 O limite da parede opaca: $V_0 \rightarrow +\infty$

Temos agora que este limite *não* pode anular o propagador. De fato,

Se x e x' são menores do que zero, então

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} K(x, -it; x') = K_0^r(x, -it; x') \quad (3.89)$$

E em todos os outros casos,

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} K(x, -it; x') = 0. \quad (3.90)$$

Referir-me-ei aos termos de $K(x, -it; x')$ na ordem em que estão na equação (3.83): primeiro, segundo, etc. Como o ponto mais fundamental deste limite está na análise do quinto termo, K_4 , a novidade em relação à análise da sec.3.4, faço-o separadamente.

Para tempo imaginário, o primeiro termo de $K(x, -it; x')$ já é o resultado que queremos. Ele se anula para $x > 0$ ou $x' > 0$, inclusive quando x e x'

são ambos maiores do que zero, por causa da exponencial decrescente. Mas para tempo real, este termo não vai a zero, apenas oscila com uma frequência alta, dada por $\xi = \frac{V_0}{\hbar}$. Para x e x' maiores que zero, dispomos apenas do resultado correto utilizando a parte imaginária negativa não-nula no tempo.

K_1 vai a zero trivialmente, para tempo real e imaginário, quando $\xi \rightarrow +\infty$.

Para tempo imaginário, K_2 e K_3 vão a zero pela mesma razão dada na seção 3.4: a competição entre duas exponenciais, para $x < 0$ e $x' < 0$ respectivamente, e a propriedade de J_1 ser limitada, para $x > 0$ e $x' > 0$ respectivamente. Entretanto, para $x < 0$ e $x' < 0$ e tempo imaginário, mencionarei que há um motivo, talvez equivalente (mas muito mais forte!), para se concluir que K_2 e K_3 vão a zero quando ξ vai a infinito. Este surge da análise assintótica do quinto termo K_4 , através do método de ponto de sela em duas variáveis (veja sec.3.8.2).

Para tempo real positivo, posso reaproveitar os cálculos da sec.3.4 para concluir que K_2 e K_3 vão a zero quando ξ cresce indefinidamente. Estes termos vão a zero com $O(\xi^{1/2})$ e isto pode ser visto na análise assintótica de K_4 , que faremos a seguir.

O quinto termo se anula para $x.x' \leq 0$, em qualquer limite. Tenho que provar que, para $x < 0$ e $x' < 0$ ele se anula, independentemente de se tomar o parâmetro tempo como real ou imaginário. Já para $x > 0$ e $x' > 0$, tenho que provar que $K_4(x, -it; x')$ vai a zero, e

$$K_4(x, t; x') \rightarrow -\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left\{ e^{i\frac{m(x-x')^2}{2\hbar t}} - e^{i\frac{m(x+x')^2}{2\hbar t}} \right\} e^{-i\xi t}.$$

3.8.1 Análise assintótica de $K_4(x, -it; x')$ e $K_4(x, t; x')$

Reproduzo aqui o quinto termo de $K(x, -it; x')$:

$$K_4(x, -it; x') = -e^{-\beta(-x')t} [\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'}{\hbar t} \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x| + |x'| + s' + s]^2}{\hbar t} \right] K_0(|x| + |x'| + s + s', -it; 0) \times$$

$$\times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2} (s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds' , \quad (3.91)$$

Para $x < 0$, tem-se que $x' < 0$, para que K_4 seja não nulo. Abrevio a expressão acima usando o operador $1 + \frac{\partial}{\partial u}$:

$$K_4(x, -it; x') = -\frac{2mxx'}{\hbar t} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \left[1 + \frac{\partial}{\partial u}\right] A(x, x', u) \Big|_{u=1} , \quad (3.92)$$

onde

$$A(x, x', u) = e^{-\xi t} \int_0^{+\infty} ds \int_0^{+\infty} ds' e^{-\frac{mu^2}{2\hbar t} (|x|+|x'|+s+s')^2} \times \\ \times \frac{I_1(\alpha_0(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) I_1(\alpha_0(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2} (s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} . \quad (3.93)$$

O apêndice D avalia esta função, no limite de ξ grande, usando uma extensão natural do método do ponto de sela para duas variáveis. O apêndice é interessante, mas um pouco longo. Obtenho

$$A(x, x', u) \approx \frac{i\sqrt{\pi}}{2\xi^2 t^2} \left(\frac{2\hbar t(|x|+|x'|)}{u^2|x||x'|}\right)^{3/2} \frac{1}{\left[\frac{x^2+x'^2}{|x||x'|} - 1\right]^{1/2}} \times \\ \times \exp\left[-\xi t\left(1 - \frac{1}{u^2}\right) - \frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t}\right] . \quad (3.94)$$

Apesar de que a expressão acima esteja escrita para o propagador calculado em tempo imaginário, esta característica não é levada em consideração nos cálculos do apêndice (veja nota de rodapé 1, pág. 84). Substituindo na expressão de K_4 , o termo de ordem mais alta em ξ é $O(\xi^{-1})$. Que vai a zero. Deste modo, posso afirmar que para $x < 0$ e $x' < 0$, K_4 se anula assintoticamente.

Para tempo real e imaginário, nas situações $x < 0$ ou $x' < 0$, mostramos que o propagador se comporta exatamente como deve. Quando $x > 0$ e $x' > 0$, usando do artifício de dar ao tempo uma parte imaginária negativa, também mostramos que o propagador tem o limite correto, ou seja, vai a zero. Convém observar novamente que este artifício vem como consequência

da medida de Wiener não estar bem definida para as integrais de trajetória, não sendo necessário em processos difusivos como o movimento browniano [2, 3]. Os estudos deste limite da parede opaca, mantendo o tempo apenas real positivo, tiveram a finalidade de explorar justamente esta complexidade de cálculos, por exemplo, sugerindo a análise de pontos de sela de funções de duas variáveis D .

3.8.2 Sobre K_2 e K_3 , nova análise para tempo imaginário

Esta subseção completa a discussão de 3.4.

Os pontos de sela obtidos; para $A(x, x', u)$, no apêndice D, durante a análise assintótica de $K_4(x, -it; x')$; não estão localizados sobre os eixos $s = 0$ ou $s' = 0$. Na verdade, obtenho que

$$s \sim -|x| + (\xi t)^{1/2}|x|O(1) \quad \text{e} \quad s' \sim -|x'| + (\xi t)^{1/2}|x'|O(1) ,$$

o que indica que no plano, ou hiperplano complexo, ss' , os pontos de sela se afastam da origem na medida que ξ cresce.

Observando que, para $x' \neq 0$, K_2 é dado por

$$\begin{aligned} K_2(x, -it; x') &= e^{-\beta(-x)t} \frac{\alpha(x)x}{\xi t \alpha(x')x'} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x'| + |x| + s + s']^2}{\hbar t} \right] K_0(|x| + |x'| + s + s', -it; 0) \delta(s') \times \\ &\times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds' , \end{aligned} \quad (3.95)$$

e K_3 tem uma forma análoga, temos, por causa da função delta, que tanto K_2 quanto K_3 vão a zero mais rapidamente que K_4 :

$$|K_3| \sim |K_2| < |K_4| \rightarrow 0 ,$$

quando $\xi \rightarrow +\infty$.

3.9 O limite da partícula livre

Queremos verificar que

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K(x, -it; x') = K_0(x, -it; x') \quad (3.96)$$

onde K_0 é o propagador da partícula livre.

Para o segundo termo temos

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K_1(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{m(|x|+|x'|)^2}{\hbar t}\right) \exp\left(-\frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.97)$$

Dos termos subseqüentes, analisemos em maior detalhe o terceiro, pois que os resultados podem ser usados analogamente para os outros dois. Para as funções de Bessel, temos neste limite

$$J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) \approx \frac{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}}{2}$$

e assim, substituindo na expressão de K_2 , temos

$$K_2(x, -it; x') \approx -\frac{\alpha^2(x)x}{2\xi t} \int_0^\infty \left[1 - \frac{m[|x'| + |x| + s]^2}{\hbar t}\right] \times \\ \times K_0(|x| + |x'| + s, -it; 0) ds \quad (3.98)$$

$$= -\frac{m|x|}{\hbar t} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{\partial}{\partial u}\right) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{mu^2(|x|+|x'|+s)^2}{2\hbar t}\right) \Big|_{u=1} d\quad (3.99)$$

$$= -\frac{2m|x|}{\hbar t} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{\partial}{\partial u}\right) I(u) \Big|_{u=1} \quad (3.100)$$

De [22], p.307, eq.(3.322.2)

$$I(u) = \sqrt{\frac{\pi \hbar t}{2m}} \frac{1}{u} \left(1 - \phi\left(\sqrt{\frac{m(|x| + |x'|)^2}{2\hbar t}} u\right)\right) \quad (3.101)$$

$$I'(u) = -\sqrt{\frac{\pi \hbar t}{2m}} \frac{1}{u^2} \left(1 - \phi\left(\sqrt{\frac{m(|x| + |x'|)^2}{2\hbar t}} u\right)\right) - \quad (3.102)$$

$$-\sqrt{\frac{\pi \hbar t}{2m}} \frac{1}{u} \sqrt{\frac{m(|x| + |x'|)^2}{2\hbar t}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.103)$$

onde ϕ é a função erro. So we have

$$I(1) + I'(1) = -(|x| + |x'|) \exp\left(-\frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t}\right), \quad (3.104)$$

Finalmente, sobre K_4 não temos que nos preocupar, pois este termo que é da ordem de $\xi = V_0/\hbar$, quando $\xi \rightarrow 0$, de modo que se anula neste limite.

