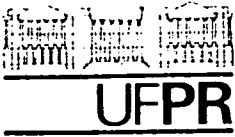


LUIS AUGUSTO TREVISAN

## **AVALIAÇÃO DE APROXIMAÇÕES VARIACIONAIS**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

CURITIBA  
1991



ATA DA DEFESA DE TESE DE MESTRADO DO SR. LUIS AUGUSTO TREVISAN

TÍTULO DA TESE: "Avaliação de Aproximações Variacionais"

Em sessão pública de defesa de tese, iniciada às nove horas e trinta minutos, nesta data, após um seminário sobre o assunto da tese e arguição pela banca, esta decidiu atribuir Conceito A.

Curitiba, 12 de dezembro de 1991.

Banca Examinadora:

---

Prof. BIN KANG CHENG  
Presidente/Orientador - UFPR

---

Prof. AMIR CALDEIRA  
Instituto de Física - UNICAMP

---

Prof. GILBERTO MEDEIROS KREMER  
Depto. de Física - UFPR

**Não foste feito para viver como bruto,  
mas para seguir virtude e conhecimento.  
(DANTE)**

## **AGRADECIMENTOS**

Ao meu orientador Professor Bin Kang Cheng pela atenção, dedicação e paciência.

Aos meus amigos da Universidade pelo incentivo, carinho e amizade.

À Jose, pelo trabalho como secretária.

À CAPES pelo auxílio financeiro.

## SUMÁRIO

<b>Introdução</b> .....	1
<b>Cap 1: Integrais de caminho de Feynman</b> .....	3
1.1 Formulação de Feynman da Mecânica Quântica .....	3
1.2 A matriz densidade .....	7
1.3 Matriz densidade por integrais de caminho .....	8
<b>Cap 2: Aproximação Semi-Clássica</b> .....	10
a) espaço de fase .....	10
b) indução .....	12
c) integrais de caminho .....	13
<b>Cap 3: Aproximação Original de Feynman</b> .....	15
3.1 Expansão em série .....	15
3.2 Potencial Efetivo .....	17
<b>Cap 4: Aproximação de Feynman-Kleinert</b> .....	21
<b>Cap 5: Comparação entre os resultados</b> .....	28
5.1 Oscilador harmônico com parede rígida na origem .....	28
5.1.a Cálculo Exato .....	28
5.1.b Cálculo Semi-Clássico .....	30
5.1.c Aproximação de Feynman-Kleinert .....	30
5.1.d Aproximação para parede rígida .....	32

5.2 Potencial linear com parede rígida na origem .....	32
5.2.a Cálculo Exato .....	32
5.2.b Cálculo Semi-Clássico .....	34
5.2.c Aproximação de Feynman-Kleinert .....	34
5.2.d Aproximação para parede rígida .....	35
Comparação entre os resultados	
Considerações finais .....	49
Apêndice A .....	50
A.1 Partícula sob a ação de força constante .....	50
A.2 Oscilador Harmônico .....	51
A.3 Oscilador Harmônico forçado .....	52

## LISTA DE FIGURAS

5.1: Potenciais clássico e efetivos para oscilador harmônico com parede rígida .....	38
5.2: Potenciais clássico e efetivos para o potencial linear com parede rígida .....	39
5.3: Comparação entre energia livre para oscilador com parede rígida para $w = 1$ .....	40
5.4: Comparação entre energia livre para oscilador com parede rígida para $w = 0.5$ ....	41
5.5: Comparação entre energia livre para oscilador com parede rígida para $w = 0.2$ ....	42
5.6 Comparação entre energia livre potencial linear com parede rígida para $a = 1$ .....	43
5.7 Comparação entre energia livre potencial linear com parede rígida para $a = 0.5$ ....	44
5.8 Comparação entre energia livre potencial linear com parede rígida para $a = 0.2$ ....	45
5.9 Comparação entre densidades no oscilador com parede rígida ( $w = 1$ ) para $\beta = 5$ (inverso da temperatura).....	46
5.10 Comparação entre densidades no oscilador com parede rígida ( $w = 1$ ) para $\beta = 1$ (inverso da temperatura).....	47
5.11 Comparação entre densidades no oscilador com parede rígida ( $w = 1$ ) para de $\beta = 0.1$ (inverso da temperatura).....	48

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Comparação entre função partição exata de Feynman- Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com $w = 1$ .....	36
Tabela 2: Comparação entre função partição exata, de Feynman- Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com $w = 0.5$ .....	36
Tabela 3: Comparação entre função partição exata, de Feynman- Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com $w = 1$ .....	36
Tabela 4: Comparação entre função partição exata, de Feynman- Kleinert e método adaptado para potencial linear com parede rígida com $a = 1$ .....	37
Tabela 5: Comparação entre função partição exata, de Feynman- Kleinert e método adaptado para potencial linear com parede rígida com $a = 0.5$ .....	37
Tabela 6: Comparação entre função partição exata, de Feynman- Kleinert e método adaptado para potencial linear com parede rígida com $a = 0.2$ .....	37



## RESUMO

No formalismo de Feynman na mecânica estatística quântica, a função partição pode ser representada como uma integral de caminho. O método variacional proposto recentemente por Feynman e Kleinert permite transformar a integral de caminho numa integral no espaço de fase, no qual as flutuações quânticas são consideradas introduzindo potencial clássico efetivo. Este método foi testado com sucesso para potenciais suaves e para o potencial com a singularidade delta de Dirac.

Nesta dissertação, nós aplicamos o método para potenciais com singularidade forte: (a) um potencial quadrático e (b) um potencial linear, ambos com uma parede rígida na origem. Para que a densidade de probabilidade seja zero na origem, introduzimos o método de Feynman-Kleinert adaptado.

Primeiro obtivemos o potencial clássico efetivo analiticamente e avaliamos os potenciais clássicos efetivos, energias livres (ou funções partições) e densidades de probabilidades numericamente. Por último comparamos nossos resultados com os exatos, os de Feynman-Kleinert e os semi-clássicos. Nossos resultados são bons para osciladores com baixas frequências angulares e potenciais lineares fracos, mesmo para baixas temperaturas. Para osciladores com frequências angulares altas e potenciais lineares fortes, os resultados são válidos somente à temperaturas mais altas ( $\beta \geq 1$ ).

## ABSTRACT

In Feynman's approach to quantum statistical mechanics, the partition function can be represented as a path integral. A recently proposed variational method of Feynman-Kleinert is able to transform the path integral into an integral in phase space, in which the quantum fluctuations have been taken care of by introducing the effective classical potential. This method has been tested with success for the smooth potentials and for the singular potential of delta.

In this dissertation, we apply the method to the strong singular potentials: (a) a quadratic potential and (b) a linear potential both with a rigid wall at the origin. By satisfying the density of the particle to vanish at the origin, we introduce an adapted method of Feynman-Kleinert in order to improve the method.

We first obtain the effective classical potential analytically and then evaluate effective classical potentials, free energies (or partition functions) and the densities of particles numerically. Finally we compare our results with those of exact, Feynman-Kleinert and semi-classical. Our results are good for lower angular frequency of oscillator and for weak linear potential even at lower temperatures. For higher angular frequency of oscillator and for strong linear potential, our results are valid only in higher temperature (up to  $\beta \cong 1$ ).

## INTRODUÇÃO

Da mecânica quântica estatística, sabemos que um sistema em equilíbrio térmico pode estar em qualquer nível de energia. A probabilidade relativa de que esteja num estado com energia  $E_i$  é proporcional a  $e^{-\beta E_i}$ , onde  $\beta$  é o inverso da energia térmica ( $\beta = 1/kT$ ). A lei exponencial acima não é ainda uma verdadeira distribuição de probabilidade, porque não está normalizada. O fator de normalização pode ser escrito como  $1/Z$ , de modo que a probabilidade do sistema estar num estado de energia  $E_i$  é :

$$p_i(E_i) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \quad (1)$$

onde consideramos que não há estados degenerados. Esta é a bem conhecida distribuição canônica.

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (2)$$

O símbolo  $\sum$  representa um somatório para os estados discretos e uma integral para os estados contínuos.  $Z$  é chamada de função partição. A notação  $Z$  vem do alemão : Zustandssumme, soma sobre os estados.

Uma normalização equivalente consiste em definir uma energia  $F$  de modo que:

$$p_i(E_i) = e^{-\beta(E_i - F)} \quad (3)$$

onde  $F$  é a chamada energia livre de Helmholtz. Seu valor depende da temperatura, contudo, os níveis de energia não dependem. De (2) e (3)

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (4)$$

Trabalhamos apenas com sistemas unidimensionais de uma partícula. Para um sistema clássico os níveis de energia são contínuos, e o somatório deve ser substituído por uma integral dupla no espaço de fase, de coordenada  $x$  e de momento  $p$ , de modo que para o hamiltonianos padrão

$$H = p^2/2m + V(x) \quad (5)$$

onde  $m$  é a massa da partícula e  $V(x)$  é a energia potencial. A função partição é dada por

$$Z_{cl} = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta V(x)} \quad (6)$$

Esta é a aproximação semi-clássica na mecânica quântica estatística.

Feynman propôs uma aproximação onde o potencial  $V(x)$  da (6) é substituído por um potencial efetivo  $W_0(x)$  [1]. Este potencial procura coletar as flutuações quânticas durante o intervalo de tempo imaginário  $\beta\hbar$ , portanto sua introdução melhora o resultado obtido por (6). Mais tarde, em 1986, Feynman e Kleynert [2] aperfeiçoaram a aproximação original de Feynman introduzindo um potencial efetivo  $W_1(x)$ . Este método foi testado para os potenciais suaves [3,4] e o potencial de singularidade fraca, como o potencial  $\delta$  de Dirac [5], com bons resultados.

Nesta dissertação, aplicaremos o método de Feynman-Kleynert [2] para potenciais com singularidade forte, como o potencial quadrático do oscilador e o potencial linear, ambos interagindo com uma parede rígida na origem. O objetivo da presente dissertação é a comparação entre os resultados obtidos pela aproximação de Feynman-Kleynert [2] e os resultados exatos -obtidos por (2)- e aproximados -obtidos por (6).

**Capítulo 1 – Integrais de caminho de Feynman**

**1.1 FORMULAÇÃO DE FEYNMAN DA MECÂNICA QUÂNTICA**

Para sistemas de Hamiltoniano (5), a equação de Schrödinger é da forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (1.1)$$

Dada a função de onda  $\Psi(x', t')$ , a função de onda  $\Psi(x'', t'')$  ( $t'' > t'$ ) pode ser obtida pela resolução de (1.1). Entretanto, funções de onda em tempos diferentes são ligadas pela seguinte integral:

$$\Psi(x'', t'') = \int_{-\infty}^{\infty} K(x'', t''; x', t') \Psi(x', t') dx' \quad (1.2)$$

onde  $K(x'', t''; x', t')$  é o propagador ou a amplitude de transição de probabilidade de uma partícula chegar em  $(x'', t'')$  vinda de  $(x', t')$ .

A ação funcional é definida por

$$S[x(\tau)] = \int_{t'}^{t''} L(\dot{x}, x) d\tau \quad (1.3)$$

onde a Lagrangiana é dada por

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \quad (1.4)$$

Dividindo o intervalo de tempo total  $t'' - t'$  em N intervalos iguais, (1.3) pode ser escrita como

$$S[x(\tau)] = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{n=1}^N S(n, n-1) \right) \quad (1.5)$$

com

$$S(n, n - 1) = \frac{m(x_n - x_{n-1})}{2(\Delta t)^2} - \Delta t V \left( \frac{x_n + x_{n-1}}{2} \right), (t'' - t' = N\Delta t) \quad (1.6)$$

Daqui para frente, usaremos  $t_n = t' + n\Delta t$  e  $x_n = x(t' + n\Delta t)$  para  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ .

Dirac [6] observou que há uma relação entre  $S(n, n - 1)$  e  $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$  que é a amplitude de transição de tempo curto.  $\langle | \rangle$  são ket e bra na notação de Dirac.

A partir daí, Feynman completou esta relação como segue [6]:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[ \frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp \left[ \frac{iS(n, n - 1)}{\hbar} \right] \quad (1.7)$$

O fator de peso em frente a exponencial deve ter dimensão de inverso de comprimento. De acordo com a ortonormalidade

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \delta(x_n - x_{n-1}) \quad (1.8)$$

quando  $t_n = t_{n-1}$  obtemos o fator pré exponencial

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \quad (1.9)$$

A expressão final para a amplitude de transição com  $t_n - t_1$  finito é:

$$\langle x'', t'' | x', t' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_1 \prod_{n=1}^N \exp \left[ \frac{iS(n, n - 1)}{\hbar} \right] \quad (1.10)$$

onde o limite  $N \rightarrow \infty$  é tomado com  $x', t'$  e  $x'', t''$  fixos. É costumeiro definir aqui uma nova notação integral

$$\int_{x', t'}^{x'', t''} D[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{(N+1)}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \quad (1.11)$$

e escrever (1.10)

$$K(x'', t''; x', t') = \int_{x'}^{x''} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt L(x, \dot{x}) \right] D[x(t)] \quad (1.12)$$

Esta expressão é a famosa integral de caminho de Feynman [1, 2].

A interpretação física é a seguinte: a integral faz a soma da contribuição para a amplitude de transição de todos os caminhos possíveis entre dois pontos fixos.

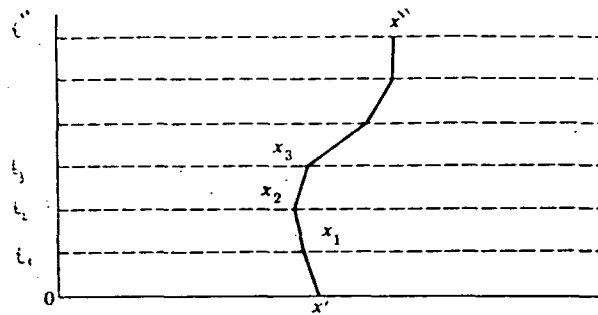


fig 1.1 partícula deslocando entre  $(x', t')$  até  $(x'', t'')$  passando por  $x_1, x_2$  etc

É importante provar que as expressões de Feynman para  $\langle x'', t'' | x', t' \rangle$  satisfazem a equação de Schrödinger dependente do tempo. Começamos com

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar} \left( \frac{x_N - x_{N-1}}{\Delta t} \right)^2 - \frac{iV((x_N + x_{N-1})/2)\Delta t}{\hbar} \right] \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (1.13)$$

onde supomos  $t_N - t_{N-1}$  infinitesimal. Introduzindo

$$\xi = x_N - x_{N-1}$$

e fazendo  $x_N \rightarrow x$  e  $t_n \rightarrow t + \Delta t$ , nós obtemos

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \right) \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle \quad (1.14)$$

No limite  $\Delta \rightarrow 0$ , a maior contribuição para esta integral vem da região  $\xi = 0$ . Expandimos  $\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle$  e  $\exp(-iV\Delta t/\hbar)$  em potências de  $\Delta t$ ,

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left( \frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} \right) \left( 1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \dots \right) \times$$

$$\times \left[ \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \xi \frac{\partial}{\partial x} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \dots \right] \quad (1.15)$$

Substituímos as integrais

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) \xi d\xi = 0 \quad (1.16a)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) \xi^2 d\xi = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} \quad (1.16b)$$

na equação (1.15) e obtemos

$$\begin{aligned} & \langle x_N, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = \\ & \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - i\Delta t V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \frac{\hbar\Delta}{2im} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (1.17)$$

onde reagrupamos e temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + V(x) \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \quad (1.18)$$

que é a equação de Schrödinger.

Na mecânica quântica, o propagador pode ser escrito em termos das autofunções e dos autovalores de energia como :

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_k \Psi_k(x'') \Psi_k^*(x') \exp\left[\frac{-iE_k(t'' - t')}{\hbar}\right] \quad (1.19)$$

de (1.18) e (1.7), o propagador (1.10) obedece à equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t''} K(x'', t''; x', t') = - \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x''^2} K(x'', t''; x', t') + V(x'') K(x'', t''; x', t') \quad (1.20)$$

com a condição de contorno

$$K(x'', t''; x', t') = \delta(x'' - x') \quad (1.21)$$



para  $t'' \rightarrow t'$

## 1.2 A MATRIZ DE DENSIDADE NORMALIZADA

Vamos usar o seguinte formalismo para descrever a mecânica quântica estatística[7]:o sistema quântico pode ser representado por um operador de matriz densidade

$$\tilde{\rho}_n = \sum_k w_k |k\rangle\langle k| \quad (1.22)$$

que satisfaz às seguintes condições :

a)  $|k\rangle$  é um estado possível do sistema e  $\{|k\rangle\}$  é um conjunto completo de vetores ortonormais

b)  $w_k \geq 0$

c)  $\sum_k w_k = 1$

d) o valor esperado do operador  $\tilde{A}$  é dado por

$$\langle \tilde{A} \rangle = Tr \tilde{\rho}_n \tilde{A} = \sum_{k'} \langle k' | \tilde{\rho}_n \tilde{A} | k' \rangle = \sum_{k',k} w_k \langle k' | k \rangle \langle k' | \tilde{A} | k \rangle = \sum_k w_k \langle k | \tilde{A} | k \rangle \quad (1.23)$$

onde  $\langle i | \tilde{A} | i \rangle$  é o valor esperado de  $\tilde{A}$  no estado  $|i\rangle$  e  $Tr.$  representa o traço da matriz. Considerando (b),(c) e (1.23) podemos interpretar  $w_k$  como a probabilidade de o sistema estar no estado  $k$ . Se todos menos um  $w_k$  são zero, nós podemos dizer que o sistema está em um estado puro, de outra forma estará num estado misturado.

