e-Boletim de Física
International Centre for Condensed Matter Physics
Instituto de Física, Universidade de Brasília
Ano IV, Abril de 2015 • http://www.boletimdafisica.com/ • eBFIS **4** 4401-1(2015)

Uma Introdução à Teoria Quântica
(An Introduction to Quantum Theory)

José David M. Vianna*
Instituto de Física, Centro Internacional de Física da Matéria Condensada
Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília,DF, Brasil.

Notas do curso sobre mecânica quântica apresentado na III Escola de Física Roberto A. Salmeron/IX Semana da Física, de 03 a 07 de Novembro de 2014, no International Center for Condensed Matter Physics, Universidade de Brasília.

Palavras-chave: III Escola de Física Roberto A. Salmeron, Semana da Física.

Lectures on physics about quantum mechanics presented in the III Roberto A. Salmeron School on Physics/IX Week on Physics, November 03 to 07, 2014 in the International Center for Condensed Matter Physics, Universidade de Brasilia.

Key words: Roberto A. Salmeron School on Physics, Week on Physics.

I. INTRODUÇÃO

As notas presentes tiveram origem em uma proposta da Sociedade Brasileira de Física (SBF) visando fornecer a estudantes no início do Curso de Física (terceiro ou quarto semestre letivo) os elementos que julgasse eu necessários para uma introdução à Mecânica Quântica.

Entre as várias opções que poderia ter escolhido, muitas já se encontram em textos do Curso Básico (em geral o quarto volume das coleções mais usadas). Assim, optamos por uma formulação baseada na estrutura algébrica que se encontra presente tanto na formulação da Mecânica Clássica como na formulação da Teoria Quântica. Para atingir esse objetivo resolvemos apresentar como partes iniciais do minicurso a Mecânica Clássica Lagrangiana, Hamiltoniana e de Poisson para em seguida introduzirmos o conceito de álgebra de Lie tendo os Parêntesis de Poisson como operação de Lie. As transformações canônicas são então tratadas dentro deste contexto, seguindo a apresentação com definições de interesse para a Teoria Quântica como, por exemplo, espaço de Hilbert, operadores lineares, equação de autovalor. Tendo elementos básicos, a Mecânica Quântica é então introduzida por intermédio do chamado Problema de Heisenberg cuja solução foi apresentada por John Von Neumann em duas etapas: a cinemática e a dinâmica. Tendo a solução do Problema de Heisenberg, fazemos a ligação com a formulação usual em termos da Equação de Schrödinger dependente e independente do tempo. As notas são concluídas com um exemplo simples e a discussão geral do processo de quantização realçando a estrutura algébrica com o comutador ou produto de Dirac como operação dessa álgebra.

II. FORMULAÇÃO LAGRANGIANA DA MECÂNICA CLÁSSICA

A. Vetores base para coordenadas generalizadas

Coordenadas cilíndricas e esféricas são dois exemplos de coordenadas generalizadas q_1, q_2, q_3 em termos dos quais pode-se descrever o movimento de uma partícula. Assim, para coordenadas esféricas, tem-se:

$$q_1 = r, \qquad q_2 = \theta, \qquad q_3 = \varphi.$$

O processo usado na análise de coordenadas esféricas e cilíndricas é em geral aplicável a qualquer conjunto de coordenadas. Então se,

$$x = x(q_1, q_2, q_3), \qquad y = y(q_1, q_2, q_3), \qquad z = z(q_1, q_2, q_3), \tag{1}$$

forem as equações relacionando as coordenadas cartesianas às coordenadas generalizadas q_1, q_2, q_3, o vector posição $\mathbf{r}$ poderá ser escrito como:

$$\mathbf{r} = x(q_1, q_2, q_3)\mathbf{i} + y(q_1, q_2, q_3)\mathbf{j} + z(q_1, q_2, q_3)\mathbf{k}, \tag{2}$$

* jdavid@fis.unb.br

e os vetores base apropriados para as coordenadas generalizadas q_1, q_2, q_3 são definidos por:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} = h_1 \mathbf{e}_1, \qquad \text{com } h_1 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} \right|, \tag{3a}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} = h_2 \mathbf{e}_2, \qquad \text{com } h_2 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} \right|, \tag{3b}$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_3} = h_3 \mathbf{e}_3, \qquad \text{com } h_3 = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_3} \right|. \tag{3c}$$

Observe que $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ e $\mathbf{b}_3$ não são vetores unitários; os vetores $\mathbf{e}_i$ o são. Com os vetores $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ e $\mathbf{b}_3$, entretanto, obtém-se resultados mais concisos do que com o uso dos $\mathbf{e}_i$ $(i = 1, 2, 3)$. Em termos de suas componentes cartesianas, os vetores base $\mathbf{b}_i$ são especificados por:

$$\mathbf{b}_i = \frac{\partial x}{\partial q_i}\mathbf{i} + \frac{\partial y}{\partial q_i}\mathbf{j} + \frac{\partial z}{\partial q_i}\mathbf{k} \tag{4}$$

com

$$h_i = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2}$$

Esses vetores base $\mathbf{b}_i$ geralmente não são mutuamente ortogonais. Eles necessitam, entretanto, ser não coplanares, ou seja:

$$\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3 = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial q_1} & \frac{\partial y}{\partial q_1} & \frac{\partial z}{\partial q_1} \\ \frac{\partial x}{\partial q_2} & \frac{\partial y}{\partial q_2} & \frac{\partial z}{\partial q_2} \\ \frac{\partial x}{\partial q_3} & \frac{\partial y}{\partial q_3} & \frac{\partial z}{\partial q_3} \end{vmatrix} \neq 0 \tag{5}$$

Esse determinante é conhecido como Jacobiano das coordenadas x, y, z com relação às coordenadas q_1, q_2, q_3. Assim a relação (5) pode ser expressa como:

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(q_1, q_2, q_3)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial q_1} & \frac{\partial y}{\partial q_1} & \frac{\partial z}{\partial q_1} \\ \frac{\partial x}{\partial q_2} & \frac{\partial y}{\partial q_2} & \frac{\partial z}{\partial q_2} \\ \frac{\partial x}{\partial q_3} & \frac{\partial y}{\partial q_3} & \frac{\partial z}{\partial q_3} \end{vmatrix} \neq 0 \tag{6}$$

que é também a condição necessária e suficiente para que se obtenha de (1) as coordenadas generalizadas q_1, q_2, q_3 como funções das coordenadas cartesianas (x, y, z), i.e

$$q_1 = q_1(x, y, z), \qquad q_2 = q_2(x, y, z), \qquad q_3 = q_3(x, y, z). \tag{7}$$