Logo

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K_2(x, -it; x') = \frac{m|x|(|x| + |x'|)}{\hbar t} K_0(|x| + |x'|, -it; 0) \quad (3.105)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K_3(x, -it; x') = \frac{m|x'|(|x| + |x'|)}{\hbar t} K_0(|x| + |x'|, -it; 0) \quad (3.106)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K_4(x, -it; x') = 0 \quad (3.107)$$

Temos portanto

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} K(x, -it; x') = [\theta(x) - \theta(-x')]^2 K_0^r(x, -it; x') + K_0(|x| + |x'|, -it; 0), \quad (3.108)$$

que chega a ser uma maneira engenhosa de se escrever o propagador da partícula livre.

3.10 Verificação da condição inicial

Para $t \rightarrow 0^+$, temos

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} K_1(x, -it; x') = \lim_{t \rightarrow 0^+} \left[1 - \frac{m(|x| + |x'|)^2}{\hbar t} \right] K_0(|x| + |x'|, -it; 0)^{11} \quad (3.109)$$

Para t pequeno, as funções K_0 nos integrandos dos outros termos, por exemplo K_2 , são proporcionais a

$$\left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m(|x|+|x'|+s)^2}{2\hbar t}\right)$$

¹¹Usamos implicitamente a regra “o limite do produto é o produto dos limites”, para uma função não-regular, isto é, no sentido de distribuições.

que pode ser escrito como

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t}} \exp\left(-\frac{m(s^2+2(|x|+|x'|)s)}{2\hbar t}\right). \quad (3.110)$$

Agora invertemos o limite com a integral em s . O integrando decresce rapidamente, sendo significativo apenas na região em que $s^2 + 2(|x| + |x'|)s$ está próximo de zero. Este fato nos permite fazer a mesma aproximação que fizemos no limite da partícula livre

$$s^2 + 2(|x| + |x'|)s \leq s^2 + 2|x|s \approx 0 \Rightarrow$$

$$J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}) \approx \frac{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}}{2}$$

e a continuação dos cálculos é bastante semelhante, com exceção de K_4 que, pelo mesmo argumento, será proporcional a

$$\frac{4m\xi|x|x'}{\hbar} \delta(|x + x'|)$$

quando $xx' > 0$, de modo que ele se anula.

Podemos concluir que

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} K(x, -it; x') = \lim_{t \rightarrow 0^+} K_0(x, -it; x') = \delta(x - x') \quad (3.111)$$

Também podemos verificar, por inspeção, que o propagador obtido é simétrico com respeito à troca dos pontos inicial e final, x' e x respectivamente, quando $xx' \geq 0$.

3.11 A continuidade do propagador e de sua derivada

Queremos verificar que

$$\lim_{x' \rightarrow 0} K(x, -it; x') = K(x, -it; 0) \quad (3.112)$$

Dos cinco termos do propagador, apenas o segundo: K_1 e o terceiro: K_2 não se anulam neste limite, tendo em vista que

- i. K_0^r se anula para x ou x' iguais a zero e
- ii. Os integrandos são funções contínuas de x e os prefatores contêm funções limitadas e o próprio x nos outros três termos.

Sobre a continuidade da derivada de $K(x, t; x')$, ela é necessária, isto é, é implicada pela continuidade do propagador mesmo pois, integrando a equação de Schrödinger de $-\epsilon$ a $\epsilon > 0$, temos

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x^2} K(x, t; x') dx + V_0 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \theta(x) K(x, t; x') dx \\
 \text{nonumber} \quad & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} K(x, t; x') dx
 \end{aligned} \tag{3.114}$$

que no limite de $\epsilon \rightarrow 0^+$ nos fornece

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} K(x, t; x') \right|_{x=0+} - \left. \frac{\partial}{\partial x} K(x, t; x') \right|_{x=0-} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \epsilon K(0, t; x') \tag{3.115}$$

E isto conclui o cálculo do propagador.

Capítulo 4

Conclusões

*Meu trabalho é um trabalho
de paciência executado por
um impaciente.*

P. Valéry

Acreditamos que estes cálculos sejam por demais complicados em relação ao nível normal. Há um conceito bem fundado em palavras de Einstein, Dirac e Penrose de que as contas em Física devam ser “simples”. O leitor moderno talvez tenha pulado também todo o capítulo anterior a fim de ver o final. Mas a conclusão já passou, nas duas páginas, 47 e 49, em que se consegue colocar o resultado final do propagador espaço-tempo para o potencial degrau.

E por quê afinal de contas se deseja calcular o propagador espaço-tempo para um problema aparentemente esgotado, trivial, e apenas ilustrativo em Mecânica Quântica? Repetimos por que há poucos propagadores de potenciais espalhadores unidimensionais resolvidos exatamente: aquele para a barreira delta e para secante ao quadrado [13].

Há muitas análises interessantes, do ponto de vista físico, que podem ser feitas agora, *a partir* deste resultado. Neste fim, propõe-se algumas, sem muito rigor, de forma a justificar a necessidade de todos estes cálculos.

4.1 Sobre os problemas de Reflexão e Transmissão de pacotes

O interesse primordial do cálculo da função de Green espaço-tempo, para este trabalho de Mestrado, era o de dar uma interpretação dos coeficientes de reflexão e transmissão para potenciais unidimensionais simples a partir da mesma. Feito isto, poderíamos aplicar a metodologia ao problema de tunelamento dissipativo, por exemplo.

Com o propagador obtido no capítulo anterior, pode-se fazer a evolução de um pacote gaussiano, inicialmente normalizado, da esquerda para a direita da descontinuidade. Pode ser estabelecido um limite de tempo para o cálculo dos coeficientes de reflexão e transmissão. Podemos usar as seguintes ‘definições’:

$$T(k) \doteq \int_0^{\infty} \psi(x, t) \psi^*(x, t) dx \quad (4.1)$$

$$R(k) \doteq \int_{-\infty}^0 \psi(x, t) \psi^*(x, t) dx , \quad (4.2)$$

onde

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; y) \psi_0(y) dy , \quad (4.3)$$

e

$$\psi_0(y) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{ikx - \frac{(y-x_0)^2}{4\sigma^2}} \quad (4.4)$$

O limite de tempo que mais se adequa para a definição dos coeficientes de reflexão e transmissão é o tempo semiclássico que o pacote gasta para sair de x_0 e chegar à descontinuidade em $x = 0$. Por exemplo, duas vezes este tempo para $k < \alpha_0$, onde $\alpha_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$, é *suficiente* para que o pacote tenha voltado da sua tentativa de incursão na região a si proibida.

Os cinco termos do propagador, devido às funções teta multiplicando-os, já contêm uma informação a priori a respeito deste problema de espalhamento:

- o primeiro e o quinto termos são responsáveis apenas pela reflexão, por se anularem quando o ponto inicial e final estão em lados opostos da descontinuidade;
- os outros três termos são responsáveis a um só tempo pela transmissão e pelo pacote que interfere com aqueles refletidos pelo primeiro e quinto termos.

Note que, justamente por serem responsáveis pela transmissão o segundo, terceiro e quarto termos sempre se anulam no limite da parede opaca.

Para se calcular as integrais em (4.2), entanto, são necessárias também algumas aproximações, havendo a possibilidade de se fazê-las numericamente.

4.2 Sobre o problema da barreira quadrada

A pretensão deste trabalho é, uma vez conseguindo superar a dificuldade de determinar o propagador para um potencial com *uma* descontinuidade finita, obter o propagador para a barreira quadrada:

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V_0 \theta\left(\frac{a}{2} - |q|\right).$$

Depois de interpretado os coeficientes de espalhamento para este problema, imagino ser possível um cálculo perturbativo do propagador para a barreira dissipativa (veja eq.(0.3)), usando a equação de Dyson:

$$\mathbf{K}(x, \vec{q}, t; x', \vec{q}') = \mathbf{K}_0(x, \vec{q}, t; x', \vec{q}') - \frac{i}{\hbar} \int \mathbf{K}_0(x, \vec{q}, t; x'', \vec{q}'') V_i(x'', \vec{q}'') \mathbf{K}(x'', \vec{q}'', \tau; x', \vec{q}') \quad (4.5)$$

onde V_i é o potencial de interação e o reservatório dissipativo.