Na representação de configuração , podemos reescrever (1.22) e (1.23)

$$\rho_n(x'', x') = \langle x'' | \tilde{\rho}_n | x' \rangle = \sum_k w_k \langle x'' | k \rangle \langle k | x' \rangle = \sum_k w_k \Psi_k(x'') \Psi_k^*(x') \quad (1.24)$$

O valor esperado na representação espacial fica

$$\langle \tilde{A} \rangle = Tr(\tilde{\rho}A) = \int dx(x'' | \rho A | x') \quad (1.25)$$

Quando o sistema está em equilíbrio térmico, a probabilidade  $w_k$  dele estar no estado de energia  $E_k$  satisfaz a distribuição canônica ou

$$w_k = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E_k} \quad (1.26)$$

substituindo (1.26) na (1.24), obtemos

$$\rho_n(x'', x') = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_k \Psi_k(x'') \Psi_k(x') e^{-\beta E_k} \quad (1.27)$$

### 1.3 MATRIZ DE DENSIDADE NÃO NORMALIZADA POR INTEGRAL DE CAMINHO

De (1.27), introduzimos a matriz de densidade não normalizada como

$$\rho(x'', x') = \sum_k \Psi(x'') \Psi_k^*(x') e^{-\beta E_k} \quad (1.28)$$

temos a relação importante

$$Z(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x'', x') dx' \quad (1.29)$$

Comparando (1.28) com (1.19) para  $t' = 0$  e  $t'' = t$ , obtemos

$$\rho(x'', x') = K(x'', -i\beta\hbar; x', 0) \quad (1.30)$$

usando (1.12) e (1.30), representamos a matriz de densidade não normalizada como uma integral de caminho, ou

$$\rho(x_2, x_1) = \int \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left[ \int_0^{\beta\hbar} \frac{m\dot{x}^2}{2} + V[x(\mu)] \right] du\right) Dx(\mu) \quad (1.31)$$

O parâmetro  $\mu$  tem dimensão de "tempo", mas não tem um verdadeiro sentido físico. É apenas um parâmetro na expressão para a densidade de matriz  $\rho$ . Contudo, se nós quisermos fazer uma analogia no nosso raciocínio, podemos considerar  $\mu$  como o tempo para a partícula realizar certo caminho, e interpretar a integral como segue: consideramos todos os caminhos possíveis, ou movimentos, pelos quais uma partícula do sistema pode

viajar entre a configuração inicial e final no "tempo"  $\beta\hbar$ . A densidade de matriz  $\rho$  é a soma das contribuições de cada movimento; a contribuição de um movimento particular é a integral "temporal" da "energia" dividido por  $\hbar$  para o caminho em questão. Por isso, a contribuição de cada caminho na (1.31) é diferente. Aquele caminho que corresponde à uma ação funcional menor contribui mais devido ao sinal da exponencial. A função partição é obtida considerando somente aqueles casos em que a configuração final é igual a inicial, e nós somamos sobre todas as configurações possíveis. Este resultado é muito interessante, porque descreve o comportamento estatístico de um sistema quântico como uma integral de caminho sem o incômodo imaginário, tão característico da mecânica quântica.

## Capítulo 2 – Aproximação Semi-Clássica

A aproximação semi-clássica para a função partição pode ser obtida pelas três maneiras a seguir: integração no espaço de fase [8]; por indução pelo princípio da correspondência [8] ou por integrais de caminho [1,7]

### a) espaço de fase:

Na mecânica clássica estatística, um ponto no espaço de fase corresponde a um estado do sistema. Na mecânica quântica o estado não pode ser especificado por um ponto. De acordo com o princípio da incerteza, o estado do sistema não pode ser localizado no espaço de fase mais precisamente que uma área  $\Delta p \Delta q$  ( $q$  coordenada,  $p$  momento) da ordem de  $h$ . A precisão do valor de  $h$ , contudo, não pode ser deduzida do princípio da incerteza, porque este princípio, para ser exato diz:  $\Delta q \Delta p \geq \frac{h}{2}$  (onde  $\Delta q$  e  $\Delta p$  são desvios padrão)

Uma dedução alternativa para o fator  $h$  é a seguinte. Vamos sombrear caminhos de energia constante para o oscilador harmônico,  $H(q, p) = \epsilon = \text{constante}$ , no espaço clássico de  $q$  e  $p$ . O hamiltoniano é igual a

$$H(p, q) = \frac{m(2\pi\nu)^2 q^2}{2} + \frac{p^2}{2m} = \epsilon \quad (2.1)$$

onde  $\nu$  é a frequência do oscilador. De onde concluímos que os caminhos são elipses dadas por

$$\frac{q^2}{\alpha^2} + \frac{p^2}{\gamma^2} = 1 \quad (2.2)$$

onde

$$\alpha = \frac{\epsilon}{2\pi^2 m \nu} \quad \gamma = 2m\epsilon$$

e a área da elipse é  $a$

$$a = \pi \alpha \gamma = \frac{\epsilon}{\nu}$$

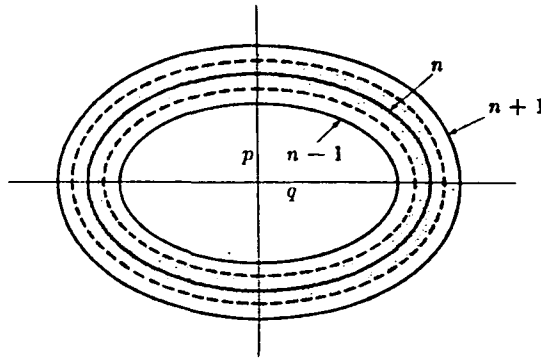


fig 2.1 caminhos clássicos de energia constante no espaço de fase para oscilador harmônico unidimensional (esboço);  $n =$  número quântico.

Em particular, deixamos as elipses serem esboçadas como na figura 2.1, para as energias  $\epsilon = \epsilon_{n-1}, \epsilon_n$  e  $\epsilon_{n+1}$ , onde  $\epsilon_n$  é o nível quântico de energia ( $\epsilon = (n + \frac{1}{2})h\nu$ ) para um número quântico grande  $n$ . A área entre duas elipses sucessivas na figura 2.1 é então a área do espaço de fase clássico associado com um estado quântico. Nós achamos então, de  $\epsilon$  e da *area*

$$a_{n+1} - a_n = (n + \frac{3}{2})h - (n + \frac{1}{2})h = h \tag{2.3}$$

o que confirma nosso resultado.

Nós podemos quebrar a integral clássica sobre  $p$  e  $q$  em contribuições discretas ( como a soma quântica sobre os estados) de cada área sombreada (de magnitude  $h$ ) porque a integração é essencialmente constante através de cada uma dessas áreas (numeros quânticos altos e altas temperaturas). Então

$$\int \int e^{-\beta H(p,q)} dq dp \cong h \sum e^{-\beta \epsilon_n} \tag{2.4}$$

de onde tiramos

$$Z_{ex} \cong Z_{cl} = \frac{1}{h} \int \int e^{-\beta H} dqdp \quad (2.5)$$

com hamiltonianos (5) chegamos a forma para aproximação semi-clássica (6)

b) Indução :

Para Hamiltoniano (5) o somatório (2) deve ser substituído pela integral dupla:

$$Z_{cl} = c \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta H} dpdx$$

onde a constante  $c$  tem dimensão de inverso da ação e será determinada igualando a integral ao somatório quântico para altas temperaturas. Faremos isso para um caso específico (oscilador harmônico), mas podemos antecipar que  $c$  sempre dependerá da constante de Planck  $h$ , o que significa que não pode ser obtido por considerações puramente clássicas. Daí o nome "Aproximação Semi-Clássica".

A função partição exata, para um oscilador harmônico unidimensional é:

$$Z_{ex} = \frac{e^{-\beta h\nu/2}}{1 - e^{-\beta h\nu}} \quad (2.6)$$

a temperaturas altas, quando  $1/\beta \gg h\nu$

$$Z_{ex} \cong \frac{1 - \beta h\nu/2}{1 - [1 - \beta h\nu]} \cong \frac{1}{\beta h\nu} \quad (2.7)$$

e considerando agora o Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m\nu^2 q^2 \quad (2.8)$$

onde  $q = x$  e  $p = m\dot{x}$ , na integral (2.5) resulta:

$$Z_{cl} = c \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dpdq \exp \left[ -\beta \left( \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m\nu^2 q^2 \right) \right] = \frac{c}{\beta\nu} \quad (2.10)$$

De (2.7) e (2.10),  $c = 1/\hbar$  para satisfazer  $Z_{cl} \cong Z_{ex}(\beta \rightarrow 0)$

Seria preciso um fator  $1/\hbar$  para cada produto  $dpdx$  na integral, ou seja, para cada grau de liberdade. Esta indução pode ser feita também para potencias diferentes do oscilador harmônico ( por exemplo: poço infinito ).

**c)integral de caminho:**

Partimos da fórmula para densidade como uma integral de caminho, apresentada no capítulo 1

$$\rho(x_2, x_1) = \int \exp\left(\frac{-1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} + V(x(\mu))\right] du\right) Dx(\mu) \quad (1.31)$$

A dependência do propagador com a temperatura é explicada a seguir: se a temperatura não é muito baixa,  $\beta\hbar$  é pequeno. Calculando a função partição para qual  $x_1 = x_2$ , cada caminho começa de  $x_1$  e pouco tempo depois está de volta. Como o tempo é pequeno a partícula não se afasta muito de sua posição ; caso se afaste, significa que tem alta energia cinética, a sua contribuição para a integral será pequena. Logo, para temperaturas altas é válida a aproximação :  $V[x(\mu)] \cong V[x_1]$ . A matriz densidade torna-se com isso:

$$\rho(x_1, x_1) = e^{-\beta V(x_1)} \int_{x_1}^{x_1} \exp\left[\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2(\mu) d\mu\right] Dx(\mu) \quad (2.11)$$

Temos uma integral de caminho para uma partícula livre na última expressão , o resultado é :

$$\int_{x_1}^{x_2} \left[\exp\left(\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2(\mu)\right)\right] Dx(\mu) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2\pi\beta}} \exp\left[\frac{-m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar^2\beta}\right] \quad (2.12)$$

Como estamos interessados, para a função de partição em que  $x_2 = x_1$  temos para a matriz densidade

$$\rho(x_1, x_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} e^{-\beta V(x_1)} \quad (2.13)$$

integrando, temos

$$Z_{cl} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \int e^{-\beta V(x_1)} dx_1 \quad (2.14)$$

Esta é a fórmula para a função partição válida no limite da mecânica clássica (equivale a (1.29)).

Quanticamente, o desvio que a partícula deve ter sobre o ponto final é da ordem de :

$$\Delta x \Delta p = \hbar$$

substituindo o desvio do momento , temos

$$\Delta x \frac{\Delta x}{\Delta t} m = \hbar$$

considerando o tempo imaginário

$$\Delta t = \beta \hbar$$

isolando  $\Delta x$  obtemos

$$\Delta x = \hbar \sqrt{\frac{\beta}{m}} \tag{2.15}$$

A condição para a aproximação semi-clássica ser válida é

$$1/\beta \gg \Delta \epsilon$$

onde  $\Delta \epsilon$  é a diferença entre os níveis de energia.



### Capítulo 3 – Aproximação Original de Feynman

Quando as características quânticas de um sistema são relevantes, a aproximação semi-clássica não é válida. Para estes casos é necessário incluir mudanças no potencial que resultam do movimento ao longo do "caminho" (flutuações quânticas). Estas mudanças podem ser feitas de duas formas:

#### 3.1. EXPANSÃO EM SÉRIE

Nós expandimos o potencial em série de Taylor, ao redor de uma posição média dada por:

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(\mu) d\mu \quad (3.1)$$

que é definida para qualquer caminho particular. Nós podemos caracterizar cada caminho por sua posição média e efetuar as integrações sobre todas posições médias, ao invés dos pontos iniciais  $x_1$ , como está feito em (2.11). Deste modo, a função partição torna-se:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{x_1}^{x_1} \left[ \exp \left( \frac{-1}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 d\mu + \int_0^{\beta\hbar} V[x(\mu)] d\mu \right\} \right) \right] D x(\mu) \quad (3.2)$$

Nesta expressão os caminhos são escolhidos para satisfazerem duas condições : (1) que  $\bar{x}$  dado por (3.1) é fixo e (2) que o ponto inicial e final são idênticos (o que implica que a integral sobre todos os caminhos também inclui uma integração sobre todos pontos finais)

Usando uma expansão em série de Taylor para  $V(x)$  sobre o ponto  $\bar{x}$ , nós achamos:

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta\hbar} V[x(\mu)] d\mu &= \beta\hbar V(\bar{x}) + \int_0^{\beta\hbar} [x(\mu) - \bar{x}] V'(\bar{x}) d(\mu) \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} [x(\mu) - \bar{x}]^2 V''(\bar{x}) d\mu \end{aligned} \quad (3.3)$$

Devido a expressão (3.1) o segundo termo no lado direito da equação é zero.

Substituindo a expansão até segunda ordem em (3.2) vem:

$$\begin{aligned}
 Z &\cong \int d\bar{x} e^{-\beta V(\bar{x})} \int_{x_1}^{x_1} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 d\mu + \beta\hbar V(\bar{x}) + \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} [x(\mu) - \bar{x}]^2 V''(\bar{x}) d\mu \right\}\right) \\
 &\cong \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} e^{-\beta V(\bar{x})} \int_{x_1}^{x_1} \exp\left(-\int_0^{\beta\hbar} \frac{m}{2} \dot{x}^2 + (x(\mu) - \bar{x})^2 \frac{V''(\bar{x})}{2} d\mu\right) \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

Nesta integral de caminho, temos o vínculo da equação (3.1) que pode ser reescrito:

$$\int_0^{\beta\hbar} (x - \bar{x}) d\mu = 0$$

A substituição  $y = x - \bar{x}$  dá o vínculo na forma

$$\int_0^{\beta\hbar} y d\mu = 0$$

a integral de caminho na (3.4) é:

$$\int_{x_1 - \bar{x}}^{x_1 - \bar{x}} \left( \exp\left\{ -\int \frac{m\dot{y}^2}{2} + \frac{1}{2} y^2 V''(\bar{x}) \right\} \frac{d\mu}{\hbar} \right) Dy(\mu) \quad (3.5)$$

O integrando desta integral de caminho é o mesmo que para o oscilador harmônico com frequência dada por  $\omega^2 = -V''(\bar{x})/m$ .

Vamos agora aplicar o vínculo para esta integral de caminho no seguinte modo. Nós multiplicamos a integral de caminho pela função  $\delta\left(\int_0^{\beta\hbar} y d\mu\right)$ . Para manipular a integral com a função delta, expressamos esta última por sua transformada de Fourier:

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [\exp(ikx)] \frac{dk}{2\pi} \quad (3.6)$$

e escrevemos (3.5) como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{x_1 - \bar{x}}^{x_1 - \bar{x}} \left\{ \exp\left[ \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left( \frac{m\dot{y}^2}{2} + \frac{1}{2} V'' y^2 + ik y \right) d\mu \right] \right\} Dy(\mu) \quad (3.7)$$

Desta forma a integral de caminho tem o vínculo (3.1). A integral (3.7) tem a forma da integral para o oscilador harmônico forçado, se interpretarmos  $m$  e  $V''$  como imaginários.