Deve-se notar que as coordenadas generalizadas q_1, q_2, q_3 são coordenadas independentes, o que resulta em

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \delta_{ij}.$$

E considerando as relações (1) e (7), segue que

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \frac{\partial q_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial q_j} + \frac{\partial q_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial q_j} + \frac{\partial q_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial q_j} = \delta_{ij}$$

ou ainda,

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \left(\frac{\partial q_i}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial q_i}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial q_i}{\partial z}\mathbf{k}\right) \cdot \left(\frac{\partial x}{\partial q_j}\mathbf{i} + \frac{\partial y}{\partial q_j}\mathbf{j} + \frac{\partial z}{\partial q_j}\mathbf{k}\right) = \delta_{ij} \tag{8}$$

Comparando a relação (8) com a definição (4) é natural introduzir um segundo conjunto de vetores base, que notaremos por $(\mathbf{b}'_1, \mathbf{b}'_2, \mathbf{b}'_3)$, e definidos por:

$$\mathbf{b}'_i = \frac{\partial q_i}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial q_i}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial q_i}{\partial z}\mathbf{k}, \qquad \text{com } i = 1, 2, 3. \tag{9}$$

Esses vetores $\mathbf{b}'_i$ $(i = 1, 2, 3)$ são chamados de vetores recíprocos de $\mathbf{b}_i$ $(i = 1, 2, 3)$. Da relação (8) e (9) segue que

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}'_j = \mathbf{b}_j \cdot \mathbf{b}'_i = \delta_{ij}. \tag{10}$$

Observe da definicão (9) que

$$\mathbf{b}'_i = \nabla q_i. \tag{11}$$

B. Velocidade e aceleração em coordenadas generalizadas

Em termos dos vetores base $\mathbf{b}_i$ e seus vetores recíprocos $\mathbf{b}'_i$, um vetor $\mathbf{A}$ pode ser escrito como:

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{b}'_i)\mathbf{b}_i = \sum_{i=1}^{3} A'_i \mathbf{b}_i, \tag{12a}$$

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{b}_i)\mathbf{b}'_i = \sum_{i=1}^{3} A_i \mathbf{b}'_i. \tag{12b}$$

Uma notação mais conveniente para as relações acima é a seguinte: os vetores recíprocos são notadas por $\mathbf{b}^i$, as componentes A'_i são notadas por A^i, e as coordenadas generalizadas por q^i. Assim, tem-se:

$$\mathbf{b}_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i}, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{13a}$$

$$\mathbf{b}^i = \nabla q^i, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{13b}$$

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{b}^i)\mathbf{b}_i = A^i \mathbf{b}_i, \tag{13c}$$

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{b}_i)\mathbf{b}^i = A_i \mathbf{b}^i, \tag{13d}$$

onde em (13a) e (13d) eliminamos o sinal de soma e usamos a convenção de soma de Einstein. As componentes A^i serão chamadas contravariantes e A_i componentes covariantes de $\mathbf{A}$.

Para o vetor velocidade, teremos:

$$\mathbf{v} = v_i \mathbf{b}^i = (\mathbf{v}\cdot\mathbf{b}_i)\mathbf{b}^i,$$
$$\mathbf{v} = v^i \mathbf{b}_i = (\mathbf{v}\cdot\mathbf{b}^i)\mathbf{b}_i.$$

As componentes covariantes de $\mathbf{v}$, v_i serão:

$$v_i = \mathbf{v}\cdot\mathbf{b}_i = (\dot{x}\mathbf{i} + \dot{y}\mathbf{j} + \dot{z}\mathbf{k})\cdot\left(\frac{\partial x}{\partial q^i}\mathbf{i} + \frac{\partial y}{\partial q^i}\mathbf{j} + \frac{\partial z}{\partial q^i}\mathbf{k}\right),$$

ou,

$$v_i = \dot{x}\frac{\partial x}{\partial q^i} + \dot{y}\frac{\partial y}{\partial q^i} + \dot{z}\frac{\partial z}{\partial q^i} \tag{14}$$

Por outro lado,

$$\dot{x} = \frac{\partial x}{\partial q^i}\dot{q}^i, \qquad (\text{soma em } i) \tag{15a}$$
$$\dot{y} = \frac{\partial y}{\partial q^i}\dot{q}^i, \qquad (\text{soma em } i) \tag{15b}$$
$$\dot{z} = \frac{\partial z}{\partial q^i}\dot{q}^i, \qquad (\text{soma em } i) \tag{15c}$$

o que resulta em

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial x}{\partial q^i}, \qquad \frac{\partial \dot{y}}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial y}{\partial q^i}, \qquad \frac{\partial \dot{z}}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial z}{\partial q^i}. \tag{16}$$

Problema B.1

1. *Mostre que para coordenadas curvilíneas ortogonais (q^1, q^2, q^3) os vetores recíprocos são $\mathbf{b}^i = 1/h_i^2\mathbf{b}_i$. Daí obtenha a expressão para o gradiente de uma função ϕ nessas coordenadas.*
2. *Mostre que $v_i = \partial/\partial\dot{q}^i(\frac{1}{2}v^2)$ com $v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$.*

Da definição de componentes contravariantes tem-se para v^i que,

$$v^i = \mathbf{v}\cdot\mathbf{b}^i = (\dot{x}\mathbf{i} + \dot{y}\mathbf{j} + \dot{k}\mathbf{k})\cdot\left(\frac{\partial q^i}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial q^i}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial q^i}{\partial z}\mathbf{k}\right)$$
$$= \dot{x}\frac{\partial q^i}{\partial x} + \dot{y}\frac{\partial q^i}{\partial y} + \dot{z}\frac{\partial q^i}{\partial z} = \dot{q}^i, \tag{17}$$

ou seja, as componentes contravariantes da velocidade são as chamadas velocidades generalizadas. Note, entretanto, que são as componentes covariantes da velocidade multiplicadas pela massa da partícula que serão chamadas de momenta generalizadas da partícula, i.e.

$$p_i = mv_i. \tag{18}$$

Com relação à aceleração tem-se também componentes covariantes e contravariantes, ou seja, respectivamente,

$$a_i = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_i,$$

e,

$$a^i = \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^i,$$

onde $\mathbf{a}$ é o vetor aceleração.