Sem dúvida isto pode ser complicado demais.

Para o primeiro passo, entretanto, pode ser feito desde já um algoritmo das contas, um algoritmo que na verdade embute o problema da falta de simetria translacional em todo o espaço de configuração:

1. Antes de tudo, normalizar os autoestados do problema (3.3), e também do problema para o potencial:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{para } x < -a/2 \\ V_0 & \text{para } -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{para } x > a/2 \end{cases} \quad (4.6)$$

O estudo deste problema, (4.6), é necessário para determinar o propagador restrito à região $x > -a/2$.

2. Determinando o propagador restrito:

- (a) Calcular, através das autofunções normalizadas,

$$K^r(a/2, -it; a/2)$$

- (b) Usando o método PDX, determinar $K^r(x, -it; a/2)$ nos dois casos
 - i. $x < a/2$, deve-se usar o propagador restrito do poço infinito, mas com altura V_0 , conhecido;
 - ii. $x > a/2$, deve-se usar o propagador da parede opaca em $x = a/2$.
- (c) Usando novamente o método PDX, determinar $K^r(x, -it; x')$, nos diversos casos.

O raciocínio prossegue da maneira natural. É claro que, se as convoluções no tempo forem muito diferentes das que foram calculadas aqui, o trabalho ficaria muito mais difícil. Mas não temos condições de precisar o grau de dificuldade deste problema, assim proposto.

Seria interessante ver como se modifica o propagador, neste caso da barreira, quando V_0 é negativo: o que representa o estado ligado? O limite $V_0 \rightarrow +\infty$ com $V_0 a$ constante também poderia ser comparado ao resultado de Schullman para a barreira delta (veja (1.5)).

Apêndice A

Resultados elementares

A.1 Detalhes da representação do propagador como uma integral de trajetória

Havíamos chegado na equação:

$$K(x, t; x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \langle x | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_N \rangle \times \\ \times \langle x_N | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | \cdots | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | x' \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Tomando o limite quando $N \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta t \rightarrow 0^+$, temos

$$K(x, t; x') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots dx_N \times \\ \times \prod_{k=0}^{N-1} \langle x_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} [\frac{p^2}{2m} + V(x)] \Delta t} | x_k \rangle. \quad (\text{A.2})$$

É sabido que

$$\langle x_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t} | x_k \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} V(x_k) \Delta t} \delta(x_k - x_{k+1}) \quad (\text{A.3}) \\ \langle x_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} | x_k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle x_{k+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} | p \rangle \langle p | x_k \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t + \frac{i}{\hbar} p(x_{k+1} - x_k)\right\} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{\frac{im}{2\hbar \Delta t} (x_{k+1} - x_k)^2} \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

O fator $\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}$ aparece $N-1$ vezes, uma para cada ‘sanduíche’ da forma acima. Temos, portanto

$$\begin{aligned}
K(x, t; x') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{(N-1)/2} \times \\
&\quad \times \exp\left\{\frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)\right]\right\} \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

A soma no expoente é uma soma de Riemann, e temos a igualdade

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t}\right)^2 - V(x_k)\right] = \int_0^t d\tau \left\{\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x)\right\} \quad (\text{A.6})$$

No integrando ficamos com a Lagrangeana da partícula, e a integral desta nada mais é do que o funcional de ação da trajetória $x(\tau)$: $S[x(\tau)]$.

Uma pergunta natural: o que se fez com o prefator $\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}^{N-1}$? Basicamente definiu-se a medida no espaço de trajetórias contínuas através deste prefator:

$$\mathcal{D}[x(\tau)] \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=0}^N \frac{dx_k}{\sqrt{\frac{2\pi i \hbar t}{N} m}}, \quad (\text{A.7})$$

e, de resto, (ab)usamos da regra o limite do produto é o produto dos limites.

Com uma medida no espaço de funções, temos que fazer uma integral no espaço de funções e é só.

A.2 Demonstração de uma identidade

Reescrevemos a eq. 2.10:

$$\left(\frac{m}{2\pi \hbar \epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar \epsilon} (x_{n+1} - x_n)^2\right] =$$

$$\int_0^\epsilon d\tau \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar\tau} (x_\sigma - x_n)^2 \right] \times \\ \times \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{m}{2\pi\hbar(\epsilon - \tau)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar(\epsilon - \tau)} (x_{n+1} - x)^2 \right] \right] \Bigg|_{x=x_\sigma} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{m}{2\pi\hbar(\epsilon - \tau)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m(x_{n+1} - x)^2}{2\hbar(\epsilon - \tau)} \right] \Bigg|_{x=x_\sigma} = \\ \frac{x_{n+1} - x_\sigma}{(\epsilon - \tau)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m(x_{n+1} - x_\sigma)^2}{2\hbar(\epsilon - \tau)} \right] \quad (\text{A.9})$$

Defina

$$1. \alpha_1 = \frac{m(x_{n+1} - x_\sigma)^2}{2\hbar} \quad e$$

$$2. \alpha_2 = \frac{m(x_\sigma - x_n)^2}{2\hbar}$$

Assim, isolando as constantes não dependentes de τ :

$$const. = (x_{n+1} - x_\sigma) \frac{m}{2\pi\hbar} \quad (\text{A.10})$$

calculamos

$$I(\epsilon) = \int_0^\epsilon \exp \left[-\frac{\alpha_1}{(\epsilon - \tau)} - \frac{\alpha_2}{\tau} \right] \frac{d\tau}{(\tau(\epsilon - \tau)^3)^{1/2}} \quad {}^1 \quad (\text{A.11})$$

Agora definimos a transformada de Laplace de $I(\epsilon)$:

$$J(p) = \int_0^\infty d\epsilon I(\epsilon) e^{-p\epsilon} \quad (\text{A.12})$$

Aplicando o teorema da convolução:

$$J(p) = J_1(p)J_2(p) \quad \text{com} \quad (\text{A.13})$$

$$J_1(p) = \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\zeta^{1/2}} e^{-\frac{\alpha_1}{\zeta} - p\zeta} \quad (\text{A.14})$$

$$J_2(p) = \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\zeta^{3/2}} e^{-\frac{\alpha_2}{\zeta} - p\zeta} \quad (\text{A.15})$$

¹Esta integral está listada no apêndice de [3]

Os resultados para $J_1(p)$ e $J_2(p)$ podem ser encontrados em [20], pág. 146, eq. 28 e 27 respectivamente:

$$J_1(p) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_1}} e^{-2\sqrt{\alpha_1 p}} \quad (\text{A.16})$$

$$J_2(p) = \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{-2\sqrt{\alpha_2 p}} \quad (\text{A.17})$$

$$\Downarrow \quad (\text{A.18})$$

$$J(p) = \frac{\pi}{\sqrt{\alpha_1 p}} \exp[-2\sqrt{p}(\sqrt{\alpha_1} + \sqrt{\alpha_2})] \quad (\text{A.19})$$

Nota-se que $J(p)$ é da mesma forma de $J_2(p)$, portanto

$$I(\zeta) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_1 \zeta}} \exp - \frac{(\sqrt{\alpha_1} + \sqrt{\alpha_2})^2}{\zeta} \quad (\text{A.20})$$

Substituindo os valores de α_1 e α_2 , e usando que $x_n < x_\sigma < x_{n+1}$ ou $x_n > x_\sigma > x_{n+1}$, obtemos

$$\begin{aligned} I(\zeta) &= \frac{m(x_{n+1} - x_\sigma)}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m(x_{n+1} - x_\sigma)^2 \zeta}} \exp \left(\left(-\frac{m}{2\hbar\zeta} (x_{n+1} - x_\sigma)^2 \right) \right) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \exp \left(\left(-\frac{m}{2\hbar\zeta} (x_{n+1} - x_\sigma)^2 \right) \right) \\ &\quad \text{se } x_{n+1} > x_\sigma, \text{ e} \\ &= - \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{1/2} \exp \left(\left(-\frac{m}{2\hbar\zeta} (x_{n+1} - x_\sigma)^2 \right) \right) \\ &\quad \text{se } x_{n+1} < x_\sigma. \end{aligned}$$

Temos portanto que “generalizar” a identidade contando também com o sinal de x . Um outro ponto de vista, que só aparece na exposição de [14] quando se estuda o problema de decomposição de caminhos em duas ou mais dimensões, é entendermos a derivada parcial em (2.10) como sendo uma derivada normal à superfície Σ que, em nosso caso, se restringe a um ponto.