O propagador para o oscilador harmônico forçado é: (vide apêndice A)

$$K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}} e^{iS_{cl}/\hbar}$$

onde

$$\begin{aligned} S_{cl} = & \frac{m\omega}{2\sin(\omega T)} \left[ (\cos(\omega T))(x_b^2 + x_a^2) - 2x_a x_b \right. \\ & + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin(\omega(t - t_a)) dt \\ & + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin(\omega(t_b - t)) dt \\ & \left. - \frac{2}{m^2\omega^2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t f(t)f(s) \sin(\omega(t_b - t)) \sin(\omega(s - t_a)) ds dt \right] \end{aligned}$$

Para obtermos a função de partição integramos sobre todos os valores de  $x$  e  $k$ . A função de partição obtida por Feynman foi:

$$Z = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \exp \left\{ -\beta \left[ V(\bar{x}) + \frac{\beta\hbar^2}{24m} V''(\bar{x}) \right] \right\} \right) d\bar{x} \quad (3.8)$$

Nós vemos que a função partição tem a mesma forma que foi derivada sob suposições clássicas. A única diferença é o termo corretivo que foi adicionado ao potencial. Este termo,  $\frac{\beta\hbar^2}{24m} V''(\bar{x})$  é claramente quântico, como se vê pela inclusão da constante de Planck  $\hbar$ .

### 3.2 POTENCIAL EFETIVO

Vamos ir além e procurar algum possível potencial efetivo  $U(\bar{x})$  que, quando substituí o verdadeiro  $V(\bar{x})$ , na equação (2.14) possa representar uma boa aproximação para a correta função partição da mecânica quântica. Nós começamos com a expressão exata:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\beta V(\bar{x})] d\bar{x} \int \exp \left( \frac{m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 d\mu - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(\mu)] - V[\bar{x}]\} d\mu \right) Dx(\mu) \quad (3.9)$$

Podemos olhar a integral de caminho nesta expressão como representante da média sobre a funcional  $e^f$  com

$$f = - \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(\mu)] - V[\bar{x}]\} \frac{d\mu}{\hbar} \quad (3.10)$$

onde o processo de média é executado com a função peso  $\exp[-(m/2\hbar) \int \dot{x}^2 d\mu]$ . Se nós substituirmos esta média de uma exponencial pela exponencial de uma média, isto é:

$$\langle e^f \rangle \rightarrow e^{\langle f \rangle}$$

nós faremos um erro de segunda ordem, com os termos  $\langle f \rangle^2 e^{\langle f \rangle}$ . Pelo gráfico verificamos o sinal da desigualdade :  $\langle e^f \rangle \geq e^{\langle f \rangle}$

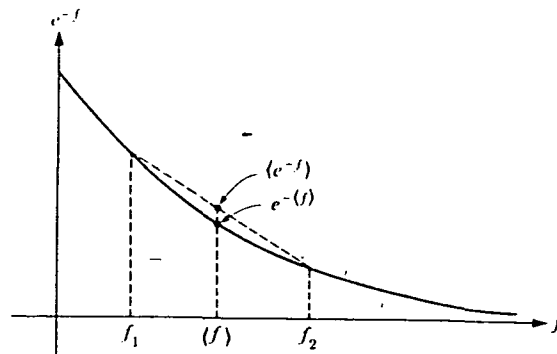


fig3.1: curva de  $e^{-f}$ , mostrando a média da exponencial e exponencial da média

Nós vamos obter uma média de  $f$  para cada valor de  $\bar{x}$ , isto é,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{\hbar} \int \left[ \exp \left( \frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 d\mu \right) \right] \int_0^{\beta\hbar} \{V[x(t)] - V[\bar{x}]\} dt D\mathbf{x}(\mu) \quad (3.11)$$

onde nós vinculamos a integral para retornar ao seu ponto inicial e para satisfazer os vínculos dados por  $\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(\mu) d\mu$ . Faremos novamente as substituições

$$y(t) = x(t) - \bar{x} \rightarrow x(t) = y(t) + \bar{x} \quad (3.12a)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{y}(t) \quad (3.12b)$$

logo

$$\langle f \rangle = \frac{1}{\hbar} \int \exp\left(\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{y} d\mu\right) \int_0^{\beta\hbar} \{V[\mathbf{x} + \mathbf{y}(t)] - V[\mathbf{x}]\} dt Dy(\mu) \quad (3.13)$$

vamos colocar as seguintes restrições :

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}(\beta\hbar) = Y \quad \int_0^{\beta\hbar} \mathbf{y}(\mu) d\mu = 0 \quad (3.14)$$

Os vínculos de (3.14) fazem com que a integração se realize sobre infinitos caminhos periódicos. A sobreposição destes caminhos, com as diferenças de fase, fazem com que a integração seja independente do tempo. Devemos ainda considerar todos os valores possíveis de  $Y$ .

$$\langle f \rangle = \frac{\beta\hbar}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int \left[ \exp\left(\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{y}^2\right) \right] [V(\mathbf{x} + Y) - V(\mathbf{x})] Dy(\mu) dY \quad (3.15)$$

Para incluir o vínculo (3.14) usamos novamente (3.6) e a média  $\langle f \rangle$  torna-se

$$\langle f \rangle = \beta \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \underbrace{\int \exp\left\{\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} (\dot{y}^2 + ik\dot{y}) d\mu\right\}} [V(\mathbf{x} + Y) - V(\mathbf{x})] Dy(\mu) dY \quad (3.16)$$

A integral destacada é o propagador para o potencial linear com  $F = -ik$ , vide apêndice(A).

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \beta \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[-ik(-i\beta\hbar)Y - (ik)^2 \frac{(-i\beta\hbar)^3}{24m}\right]\right\} [V(\mathbf{x} + Y) - V(\mathbf{x})] dY \\ &= \langle f \rangle = \sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar}} \beta \int_{-\infty}^{\infty} [V(\mathbf{x} + Y) - V(\mathbf{x})] \exp\frac{-6Y^2m}{\beta\hbar} dY \end{aligned} \quad (3.17)$$

Chamando a aproximação para a função partição  $Z'$ , a energia livre de Helmholtz deve ser  $F'$ , lembrando que  $Z' = e^{-\beta F'}$ .

Lembrando a substituição  $\langle e^f \rangle \rightarrow e^{\langle f \rangle}$  da (3.9) e (3.15) nós temos

$$Z' = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \exp\left\{-\beta[V(\mathbf{x}) + I(\mathbf{x})]\right\} \right) d\mathbf{x} \underbrace{\int \left[ \exp\left(\frac{-m}{2\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{x}^2 d\mu\right) \right]} D\mathbf{x}(\mu) \quad (3.18)$$

onde  $I(\bar{x}) = \frac{\langle f \rangle}{\beta}$  e a integral destacada já está avaliada em (2.12). Então podemos escrever:

$$Z' = e^{-\beta F'} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\beta}} \int e^{-\beta U(x)} d\bar{x} \quad (3.19)$$

onde

$$U(\bar{x}) = \sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} V(\bar{x} + Y) e^{-6Y^2 m / \beta\hbar^2} dY \quad (3.20)$$

(3.19) é a aproximação original de Feynman [1].

Isto significa que nós podemos calcular uma energia livre aproximada de uma maneira clássica, substituindo o potencial clássico  $V(\bar{x})$  por um potencial efetivo  $U(\bar{x})$ , que depende da temperatura. Observamos que (3.20) pode ser expandida reproduzindo (3.8). O potencial efetivo é um valor médio de  $V(x)$  tomado sobre pontos próximos a  $\bar{x}$  em uma curva gaussiana, onde o espalhamento médio quadrático, ou desvio padrão da gaussiana é  $\sqrt{\frac{\beta\hbar}{12m}}$ .

### Capítulo 3 – Aproximação de Feynman-Kleinert

A aproximação de Feynman vista na capítulo anterior, foi aperfeiçoada por Feynman e Kleinert [2] em 1986 e independentemente por Giachetti e Tognetti[9]. Nesta seção vamos verificar as idéias básicas desta aproximação seguindo o trabalho de Janke [10].

A representação com integral de caminho de uma função partição tem a forma ( $m = 1$ )

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Dx(\mu) \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left[ \frac{\dot{x}^2}{2} + V(x) \right] d\mu \right] \quad (4.1)$$

onde supomos que os caminhos  $x(\mu)$  sejam periódicos,  $x(0) = x(\beta\hbar)$ . Aqui, o limite para altas temperaturas ( $\beta \rightarrow 0$ ) corresponde à aproximação clássica :

$$Z(\beta) \cong Z_{cl} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\beta V(x_0)} \quad (4.2)$$

onde  $x_0$  é o caminho médio  $\frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(\mu) d\mu$ . Vamos escrever (4.1) numa forma mais adaptável. Para este fim fazemos uso da periodicidade dos caminhos e expandimos em séries de Fourier.

$$x(\mu) = x_0 + x_1(\mu) \equiv x_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu}) \quad (4.3)$$

onde  $w_n \equiv 2\pi n / \beta\hbar$  e  $x_n \equiv x_n^r + i x_n^i = x_n^*$ . Usando a (4.3), a função partição pode ser decomposta como segue:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\beta W(x_0)} = e^{-\beta F} \quad (4.4)$$

onde ( $\hbar = 1$ )

$$e^{-\beta W(x_0)} = \int Dx_1(\mu) \exp \left[ -\beta \sum_{n=1}^{\infty} w_n^2 |x_n|^2 - \int_0^{\beta} V(x_0 + x_1(\mu)) d\mu \right] \quad (4.5)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} Dx_1(\mu) \equiv \prod_{n=1}^{\infty} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n^{re} dx_n^{im}}{\pi/w_n^2 \beta} \right] \quad (4.6)$$

Vamos justificar como o termo de energia cinética em (4.5) foi obtido. A partir da

$$x_1(\mu) = \sum (x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu}) \quad (4.7)$$

obtemos

$$\dot{x}_1^2(\mu) = \sum_{n,j} (x_n e^{i w_n \mu} - x_n^* e^{-i w_n \mu})(x_j^* e^{-i w_j \mu} - x_j e^{i w_j \mu}) \quad (4.8)$$

Usando as seguintes integrais

$$\int_0^{\beta} e^{\pm i(w_n + w_j)\mu} d\mu = 0 \quad (4.9)$$

e

$$\int_0^{\beta} e^{\pm i(w_n - w_j)\mu} d\mu = \begin{cases} 0, & \text{se } n \neq j; \\ \beta & n=j \end{cases} \quad (4.10)$$

mostra-se que

$$\int_0^{\beta} \frac{\dot{x}^2}{2} = \beta \sum_n w_n^2 [(x_n^{re})^2 + (x_n^{im})^2] = \beta \sum_n w_n^2 |x_n|^2 \quad (4.11)$$

Observamos que

$$\int Dx_1(\mu) e^{-\beta \sum_{n=1}^{\infty} w_n^2 |x_n|^2} = \prod_{n=1}^{\infty} \int \frac{dx_n^{re} dx_n^{im}}{\pi/w_n^2 \beta} e^{-\beta w_n^2 |x_n|^2} = \prod_{n=1}^{\infty} \left( \sqrt{\frac{\pi}{w_n^2 \beta}} \sqrt{\frac{\pi}{w_n^2 \beta}} \frac{1}{\pi/w_n^2 \beta} \right) = 1 \quad (4.12)$$

é uma medida gaussiana normalizada.



Aplicando a desigualdade de Feynman-Jensen[7], nós achamos

$$e^{-\beta W(x_0)} = \langle e^{-\int_0^\beta V d\mu} \rangle_0 \geq e^{-\langle \int_0^\beta V d\mu \rangle_0} \equiv e^{-\beta W_0(x_0)} \quad (4.13)$$

A avaliação do valor esperado da gaussiana dá o potencial efetivo

$$W_0(x_0) \equiv \frac{1}{\beta} \langle \int_0^\beta V(x_0 + x_1(\mu)) d\mu \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} Dx_1(\mu) \left( e^{-\beta \sum w_n |x_n|^2} \int_0^\beta V(x_0 + x_1(\mu)) d\mu \right) \quad (4.14)$$

A integral (4.14) pode ser reescrita como

$$W_0(x_0) = \int \frac{dx_1^r dx_1^i}{\pi/w_1^2 \beta} \dots \int \frac{dx_n^r dx_n^i}{\pi/w_n^2 \beta} e^{-\beta w_n^2 |x_n|^2} \left( \int_0^\beta V(x_0 + x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu}) d\mu \right) \quad (4.15)$$

(A rigor, deveríamos ter todo o somatório. Mas como com as transformações que faremos não aparecerão termos com índices cruzados, trabalhamos somente com um termo, para depois generalizar.) isto significa que consideramos todas as oscilações possíveis em torno de  $x_0$ , com todas as frequências. Escolbemos  $x$  de modo que

$$\int_0^\beta V(x_0 + x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu}) d\mu = \int_0^\beta V(x) d\mu = \beta V(x) \quad (4.16)$$

ou seja, a partícula oscila em torno de  $x_0$ , mas "sente", na média, o potencial  $V(x)$ .

Examinamos agora como uma transformação em  $x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu}$  corresponde em  $x$ . Faremos esta análise para depois substituir o termo equivalente em  $\dot{x}^2(\mu)$ , na exponencial de energia cinética do propagador.

Observamos a equivalência :

$$x_0 + x_n e^{i w_n \mu} + x_n^* e^{-i w_n \mu} \iff x \quad (4.18)$$

$$2x_n^r \cos w_n \mu + 2x_n^i \sin w_n \mu \iff x - x_0 \quad (4.19)$$

obtemos

$$4w_n^2(x_n^{2re} \sin^2(w_n\mu) + 2x_n^{2re} x_n^{2im} \cos(w_n\mu) \sin(w_n\mu) + x_n^{2im} \sin^2(w_n\mu)) \Leftrightarrow w_n^2(x-x_0)^2 \quad (4.19)$$

Integrando (4.19) sobre  $\mu$  entre 0 e  $\beta$  dividindo por 2, temos

$$\beta \sum w_n^2 |x_n|^2 \Leftrightarrow \frac{\beta}{4} \sum w_n^2 (x-x_0)^2 \quad (4.20)$$

Substituindo (4.20) em (4.12), chegamos

$$\prod \int \frac{dx_n^{re} dx_n^{im}}{\pi/w_n^2 \beta} \exp \frac{(x-x_0)^2}{2 \cdot (2/\beta w_n)} = \int dx \exp \frac{(x-x_0)^2}{2(\frac{2}{\beta}) \sum \frac{1}{(w_n^2)}} \quad (4.21)$$

e

$$\frac{2}{\beta} \sum \frac{1}{w_n^2} = \frac{2\beta^2}{\beta 4\pi^2} \underbrace{\left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \frac{1}{16} + \frac{1}{25} \dots\right)} \quad (4.22)$$

o termo destacado é igual a  $\frac{\pi^2}{6}$ , de onde concluímos

$$\frac{2}{\beta} \sum \frac{1}{w_n^2} = \frac{\beta}{12} \quad (4.23)$$

Agora definiremos  $\sigma^2 = \frac{\beta}{12}$ , como o fator de espalhamento gaussiano, e a constante de normalização é  $\sqrt{2\pi\sigma^2}$ . A distribuição gaussiana sobre o potencial pode ser escrita então :

$$V_{\sigma^2}(x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) e^{(x-x_0)^2/2\sigma^2} \quad (4.24)$$

o potencial  $V_{\sigma^2}(x_0)$  é chamado de potencial suavizado. Esta aproximação, com o fator  $\sigma^2 = \frac{\beta}{12}$  ainda é equivalente à aproximação original de Feynman[1].