Problema B.2

Mostre que para as componentes covariantes de $\mathbf{a}$ *tem-se*

$$a_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}^i}\left(\frac{1}{2}v^2\right) - \frac{\partial}{\partial q^i}\left(\frac{1}{2}v^2\right),$$

e que v^2 pode ser escrito como

$$v^2 = \sum_{i=1}^{3} h_i^2(\dot{q}^i)^2.$$

C. Forças generalizadas

O processo de representar um vetor em termos de coordenadas generalizadas repousa no fato que um vetor (no espaço a três dimensões) pode ser especificado dando-se seu produto escalar com três vetores não coplanares. Assim, dado um vetor $\mathbf{F}$ que represente uma força, pode-se escrever:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_i)\mathbf{b}^i \tag{19}$$

ou notando as componentes por:

$$Q_i = \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_i \tag{20}$$

tem-se,

$$\mathbf{F} = Q_i\mathbf{b}^i \tag{21}$$

As componentes Q_i são denominadas forças generalizadas; elas não necessariamente terão a dimensão de força. No caso do sistema de coordenadas esféricas, por exemplo, (verifique!!),

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial r} = \mathbf{e}_r, \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial\theta} = \mathbf{e}_\varphi\times\mathbf{r}, \qquad \mathbf{b}_3 = \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial\varphi} = \mathbf{k}\times\mathbf{r}. \tag{22}$$

E daí,

$$Q_1 = \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_1 = \mathbf{F}\cdot\mathbf{e}_r = F_r \tag{23a}$$
$$Q_2 = \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_2 = \mathbf{e}_\varphi\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{F}) \tag{23b}$$
$$Q_3 = \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_3 = \mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{F}) \tag{23c}$$

onde se nota que Q_2 e Q_3 não têm a dimensão de força.

D. Momenta generalizados

De forma semelhante ao caso de $\mathbf{F}$ pode-se representar o momentum de uma partícula $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ em um ponto (q^1, q^2, q^3) usando os produtos escalares

$$p_i = \mathbf{p}\cdot\mathbf{b}_i, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{24}$$

sendo p_i designado por momenta generalizados da partícula. Com $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, tem-se de (24)

$$p_i = \mathbf{p}\cdot\mathbf{b}_i = m\mathbf{v}\cdot\mathbf{b}_i = mv_i, \tag{25}$$

sendo v_i a componente covariante da velocidade $\mathbf{V}$. E pelo ítem 2) do Problema B.1, segue que:

$$p_i = mv_i = \frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}\left(\frac{1}{2}v^2\right) = \frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}\left(\frac{1}{2}mv^2\right),$$

ou,

$$p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i}, \qquad \text{com} \qquad T = \frac{1}{2}mv^2. \tag{26}$$

Problema D.1

Usando coordenadas cilíndricas, determine os momenta generalizados de uma partícula, dê-lhes interpretação física e verifique se a dimensão é de momentum.

Observe que como as componentes contravariantes da velocidade são

$$v^i = \dot{q}^i,$$

e

$$T = \frac{1}{2}\mathbf{p}\cdot\mathbf{v}, \qquad \text{com} \qquad \mathbf{p} = m\mathbf{v},$$

tem-se

$$T = \frac{1}{2}(p_i\mathbf{b}^i)\cdot(\dot{q}^j\mathbf{b}_j),$$

ou,

$$T = \frac{1}{2}p_i\dot{q}^i. \tag{27}$$

E. Equações generalizadas de movimento

As equações generalizadas de movimento são obtidas a partir da equação $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ e dos três vetores $\mathbf{b}_i$ do sistema de coordenadas generalizadas. Com efeito, tem-se:

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= m\mathbf{a}\\ \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_i &= m\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}_i\\ Q_i &= ma_i.\end{aligned}$$

E usando o resultado do Problema B.2, segue que

$$Q_i = m\left[\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}\left(\frac{1}{2}v^2\right) - \frac{\partial}{\partial q^i}\left(\frac{1}{2}v^2\right)\right],$$

ou,

$$Q_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial T}{\partial q^i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{28}$$

que são chamadas de equações generalizadas de movimento. Para uma força conservativa, derivável de uma função energia potencial U, a força generalizada será:

$$\begin{aligned}Q_i &= \mathbf{F}\cdot\mathbf{b}_i = \mathbf{F}\cdot\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i}\\ &= -\left(\frac{\partial U}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial U}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial U}{\partial z}\mathbf{k}\right)\cdot\left(\frac{\partial x}{\partial q^i}\mathbf{i} + \frac{\partial y}{\partial q^i}\mathbf{j} + \frac{\partial z}{\partial q^i}\mathbf{k}\right)\\ &= -\frac{\partial U}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial q^i} - \frac{\partial U}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial q^i} - \frac{\partial U}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial q^i},\end{aligned}$$

ou,

$$Q_i = -\frac{\partial U}{\partial q^i}. \tag{29}$$

Com (29) as equações (28) são escritas como

$$-\frac{\partial U}{\partial q^i} = \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial T}{\partial q^i}, \qquad i = 1,2,3. \tag{30}$$

E para uma função energia potencial dependente apenas da posição, pode-se escrever de (30)

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial T}{\partial q^i} + \frac{\partial U}{\partial q^i} = 0,$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}(T-U) - \frac{\partial}{\partial q^i}(T-U) = 0,$$

ou ainda,

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} = 0, \qquad i = 1,2,3 \tag{31}$$

onde $L = T - U$ é conhecida como função de Lagrange ou simplesmente Lagrangiana.

As equações (31) são denominadas equações de Lagrange. Se em adição às forças conservativas houver forças não conservativas atuando sobre a partícula, as correspondentes forças generalizadas não estarão incluídas em (31) e nesse caso as equações de Lagrange [**?**] são expressas como:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} = Q_i^{nc}, \tag{32}$$

onde Q_i^{nc} são as forças generalizadas não conservativas; as forças conservativas estão incluídas na função de Lagrange.

No caso em que no problema em estudo houver forças dependentes de velocidade que sejam deriváveis de uma função energia potencial $U(q^i, \dot{q}^i, t)$ com a força generalizada dada por:

$$Q_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial U}{\partial q^i}, \tag{33}$$

as equações de movimento são ainda dadas por (31) com a Lagrangiana sendo $L = T - U(q^i, \dot{q}^i, t)$. Neste caso deve-se notar que é habitual definir o momentum conjugado p_i pela relação:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}(T - U) = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i}, \tag{34}$$

o qual coincide com o momentum generalizado da partícula, definido na seção II D, no caso em que U não dependa da velocidade. Para problemas envolvendo forças magnéticas, encontra-se que o momentum (ou momentum conjugado generalizado) definido por (34) é (verifique!)