A.3 A derivada da função de Green restrita

De [15], pág. 40, fazendo $t = -i\xi$:

$$K_0^r(x, -i\xi; y) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\xi}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \exp\left(-\frac{m}{2\hbar\xi}(x-y)^2\right) - \exp\left(-\frac{m}{2\hbar\xi}(x+y)^2\right) \right\} \quad (\text{A.21})$$

Temos

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial y} K_0^r(x, -i\xi; y)|_{y=0} &= \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\xi}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ -\frac{mx}{\hbar\xi} e^{-\frac{m}{2\hbar\xi}x^2} - \frac{mx}{\hbar\xi} e^{-\frac{m}{2\hbar\xi}x^2} \right\} \\ &= \frac{x}{\xi} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\xi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m}{2\hbar\xi}x^2} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Apêndice B

Primeira Convolução

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(t) &= [\theta(x) - \theta(-x)] \frac{1}{\xi} \int_0^t \frac{1 - e^{-\xi t}}{\tau^{3/2}} \times \\ &\quad \times \frac{\exp\left(-\frac{a}{t-\tau} - \beta(x)(t-\tau)\right)}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Pelo teorema da convolução,

$$\mathcal{I}(p) = \mathcal{I}_1(p)\mathcal{I}_2(p) \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{I}_1(p) = \frac{1}{\xi} \int_0^\infty e^{-pt} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\tau^{3/2}} dt \quad (\text{B.3})$$

$$= \frac{2}{\xi} \int_0^\infty e^{-(p+\xi/2)t} \frac{\sinh \xi t/2}{t^{3/2}} dt$$

que, via [20], p.164, eq.(18)

$$= -\frac{2\sqrt{\pi}}{\xi} (p^{1/2} - (p+\xi)^{1/2}) \quad (\text{B.4})$$

Divido em dois casos o cálculo de $\mathcal{I}_2(p)$. Para $x < 0$,

$$\mathcal{I}_2(p) = -\int_0^\infty \frac{e^{-a/t-pt}}{t^{3/2}} dt \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} & \text{que, via [20], p.146, eq.(28)} \\ & = -\sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-2\sqrt{ap}} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Logo, para $x < 0$

$$\mathcal{I}(t) = \frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{ap}}(p^{1/2} - (p + \xi)^{1/2})\} \quad (\text{B.7})$$

Pela teoria das transformadas de Laplace [24]

$$\mathcal{L}[f(t) + g(t)] = \mathcal{L}[f(t)] + \mathcal{L}[g(t)] \quad (\text{B.8})$$

se $f(t)$ e também $g(t)$ satisfazem as condições

$$|f(t)| \leq a e^{bt}$$

para constantes a e b reais quando $t \rightarrow \infty$, e

$$\int_0^T |f(t)| dt < \infty$$

para todo T finito.

Usando [20], p.246, eq.(5)

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(t) & = -\sqrt{\frac{\pi}{at}} \frac{1}{\xi t} \left(1 - \frac{2a}{t}\right) e^{-a/t} - \\ & \quad - \frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{ap}}(p + \xi)^{1/2}\} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{ap}}(p + \xi)^{1/2}\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{pt} e^{-2\sqrt{ap}}(p + \xi)^{1/2} d\xi, \quad (\text{B.10})$$

onde γ é maior do que todos os pontos de ramo da função de que se está calculando a transformada inversa; no caso, $\gamma > 0$.

Faço $\gamma = \epsilon + \xi$ com $\epsilon > 0$, e $p \leftarrow p - \xi$, obtendo

$$\mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{ap}}(p + \xi)^{1/2}\} = e^{-xit} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{a(p-\xi)}} p^{1/2}\} \quad (\text{B.11})$$

Para $x > 0$

$$\mathcal{I}_2(p) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-2\sqrt{a(p+\xi)}} \quad (\text{B.12})$$

Logo

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(t) &= -\frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{a(p+\xi)}} p^{1/2}\} + \\ &\quad \frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{a(p+\xi)}} (p+\xi)^{1/2}\} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} &= -\sqrt{\frac{\pi}{at}} \frac{1}{\xi t} \left(1 - \frac{2a}{t}\right) e^{-\frac{a}{t} - \xi t} - \\ &\quad -\frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{a(p+\xi)}} p^{1/2}\}, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

onde usei uma analogia de B.11 e [20], p.246, eq.(5).

As duas inversões que restam são semelhantes, mas não triviais. Obtenho para elas uma representação integral. Seja

$$\gamma(x) = \xi[\theta(x) - \theta(-x)] \quad (\text{B.15})$$

Calculo

$$-\frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{e^{-2\sqrt{a(p+\gamma(x))}} p^{1/2}\} = -\frac{2\pi}{\sqrt{a\xi}} \mathcal{L}^{-1}\{J(p)\}, \quad (\text{B.16})$$

$$(\text{B.17})$$

onde

$$J(p) = -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \int_0^\infty \frac{e^{-a/t - (p+\gamma(x))t}}{t^{3/2}} dt \quad (\text{B.18})$$

$$= -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \int_0^\infty \frac{e^{-a/t - pt}}{t^{3/2}} \sum_{j=0}^\infty \frac{(-\gamma(x)t)^j}{j!} dt \quad (\text{B.19})$$

Usando indutivamente o resultado B.8

$$\begin{aligned} J(p) &= -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-2\sqrt{ap}} - \\ &\quad -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \sum_{j=1}^\infty \frac{(-\gamma(x))^j}{j!} \int_0^\infty e^{-a/t - pt} t^{j-3/2} dt \end{aligned}$$

Para economizar espaço, trabalho agora o segundo termo(ST). A integral é extraída de [20], p.146, eq.(29)

$$ST = -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-\gamma(x))^j}{j!} 2 \left(\frac{a}{p}\right)^{\frac{j-1/2}{2}} K_{j-1/2}(2\sqrt{ap}) \quad (\text{B.20})$$

onde $K_{j-1/2}(2\sqrt{ap})$ é a função de Bessel de segunda espécie. De [22], p.959, **8.432.8**

$$\left(\frac{a}{p}\right)^{\frac{j-1/2}{2}} K_{j-1/2}(2\sqrt{ap}) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(j)} e^{-2\sqrt{ap}} \int_0^{\infty} e^{-2\sqrt{p}u} u^{j-1} (2\sqrt{a} + u)^{j-1} du$$

Lembrando que $a = \frac{mx^2}{2\hbar}$, faço a substituição:

$$u = \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{1/2} s,$$

obtendo

$$\left(\frac{a}{p}\right)^{\frac{j-1/2}{2}} K_{j-1/2}(2\sqrt{ap}) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(j)} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{j-1/2} \times \int_0^{\infty} e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} (s^2 + 2|x|s)^{j-1} ds,$$

onde $c(s, x) := \frac{m}{2\hbar} (|x| + s)^2$.

Assim,

$$\begin{aligned} ST &= -\frac{2\pi\sqrt{p}}{\xi} \sum_{j=1}^{\infty} 2 \frac{(-\gamma(x))^j}{j!\Gamma(j)} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{j-1/2} \int_0^{\infty} e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} (s^2 + 2|x|s)^{j-1} ds \\ &= +\frac{2\pi\sqrt{p}}{\xi} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} \times \\ &\quad \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!(j+1)!} \frac{\left[\left(\frac{2m\gamma(x)}{\hbar}\right)^{1/2} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right]^{2j}}{2^{2j}} ds \end{aligned}$$

Finalmente, defino

$$\alpha^2(x) \equiv \frac{2m\gamma(x)}{\hbar} \quad (\text{B.21})$$

e identifico a função de Bessel na somatória, obtendo

$$J(p) = -\frac{2\pi\sqrt{p}}{\sqrt{a\xi}} e^{-2\sqrt{ap}} + \frac{2\pi\sqrt{p}}{\xi} \gamma(x) \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{1/2} \int_0^\infty e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (\text{B.22})$$

Agora é possível inverter esta transformada. Assim, para $x < 0$ (veja eq.(B.11)),

$$I(t) = -\sqrt{\frac{\pi}{at}} \frac{1}{\xi t} \left(1 - \frac{2a}{t}\right) e^{-a/t} (1 - e^{-\xi t}) - e^{-\xi t} \frac{\pi\gamma(x)}{\xi t^{3/2}} \int_0^\infty e^{-c(s,x)/t} \left(1 - \frac{2c(s,x)}{t}\right) \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (\text{B.23})$$

Para $x < 0$ (veja eq.(B.14)),

$$I(t) = \sqrt{\frac{\pi}{at}} \frac{1}{\xi t} \left(1 - \frac{2a}{t}\right) e^{-a/t} (1 - e^{-\xi t}) - \frac{\pi\gamma(x)}{\xi t^{3/2}} \int_0^\infty e^{-c(s,x)/t} \left(1 - \frac{2c(s,x)}{t}\right) \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (\text{B.24})$$

Concluindo este apêndice, lembrando que

$$K(x, -it; 0) = \frac{m}{2\pi\hbar} x I(t),$$

obtive

$$K(x, -it; 0) = \frac{(1 - e^{-\xi t})}{\xi t} \left(1 - \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) K_0(x, -it; 0) - \frac{e^{-\beta(-x)t} \alpha(x) x}{\xi t} \int_0^\infty K_0(|x| + s, -it; 0) \left(1 - \frac{m(|x| + s)^2}{\hbar t}\right) \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds, \quad (\text{B.25})$$

que é substituída no texto do capítulo 3.