A idéia de Feynman-Kleinert é introduzir um parâmetro de curvatura no potencial[2,9]

$$V[x(\mu)] \equiv \frac{1}{2} \Omega^2(x_0) [x(\mu) - x_0]^2 + \tilde{V}[x(\mu)] \quad (4.25)$$

$\Omega(x_0)$  é um parâmetro variacional introduzido para minimizar a diferença  $(e^{-f}) - e^{(-f)}$ . Isto necessariamente melhora a aproximação original de Feynman, que equivale a  $\Omega(x_0) \equiv 0$ . De (4.12), temos:

$$\int Dx_1(\mu) e^{-\beta \sum_{n=1}^{\infty} [w_n^2 + \Omega^2(x_0)] |x_n|^2} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_n^r dx_n^i}{\pi/w_n^2 \beta} e^{[w_n^2 + \Omega^2(x_0)] |x_n|^2} = \prod_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{w_n^2}{w_n^2 + \Omega^2(x_0)} \right] \quad (4.26)$$

de (38.3) [11] temos

$$\frac{(2\pi\beta^{-1})^2}{((2\pi\beta^{-1})^2 + \Omega^2(x_0))} \times \frac{(2\pi\beta^{-1/2})^2}{((2\pi\beta^{-1/2})^2 + \Omega^2(x_0))} \times \frac{(2\pi\beta^{-1/3})^2}{((2\pi\beta^{-1/3})^2 + \Omega^2(x_0))} \cdots$$

$$\frac{1}{\left[1 + \frac{\Omega^2(x_0)}{(2\pi\beta^{-1})^2}\right]} \times \frac{1}{\left[1 + \frac{\Omega^2(x_0)}{(2\pi\beta^{-1/2})^2}\right]} \times \frac{1}{\left[1 + \frac{\Omega^2(x_0)}{(2\pi\beta^{-1/3})^2}\right]} \cdots = \frac{\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh[\beta\Omega(x_0)/2]} = u \quad (4.27)$$

e a desigualdade (4.13) torna-se

$$e^{-\beta W(x_0)} = u (e^{-\int_0^\beta \tilde{V} d\mu})_1 \geq u e^{-(\int_0^\beta \tilde{V} d\mu)} \equiv e^{-\beta W_1(x_0)} \quad (4.28)$$

onde  $\tilde{V}[x(\mu)] \equiv V[x(\mu)] - \frac{1}{2}\Omega^2(x_0)[x(\mu) - x_0]^2$

De (4.25) e (4.13) o novo potencial obtido por Feynman-Kleinert foi:

$$W_1 = -\frac{1}{\beta} \ln u + \tilde{V}_{\sigma^2}$$

$$= \frac{1}{\beta} \ln \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] + V_{\sigma^2}(x_0) - \frac{1}{2}\Omega^2\sigma^2 \quad (4.29)$$

onde

$$\sigma^2 = \frac{2}{\beta} \sum \frac{1}{(w_n^2 + \Omega^2)} = -\frac{2}{\beta} \frac{\partial \ln u}{\partial \Omega^2} =$$

$$= \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[ \frac{\beta\Omega}{2} \coth \left( \frac{\beta\Omega}{2} \right) - 1 \right] \approx \frac{\beta}{12} \quad (4.30)$$

\* A última igualdade é válida se  $\beta$  tende a zero. Finalmente, otimizando (4.30) com respeito a  $\Omega$ , e (4.29) com respeito a  $\sigma^2$ , derivamos

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial V_{\sigma^2}(x_0)}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial^2 V_{\sigma^2}(x_0)}{\partial x_0^2} \quad (4.31)$$

Verificamos esta igualdade começando com (4.24). A primeira derivada de (4.24) com relação a  $x_0$  é

$$\frac{\partial}{\partial x_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} V(x) e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{[-(2x_0 - 2x)^2]}{2\sigma^2} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} V(x)$$

e a segunda derivada, após as simplificações dá

$$\frac{\partial}{\partial x_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} V(x) \frac{(-x_0 + x)}{\sigma^2} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

---

\* Pode ser vista com ajuda de (37.7) [11]. Expandimos o somatório

$$\begin{aligned} \frac{2}{\beta} \sum \frac{1}{w_n^2 + \Omega^2(x_0)} &= \frac{2}{\beta} \left[ \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^2 + \Omega^2} + \frac{1}{\left(\frac{2\pi 2}{\beta}\right)^2 + \Omega^2} + \frac{1}{\left(\frac{2\pi 3}{\beta}\right)^2 + \Omega^2} + \dots \right] \\ &= \frac{2}{\beta} \left[ \frac{\beta^2/2^2}{\frac{(2\pi)^2 + \Omega^2 \beta^2}{2^2}} + \frac{\beta^2/2^2}{\frac{(2\pi 2)^2 + \Omega^2 \beta^2}{2^2}} + \frac{\beta^2/2^2}{\frac{(2\pi 3)^2 + \Omega^2 \beta^2}{2^2}} + \dots \right] \\ &= \frac{\beta}{2} \left[ \frac{1}{(\pi^2 + \frac{\Omega^2 \beta^2}{2^2})} + \frac{1}{(2\pi)^2 + \frac{\Omega^2 \beta^2}{2^2}} + \frac{1}{(3\pi)^2 + \frac{\Omega^2 \beta^2}{2^2}} + \dots \right] \end{aligned}$$

$x = \frac{\Omega\beta}{2}$ , e multiplicando e dividindo por  $\Omega$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Omega} \left[ \beta\Omega \left( \frac{1}{\pi^2 + x^2} + \frac{1}{(2\pi)^2 + x^2} + \frac{1}{(3\pi)^2 + x^2} + \frac{1}{(4\pi)^2 + x^2} + \dots \right) + \frac{2}{\beta\Omega} - \frac{2}{\beta\Omega} \right] &= \\ = \frac{1}{2\Omega} \left[ \coth \frac{\Omega\beta}{2} - \frac{2}{\beta\Omega} \right] &= \frac{1}{2\Omega\beta\Omega} \left[ \beta\Omega \coth \frac{\beta\Omega}{2} - 2 \right] = \\ = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[ \frac{\beta\Omega}{2} \coth \frac{\Omega\beta}{2} - 1 \right] \end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dxV(x)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \left[ \frac{-1}{\sigma^2} + \frac{(x_0-x)^2}{\sigma^2} \right]$$

Agora, a derivada de (4.24) em relação a  $\sigma^2$  é

$$\frac{\partial}{\partial\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dxV(x)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dxV(x)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \left[ \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2\sigma^2} \right]$$

multiplicando o último resultado por 2 verificamos a igualdade (4.31)

Inserindo  $\sigma^2$  de (4.30), nós vemos que é, em geral, uma equação transcendental para  $\sigma^2$ , que depende de  $x_0$  e  $\beta$ , e deve ser resolvida numericamente. Para o oscilador harmônico a solução é  $\Omega^2(x_0) = w^2$  e a aproximação variacional reproduz a função de partição exata. A densidade normalizada pode ser obtida a partir da aproximação de Feynman-Kleinert [2,12,13]:

$$\rho(x_0) = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[ \frac{-(x_0-x)^2}{2\sigma^2} \right] \frac{e^{-\beta W_1(x)}}{\sqrt{2\pi\beta}} \quad (4.32)$$

Considerando agora a matriz de densidade não normalizada

$$\rho(x_0) = \rho_{par} + \rho_{impar}$$

obeservamos  $\rho_{impar}$  é igual a zero na origem. Então ela satisfaz a condição de contorno para parede rígida na origem. Procuramos eliminar os termos pares de  $\rho(x_0)$ . De (4.32), a nossa aproximação torna-se :

$$\rho_d(x_0) = \frac{1}{Z} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left\{ \exp \left[ \frac{-(x_0-x)^2}{2\sigma^2} \right] - \exp \left[ \frac{-(-x_0-x)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \frac{e^{-\beta W_1(x)}}{\sqrt{2\pi\beta}} \quad (4.33)$$

Observamos que esta adaptação da propriedade da matriz densidade para a aproximação de Feynman-Kleinert satisfaz à condição de contorno para parede rígida na origem, o que não ocorre para a aproximação de Feynman-Kleinert. Podemos chamar (4.33) de aproximação de Feynman-Kleinert adaptada. Uma integração adicional sobre  $x_0$  em (4.33) leva à função partição adaptada.

## Capítulo 5 – Comparação entre os resultados

### 5.1 OSCILADOR HARMÔNICO COM PAREDE RÍGIDA NA ORIGEM

No primeiro exemplo, testaremos a aproximação para o potencial do oscilador harmônico interagindo com uma parede rígida na origem. O potencial é da forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < 0; \\ \frac{1}{2}w^2x^2, & \text{se } x \geq 0. \end{cases} \quad (5.0)$$

#### 5.1.a CÁLCULO EXATO

A solução de autofunções e auto-valores de energia para este potencial é fácil de obter, desde que consideremos somente os auto-valores e autofunções ímpares do caso do oscilador sem parede rígida.

A energia é dada por

$$E_n = \frac{1}{2}\hbar w \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 1, 3, 5, 7 \dots \quad (5.1)$$

e a função partição é da forma:

$$Z_{ex} = \sum_{\substack{n=1 \\ \text{ímpar}}}^{\infty} \exp(-\beta E_n) \quad (5.2)$$

que leva a ( $\hbar = 1$ )

$$Z_{ex} = \frac{e^{\beta w/2}}{e^{2\beta w} - 1} \quad (5.3)$$

Para a densidade de partícula normalizada exata, temos pela definição

$$\rho(x) = Z^{-1} \sum_{\substack{n=1 \\ \text{ímpar}}}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 e^{-\beta E_n} \quad (5.4)$$

com  $\Psi_n(x) = N_n D_n(\sqrt{2wx})$ , onde  $D_n(\sqrt{2wx})$  é a função cilíndrica parabólica [14] e  $N_n$  a constante de normalização. A comparação entre as densidades é feita apenas para o caso

$$N_m = \left\{ \int_0^\infty dx [D_n(\sqrt{2x})]^2 \right\}^{-1/2} \quad (5.5)$$

Usando a seguinte integral

$$\int_{-\infty}^\infty D_n(z) D_m(z) dz = \begin{cases} 0, & \text{se } m \neq n; \\ n!(2\pi)^{1/2}, & \text{se } m=n. \end{cases} \quad (5.6)$$

a constante de normalização fica

$$N_n = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4} \sqrt{n!}} \quad (5.7)$$

A partir da

$$D_n(\sqrt{2x}) = 2^{-n/2} \exp\left[\frac{(\sqrt{2x})^2}{4}\right] H_n(x) \quad (5.8)$$

e

$$H_0(x) = 1 \text{ e } H_1(x) = 2x \quad (5.9)$$

onde  $H_n(x)$  são os polinômios de Hermite [11], temos :

$$D_0(\sqrt{2x}) = e^{-x^2/2} \text{ e } D_1(\sqrt{2x}) = 2\sqrt{2x}e^{-1/2} \quad (5.10)$$

Através da relação de recorrência :

$$D_{p+1}(\sqrt{2x}) = \sqrt{2x} D_p(\sqrt{2x}) - p D_{p-1}(\sqrt{2x}) \quad (5.11)$$

e (5.9) podemos calcular  $D_n(\sqrt{2x})$  para  $n \geq 2$ . Substituindo os resultados na (5.4) obtemos a densidade normalizada e exata.

### 5.1.b CÁLCULO SEMI-CLÁSSICO

Ainda para o caso do oscilador harmônico com parede rígida, temos a aproximação semi-clássica que leva a:

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_0^{\infty} e^{-\beta w^2 x^2/2} = \frac{1}{2\beta w} \quad (5.12)$$

### 5.1.c APROXIMAÇÃO DE FEYNMAN-KLEYNERT

Os procedimentos para se calcular  $Z$  pela aproximação de Feynman - Kleynert podem ser resumidos como segue [2,5]:

A-Calculamos a versão suavizada do potencial

$$V_{\sigma^2}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx' V(x') e^{-(x-x')^2/2\sigma^2}}{\sqrt{(2\pi\sigma^2)}} \quad (5.13)$$

onde o termo  $\sigma^2$  é dado por :

$$\sigma^2 = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[ \frac{1}{2}\beta\Omega \coth\left(\frac{\beta\Omega}{2}\right) - 1 \right] \quad (5.14)$$

B-Calculamos o parâmetro auto-consistente:

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial V_{\sigma^2}(x_0)}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial^2 V_{\sigma^2}(x_0)}{\partial x_0^2} \quad (5.15)$$

C- O potencial efetivo é dado por:

$$W_1(x) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] - \frac{\Omega^2\sigma^2}{2} + V_{\sigma^2}(x) \quad (5.16)$$

de onde tiramos

$$Z_{F-K} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\beta W_1(x)) \quad (5.17)$$

Aplicando o algoritmo para o potencial do oscilador com parede rígida, temos:



## A- Potencial suavizado

$$V_{\sigma^2}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_0^\infty dx' \frac{1}{2} u^2 x^2 \exp\left(\frac{-(x-x')^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5.18)$$

Fazendo  $w = 1$  e a mudança de variáveis na (5.18)

$$\begin{cases} x' - x = u & , du = dx'; \\ x' = u + x & \text{e se } x' = 0 \rightarrow u = -x. \end{cases}$$

chegamos à expressão

$$\begin{aligned} \int_{-x}^\infty \frac{du}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{2} (u+x)^2 \exp\left[\frac{-u^2}{2\sigma^2}\right] &= \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{2} (u^2 + 2ux + x^2) e^{-u^2/2\sigma^2} \\ &+ \int_{-x}^0 \frac{du}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{2} (u^2 + 2ux + x^2) e^{-u^2/2\sigma^2} \end{aligned} \quad (5.19)$$

Resolvendo estas integrações, obtemos

$$V_{\sigma^2}(x) = \frac{\sqrt{2}\sigma x e^{-x^2/2\sigma^2}}{4\sqrt{\pi}} + \left[\frac{x^2 + \sigma^2}{4}\right] \left\{1 + \operatorname{erf}\left[\frac{\sqrt{2}x}{2\sigma}\right]\right\} \quad (5.20)$$

Onde  $\operatorname{erf}(x)$  é a função erro [11]. Quando  $x$  é grande temos  $V_{\sigma^2}(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}\sigma^2$

## B- Parâmetro auto-consistente

A primeira derivada do potencial (5.20) em relação a  $x$  leva a :

$$\frac{\partial}{\partial x} V_{\sigma^2}(x) = \frac{x}{2} + \frac{\sqrt{2}e^{-x^2/2\sigma^2}}{2\sqrt{\pi}} + \frac{1}{2}x \operatorname{erf}\left[\frac{\sqrt{2}x}{2\sigma}\right] \quad (5.21)$$

Derivamos (5.21) em relação a  $x$  e obtemos finalmente :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} V_{\sigma^2}(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left[\frac{\sqrt{2}x}{2\sigma}\right] = \Omega^2(x) \quad (5.22)$$

observamos que  $\frac{\sqrt{2}}{2} \leq \Omega \leq 1$ , quando  $x = 0$  e  $x = \infty$  ocorrem as igualdades da esquerda e direita, respectivamente.

### C-Potencial Efetivo

Substituindo (5.20) e (5.22) na (5.16) obtemos finalmente o potencial efetivo.

$$W_1(x) = \frac{1}{\beta} \log \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] + \frac{x^2}{4} + \frac{x^2}{4} \operatorname{erf} \left[ \frac{\sqrt{2}x}{2\sigma} \right] + \frac{\sqrt{2}\sigma e^{-x^2/2\sigma^2}}{4\sqrt{\pi}} \quad (5.23)$$

#### 5.1d APROXIMAÇÃO PARA PAREDE RÍGIDA

Para aplicarmos a aproximação de (4.33) para densidade, começamos com o potencial do oscilador harmônico e repetimos os procedimentos A,B e C para calcular  $W_1(x)$ . Evidentemente, uma integração adicional sobre  $x_0$  leva à função partição .

#### 5.2 POTENCIAL LINEAR COM PAREDE RÍGIDA NA ORIGEM

O segundo exemplo é um potencial linear interagindo com uma parede rígida na origem. O potencial é da forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < 0; \\ ax, & \text{se } x \geq 0. \end{cases} \quad (5.24)$$

##### 5.2.a CÁLCULO EXATO

Nós consideramos a equação de Schrodinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + ax\Psi = E\Psi \quad (5.25)$$

Introduzindo a nova variável adimensional

$$X = \left( \frac{2ma}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} x \quad (5.26)$$

e o parâmetro real

$$\alpha = \left( \frac{2m}{\hbar^2 a^2} \right)^{\frac{1}{3}} E \quad (5.27)$$

nós podemos transformar (5.25) em

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + (\alpha - X)\Psi = 0 \quad (5.28)$$

As condições de contorno são :  $\Psi(x)$  tende a zero quando  $x$  tende a infinito e  $\Psi(0) = 0$

A equação (5.28) pode ser reescrita:

$$\frac{d^2\Psi}{dX^2} + Q^2(X)\Psi = 0 \quad (5.29)$$

onde  $Q^2(X) = \alpha - X$ . A solução exata de (5.29) é dada pela função de Airy [15]

$$\Psi = A_i(X - \alpha) \quad (5.30)$$

a menos de uma constante arbitrária. De acordo com as condições de quantização , nós temos:

$$A_i(-\alpha) = 0 \quad (5.31)$$

para estados ímpares.