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = (m\mathbf{v} + e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{b}_i = mv_i + eA_i$$

onde $\mathbf{A}$ é o vetor potencial magnético.

Problema E.1

1. *Escreva a Lagrangiana e as equações de Lagrange para uma partícula de massa m sujeita à força central $\mathbf{F} = \frac{K}{r^2}(\mathbf{r}/r)$, onde K é uma constante e $r = |\mathbf{r}|$.*
2. *Resolva o problema do oscilador harmônico no plano usando coordenadas polares e as equações de Lagrange.*

III. FORMAÇÃO HAMILTONIANA DA MECÂNICA CLÁSSICA

A. Conservação da energia e função de Hamilton

O princípio da conservação da energia pode ser obtido diretamente das equações de Lagrange

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}^i}(T - U) - \frac{\partial}{\partial q^i}(T - U) = 0, \tag{35}$$

onde a energia potencial U pode também ser uma função da velocidade. Com efeito, as forças generalizadas deriváveis da função energia potencial dependente da velocidade $U(q^i, \dot{q}^i)$ são

$$Q_i = \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial U}{\partial q^i},$$

e o trabalho realizado por tais forças generalizadas para variação dq^i nas coordenadas generalizadas é

$$\begin{aligned} dW &= Q_i dq^i, \qquad\qquad \text{(soma em } i\text{)} \\ &= \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial U}{\partial q^i}\right) dq^i \\ &= \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial T}{\partial q^i}\right) dq^i, \end{aligned} \tag{36}$$

de onde se tem

$$\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i}\right) dq^i = 0, \tag{37}$$

ou ainda

$$\left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) \dot{q}^i dt = \frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i dt. \tag{38}$$

Utilizando a relação

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right) \dot{q}^i dt &= \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i\right) dt - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i dt \\ &= d\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i\right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i, \end{aligned} \tag{39}$$

em (38), segue que

$$d\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i\right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i - \frac{\partial L}{\partial q^i} dq^i = 0,$$

ou,

$$d\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right) + \frac{\partial L}{\partial t} dt = 0, \tag{40}$$

pois

$$dL = \frac{\partial L}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} d\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \tag{41}$$

Se a Lagrangiana não depender explicitamente do tempo, $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ e tem-se de (40)

$$d\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right) = 0. \tag{42}$$

Como $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$, a relação (42) pode ser reescrita na forma

$$d(p_i \dot{q}^i - L) = 0,$$

ou seja

$$(p_i \dot{q}^i - L) = cte. \tag{43}$$

Assim, se a Lagrangiana não for explicitamente função do tempo, a quantidade

$$H = p_i \dot{q}^i - L, \qquad \text{(soma em } i\text{)} \tag{44}$$

conhecida como Hamiltoniana ou função de Hamilton do sistema e é uma constante do movimento.

Vejamos qual o significado físico de H. Para isso, analisemos o caso de uma partícula carregada sob a ação de um campo de força conservativo com energia potencial $U(x, y, z)$ e um campo magnético. Neste caso, como foi visto na seção II E os momenta conjugados são:

$$p_i = mv_i + eA_i, \tag{45}$$

com

$$v_i = \mathbf{v}\cdot\mathbf{b}_i, \qquad A_i = \mathbf{A}\cdot\mathbf{b}_i$$

Então, segue que

$$\begin{aligned} H &= p_i\dot{q}^i - L \\ &= (mv_i + eA_i)v^i - L. \end{aligned} \tag{46}$$

E como $L = \frac{1}{2}mv^2 - U + e\mathbf{v}\cdot\mathbf{A}$, tem-se de (46)

$$\begin{aligned} H &= (mv_i + eA_i)v^i - \frac{1}{2}mv^2 + U - ev^iA_i \\ &= mv^2 + eA_iv^i - \frac{1}{2}mv^2 + U - ev^iA_i \\ &= \frac{1}{2}mv^2 + U = T + U, \end{aligned}$$

ou seja, H é a energia total do sistema.

B. Equações de movimento de Hamilton

A função de Hamilton ou Hamiltoniana definida por (44) não é, como parece indicar sua definição, uma função explícita das velocidades generalizadas $\dot{q}^i$. Verifiquemos esse resultado considerando dH com a hipótese que H seja uma função de $q^i, \dot{q}^i, p_i$ e t. Temos então

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q^i}dq^i + \frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i + \frac{\partial H}{\partial \dot{q}^i}d\dot{q}^i + \frac{\partial H}{\partial t}dt. \tag{47}$$

Por outro lado, da definição (44) segue que

$$dH = p_i d\dot{q}^i + \dot{q}^i dp_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}d\dot{q}^i - \frac{\partial L}{\partial q^i}dq^i - \frac{\partial L}{\partial t}dt. \tag{48}$$

Como $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$, os termos $p_i\dot{q}^i$ e $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i$ em (48) cancelam-se e tem-se

$$dH = \dot{q}^i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q^i}dq^i - \frac{\partial L}{\partial t}dt. \tag{49}$$

Comparando (49) e (47) obtém-se

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}^i, \tag{50}$$
$$\frac{\partial H}{\partial q^i} = -\frac{\partial L}{\partial q^i}, \tag{51}$$
$$\frac{\partial H}{\partial \dot{q}^i} = 0, \tag{52}$$
$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial L}{\partial t}. \tag{53}$$

A equação (52) expressa que H não depende de $\dot{q}^i$, isto é, não é função explícita das velocidades generalizadas. Assim H é somente função dos momenta generalizados, coordenadas generalizadas e eventualmente do tempo.

$$H = H(q^i, p_i, t). \tag{54}$$

Com o uso das equações de Lagrange, a equação (51) pode ser reescrita. De fato,

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i}$$

ou,

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q^i}, \tag{55}$$

que usado em (51) nos dá

$$\frac{\partial H}{\partial q^i} = -\dot{p}_i. \tag{56}$$

As equações (50) e (56), i.e.