Apêndice C

Detalhes da obtenção de $K(x, -it; x')$

C.1 Representação integral útil de um produto de convolução

Defino

$$\Lambda(d, u, a, g, t) \equiv \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\xi} \int_0^t \frac{\exp[-du^2/\tau]}{\tau^{3/2}} \frac{\exp[-g(t-\tau) - a/(t-\tau)]}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau, \quad (\text{C.1})$$

onde iremos usar as constantes

$$a = \frac{mx^2}{2\hbar} \quad (\text{C.2})$$

$$d = b = \frac{mx'^2}{2\hbar}, \text{ ou} \quad (\text{C.3})$$

$$d = c(s', x') = \frac{m(|x'| + s')^2}{2\hbar} \quad \text{e} \quad (\text{C.4})$$

$$g(x, x') = \beta(x), \text{ ou} \quad (\text{C.5})$$

$$g(x, x') = -\beta(-x), \text{ ou} \quad (\text{C.6})$$

$$g(x, x') = \beta(x) - \beta(-x'). \quad (\text{C.7})$$

Usando o teorema da convolução, obtenho

$$\Lambda(d, u, a, g, p) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \tilde{\Lambda}_1(d, u, p) \tilde{\Lambda}_2(a, g, p), \quad (\text{C.8})$$

onde

$$\tilde{\Lambda}_1(d, u, p) = \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{du^2}{t} - pt}}{t^{3/2}} dt \quad (\text{C.9})$$

$$\tilde{\Lambda}_2(a, g, p) = \frac{1}{\xi} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{a}{t} - (p+g)t}}{t^{3/2}} dt. \quad (\text{C.10})$$

$\tilde{\Lambda}_1$ é bastante conhecida (veja [20], p.146, eq.(28)):

$$\tilde{\Lambda}_1(d, u, p) = \sqrt{\frac{\pi}{d}} \frac{1}{u} e^{-2u\sqrt{dp}} \quad (\text{C.11})$$

Observe que $\tilde{\Lambda}_2$ é da forma de $J(p)$, calculada no apêndice B. Para facilitar a comparação de $J(p)$ com $\tilde{\Lambda}_2$, reescrevemos cá o $J(p)$:

$$J(p) = -\frac{2\sqrt{\pi p}}{\xi} \int_0^\infty \frac{e^{-a/t - (p+\gamma(x))t}}{t^{3/2}} dt. \quad (\text{C.12})$$

Portanto, enquanto

$$\begin{aligned} J(p) &= -\frac{2\pi\sqrt{p}}{\sqrt{a}\xi} e^{-2\sqrt{ap}} + \frac{2\pi\sqrt{p}}{\xi} \gamma(x) \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{1/2} \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

ou seja, substituindo também

$$\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{1/2} = \frac{|x|}{\sqrt{a}}$$

$$\begin{aligned} J(p) &= -\frac{2\pi\sqrt{p}}{\sqrt{a}\xi} e^{-2\sqrt{ap}} + \frac{2\pi\sqrt{p}}{\xi} \frac{\alpha(x)|x|}{\sqrt{a}} \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

a função $\tilde{\Lambda}_2(a, g, p)$ desejada é obtida trocando-se $\gamma(x)$ por $g(x, x')$ em $J(p)$, e multiplicando-o por $-\frac{1}{2\sqrt{\pi p}}$. Isto pode ser visto comparando (C.10) a (C.12).

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}_2(a, g, p) &= \frac{\sqrt{\pi}}{\xi\sqrt{a}} e^{-2\sqrt{ap}} - \frac{\sqrt{\pi} \tilde{\alpha}(x)|x|}{\xi \sqrt{a}} \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-2\sqrt{c(s,x)p}} \frac{J_1(\tilde{\alpha}(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds. \end{aligned} \quad (C.15)$$

Este novo $\tilde{\alpha}(x, x')$ é obtido prosseguindo a comparação. Do ap.B, veja (B.15,B.21)

$$\begin{aligned} \gamma(x) &= \beta(x) - \beta(-x) \\ \alpha^2(x) &= \frac{2m\gamma(x)}{\hbar}. \end{aligned}$$

Trocando $\gamma(x)$ por $g(x, x')$ nestas expressões, obtemos

$$\tilde{\alpha}^2(x, x') = \frac{2mg(x, x')}{\hbar} \quad (C.16)$$

Basta-nos agora inverter

$$\begin{aligned} \Lambda(d, u, a, g, p) &= \sqrt{\frac{\pi}{d}} \frac{1}{u\xi} \left\{ e^{-2\sqrt{p}(u\sqrt{d} + \sqrt{a})} - \tilde{\alpha}(x, x')|x| \times \right. \\ &\times \left. \int_0^\infty e^{-2\sqrt{p}(\sqrt{c(s,x)} + u\sqrt{d})} \frac{J_1(\tilde{\alpha}(x, x')(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\} \end{aligned} \quad (C.17)$$

Usando [20], p.245, eq.(1), temos

$$\begin{aligned} \Lambda(d, u, a, g, t) &= \frac{u\sqrt{d} + \sqrt{a}}{u\sqrt{d}} e^{-\frac{(u\sqrt{d} + \sqrt{a})^2}{t}} - \frac{\tilde{\alpha}(x, x')|x|}{\xi t^{3/2}} \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{d} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{d} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{d}} \times \\ &\times \frac{J_1(\tilde{\alpha}(x, x')(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds. \end{aligned} \quad (C.18)$$

Agora só tenho que substituir os parâmetros convenientes para cada ${}_iK$ na equação acima

$${}_1K(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \Lambda(b, u, a, \beta(x), t) \quad (\text{C.19})$$

$${}_2K(x, -it; x') = -\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-\xi t} \Lambda(b, u, a, -\beta(-x), t) \quad (\text{C.20})$$

$$\begin{aligned} {}_3K(x, -it; x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-\beta(-x')t} \Omega \times \\ &\times \mathcal{O}\{\Lambda(c(s', x'), u, a, \beta(x) - \beta(-x'), t)\} \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

obtendo

$$\begin{aligned} {}_1K(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left\{ \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \frac{\sqrt{\frac{2m\beta(x)}{\hbar}} |x|}{\xi t} - \frac{\sqrt{\frac{2m\beta(x)}{\hbar}} |x|}{\xi t} \times \right. \\ &\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \times \\ &\times \left. \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m\beta(x)}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

$$\begin{aligned} {}_2K(x, -it; x'u) &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \left\{ \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \frac{\sqrt{\frac{-2m\beta(-x)}{\hbar}} |x|}{\xi t} - \frac{\sqrt{\frac{-2m\beta(-x)}{\hbar}} |x|}{\xi t} \times \right. \\ &\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \times \\ &\times \left. \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{-2m\beta(-x)}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\} e \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

$$\begin{aligned}
{}_3K(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\Omega}{\xi t} \mathcal{O} \left\{ \frac{u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{a}}{u\sqrt{c(s', x')}} \times \right. \\
&\times e^{-\frac{(u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{a})^2}{t}} - \frac{\sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x'))}{\hbar}} |x|}{\xi t} \times \\
&\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{c(s, x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{c(s, x)}}{u\sqrt{c(s', x')}} \times \\
&\times \left. \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x'))}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \right\}. \quad (\text{C.24})
\end{aligned}$$

C.2 Trabalhando os termos

Não são, de forma alguma, fórmulas simples à primeira vista (first glance), mas olhando com paciência, ou raiva (glaring), observa-se que ${}_1K$ e ${}_2K$ podem ser agrupados:

1. para $x > 0$, ${}_1K + {}_2K$ contém dois termos:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \\
&- \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}} |x|}{\xi t} \times \\
&\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)}}{u\sqrt{b}} \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds
\end{aligned}$$