Os primeiros auto-valores estão tabelados[16] e para os níveis mais altos podemos usar a aproximação que segue [15]:

$$A_i(-X) = X^{1/4} [f_1(\xi) \cos(\xi) + f_2(\xi) \sin(\xi)] \quad (5.32)$$

aqui  $f_1(\xi)$  e  $f_2(\xi)$  são

$$f_1(\xi) \cong f_2(\xi) \cong 0.3989423 = C \quad (5.33)$$

e  $\xi$  é dado por

$$\xi = \frac{2}{3} X^{3/2}$$

Com isto , temos

$$A_i(-\alpha) = \alpha^{1/4} [C \cos(\frac{2}{3}\alpha^{3/2}) + C \sin(\frac{2}{3}\alpha^{3/2})] \quad (5.34)$$

e o auto-valores satisfazem à equação :

$$\cos\left(\frac{2}{3}\alpha^{\frac{2}{3}}\right) = -\sin\left(\frac{2}{3}\alpha^{\frac{2}{3}}\right) \quad (5.35)$$

de onde tiramos

$$\frac{2}{3}\alpha^{\frac{2}{3}} = \left(\frac{3\pi}{4} + n\pi\right) \quad (5.36)$$

e isolamos  $\alpha$

$$\alpha = \left[\frac{3}{2}\left(\frac{3\pi}{4} + n\pi\right)\right]^{2/3} \quad (5.37)$$

De (5.27) temos

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2 a^2}\right)^{\frac{1}{3}} E_n = \left[\frac{3}{2}\left(\frac{3\pi}{4} + n\pi\right)\right]^{\frac{2}{3}} \quad (5.38)$$

e finalmente

$$E_n = \left(\frac{2m}{\hbar^2 a^2}\right)^{-\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{2}\left(\frac{3\pi}{4} + n\pi\right)\right]^{\frac{2}{3}} \quad (5.39)$$

Para o caso  $m = \hbar = 1$ , temos :

$$E_n = \left(\frac{2}{a^2}\right)^{-\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{2}\left(\frac{3\pi}{4} + n\pi\right)\right]^{\frac{2}{3}} \quad (5.40)$$

que usaremos para calcular a função partição exata.

### 5.2.b CÁLCULO SEMI-CLÁSSICO

No cálculo semi-clássico da função partição temos

$$Z_{cl} = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp(-\beta ax) = \frac{\Gamma(1)}{\sqrt{2\pi\beta}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta} a} \quad (5.41)$$

### 5.2.c APROXIMAÇÃO FEYNMAN-KLEINERT

Para termos a aproximação F-K repetiremos os procedimentos A, B e C.

A-Potencial Suavizado

De (5.13) e (5.24) temos

$$V_{\sigma^2}(x) = \int_0^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} ax' \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{2\sigma^2}\right]$$

$$V_{\sigma^2}(x) = \frac{ae^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{2}ax\operatorname{erf}\left[\frac{x}{\sqrt{2}\sigma}\right] + \frac{ax}{2} \quad (5.42)$$

B Parâmetro auto-consistente

A partir da (5.42) temos

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}V_{\sigma^2}(x) = \frac{\sqrt{2}ae^{-x^2/2\sigma^2}}{2\sigma\sqrt{\pi}} = \Omega^2 \quad (5.43)$$

C-Potencial Efetivo

Substituindo (5.42) e (5.43) na (5.16) chegamos

$$W_1(x) = \frac{1}{\beta} \ln \left[ \frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] + \frac{ae^{-x^2/2\sigma^2}\sigma}{2\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{2}ax\operatorname{erf}\left[\frac{x}{\sqrt{2}\sigma}\right] + \frac{1}{2}ax \quad (5.44)$$

no limite  $x \rightarrow \infty$   $W_1(x) \rightarrow ax$

## 5.2d APROXIMAÇÃO PARA PAREDE RÍGIDA

Nesse caso, o potencial utilizado é do tipo

$$V(x) = ax \quad (5.45)$$

e calculamos apenas a função partição com a integração sobre  $x$  e  $x_0$  de (4.33).

## COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS

As comparações entre resultados são mostrados nas figuras e tabelas. As tabelas mostram uma comparação entre as funções partição exatas e obtidas pelas aproximações estudadas, para diversos valores de  $\beta$ . Na notação utilizada  $Z_a$  indica a função partição calculada pelo método adaptado para potenciais com parede rígida. Observamos que esta adaptação melhora os resultados para função partição. As três primeiras tabelas fazem a comparação para o oscilador com parede rígida e as três últimas para o potencial linear.

**TABELA 1  $w=1$** 

$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.50	0.747273	0.986678	0.8985896
1.00	0.2580539	0.4799233	0.3945586
2.50	$2.36773 \cdot 10^{-2}$	0.1637728	$9.633681 \cdot 10^{-2}$
5.00	$5.531117 \cdot 10^{-4}$	$4.281252 \cdot 10^{-2}$	$1.78984 \cdot 10^{-2}$

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com  $w = 1$

**TABELA 2  $w=0.5$** 

$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.50	1.746742	1.994803	1.9024026
1.00	0.7472729	0.9897074	0.899268
2.50	0.1670689	0.381738	0.2938602
5.00	$2.367733 \cdot 10^{-2}$	0.1593551	$9.649185 \cdot 10^{-2}$

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com  $w = 0.5$

**TABELA 3  $w=0.2$** 

$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.50	4.748229	4.997921	4.905456
1.00	2.247083	2.495847	2.4046621
2.50	0.747273	0.9912089	0.9000782
5.00	0.2580542	0.4805976	0.3952687

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado para oscilador com parede rígida com  $w = 0.2$

**TABELA 4 a=1**

$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.50	0.9054782	0.9925736	0.992317
1.00	0.2156648	0.3205455	0.3015027
2.50	$9.98270 \cdot 10^{-3}$	$4.854522 \cdot 10^{-2}$	0.036524
5.00	$9.345817 \cdot 10^{-5}$	$5.688524 \cdot 10^{-3}$	$1.85428 \cdot 10^{-3}$

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado potencial linear com parede rígida com  $a = 1$

**TABELA 5 a=0.5**

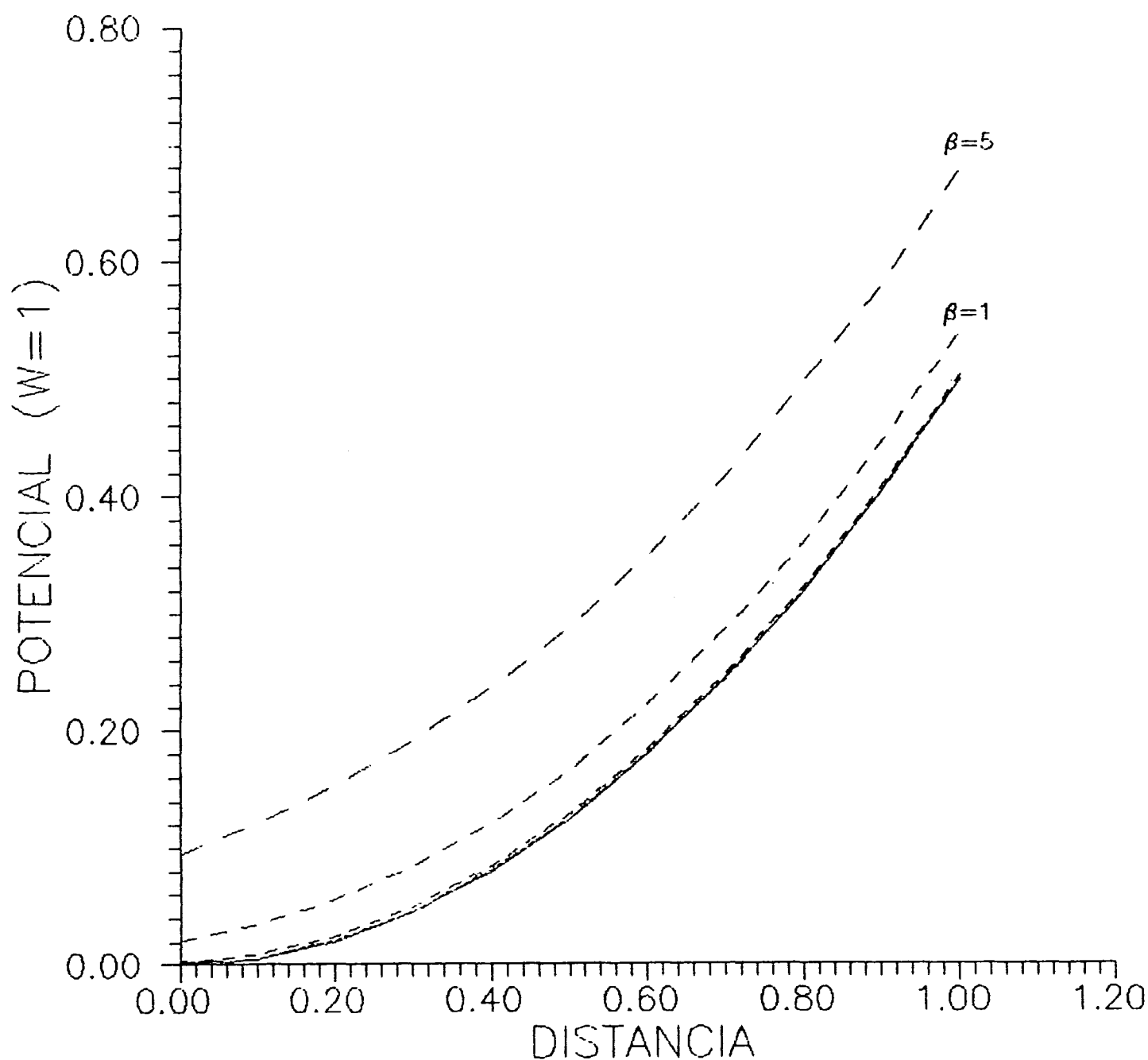
$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.20	8.674432	8.737352	8.698212
1.00	0.536176	0.7123175	0.6983665
2.50	$6.110877 \cdot 10^{-2}$	0.1443883	0.1294591
5.00	$2.931035 \cdot 10^{-3}$	$3.108553 \cdot 10^{-2}$	$1.869711 \cdot 10^{-2}$

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado potencial linear com parede rígida com  $a = 0.5$

**TABELA 6 a=0.2**

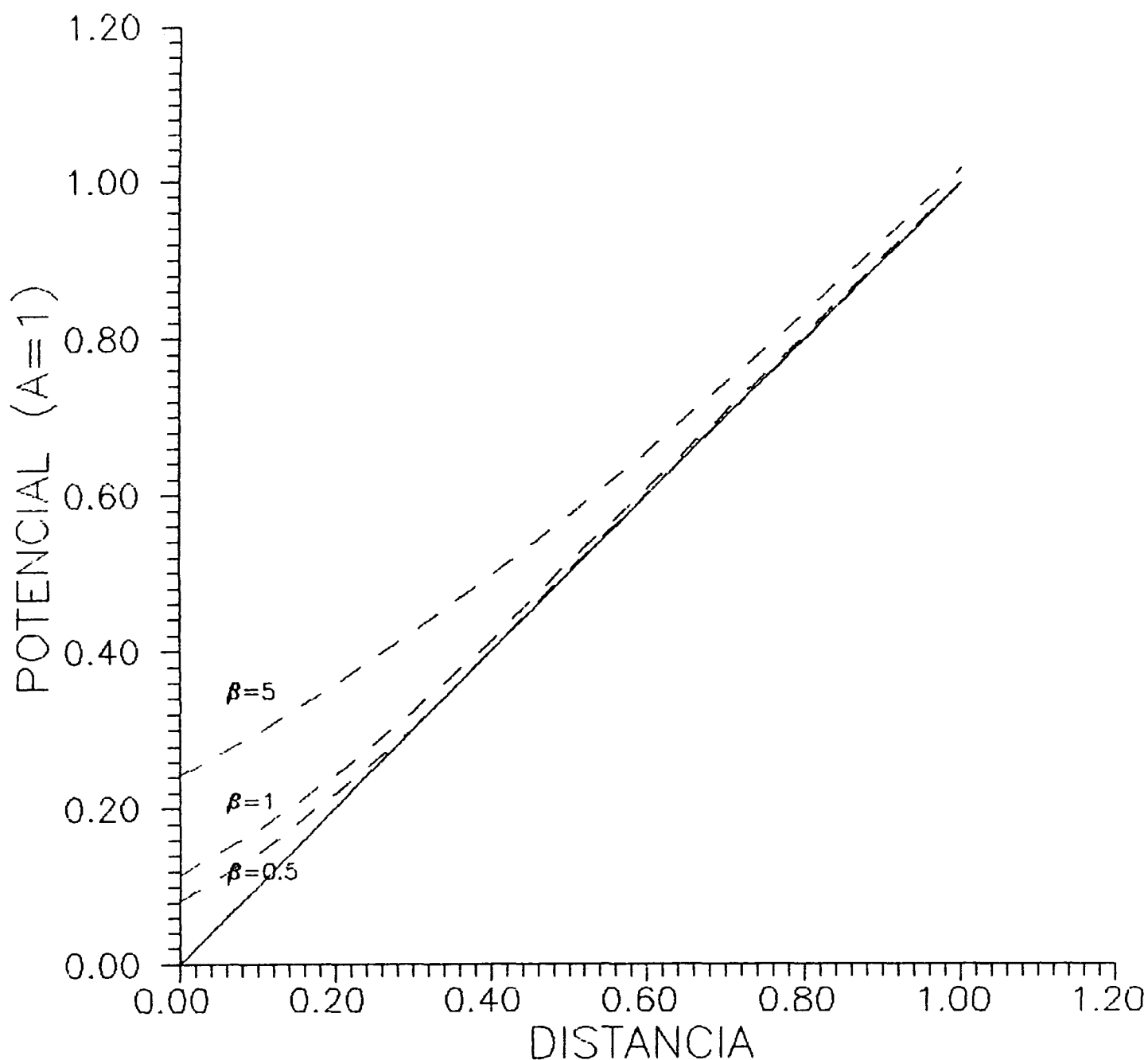
$\beta$	$Z_{ex}$	$Z_{F-K}$	$Z_a$
0.30	11.89223	11.96125	11.95877
1.00	1.760594	1.915541	1.894585
2.50	0.3097244	0.4441557	0.4337039
5.00	$4.644413 \cdot 10^{-2}$	0.1421062	0.1156933

Comparação entre função partição exata, de Feynman-Kleinert e método adaptado potencial linear com parede rígida com  $a = 0.2$



**Fig 5.1** Potencial clássico efetivo para o oscilador harmônico mais parede rígida para diversos valores de  $\beta$ . A linha contínua representa o potencial clássico





**Fig 5.2** Potencias clássicos efetivos (linhas tracejadas) de um potencial linear mais parede rígida na origem, para varios valores de  $\beta$ . O potencial clássico está representado pela linha contínua

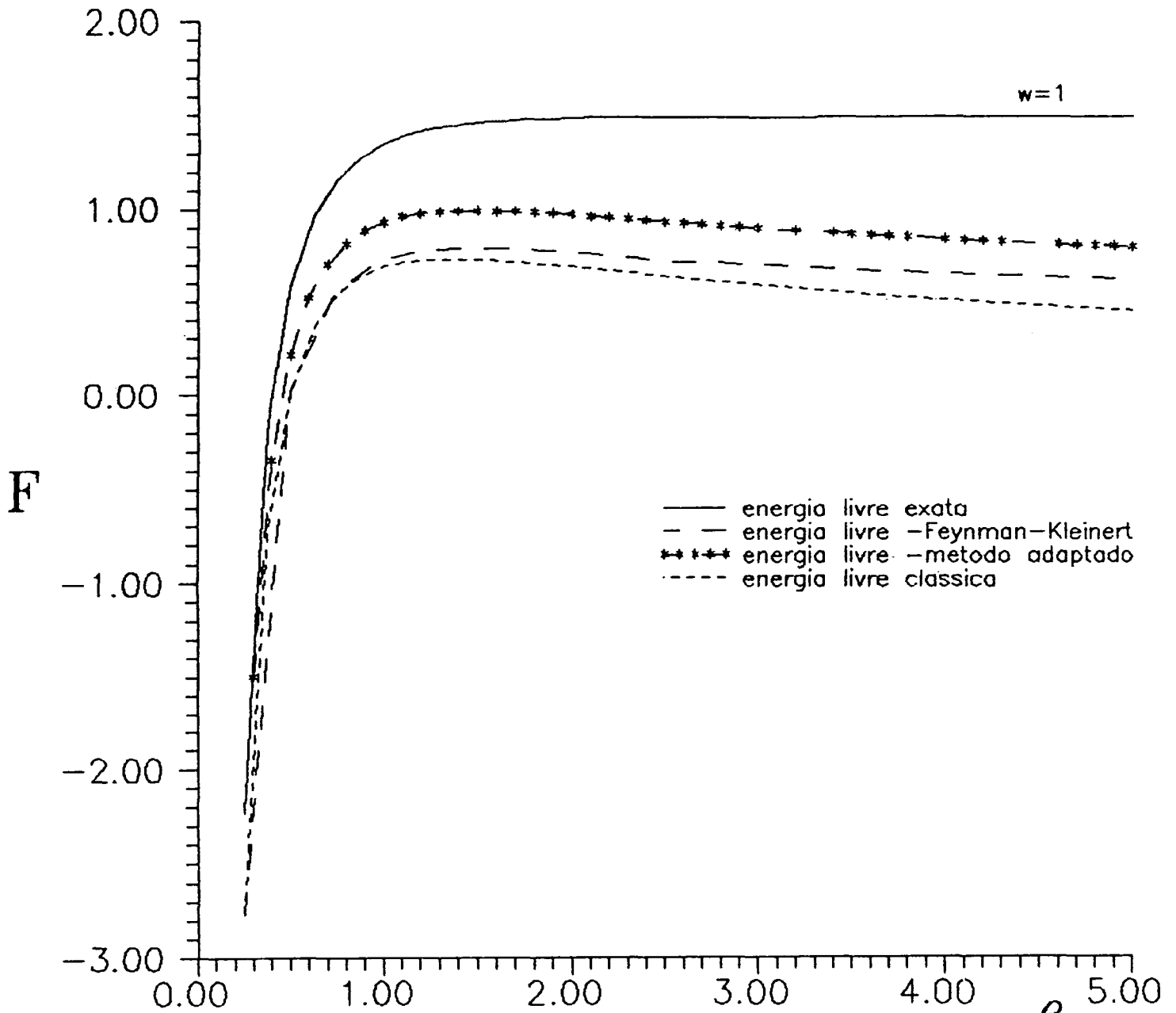


Fig 5.3 Comparação entre energias livres no oscilador harmônico com  $\beta$  parede na origem para  $w = 1$