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{57a}$$
$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad i = 1,2,3 \tag{57b}$$

constituem o que é conhecido como equações de movimento de Hamilton. As equações (57a) são equivalentes às equações de Lagrange enquanto (57b), que permite obter as velocidades generalizadas em função das coordenadas e momenta generalizados, é o inverso de

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$$

que define os momenta generalizados como função das coordenadas e velocidades generalizadas.

Problema B.1

Considere uma partícula carregada em presençã de um campo elétrico e magnético uniforme dirigido ao longo do eixo Z. Obtenha a Lagrangeana, a Hamiltoniana, as equações de Lagrange e as equações de Hamilton.

C. Parêntesis de Poisson:

O espaço das variáveis $(q^1, q^2, q^3, p_1, p_2, p_3) \equiv (q,p)$ é chamado de espaço de fase.

De grande utilidade em mecânica são os parêntesis de Poisson: se $u(q,p,t)$ e $v(q,p,t)$ são funções no mínimo C^2 dos argumentos, define-se seu parêntesis de Poisson $\{u,v\}$ como

$$\{u,v\} = \sum_k \left(\frac{\partial u}{\partial q^k}\frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k}\frac{\partial v}{\partial q^k}\right). \tag{58}$$

Os parêntesis de Poisson possuem várias propriedades. Algumas delas são:

$$\{u,v\} = -\{v,u\}; \qquad \{u,\kappa\} = 0$$
$$\{u, v_1 + v_2\} = \{u,v_1\} + \{u,v_2\}$$
$$\{u, v_1v_2\} = \{u,v_1\}v_2 + v_1\{u,v_2\}$$
$$\{u,\{v_1,v_2\}\} + \{v_2,\{u,v_1\}\} + \{v_1,\{v_2,u\}\} = 0.$$

A propriedade (59d) é conhecida como identidade de Jacobi.

Problema C.1

1. *Verifique as propriedades* (59).
2. *Verifique se* $\frac{\partial}{\partial t}\{u,v\} = \{\frac{\partial u}{\partial t}, v\} + \{u, \frac{\partial v}{\partial t}\}$.

Com o uso do parêntesis de Poisson, as equações de movimento de Hamilton podem ser reescritas pois

$$\{q^k, H\} = \sum_j \left(\frac{\partial q^k}{\partial q^j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial q^k}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q^j} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_k},$$
$$\{p_k, H\} = \sum_j \left(\frac{\partial p_k}{\partial q^j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial p_k}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q^j} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q^k},$$

que substituídas em (57) nos d ao

$$\dot{q}^k = \{q^k, H\}, \tag{60}$$
$$\dot{p}_k = \{p_k, H\}. \tag{61}$$

Essas relações constituem as equações canônicas de movimento escritas em termos dos parêntesis de Poisson. Elas, na realidade, são casos especiais de uma fórmula geral para a derivada temporal de uma função $u(q,p,t)$. Matematicamente, tem-se

$$\frac{du}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial u}{\partial p_i}\dot{p}_i \right) + \frac{\partial u}{\partial t},$$

que com as equações de Hamilton (57) nos dá

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial q^i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q^i} \right) + \frac{\partial u}{\partial t}, \\ &= \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t}. \end{aligned} \tag{62}$$

Note que se u não depender explicitamente do tempo, $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ e (62) se reduz a

$$\frac{du}{dt} = \{u, H\}. \tag{63}$$

E se o parêntesis de Poisson de u com H for nulo, segue que $\frac{du}{dt} = 0$, ou seja, u será uma constante de movimento; e inversamente, os parêntesis de Poisson de constantes de movimento com H devem ser zero.

A identidade de Jacobi permite que conhecidas duas constantes de movimento construa-se outra(s) contante(s). Na realidade, considerando-se a identidade de Jacobi tem-se:

$$\{u, \{v, w\}\} + \{w, \{u, v\}\} + \{v, \{w, u\}\} = 0,$$

e supondo que u e v são constantes e $w \equiv H$ segue que

$$\{u, \{v, H\}\} + \{H, \{u, v\}\} + \{v, \{H, u\}\} = 0,$$

onde usando que $\{v, H\} = 0$ e $\{H, u\} = 0$ obtem-se $\{H, \{u, v\}\} = 0$, ou seja, $\{u, v\}$, também é uma constante de movimento. Este resultado é conhecido como Teorema de Poisson e possibilita algumas vezes construir uma sequência inteira de constantes de movimento. Mas também pode ocorrer que as constantes assim obtidas sejam funções triviais das já conhecidas e portanto de pouca utilidade.

O que foi apresentado para o caso de uma partícula com três graus de liberdade pode ser generalizado para um sistema com f graus de liberdade. Neste caso o espaço de fase será construído com $2f$ variáveis $(q^1, q^2, \ldots, q^f, p_1, p_2, \ldots, p_f) = (q, p)$. O parêntesis de Poisson para essas variáveis dará

$$\{q^i, q^j\} = 0, \tag{64a}$$
$$\{p_i, p_j\} = 0, \tag{64b}$$
$$\{q^i, p_j\} = \delta^i_j, \qquad i = 1, 2, \ldots, f. \tag{64c}$$

e os parêntesis de Poisson de duas variáveis dinâmicas $f(q,p)$, $g(q,p)$ analíticas nessas variáveis poderão ser expressas em termos dos parêntesis (64a, 64b, 64c). De um modo geral, um conjunto de $2f$ variáveis (q,p) satisfazendo equações do tipo

$$\dot{q}^k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \qquad k = 1, 2, \ldots, f$$
$$\dot{p}_k = \frac{\partial H}{\partial q^k}, \qquad k = 1, 2, \ldots, f$$

para uma função $H(q,p,t)$ são chamadas de variáveis canônicas com q sendo as coordenadas generalizadas e p os momenta generalizados.

IV. ELEMENTOS MATEMÁTICOS

A. Álgebra de Lie

Seja um conjunto $\mathcal{U} = \{x, y, z, ...\}$ com estrutura de espaço vetorial definida sobre o corpo dos reais, $\Re$. $\mathcal{U}$ é dito ser uma álgebra de Lie se estiver definida em $\mathcal{U}$ uma lei de composição bilinear tal que a todo par (x,y) com $x, y \in \mathcal{U}$ possamos associar o produto $x * y \in U$ que satisfaz as condições

$$(x_1 * x_2) * y = x_1 * y + x_2 * y, \tag{65a}$$
$$x * (y_1 + y_2) = x * y_1 + x * y_2, \tag{65b}$$
$$\alpha(x * y) = (\alpha x) * y = x * (\alpha y), \tag{65c}$$
$$x * x = x^2 = 0, \tag{65d}$$
$$(x * y) * z + (z * x) * y + (y * z) * x = 0, \tag{65e}$$

sendo essa última relação denominada identidade de Jacobi. O produto $*$ é dito produto de Lie.