2. para $x < 0$, ${}_1K + {}_2K$ contém dois termos semelhantes:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \\
&+ \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\frac{-2m\xi}{\hbar}} |x|}{\xi t} \times \\
&\times \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)}}{u\sqrt{b}} \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{-2m\xi}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds
\end{aligned}$$

Podemos agrupar os dois casos numa só fórmula:

$$\begin{aligned}
 [{}_1K + {}_2K](x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} - \\
 &- [\theta(x) - \theta(-x)] \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x))}{\hbar}} |x|}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \times \\
 &\times \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x))}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds,
 \end{aligned}$$

que pode ser compactada identificando $\alpha(x)$:

$$\begin{aligned}
 [{}_1K + {}_2K](x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} - \\
 &- \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \times \\
 &\times \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{b}} \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds. \tag{C.25}
 \end{aligned}$$

${}_3K$ fica como está, exceto pela substituição do operador \mathcal{O} e da constante Ω , que ora faço:

$$\begin{aligned}
 {}_3K(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x)t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \\
 &\times e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a})^2}{t}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' - \\
 &- \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x'))}{\hbar}} |x| \times \\
 &\times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \\
 &\times \frac{J_1\left(\sqrt{\frac{2m(\beta(x) - \beta(-x'))}{\hbar}} (s^2 + 2|x|s)^{1/2}\right)}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds'.
 \end{aligned}$$

Definindo

$$\epsilon^2(x, x') = \frac{2m(\beta(x) - \beta(-x'))}{\hbar}, \tag{C.26}$$

posso ‘simplificar’ a fórmula para ${}_3K$:

$$\begin{aligned}
{}_3K(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty \frac{u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{a}}{u\sqrt{c(s', x')}} \times \\
&\times e^{-\frac{(u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{a})^2}{t}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' - \\
&- \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \epsilon(x, x')|x| \times \\
&\times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{c(s, x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s', x')} + \sqrt{c(s, x)}}{u\sqrt{c(s', x')}} \times \\
&\times \frac{J_1(\epsilon(x, x')(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds'. \quad (C.27)
\end{aligned}$$

Agora faça um reagrupamento de ${}_1K + {}_2K + {}_3K$, definindo:

- i. $K_1(x, -it; x'u) \equiv$ primeiro termo da soma: ${}_1K + {}_2K$;
- ii. $K_2(x, -it; x'u) \equiv$ segundo termo da soma: ${}_1K + {}_2K$;
- iii. $K_3(x, -it; x'u) \equiv$ primeiro termo de ${}_3K$;
- iv. $K_4(x, -it; x'u) \equiv$ segundo termo de ${}_3K$.

Esta separação está baseada no número de integrais em s e/ou s' de cada termo. K_1 não contém nenhuma, veja eq.(C.25). K_2 contém uma integral em s , veja eq.(C.25). K_3 contém uma integral em s' , veja eq.(C.27). E K_4 contém ambas as integrais, veja eq.(C.27).

Assim,

$$\begin{aligned}
K_1(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{a}}{u\sqrt{b}} e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \\
K_2(x, -it; x'u) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(x)t} \frac{\alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)})^2}{t}} \times \\
&\times \frac{u\sqrt{b} + \sqrt{c(s, x)}}{u\sqrt{b}} \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds
\end{aligned}$$

$$K_3(x, -it; x'u) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a})^2}{t}} \times \\ \times \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a}}{u\sqrt{c(s',x')}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds'$$

$$K_4(x, -it; x'u) = -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \epsilon(x, x')|x| \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \\ \times \frac{J_1(\epsilon(x, x')(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds'$$

Analisando as constantes multiplicativas em K_4 , descobrimos mais uma simplificação. Consideremos $q := -\alpha(x')x'\epsilon(x, x')|x|^1$:

1. para $x > 0$ e $x' > 0$, $q = -\alpha_0^2 xx'$,
2. para $x > 0$ e $x' < 0$, $q = 0$,
3. para $x < 0$ e $x' > 0$, $q = 0$ e
4. para $x < 0$ e $x' < 0$, $q = -\alpha_0^2 xx'$.

Portanto,

$$q = -[\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'\xi}{\hbar},$$

e agora reescrevo K_4 :

¹A definição de α_0 está na seção 3.4.1:

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{2m\xi}{\hbar}}$$

$$\begin{aligned}
K_4(x, -it; x'u) &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} [\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'}{\hbar} \times \\
&\quad \times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \frac{u\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)}}{u\sqrt{c(s',x')}} \times \\
&\quad \times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds',
\end{aligned}$$

onde substituí $\alpha(x)$ na segunda função de Bessel pela simples razão de que todo o termo K_4 só não se anula quando x e x' estão do mesmo lado da descontinuidade do potencial, e assim sendo, temos

$$\alpha(x) = \alpha(x') = \epsilon(x, x').$$

Como em todos os termos a dependência em u é da forma:

$$\frac{u\sqrt{d} + \sqrt{w}}{u\sqrt{d}} e^{-\frac{(u\sqrt{d} + \sqrt{w})^2}{t}},$$

podemos calcular

$$\begin{aligned}
\left\{1 + \frac{\partial}{\partial u}\right\} \frac{u\sqrt{d} + \sqrt{w}}{u\sqrt{d}} e^{-\frac{(u\sqrt{d} + \sqrt{w})^2}{t}} \Big|_{u=1} &= \\
&= \left\{1 - \frac{2(\sqrt{d} + \sqrt{w})^2}{t}\right\} e^{-\frac{(\sqrt{d} + \sqrt{w})^2}{t}} \quad (C.28)
\end{aligned}$$

Com isto acabamos este cálculo, faltando apenas substituir os valores de a , b e c :

$$K_1(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \left[1 - \frac{2[\sqrt{b} + \sqrt{a}]^2}{t}\right] e^{-\frac{(\sqrt{b} + \sqrt{a})^2}{t}} \quad (C.29)$$

$$\begin{aligned}
K_2(x, -it; x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(x)t} \frac{\alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \times \\
&\quad \times \left[1 - \frac{2[\sqrt{b} + \sqrt{c(s,x)}]^2}{t}\right] \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (C.30)
\end{aligned}$$

$$K_3(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{(\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a})^2}{t}} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{2[\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{a}]^2}{t} \right] \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' \quad (\text{C.31})$$

$$\begin{aligned} K_4(x, -it, x') &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} [\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'}{\hbar} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{(\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)})^2}{t}} \left[1 - \frac{2[\sqrt{c(s',x')} + \sqrt{c(s,x)}]^2}{t} \right] \times \\ &\times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds' \quad (\text{C.32}) \end{aligned}$$

Substituindo

$$\begin{aligned} \sqrt{a} &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} |x| \\ \sqrt{b} &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} |x'| \\ \sqrt{c(s, x)} &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} (|x| + s) \\ \sqrt{c(s', x')} &= \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} (|x'| + s') \end{aligned}$$

obtenho **finalmente**:

$$K_1(x, -it; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} \frac{1 - e^{-\xi t}}{\xi t} \left[1 - \frac{m[|x'| + |x|]^2}{\hbar t} \right] e^{-m\frac{(|x'| + |x|)^2}{2\hbar t}} \quad (\text{C.33})$$

$$\begin{aligned} K_2(x, -it; x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(x)t} \frac{\alpha(x)x}{\xi t} \int_0^\infty e^{-\frac{m(|x'| + |x| + s)^2}{2\hbar t}} \times \\ &\times \left[1 - \frac{m[|x'| + |x| + s]^2}{\hbar t} \right] \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} ds \quad (\text{C.34}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_3(x, -it; x') &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} \frac{\alpha(x')x'}{\xi t} \int_0^\infty e^{-m\frac{(|x'| + s' + |x|)^2}{2\hbar t}} \times \\ &\times \left[1 - \frac{m[|x'| + s' + |x|]^2}{\hbar t} \right] \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds' \quad (\text{C.35}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_4(x, -it, x') &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar t}\right)^{1/2} e^{-\beta(-x')t} [\theta(x) - \theta(-x')]^2 \frac{2mxx'}{\hbar} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\frac{m(|x'| + s' + |x| + s)^2}{2\hbar t}} \left[1 - \frac{m[|x'| + s' + |x| + s]^2}{\hbar t} \right] \times \end{aligned}$$

$$\times \frac{J_1(\alpha(x)(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{J_1(\alpha(x')(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}} ds ds' . \text{ (C.36)}$$

A identificação do propagador da partícula livre é imediata, por isto só o faço na transcrição das equações acima para o capítulo 3.