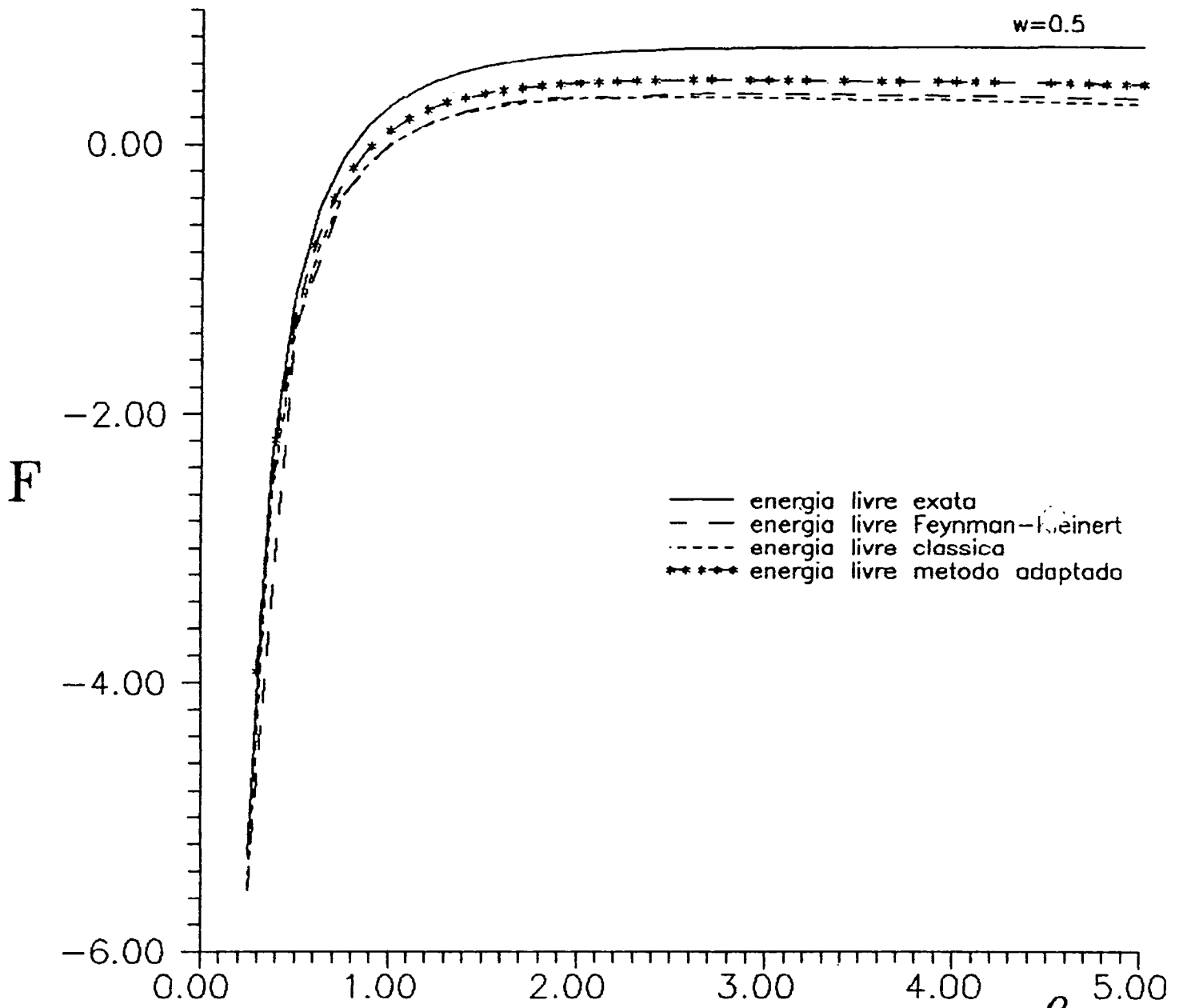
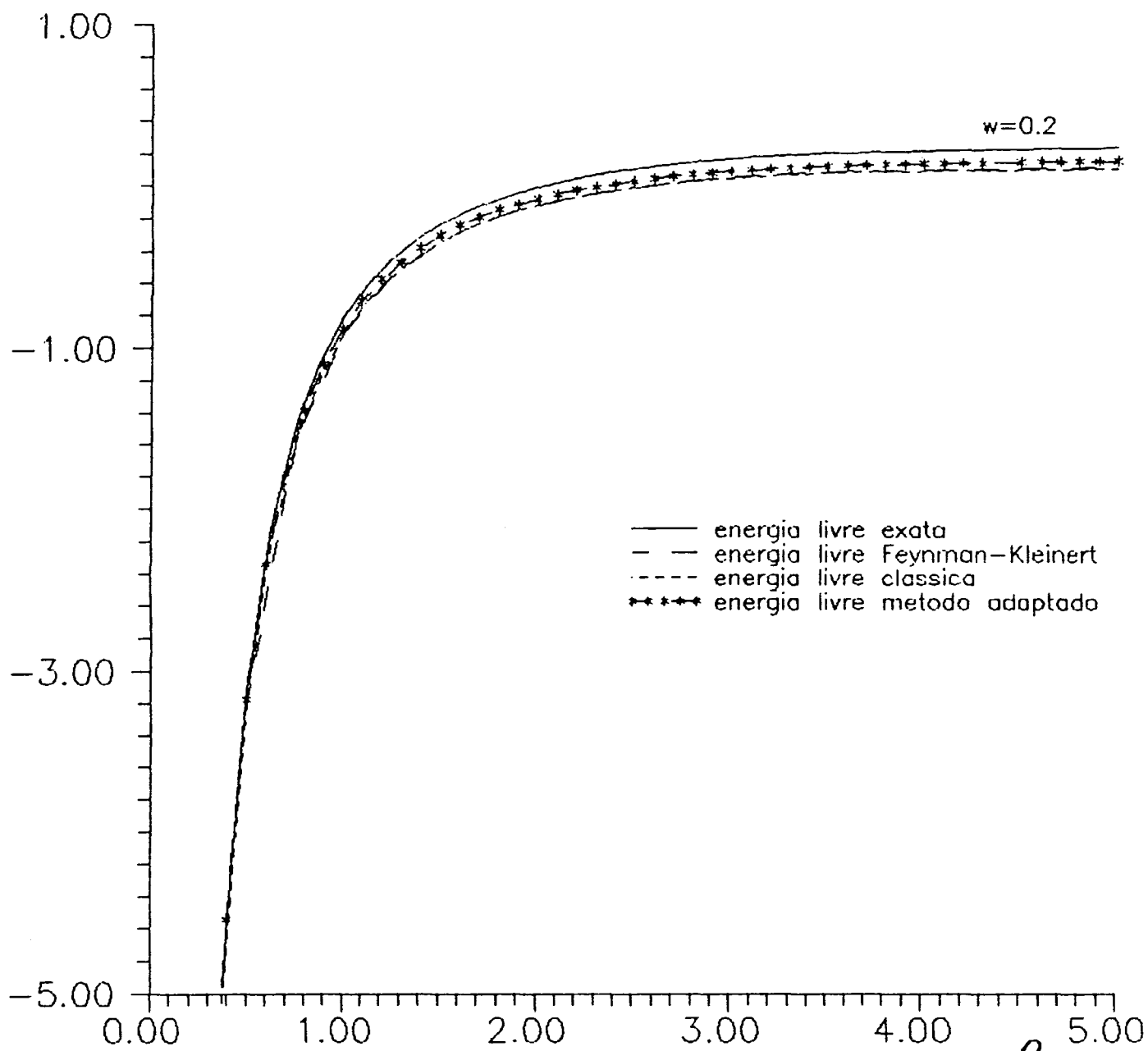


Fig 5.4 Comparação entre energias livres no oscilador harmônico com parede na origem para  $w = 0.5$



**Fig 5.5** Comparação entre energias livres no oscilador harmônico com parede na origem para  $w = 0.2$

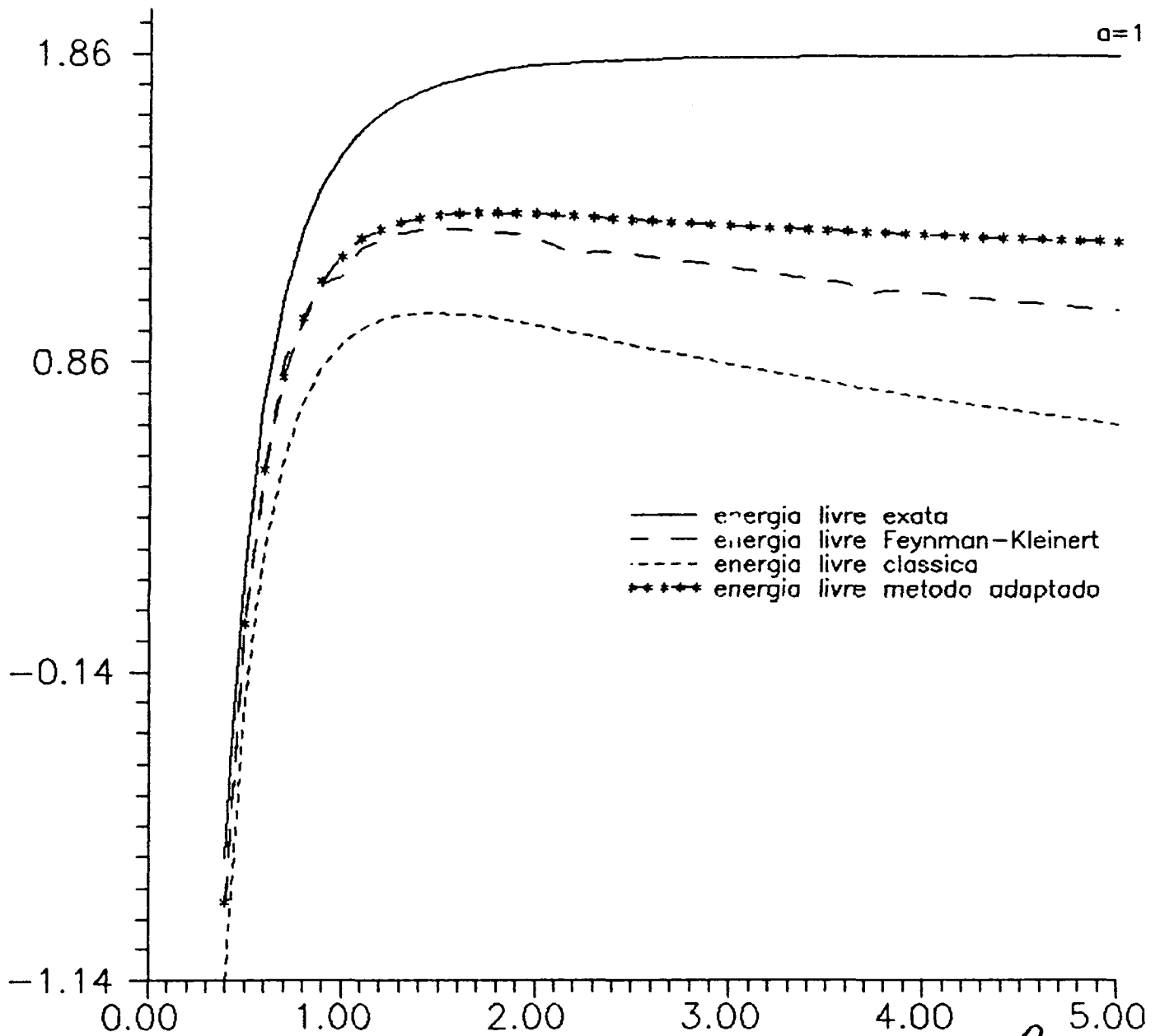
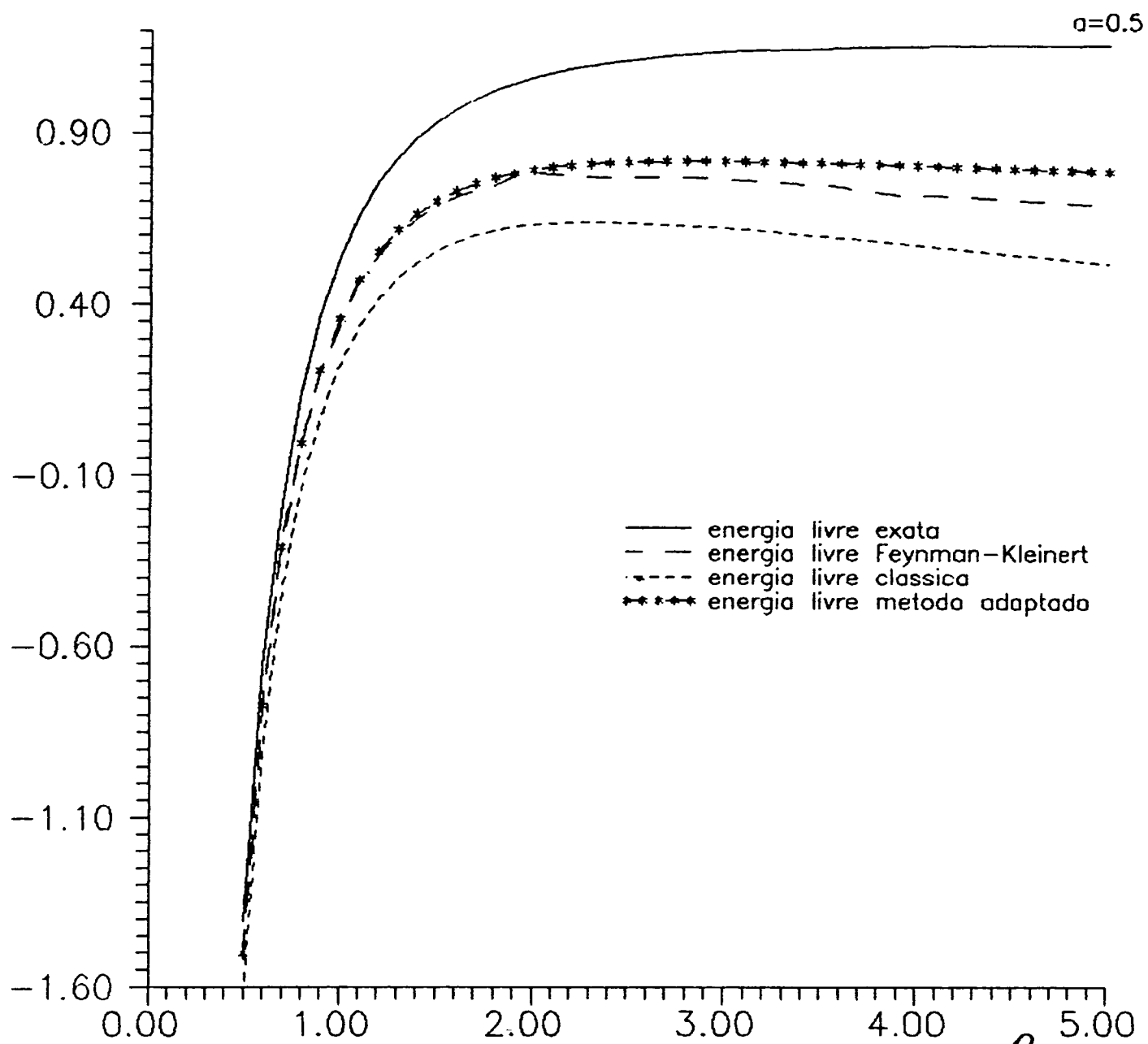