É interessante notar que a condição (65d) implica em

$$\begin{aligned} 0 = (x + y) * (x + y) &= x * x + x * y + y * x + y * y \\ &= x * y + y * x, \end{aligned}$$

ou seja,

$$x * y = -y * x, \tag{66}$$

o que mostra ser o produto de Lie anti-simétrico.

B. Espaço de fase e conjunto de observáveis

Seja $\Omega = (q^1, q^2, q^3, p_1, p_2, p_3)$ o espaço de fase de um sistema físico e $\mathcal{A} = \{f, g, h, \ldots\}$ o conjunto de todas as observáveis no sistema, *i.e.* $f = f(q,p)$, $g = g(q,p)$, $\ldots$.

O conjunto $\mathcal{A}$ é fechado por adição e pela lei de composição de Poisson ou parêntesis de Poisson, no sentido que ambos, a soma e o parêntesis de Poisson de duas observáveis são observáveis. Além disso o parêntesis de Poisson satisfaz a propriedade (66) e todas as propriedades (65). Em consequência, o conjunto $\mathcal{A}$ de todas as observáveis definidas sobre o espaço de fase constitui uma álgebra de Lie [**?**].

Qualquer subconjunto de observáveis que seja fechado com respeito à adição e aos parêntesis de Poisson tembém constitui uma álgebra de Lie, ou mais precisamente uma subálgebra da álgebra de Lie de todas as observáveis. Uma transfomação de todas as observáveis

$$f = f(q,p) \xrightarrow{W} f_\zeta = f_\zeta(q,p), \tag{67a}$$
$$g = g(q,p) \xrightarrow{W} g_\zeta = g_\zeta(q,p), \tag{67b}$$
$$\vdots \tag{67c}$$
$$f_0 = f, \qquad g_0 = g, \qquad \ldots \tag{67d}$$

é dita ser uma transfomação canônica gerada pela observável $W = W(q,p)$ se as observáveis transformadas satisfazem as equações

$$\frac{df_\zeta}{d\zeta} = \{f_\zeta, W\}, \tag{68a}$$
$$\frac{dg_\zeta}{d\zeta} = \{g_\zeta, W\}, \tag{68b}$$
$$\vdots$$

Uma observável transformada é dada explicitamente em termos das observáveis originais pela série:

$$\begin{aligned} f_\zeta &= f + \zeta\{f, W\} + \frac{\zeta^2}{2!}\{\{f,W\},W\} + \ldots \\ &= \exp\left[\zeta\left(\frac{\partial W}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial W}{\partial q^i}\frac{\partial}{\partial p_i}\right)\right] f, \end{aligned} \tag{69}$$

e tem-se também que

$$h = \{f, g\} \qquad \Longrightarrow \qquad h_\zeta = \{f_\zeta, g_\zeta\}, \qquad \text{para } \zeta \geqslant 0. \tag{70}$$

Problema B.1

Mostre que a relação (70) *é verificada.*

Pela relação (70) as transfomações canônicas preservam a estrutura algébrica de Lie. Além disso, a variação no tempo de qualquer observável canonicamente transformada é dada por

$$\frac{f_\zeta}{dt} \equiv \dot{f}_\zeta = \{f_\zeta, H_\zeta\} \tag{71}$$

como se vê colocando-se em (70) $h = \dot{f}$ e $g = H$.

Deve-se notar que para $h = c$, uma constante numérica independente de q e p, tem-se:

$$\{f, g\} = c \qquad \Longrightarrow \qquad \{f_\zeta, g_\zeta\} = c, \tag{72}$$

e daí, para as componentes de coordenada e momentum generalizados, obtêm-se as relações:

$$\{q_{\zeta_i}, q_{\zeta_j}\} = 0, \tag{73a}$$
$$\{p_{\zeta_i}, p_{\zeta_j}\} = 0, \tag{73b}$$
$$\{q_{\zeta_i}, p_{\zeta_j}\} = \delta_{ij}. \tag{73c}$$

Segue, então, como consequência de (73) que se duas observáveis f e g são analisadas como funções das componentes da coordenada e momentum generalizados, seu parêntesis de Poisson com relação a q_ζ e p_ζ é igual ao seu parêntesis de Poisson com relação a q e p, i.e.,

$$\frac{\partial f}{\partial q^i_\zeta}\frac{\partial g}{\partial p_{\zeta_i}} - \frac{\partial f}{\partial p_{\zeta_i}}\frac{\partial g}{\partial q^i_\zeta} = \frac{\partial f}{\partial q^i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q^i}, \tag{74}$$

o que conduz às equações de Hamilton

$$\dot{q}_\zeta = \frac{\partial H_\zeta}{\partial p_\zeta}, \qquad \dot{p}_\zeta = -\frac{\partial H_\zeta}{\partial q_\zeta}, \tag{75}$$

ou seja, as transformações canônicas preservam a forma das equações de Hamilton e a forma dos parêntesis de Poisson.

Problema B.2

Mostre que a relação (74) *é verdadeira e obtenha as equações* (75).

C. Transformações canônicas e álgebras de Lie

Considere uma álgebra de Lie m-dimensional $\mathcal{A}$ composta de todas as combinações lineares reais de m observáveis linearmente independentes $W_1, W_2, \ldots, W_m$. Como $\mathcal{A}$ é fechada com relação ao parêntesis de Poisson, ter-se-á

$$\{W_i, W_j\} = -\sum_{k=1}^{m} C_{ijk} W_k, \tag{76}$$

onde os $C_{ijk} = -C_{ijk}$ são as constantes de estrutura da álgebra.