Apêndice D

Estudo detalhado do limite assintótico de $A(x, x', u)$

Neste apêndice, explico a análise assintótica da integral dupla, presente no quinto termo do propagador obtido em 3.6. Encareço o leitor a atentar para a generalidade da discussão quanto ao domínio de tempo. De fato, todos os cálculos aqui feitos aparentemente valem somente para $K_4(x, -it; x')$, mas a única modificação que teria de ser feita para se obter o resultado para $K_4(x, t; x')$ (ou a integral $\tilde{A}(x, x', u)$ equivalente), está nas funções f_i , definidas mais tarde.

$$A(x, x', u) = e^{-\xi t} \int_0^{+\infty} ds \int_0^{+\infty} ds' e^{-\frac{mu^2}{2\hbar i} (|x|+|x'|+s+s')^2} \times \\ \times \frac{I_1(\alpha_0(s^2 + 2|x|s)^{1/2})}{(s^2 + 2|x|s)^{1/2}} \frac{I_1(\alpha_0(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2})}{(s'^2 + 2|x'|s')^{1/2}}. \quad (\text{D.1})$$

Fazendo as mudanças de variáveis:

$$v^2 = s^2 + 2|x|s \quad (\text{D.2})$$

$$v'^2 = s'^2 + 2|x'|s' \quad (\text{D.3})$$

obtenho,

$$s = -|x| + \sqrt{v^2 + x^2} \quad (\text{D.4})$$

$$s' = -|x'| + \sqrt{v'^2 + x'^2} . \quad (\text{D.5})$$

Assim

$$A(x, x', u) = e^{-\xi t} \int_0^{+\infty} dv \int_0^{+\infty} dv' e^{-d/2(\sqrt{v^2+x^2}+\sqrt{v'^2+x'^2})^2} \times \\ \times \frac{I_1(\alpha_0 v)}{\sqrt{v^2+x^2}} \frac{I_1(\alpha_0 v')}{\sqrt{v'^2+x'^2}} , \quad (\text{D.6})$$

onde defini

$$d = \frac{mu^2}{\hbar t} \quad (\text{D.7})$$

Usando agora a expressão assintótica para $I_1(z)$ quando $|z|$ é grande (apenas o primeiro termo de sua série assintótica)

$$I_1(\alpha_0 v) \sim \frac{e^{\alpha_0 v}}{\sqrt{2\pi\alpha_0 v}} \quad (\text{D.8})$$

Um truque interessante agora é notar que, como v é positivo,

$$I_1(\alpha_0 v) \sim \frac{e^{\alpha_0 v} + e^{-\alpha_0 v}}{\sqrt{2\pi\alpha_0 v}} . \quad (\text{D.9})$$

Substituindo em $A(x, x', u)$ obtenho expressões com paridade definida, de modo que eu possa estender os limites de integração até $-\infty$, condição necessária para aplicação do método de ponto de sela. Obtenho enfim

$$A(x, x', u) \approx \frac{e^{-\xi t}}{8\pi\alpha_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \int_{-\infty}^{+\infty} dv' e^{-d/2(\sqrt{v^2+x^2}+\sqrt{v'^2+x'^2})^2} \times \\ \times \frac{e^{\alpha_0 v} + e^{-\alpha_0 v}}{\sqrt{|v|\sqrt{v^2+x^2}}} \frac{e^{\alpha_0 v'} + e^{-\alpha_0 v'}}{\sqrt{|v'|\sqrt{v'^2+x'^2}}} . \quad (\text{D.10})$$

Agora $A(x, x', u)$ está numa forma conveniente para se usar o método de ponto de sela, bastando para isto se fazer uma reescala de v e v' :

$$v = w(\xi t)^{1/2} \quad v' = w'(\xi t)^{1/2} \quad (\text{D.11})$$

$$x = y(\xi t)^{1/2} \quad x' = y'(\xi t)^{1/2} \quad (\text{D.12})$$

e defino

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar t}} \Rightarrow \sqrt{\xi t} q = \alpha_0 \quad (\text{D.13})$$

Obtive

$$A(x, x', u) = \frac{1}{8\pi q \xi t} \int dw \int dw' e^{\frac{-\xi t \left[1 + d/2 \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 \right]}{\sqrt{|ww'|} \sqrt{w^2 + y^2} \sqrt{w'^2 + y'^2}}} \times \\ \times \left(e^{q\xi t(w+w')} + e^{-q\xi t(w+w')} + e^{q\xi t(w-w')} + e^{-q\xi t(w-w')} \right) \quad (\text{D.14})$$

Definindo

$$g(w, w') = \{|ww'| (w^2 + y^2)(w'^2 + y'^2)\}^{-1/2} \quad (\text{D.15})$$

$$f_1(w, w') = 1 + \frac{d}{2} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 - q(w + w') \quad (\text{D.16})$$

$$f_2(w, w') = 1 + \frac{d}{2} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 + q(w + w') \quad (\text{D.17})$$

$$f_3(w, w') = 1 + \frac{d}{2} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 - q(w - w') \quad (\text{D.18})$$

$$f_4(w, w') = 1 + \frac{d}{2} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 + q(w - w') \quad (\text{D.19})$$

posso examinar os pontos de sela de cada uma das quatro integrais.¹

¹ A diferença para a análise em tempo real modificaria as funções f_i e, por conseguinte, os pontos de sela. Por exemplo,

$$\tilde{f}_2(w, w') = i + i \frac{d}{2} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right)^2 + q(w + w') .$$

Note que não se tem \tilde{f}_i imaginário puro, o que implicaria no abandono do método do ponto de sela em favor do método da fase estacionária. É possível escapar de toda esta firula se fizermos o processo standard de regularização de integrais: dar à massa m ou a \hbar uma parte imaginária com sinal conveniente.

Este tipo de regularização é corrente em cálculos de funções de Green para hamiltonianas de espectro não-limitado.

D.1 Pontos de sela

Os pontos de sela em duas dimensões serão dados pelo sistema de equações

$$\nabla f_i(w, w') = \mathbf{0} \quad (\text{D.20})$$

Este sistema de equações é o que chamo de extensão natural do método de ponto de sela para duas variáveis [25].

Para a primeira integral, obtenho

$$\frac{dw}{\sqrt{w^2 + y^2}} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right) - q = 0 \quad (\text{D.21})$$

$$\frac{dw'}{\sqrt{w'^2 + y'^2}} \left(\sqrt{w^2 + y^2} + \sqrt{w'^2 + y'^2} \right) - q = 0 \quad (\text{D.22})$$

Das equações acima, segue que

$$\frac{w}{\sqrt{w^2 + y^2}} = \frac{w'}{\sqrt{w'^2 + y'^2}} \Rightarrow \frac{w}{w'} = \frac{|y|}{|y'|} \quad (\text{D.23})$$

Observe que w e w' têm o mesmo sinal e assim, os pontos de sela para f_1 são

$$w_1 = \frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad w'_1 = \frac{q|y'|}{d(|y| + |y'|)} \quad (\text{D.24})$$

Analogamente obtém-se os pontos de sela para f_2 , f_3 e f_4 :

$$w_2 = -\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad w'_2 = -\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad (\text{D.25})$$

$$w_3 = +\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad w'_3 = -\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad (\text{D.26})$$

$$w_4 = -\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad w'_4 = +\frac{q|y|}{d(|y| + |y'|)} \quad (\text{D.27})$$

Agora temos que calcular f_i e g nos pontos de sela. A integral $A(x, x', u)$ vale assintoticamente

$$A(x, x', u) \approx \frac{1}{8\pi q \xi t} \sum_{i=1}^4 g(w_i, w'_i) e^{-\xi t f_i(w_i, w'_i)} \times \int_{\gamma_i} \int_{\gamma'_i} e^{-\xi t \langle w, w' | \mathbf{H}e_i | w, w' \rangle} dw dw' , \quad (\text{D.28})$$

onde

- os caminhos γ_i e γ'_i são escolhidos no produto cartesiano dos planos complexos de w e w' de modo que f_i , como função de variáveis complexas, esteja passando por um mínimo;
- $\mathbf{H}e_i$ é a hessiana de f_i . O fato de os caminhos serem tomados de modo que os pontos de sela sejam mínimos relativos das funções f_i implica que os autovalores de $\mathbf{H}e_i$ são positivos, ao longo destes caminhos.