Fig 5.6 Comparação entre energias livres no potencial linear com parede na origem para  $a = 1$



**Fig 5.7** Comparação entre energias livres no potencial linear com parede na origem para  $a = 0.5$

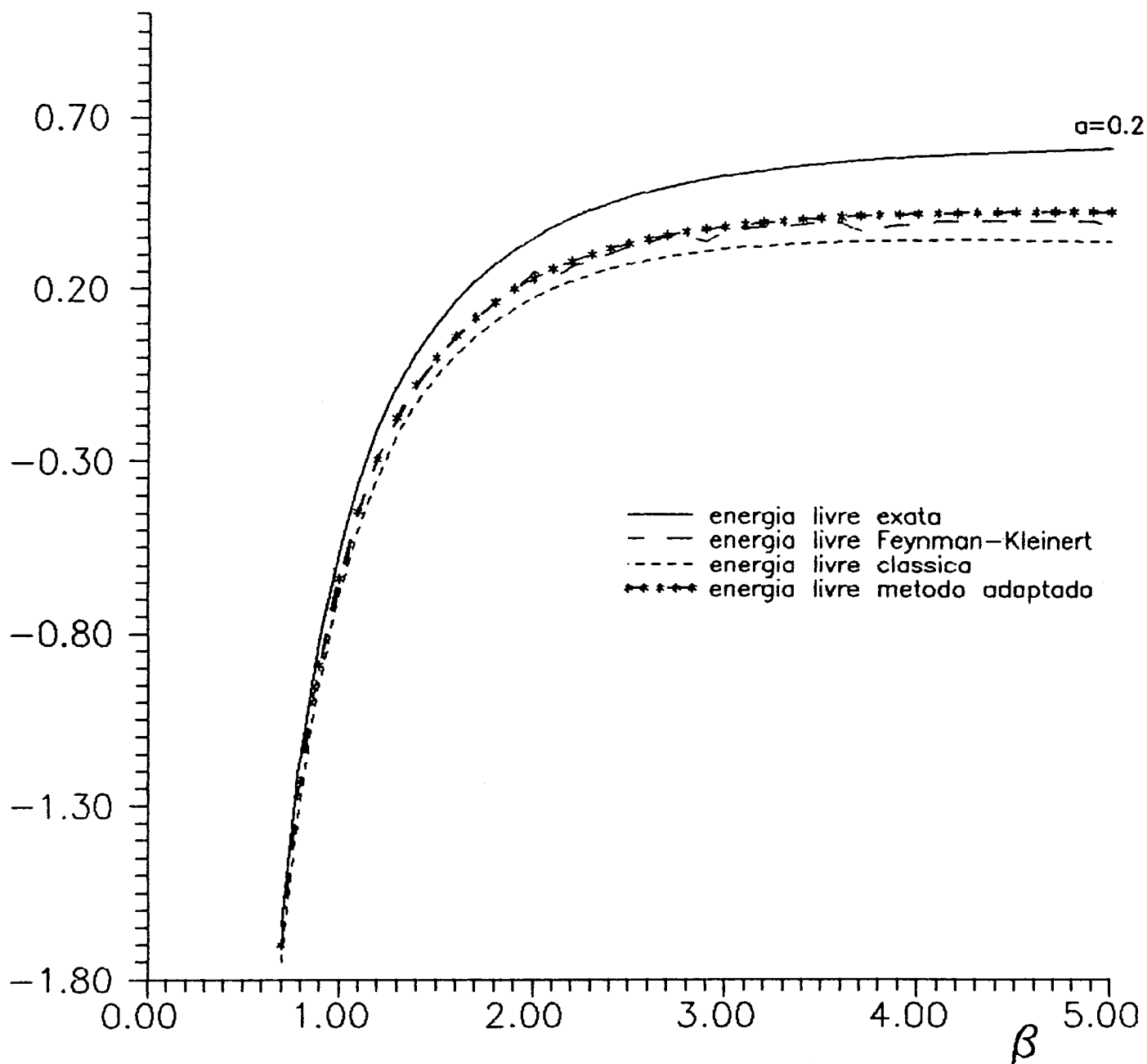


Fig 5.8 Comparação entre energias livres no potencial linear com parede na origem para  $\alpha = 0.2$

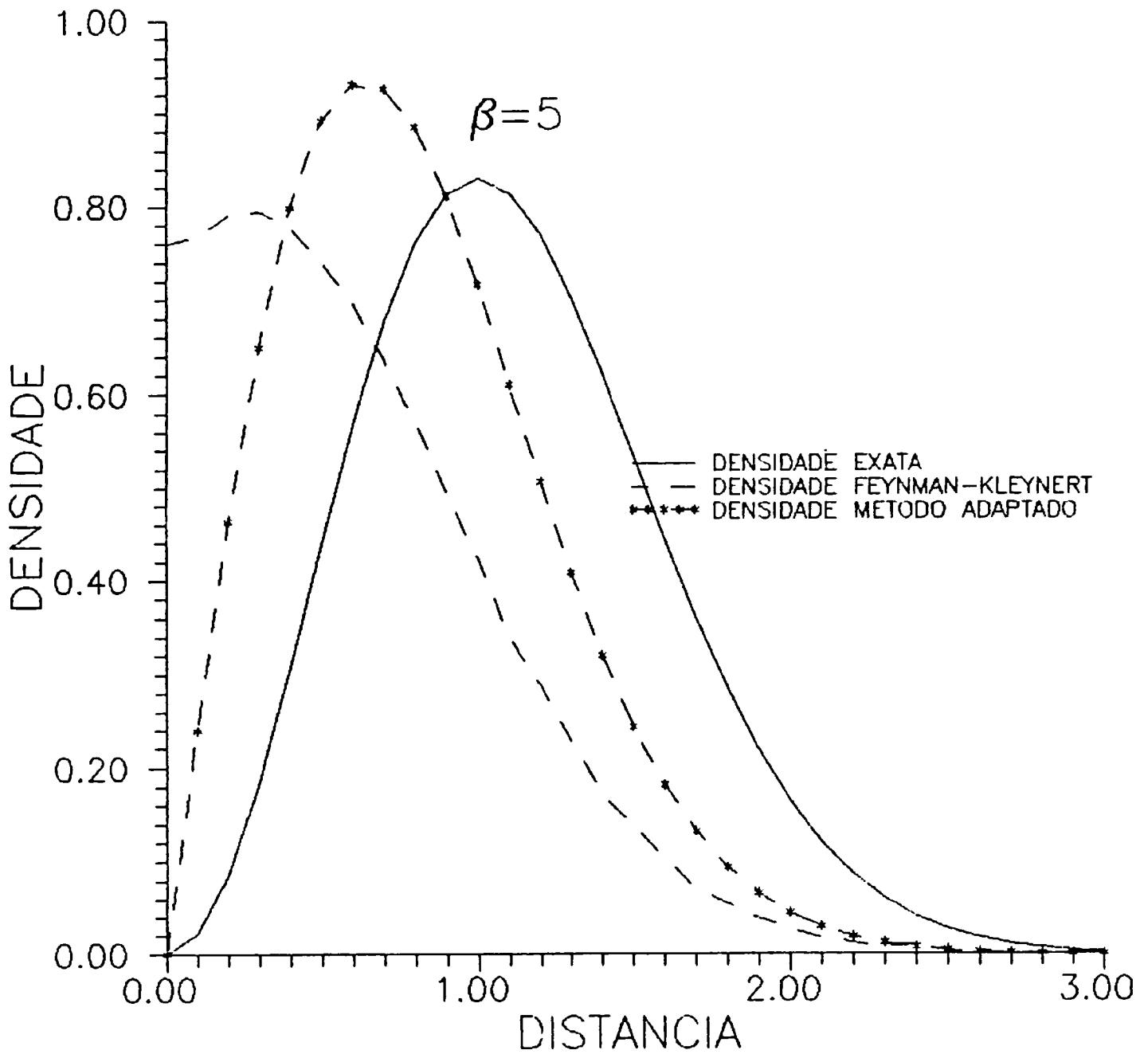


Fig 5.9 Comparação entre densidades normalizadas no oscilador com  $w = 1$  e  $\beta = 5$



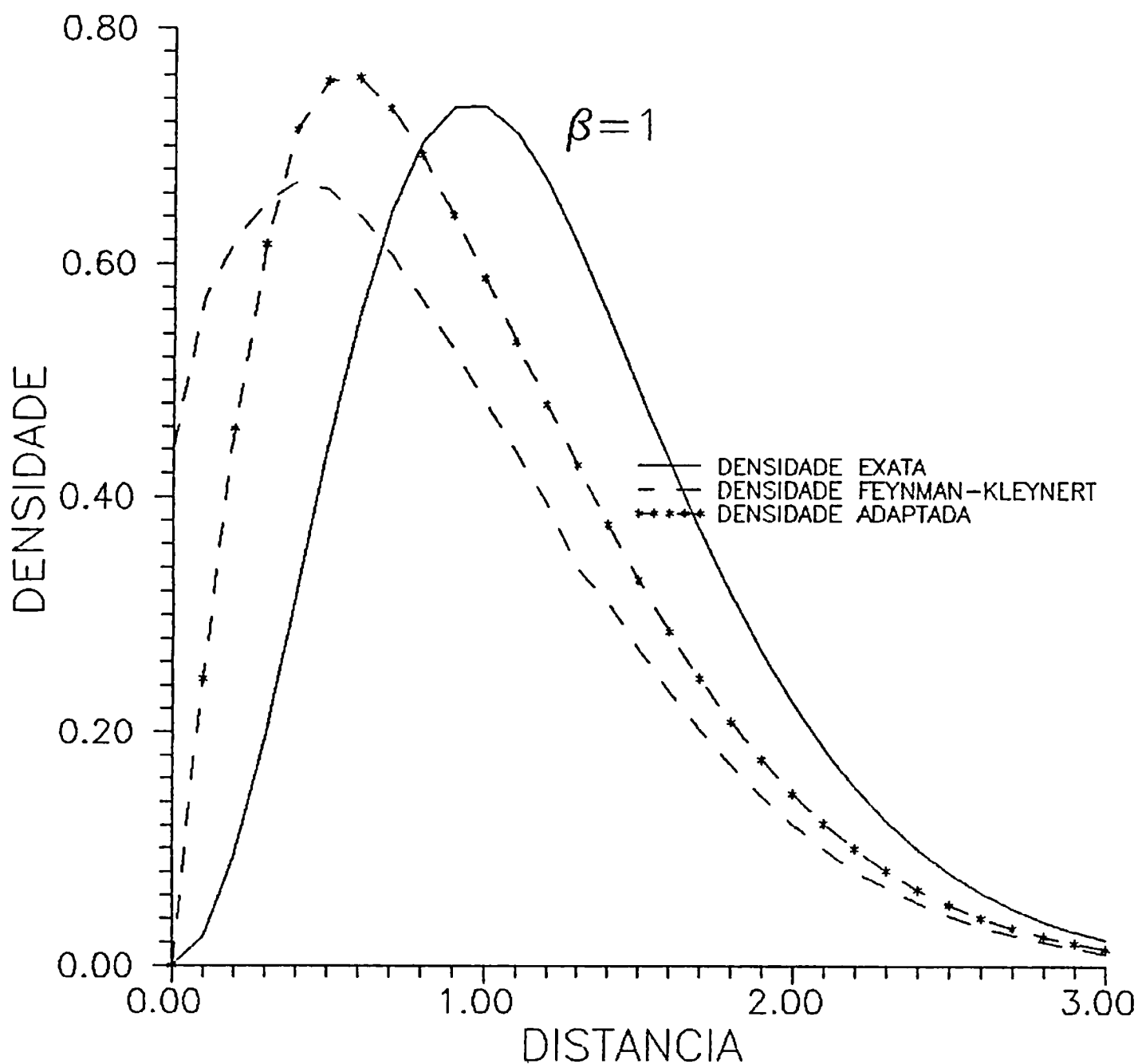


Fig 5.10 Comparação entre densidades normalizadas no oscilador com  $w = 1$  e  $\beta = 1$

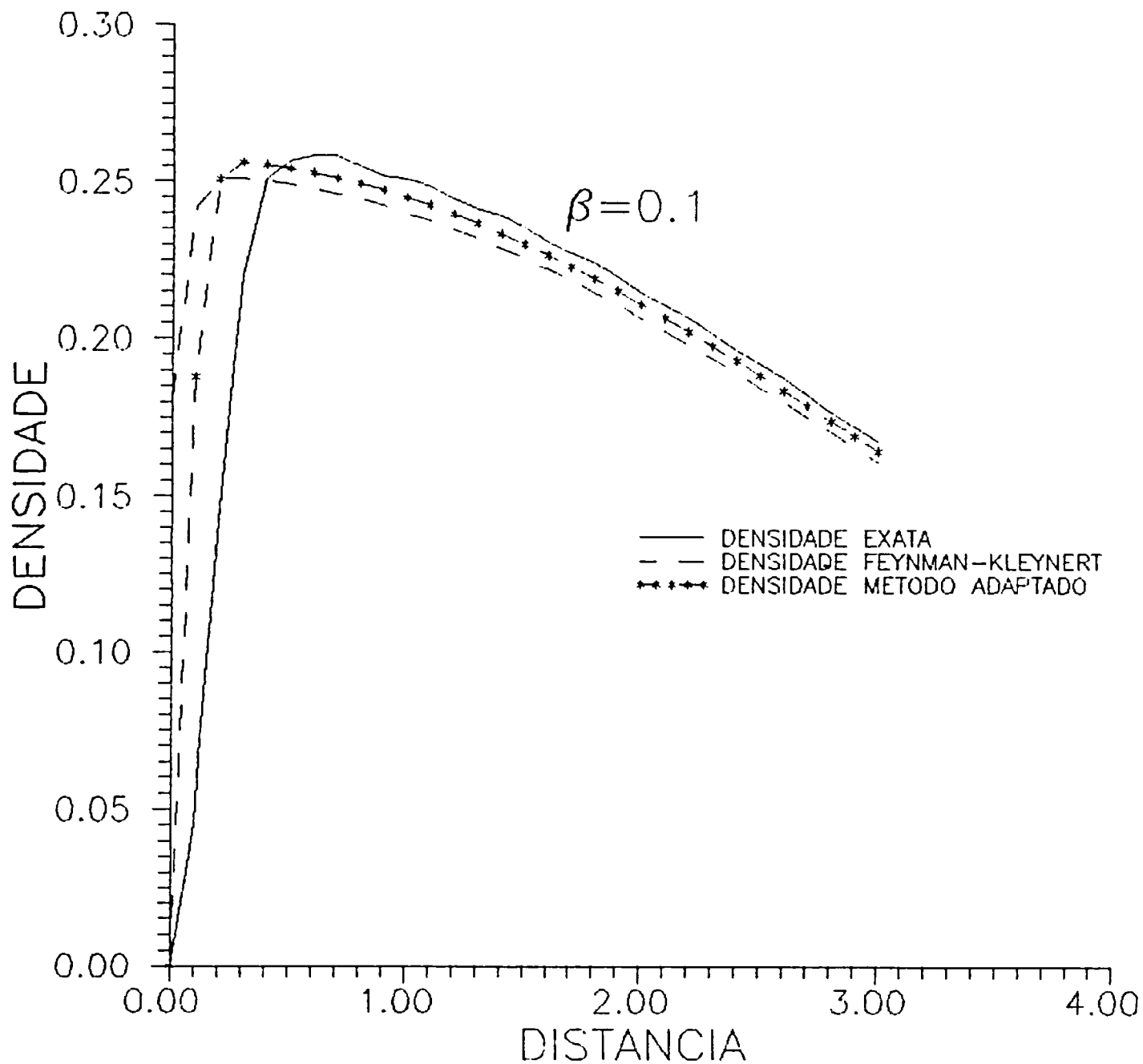


Fig 5.11 Comparação entre densidades normalizadas no oscilador com  $w = 1$  e  $\beta = 0.1$

## Conclusões

A aproximação de Feynman-Kleinert já foi analisada apresentando resultados bons para potenciais suaves [3,4] e razoáveis para potências com singularidades não muito fortes [5]

Fisicamente, a aproximação de Feynman-Kleinert é melhor que a semi-clássica porque leva as flutuações quânticas em conta. Nós podemos ver isto na comparação entre os potenciais clássicos e clássicos efetivos: com o potencial clássico, a menor energia que a partícula pode ter é zero; a menor energia no potencial efetivo é um pouco mais alta, portanto mais próxima do estado fundamental da mecânica quântica.