Considere então os geradores

$$G_i = \frac{\partial W_i}{\partial p_j}\frac{\partial}{\partial q^j} - \frac{\partial W_i}{\partial q^j}\frac{\partial}{\partial p_j}, \qquad i = 1, 2, \ldots, m \tag{77}$$

os quais como consequência de (76) satisfazem as relações de comutação:

$$[G_i, G_j] = G_i G_j - G_j G_i = \sum_{k=1}^{m} C_{ijk} G_k. \tag{78}$$

Tem-se então (veja (69)) que para uma observável genérica $f = f(q, p)$ a transformada será

$$f_\alpha = \exp\left(\alpha_1 G_1 + \alpha_2 G_2 + \ldots + \alpha_m G_m\right) f \tag{79}$$

onde $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m$ são parâmetros e entende-se que

$$\exp\left(\alpha_1 G_1 + \alpha_2 G_2 + \ldots + \alpha_m G_m\right) = \exp(\alpha \cdot G) \tag{80}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!}(\alpha \cdot G)^N \tag{81}$$

Diz-se assim que $G_1, G_2, ..., G_m$ são geradores de transformação canônica, ou que a transformação canônica é gerada pela álgebra de Lie $\mathcal{A}$ de dimensão m. Neste contexto obtém-se que a generalização de (70) é

$$h = \{f, g\} \qquad \Longrightarrow \qquad h_\alpha = \{f_\alpha, g_\alpha\}, \tag{82}$$

e a generalização (71) é

$$\frac{df_\alpha}{dt} = \dot{f}_\alpha = \{f_\alpha, H_\alpha\}. \tag{83}$$

Como uma ilustração de transformações canônicas geradas por uma álgebra de Lie de dimensão finita, considere a subálgebra tridimensional [**?**].

$$\mathcal{A} = \left\{\alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2 + \alpha_3 W_3 : W_1 = \frac{1}{4}\sum_i (p_i p_i - q_i q_i); W_2 = -\frac{1}{4}\sum_i (q_i q_i + p_i p_i); W_3 = -\frac{1}{2}\sum_i q_i p_i\right\} \tag{84}$$

Para essa álgebra $\mathcal{A}$ tem-se as relações:

$$\{W_1, W_2\} = -W_3, \qquad \{W_2, W_3\} = -W_1, \qquad \{W_3, W_1\} = W_2. \tag{85}$$

de onde segue que as constantes de estrutura não nulas independentes são:

$$C_{123} = C_{231} = -C_{312} = 1. \tag{86}$$

Problema C.1

Obtenha as relações (85).

Os geradores G_i associados a álgebra $\mathcal{A}$ serão:

$$G_1 = \frac{1}{2}\sum_i \left(q_i \frac{\partial}{\partial p_i} + p_i \frac{\partial}{\partial q_i}\right),$$

$$G_2 = \frac{1}{2}\sum_i \left(q_i \frac{\partial}{\partial p_i} - p_i \frac{\partial}{\partial q_i}\right),$$

$$G_3 = \frac{1}{2}\sum_i \left(p_i \frac{\partial}{\partial p_i} - q_i \frac{\partial}{\partial q_i}\right), \tag{87}$$

e gerarão as transformações canônicas no espaço de observáveis $f = f(q, p)$.

Nesta formulação é importante a transformação canônica gerada pelo Hamiltoniano e pelas álgebras de Lie mais simples associadas ao Hamiltoniano. De fato, colocando $\zeta = t$, $f_t = f_t(q(0), p(0)) \equiv f(q(t), p(t))$ e $W = H(q(0), p(0))$ em (68) segue que a evolução dinâmica de toda observável dada pela equação

$$\frac{df}{dt} = \dot{f} = \{f, H\}$$

pode ser vista como uma transformação canônica parametrizada pelo tempo e gerada pelo Hamiltoniano (veja equação (68)). Esta transformação canônica especial conduz a: $q(0) \xrightarrow{H} q_t(0) = q(t)$ e $p(0) \xrightarrow{H} p_t(0) = p(t)$ com o parêntesis de Poisson em (68) sendo calculado com relação às variáveis canônicas originais $q_{(0)}, p_{(0)}$. A evolução dinâmica de toda observável é expressa na forma de tranformação canônica (69) como

$$f = f(q(t), p(t))$$

$$= \exp\left[t\left(\frac{\partial H}{\partial p_i(0)}\frac{\partial}{\partial q^i(0)} - \frac{\partial H}{\partial q^i(0)}\frac{\partial}{\partial p_i(0)}\right)\right] \cdot f(q(0), p(0)) \tag{88}$$

D. Espaços de Hilbert

Um espaço de Hilbert $\mathbf{h}$ é um espaço vetorial real ou complexo no qual se define um produto escalar $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$ satisfazendo as propriedades

i) $$\mathbf{x} \cdot (\alpha \mathbf{y} + \alpha' \mathbf{y}') = \alpha \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} + \alpha' \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}', \tag{89}$$

ii) $$\left.\begin{array}{ll} \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{y} \cdot \mathbf{x} & (\text{se } \mathbf{h} \text{ real}), \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = (\mathbf{y} \cdot \mathbf{x})^* & (\text{se } \mathbf{h} \text{ complexo}) \end{array}\right\} \tag{90}$$

iii) $$\mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \geqslant 0, \qquad \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = 0. \tag{91}$$

Em decorrência da propriedade (90) diz-se que o produto escalar $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$ é linear com relação a $\mathbf{y}$ e antilinear com relação a $\mathbf{x}$, se $\mathbf{h}$ for complexo.

iv) Considerando a norma do vetor $\mathbf{x}$, $||\mathbf{x}|| = \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}$, (92)

toda sequência $\mathbf{x}_n \in \mathbf{h}$, com $n = 1, 2, \ldots, k$, tal que

$$||\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n+p}|| < \varepsilon_n, \qquad \text{com } \varepsilon_n \xrightarrow{n \mapsto \infty} 0$$

é convergente em $\mathbf{h}$, i.e.,

$$\exists\ \mathbf{x} \in \mathbf{h} \qquad \text{tal que } ||\mathbf{x}_n - \mathbf{x}|| \xrightarrow{n \mapsto \infty} 0.$$

Para descrever esta propriedade, diz-se que $\mathbf{h}$ é completo com relação à definição de norma usada.