É fácil ver que todas $f_i(w_i, w'_i)$ têm o mesmo valor para cada $i = 1, 2, 3, 4$. A função $g(w_i, w'_i)$ é par em cada uma das coordenadas e, portanto, também assume o mesmo valor em todos os pontos de sela. Então

$$A(x, x', u) \approx \frac{1}{8\pi q \xi t} g(w_1, w'_1) e^{-\xi t f_1(w_1, w'_1)} \times \\ \times \sum_{i=1}^4 \int_{\gamma_i} \int_{\gamma'_i} e^{-\xi t \langle w, w' | \mathbf{H}e_i | w, w' \rangle} dw dw' , \quad (\text{D.29})$$

onde

$$f_1(w_1, w'_1) = 1 - \frac{q^2}{2d} + \frac{d}{2} (|y| + |y'|)^2 \quad (\text{D.30})$$

$$g(w_1, w'_1) = \frac{1}{[z|yy'|]^{3/2} (1 + z^2)} , \quad (\text{D.31})$$

$$(\text{D.32})$$

onde abreviei

$$z = \frac{q}{d(|y| + |y'|)} \quad (\text{D.33})$$

D.2 Diagonalização das Hessianas

Para obter a forma final do primeiro termo do limite assintótico de A só me falta calcular as integrais em (D.29). Diagonalizando as hessianas, $\mathbf{H}e_i$, as integrais se tornam gaussianas e separáveis.

1. Cálculo da matriz hessiana geral:

Como a diferença entre as f_i está no termo linear em w e w' , a forma geral da hessiana é a mesma para todas.

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial w^2} = d - \frac{d w^2 \sqrt{w'^2 + y'^2}}{(w^2 + y^2)^{3/2}} \quad (\text{D.34})$$

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial w \partial w'} = \frac{d w w'}{\sqrt{w^2 + y^2} \sqrt{w'^2 + y'^2}} \quad (\text{D.35})$$

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial w'^2} = d - \frac{d w'^2 \sqrt{w^2 + y^2}}{(w'^2 + y'^2)^{3/2}} \quad (\text{D.36})$$

2. As quatro hessianas:

São, na verdade, apenas duas. Tem-se, por inspeção

$$\mathbf{He}_1 = \mathbf{He}_2 \quad \text{e} \quad \mathbf{He}_3 = \mathbf{He}_4 .$$

Usando a abreviação (D.33), temos

$$\mathbf{He}_1 = d \begin{bmatrix} 1 - \frac{z^2 |y'|}{(1+z^2)|y|} & \frac{z^2}{1+z^2} \\ \frac{z^2}{1+z^2} & 1 - \frac{z^2 |y|}{(1+z^2)|y'|} \end{bmatrix} \quad (\text{D.37})$$

$$\mathbf{He}_3 = d \begin{bmatrix} 1 - \frac{z^2 |y'|}{(1+z^2)|y|} & -\frac{z^2}{1+z^2} \\ -\frac{z^2}{1+z^2} & 1 - \frac{z^2 |y|}{(1+z^2)|y'|} \end{bmatrix} \quad (\text{D.38})$$

Impressionante que os autovalores das duas matrizes sejam iguais e sim-plesinhos:

$$\lambda_1 = 1 \quad (\text{D.39})$$

$$\lambda_2 = 1 - \frac{z^2}{1+z^2} \frac{y^2 + y'^2}{|y y'|} . \quad (\text{D.40})$$

É preciso saber o sinal de λ_2 . Lembrando que z é muito grande, quando ξ é grande (veja eq.(D.33), $z \sim O(\xi^{1/2})$), temos que

$$\lambda_2 \approx 1 - \frac{y^2 + y'^2}{|y y'|} ,$$

cujos valor máximo é -1 .

D.3 Conclusão, forma final de $A(x, x', u)$

Portanto temos que os caminhos de integração devem ser tomados, na vizinhanças pontos de sela, ao longo de retas, cujas direções são dadas pelos autovetores. O fato de λ_2 ser negativo não causa espécie, ganha-se um fator i em cada integral e temos finalmente:

$$A(x, x', u) \approx \frac{1}{2\pi q \xi t} g(w_1, w'_1) e^{-\xi t f_1(w_1, w'_1)} \frac{i\pi}{d\xi t \sqrt{|\lambda_1 \lambda_2|}} \quad (\text{D.41})$$

Analizando as diversas constantes e valores das funções em termos daquelas do texto principal, além de considerar o limite

$$\xi \rightarrow +\infty \Rightarrow z \rightarrow +\infty ,$$

obtenho

$$g(w_1, w'_1) \approx \left(\frac{2\hbar t(|x|+|x'|)}{u^4|x||x'|} \right)^{3/2} , \quad (\text{D.42})$$

$$-d\xi t f_1(w_1, w'_1) \approx -\xi t \left(1 - \frac{1}{u^2}\right) - \frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t} \quad e \quad (\text{D.43})$$

$$\frac{1}{\sqrt{|\lambda_2|}} \approx \left[\frac{y^2+y'^2}{|y||y'|} - 1 \right]^{1/2} \quad (\text{D.44})$$

E finalmente, posso concluir que

$$A(x, x', u) \approx \frac{i\sqrt{\pi}}{2\xi^2 t^2} \left(\frac{2\hbar t(|x|+|x'|)}{u^4|x||x'|} \right)^{3/2} \frac{1}{\left[\frac{x^2+x'^2}{|x||x'|} - 1 \right]^{1/2}} \times \\ \times \exp \left[-\xi t \left(1 - \frac{1}{u^2}\right) - \frac{m(|x|+|x'|)^2}{2\hbar t} \right] . \quad (\text{D.45})$$

Bibliografia

- [1] R.P. Feynmann. Space-time approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Physics*, 20:367, 1948.
- [2] M. Kac. *Integration in Function Spaces and some of its applications*. Accademia Nazion. dei Lincei, 1980.
- [3] R.P. Feynman & A.R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [4] M. Kac. Probability and related topics in physical sciences. In A.S. Householder, editor, *Lectures in Applied Mathematics*, page 161, Interscience Pub., J. W. & S., 1957.
- [5] M. Clutton-Brock. Feynman's kernel and the classical path. *Proc. Camb.Phil.Soc.*, 61:201, 1965.
- [6] R. Balian & C. Bloch. Solution of the Schrödinger Equation in terms of Classical Paths. *Annals of Physics*, 85:514, 1974.
- [7] B.R. Holstein & A.R. Swift. Path integrals and the WKB approximation. *Am.J.Physics*, 50(9):829, 1982.
- [8] D.W. McLaughlin. Complex time, Contour independent Path Integrals, and Barrier Penetration. *J.Math.Physics*, 13(8):1099, 1972.
- [9] B.R. Holstein & A.R. Swift. Barrier penetration via path integrals. *Am.J.Physics*, 50(9):833, 1982.

- [10] B.R. Holstein. Semiclassical treatment of above-barrier scattering. *Am.J.Physics*, 52(4):321, 1984.
- [11] M. Büttiker & R. Landauer. Traversal Time for Tunneling . *Phys. Rev.Letters*, 49:1739, 1982.
- [12] L.S. Schulman. Exact Time-Dependent Green's Function for the Half-Plane Barrier. *Phys.Rev.Letters*, 49(9):599, 1982.
- [13] B. Gaveau & L.S. Schulman. Explicit time-dependent Schrödinger propagators. *J.Phys. A: Math.Gen.*, 19:1833, 1986.
- [14] A. Auerbach & S. Kivelson. The Path Decomposition Expansion and Multidimensional Tunneling. *Nuclear Physics*, B257:799, 1985.
- [15] L.S. Schulman. *Techniques and applications in path integration*. Wiley, New York, 1981.
- [16] V.S. Buslaev. Green's function for the opaque barrier. In Sh. Birman, editor, *Topics in Mathematical Physics*, page 67, Consultants Bureau, 1967.
- [17] P. Stajn. *Transmissão por uma barreira dissipativa – uma análise crítica*. Master's thesis, IFGW-UNICAMP, 1989.
- [18] R. Bruinsma & P. Bak. Quantum Tunneling, Dissipation and Fluctuations. *Phys.Rev.Letters*, 56:420, 1986.
- [19] A.O. Caldeira & A.J. Leggett. Quantum Tunnelling in a Dissipative System. *Annals of Physics*, 149:374, 1983.
- [20] A. Erdélyi & al. *Table of Integral Transforms, vol.1*. McGraw-Hill Book Co., Inc., 1954.
- [21] A. Erdélyi & al. *Table of Integral Transforms, vol.2*. McGraw-Hill Book Co., Inc., 1954.

- [22] I.S. Gradshteyn & I.M. Ryzhik. *Table of Integrals Series and Products*. Academic Press, 1980.
- [23] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. Volume 1, North-Holland Pub. Co., 1st edition, 1961.
- [24] R.E. Bellmann & R.S. Roth. *The Laplace Transform*. World Scientific Pub. Co. Pte Ltd., 1984.
- [25] H. Jeffreys & B.S. Jeffreys. *Methods of Math. Physics*. Cambridge University Press, 1953.