Para os casos estudados os resultados podem ser resumidos da seguinte forma:

(a) A faixa de temperaturas, ou melhor, inverso de temperatura para o qual a aproximação pode ser considerada boa vai até  $\beta \cong 1$ , em geral.

(b) Observamos que quanto mais suave o potencial, por exemplo,  $w = 0, 2$  ou  $a = 0, 2$ , a diferença entre os resultados exatos, aproximação de Feynman-Kleinert e semi-clássica torna-se menor. Podemos atribuir isto ao fato de a condição  $\frac{1}{\beta} \gg \Delta\epsilon$  ser válida numa faixa maior de temperatura ( $\Delta\epsilon$  torna-se menor).

(c) Quanto à densidade, pelos exemplos estudados podemos concluir que para potenciais com parede rígida, a aproximação de Feynman-Kleinert não apresenta resultados satisfatórios, devido ao fato de termos uma singularidade muito forte. Acreditamos ser esta singularidade a causa também da aproximação ser válida numa faixa menor de temperatura.

Propomos a densidade adaptada  $\rho_d$  que satisfaz a condição de contorno na origem ( $\rho(x) = 0$ ) e obtemos resultados melhores que os da aproximação de Feynman-Kleinert.

## APÊNDICE A

Este apêndice tem por objetivo dar uma visão geral de como são obtidas as ações clássicas e os propagadores para os casos que são usados no texto. As passagens não são feitas detalhadamente, por serem manipulações algébricas simples, porém trabalhosas.

**A.1. Ação clássica e propagador para uma partícula sob a ação de uma força constante.**

A lagrangeana tem a forma

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \mathcal{F}x \quad (A.1)$$

A equação de Euler-Lagrange leva a

$$\ddot{x} = \frac{\mathcal{F}}{m} \quad (A.2)$$

cuja solução é :

$$x_{cl}(t) = x_0 + v_0t + \frac{\mathcal{F}t^2}{2m} \quad (A.3)$$

onde  $x_{cl}(t=0) = x_0$  e  $\dot{x}_{cl}(t=0) = V_0$  são as condições iniciais.

Usando (A.3) obtemos

$$L_{cl} = \frac{1}{2}mv_0^2 + \mathcal{F}x_0 + 2\mathcal{F}v_0t + \frac{\mathcal{F}^2t^2}{m} \quad (A.4)$$

No entanto, devemos escrever  $L_{cl}$  em termos das condições de dois pontos  $x(t_a) = x_a$  e  $x(t_b) = x_b$ . Mostramos as relações

$$v_0 = \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} - \frac{\mathcal{F}}{2m}(t_b + t_a) \quad (A5a)$$

$$x_0 = \frac{x_a t_a - x_b t_a}{t_b - t_a} + \frac{\mathcal{F}t_a t_b}{2m} \quad (A.5b)$$

que substituídas em (A.4) e integradas no tempo nos fornecem a ação clássica desejada.

$$S_{cl} = \frac{1}{2}m \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} + \frac{f}{2}(x_a + x_b)(t_b - t_a) - \frac{f^2}{24m}(t_b - t_a)^3 \quad (A.6)$$

o fator pré-exponencial é dado pela fórmula de Van Vleck- Pauli:

$$F(T) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar i} \left( \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial x_b} S_{cl} \right)} \quad (A.7)$$

$$F(T) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \quad (A.8)$$

onde  $T = t_b - t_a$

O propagador é

$$K = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{1}{2}fT(x_a + x_b) - \frac{f^2 T^3}{24m} \right] \right\} \quad (A.9)$$

## A.2. Oscilador Harmônico Simples

A lagrangeana é dada por

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 \quad (A.10)$$

Aplicando a equação de Euler-Lagrange obtemos

$$\ddot{x}_{cl} + \omega^2 x_{cl} = 0 \quad , \omega^2 = \frac{k}{m} \quad (A.11)$$

cuja solução geral pode ser escrita na forma

$$x_{cl}(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \quad (A.12)$$

Aplicando as condições de dois pontos  $x(t_b) = x_b$  e  $x(t_a) = x_a$ , obtemos

$$A = \frac{x_a \sin \omega t_b - x_b \sin \omega t_a}{\sin \omega (t_b - t_a)} \quad (A.13a)$$

$$B = \frac{x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b}{\sin \omega (t_b - t_a)} \quad (A.13b)$$

que substituídas em (A.12) nos permite escrever

$$x_{cl} = \frac{x_a \text{sen}w(t_b - t) - x_b \text{sen}w(t - t_a)}{\text{sen}wT} \quad (\text{A.14})$$

Por outro lado, a ação clássica pode ser escrita como

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_{t_a}^{t_b} L_{cl} dt = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} m (\dot{x}_{cl}^2 - w^2 x_{cl}^2) dt \\ &= \frac{1}{2} m x_{cl} \dot{x}_{cl} \Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{1}{2} m \int_{t_a}^{t_b} (\ddot{x}_{cl} + w^2 x_{cl}) x_{cl} dt \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

onde fizemos uma integração por partes na obtenção de (A.15). Utilizando a equação de movimento (A.11) temos então :

$$S_{cl} = \frac{1}{2} m [x_{cl}(t_b) \dot{x}_{cl}(t_b) - x_{cl}(t_a) \dot{x}_{cl}(t_a)] \quad (\text{A.16})$$

Usando adequadamente as equações (A.12) e (A.13) em (A.16) encontramos finalmente que:

$$S_{cl} = \frac{mw}{2\text{sen}wT} [(x_a^2 + x_b^2) \cos wT - 2x_a x_b] \quad (\text{A.17})$$

onde  $T = t_b - t_a$ .

O fator pré-exponencial, obtido por (A.7) é:

$$F(T) = \sqrt{\frac{mw}{2\pi i \hbar \text{sen}wT}}$$

e o propagador procurado é:

$$K = \sqrt{\frac{mw}{2\pi i \hbar \text{sen}wT}} \exp \left\{ \frac{i mw}{2 \hbar \text{sen}wT} [(x_a^2 + x_b^2) \cos wT - 2x_a x_b] \right\} \quad (\text{A.18})$$

### A.3. Oscilador Harmônico Forçado

A lagrangeana é dada por

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m w^2 x^2 + f(t)x \quad (\text{A.19})$$

o que leva à equação de movimento

$$\ddot{x}_{cl} + \omega^2 x_{cl} = \frac{f(t)}{m} \quad (\text{A.20})$$

Para calcular a ação clássica

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} (\dot{x}_{cl}^2 - \omega^2 x_{cl}^2 + \frac{2}{m} f(t) x_{cl}) dt \quad (\text{A.21})$$

vamos integrar por partes o primeiro termo do lado direito de (A.21) e usar a equação de movimento (A.20) em analogia com o que foi feito para o oscilador harmônico simples. Este procedimento nos leva a

$$S_{cl} = \frac{m}{2} (\dot{x}_b x_b - \dot{x}_a x_a) - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} f(t) x_{cl}(t) dt \quad (\text{A.22})$$

onde  $x_a = x_{cl}(t_a)$ ,  $x_b = x_{cl}(t_b)$ ,  $\dot{x}_a = \dot{x}_{cl}(t_a)$ , e  $\dot{x}_b = \dot{x}_{cl}$ .

A solução  $x_{cl}$  da equação (A.20) pode ser escrita como a soma da solução da equação homogênea com a solução particular, isto é

$$x_{cl} = x_h(t) + x_p(t) \quad (\text{A.23})$$

onde

$$\begin{aligned} \ddot{x}_h + \omega^2 x_h &= 0 \\ \ddot{x}_p + \omega^2 x_p &= \frac{f(t)}{m} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Impondo que  $x_p(t_a) = 0 = x_p(t_b)$ , as condições de dois pontos satisfeitas por  $x_{cl}(t)$  e  $x_h(t)$  são as mesmas. Com isto, pode-se mostrar que

$$x_h(t) = \frac{x_a \text{sen} \omega(t_b - t) + x_b \text{sen} \omega(t - t_a)}{\text{sen} \omega T} \quad (\text{A.25})$$

onde  $T = t_b - t_a$ .

A solução particular pode ser obtida com o método da função de Green, ou seja

$$x_p(t) = \int_{t_a}^{t_b} G(t, t') \frac{f(t')}{m} dt' \quad (A.26)$$

onde a função de Green deve satisfazer à equação

$$\left( \frac{d^2}{dt^2} + w^2 \right) G(t, t') = \delta(t - t') \quad (A.27)$$

Algumas condições devem ser impostas sobre  $G(t, t')$ . Esta deve ser simétrica

$$G(t, t') = G(t', t) \quad (A.28)$$

e deve satisfazer, além da continuidade em  $t = t'$ , às mesmas condições que  $x_p(t)$  nos extremos, isto é,

$$G(t_a, t') = 0 = G(t_b, t') \quad (A.29)$$

Para encontrar  $G(t, t')$  vamos inicialmente considerar  $t \neq t'$ , e assim

$$\tilde{G}(t, t') + w^2 G(t, t') = 0 \quad (A.30)$$

cuja solução é dada por

$$G(t, t') = A(t') \text{sen} w(t_b - t) \quad , \text{ para } t > t' \quad (A.31a)$$

$$G(t, t') = B(t') \text{sen} w(t - t_a) \quad , \text{ para } t < t' \quad (A.31b)$$

onde já usamos as condições (A.29). Temos ainda que determinar A e B. Da condição de simetria (A.28) e da continuidade de  $G(t, t')$  poderemos escrever que

$$A(t) \text{sen}[w(t_b - t')] = B(t') \text{sen}[w(t - t_a)] \quad (A.32)$$

o que nos leva a

$$\frac{A(t)}{\text{sen}[w(t - t_a)]} = \frac{B(t')}{\text{sen}[w(t_b - t')]} = \lambda = cte \quad (A.33)$$



usando (b33) podemos reescrever as soluções (A.31) na forma compacta.

$$G(t, t') = \lambda \text{sen}[w(t_{<} - t_a)] \text{sen}[w(t_b - t_{>})] \quad (\text{A.34})$$

onde  $t_{>}$  e  $t_{<}$  representam respectivamente o maior e o menor valor entre  $t$  e  $t'$ .

Para determinar o valor de  $\lambda$  devemos usar a condição de descontinuidade da primeira derivada de  $G(t, t')$  em  $t = t'$ , o que pode ser feito integrando-se a equação diferencial (A.27) na variável  $t$  sobre um pequeno intervalo que inclui o ponto singular  $t = t'$ . Temos então que

$$\int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon} \left( \frac{d^2 G}{dt^2} + w^2 G \right) dt = \int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon} \delta(t - t') dt = 1$$

$$\frac{dG}{dt} \Big|_{t=t'+\epsilon} - \frac{dG}{dt} \Big|_{t=t'-\epsilon} = 1 \quad (\text{A.35})$$

Substituindo  $\epsilon \rightarrow \infty$  (A.35) as equações (A.31) e tomando o  $\lim_{\epsilon \rightarrow \infty}$  obtemos

$$-w\lambda \{ \text{sen}[w(t' - t_a)] \cos[w(t_b - t')] + \cos[w(t' - t_a)] \text{sen}[w(t_b - t')] \} = 1 \quad (\text{A.36})$$

Usando as relações trigonométricas conhecidas para  $\text{sen}(a \pm b)$  e  $\cos(a \pm b)$  e fazendo algumas manipulações é fácil encontrar

$$\lambda = -\frac{1}{w \text{sen}(wT)} \quad (\text{A.37})$$

Substituindo (A.36) em (A.34) obtemos a expressão da função de Green do problema.

$$G(t, t') = -\frac{1}{w \text{sen}(wT)} \text{sen}[w(t_{<} - t_a)] \text{sen}[w(t_b - t_{>})] \quad (\text{A.38})$$

e com isto a solução particular tem a forma

$$x_p = -\frac{1}{m w \text{sen}(wT)} \left\{ \int_{t_a}^t \text{sen}[w(t' - t_a)] \text{sen}[w(t_b - t)] dt' + \int_t^{t_b} f(t') \text{sen}[w(t - t_a)] \text{sen}[w(t_b - t')] dt' \right\} \quad (\text{A.39})$$

Podemos então calcular  $\dot{x}_{cl}$ . Usando (A.23), (A.25) e (A.39) encontramos que

$$\begin{aligned} \dot{x}_{cl}(t) = & \frac{w\{x_b \cos[w(t-t_a)] - x_a \cos[w(t_b-t)]\}}{\text{sen}[wT]} \\ & - \frac{1}{m\text{sen}[wT]} \left\{ \int_{t_a}^{t_b} f(t') \cos[w(t-t_a)] \text{sen}[w(t_b-t')] dt' \right. \\ & \left. - \int_{t_a}^t f(t') \text{sen}[w(t'-t_a)] \cos[w(t_b-t)] dt' \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

A partir de (a40) chegamos facilmente às expressões para  $\dot{x}_a$  e  $\dot{x}_b$

$$\dot{x}_b = \frac{w}{\text{sen}[wT]} (x_b \cos[wT] - x_a) + \frac{1}{m\text{sen}[wT]} \int_{t_a}^{t_b} f(t') \text{sen}[w(t'-t_a)] dt' \quad (\text{A.41})$$

$$\dot{x}_a = \frac{w}{\text{sen}[wT]} (x_b \cos[wT] - x_a) + \frac{1}{m\text{sen}[wT]} \int_{t_a}^{t_b} f(t') \text{sen}[w(t_b-t')] dt' \quad (\text{A.42})$$

Para encontrar a ação clássica, devemos substituir as equações (A.42), (A.23), (A.25) e (A.39) em (A.22). Isto nos fornece, após algumas manipulações, o resultado final

$$\begin{aligned} S_{cl} = & \frac{mw}{2\text{sen}[wT]} \left\{ \cos[wT](x_a^2 + x_b^2) - 2x_a x_b \right. \\ & + \frac{2x_b}{mw} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \text{sen}[w(t-t_a)] dt \\ & + \frac{2x_a}{mw} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \text{sen}[w(t_b-t)] dt \\ & - \frac{1}{m^2 w^2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t f(t) f(s) \text{sen}[w(t_b-t)] \text{sen}[w(s-t_a)] dt ds \\ & \left. - \frac{1}{m^2 w^2} \int_{t_a}^{t_b} \int_t^{t_b} f(t) f(s) \text{sen}[w(t-t_a)] \text{sen}[w(t_b-s)] dt ds \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

o fator pré exponencial é o mesmo que para o oscilador harmônico simples.

A forma final do propagador é então

$$K = \sqrt{\frac{mw}{2\pi i \hbar \text{sen}[wT]}} e^{iS_{cl}/\hbar} \quad (\text{A.44})$$

**REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] R.P.Feynman and A R Hibbs; "Quantum Mechanics and Path Integrals", Mcgraw-Hill (1965)
- [2] R.P.Feynman and H.Kleynert. Effective classical partition functions. Phys. Review A. Vol 34 (1986)-5080
- [3] H.Kleynert. Effective Potentials From Effective Classical Potentials Phys. Letters B. V 181 (1986)-324
- [4] W.Janke and H.Kleynert. The Effective Classical Potential Of The Double-Well Potential Chemical Physics Letters. Vol 137 (1987) 162
- [5] W.Janke and B.K.Cheng. Statistical Properties of a Harmonic Plus a Delta Potential Phys Letters A Vol 129 (1988)-140
- [6] J.J.Sakurai; "Modern Quantum Mechanics", Addison-Wesley, (1985)
- [7] R.P.Feynman; "Statistical Mechanics: a set of lectures", Addison-Wesley, (1976)
- [8] T.L.Hill; "An Introduction to Statistical Thermodynamics", Addison-Wesley, (1960)
- [9] R.Giachetti and V.Tognetti. Quantum corrections to the thermodynamics of nonlinear systems Phys. Letters B. Vol 33 (1986)-7647
- [10] W.Janke. Path Integrals from meV to MeV, Applications of New Variational Method to Quantum Statistics World Scientific, (1988)-355
- [11] M.R.Spiegel; "Manual de Fórmulas e Tabelas", Macgraw-Hill, 1980
- [12] H.Kleynert. Particle Distribution From Effective Classical Potential Phys Letters A. Vol 118 (1986)-267

- 
- [13] W. Janke and H. Kleinert. Effective Classical Potential and Particle Distribution Of A Coulomb System Phys. Letters A. Vol 118 (1986)-371
- [14] Gradshteyn, H.S and I.M. Ryzhik; "Table of Integrals, Series, and Products", Academic Press, (1980)
- [15] M. Abramowitz and I.A. Stegun; "Handbook of Mathematical Functions", Dover, (1970)
- [16] Bo Thide. The energy levels of the one-dimensional potential well  $V(X) = a | X |$  calculated by means of certain phase-integral approximations Journal of Mathematical Physics, Vol 17, (1976)-1222