E. Operadores

Um operador linear sobre $\mathbf{h}$ é uma aplicação linear de $\mathbf{h} \to \mathbf{h}$, i.e., uma lei de correspondência

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{y},$$

que associa a um vetor $\mathbf{x} \in \mathbf{h}$, o vetor $\mathbf{y} \in \mathbf{h}$; se σ simboliza um operador linear escreve-se

$$\mathbf{x} \in \mathbf{h} \qquad \Longrightarrow \qquad \mathbf{y} = \sigma\mathbf{x} \in \mathbf{h} \tag{93}$$

e tem-se

$$\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{z}) = \sigma\mathbf{x} + \sigma\mathbf{z}, \tag{94}$$
$$\sigma(\alpha\mathbf{x}) = \alpha\sigma\mathbf{x} \qquad \alpha \in \mathbb{C}. \tag{95}$$

Se o operador σ for antilinear a propriedade (95) é substituída por

$$\sigma(\alpha\mathbf{x}) = \alpha^*\sigma\mathbf{x}. \tag{96}$$

Problema E.1

1. *Mostre que se σ for linear e C uma constante complexa (ou real) $C\sigma = \sigma C$.*

2. *Mostre que se σ for antilinear e C uma constante complexa, $C\sigma = \sigma C^*$.*

F. Observações

- Um operador σ pode ser definido em apenas um subespaço vetorial $\mathcal{D}(\sigma)$ de $\mathbf{h}$; neste caso $\mathcal{D}(\sigma)$ é dito ser o domínio de definição de σ.

- Uma notação usual, na Teoria Quântica, para o produto escalar de dois vetores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \tag{97}$$

- Há diferentes tipos de operadores lineares; um deles é definido da seguinte maneira: Sejam $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ dois vetores arbitrários em $\mathbf{h}$ e A um operador linear. Considere o produto escalar $(\mathbf{y}, A\mathbf{x})$. Chama-se então adjunto ou conjugado hermitiano de A e nota-se por $A^\dagger$, o operador tal que:

$$(\mathbf{y}, A\mathbf{x}) = (A^\dagger\mathbf{y}, \mathbf{x}) \tag{98}$$

e se $A^\dagger$ for tal que:

$$(\mathbf{y}, A\mathbf{x}) = (A^\dagger\mathbf{y}, \mathbf{x}) = (A\mathbf{y}, \mathbf{x}) \tag{99}$$

diz-se que A é hermitiano [**?**].

- Um dos exemplos mais importantes do espaço de Hilbert é o espaço $\mathcal{L}_2$ das funções reais (ou complexas) da variável real x definidas num intervalo (α, β) e de quadrado integrável no sentido que:

$$\int_\alpha^\beta |\psi(x)|^2 dx < \infty. \tag{100}$$

O produto escalar de ψ e $\psi' \in \mathcal{L}_2$ se define como:

$$(\psi(x), \psi'(x)) = \int_\alpha^\beta \psi^*(x)\psi'(x)dx. \tag{101}$$

Problema F.1

Verifique se (101) *satisfaz as propriedades* (89, 90, 91).

- Um exemplo de como a relação (99) é aplicada considerando um espaço vetorial específico, seja o operador P que atua no espaço $\mathcal{L}_2$ das funções ψ definidas no intervalo $(0, 1)$ com as condições de contorno $\psi(0) = \psi(1) = 0$, sendo P tal que $P\psi(x) = i\frac{d}{dx}\psi(x)$. Calculemos $(\psi'(x), P\psi(x)) - (P\psi'(x), \psi(x))$ o que nos dá:

$$\begin{aligned}
&= \int_0^1 (\psi'(x))^* \left(i\frac{d\psi(x)}{dx}\right) dx - \int_0^1 \left(i\frac{d\psi(x)}{dx}\right)^* \psi(x)dx \\
&= i\int_0^1 \left(\psi'(x)^*\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d\psi'(x)^*}{dx}\psi(x)\right) dx \\
&= i\int_0^1 \frac{d}{dx}(\psi'(x)^*\psi(x))dx \\
&= i(\psi'(x)^*\psi(x))\Big|_0^1 \\
&= i(\psi'(1)^*\psi(1) - \psi'(0)^*\psi(0))
\end{aligned}$$

e essa expressão é nula porque $\psi(0) = \psi(1) = 0$. Assim tem-se que nesse espaço $\mathcal{L}_2(0, 1)$, P é hermitiano.

- Um tipo de equação que tem importância na teoria quântica é

$$\sigma\mathbf{x} = a\mathbf{x} \tag{102}$$

onde σ é um operador, $\mathbf{x} \in \mathbf{h}$ e a é um número. Tal equação é dita de autovalor: $\mathbf{x}$ é chamado autovetor de σ correspondente ao autovalor a.

Para o operador P definido no ítem anterior tem-se:

$$\begin{aligned}
&P\psi(x) = a\psi(x) \\
&i\frac{d\psi(x)}{dx} = a\psi(x) \qquad \text{ou} \quad \frac{d\psi(x)}{dx} = -ia\psi(x).
\end{aligned}$$

o que resulta em $\psi_\alpha(x) = ce^{-iax}$ com $c =$ constante.

Problema F.2

Considerando que $\psi(x)$ está definida no intervalo $-\infty < x < \infty$ e $\psi(x) \xrightarrow{x \to \pm\infty} 0$ determine os possíveis valores de a.

V. PROBLEMA DE HEISENBERG. FORMULAÇÃO DE DIRAC

A. Introdução

A Mecânica Quântica de um sistema com f graus de liberdade descrito classicamente pelo Lagrangiano $L(q,\dot{q})$, onde $q = (q^1, q^2, \ldots, q^f)$, $\dot{q} = (\dot{q}^1, \dot{q}^2, \ldots, \dot{q}^f)$, ou pelo Hamiltoniano $H(q,p)$, onde $p = (p_1, p_2, \ldots, p_f)$ pode ser formulada de seguinte maneira: propôe-se encontrar operadores lineares $\hat{p}_j(t)$ e $\hat{q}_j(t)$ com $j = 1, 2, \ldots, f$, operando sobre um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ e satisfazendo as equações [**?**]

$$\frac{d\hat{q}_j(t)}{dt} = i\left[H\left(\hat{q}_j(t), \hat{p}_j(t)\right), \hat{q}_j(t)\right], \tag{103}$$

$$\frac{d\hat{p}_j(t)}{dt} = i\left[H\left(\hat{q}_j(t), \hat{p}_j(t)\right), \hat{p}_j(t)\right], \qquad i = \sqrt{-1} \tag{104}$$

onde $[A,B] = AB - BA$ é chamado de comutador de A e B, tendo com $j = 1, 2, \ldots, f$ e $-\infty < t < \infty$,

$$[\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t)] = 0, \tag{105}$$

$$[\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t)] = 0, \tag{106}$$

$$[\hat{q}_j(t), \hat{p}_k(t)] = i\delta_{jk}. \tag{107}$$

B. Solução do Problema de Heisenberg

Ó problema apresentado na secção V A é denominado de Problema de Heisenberg e sua solução foi apresentada por J. von Neumann (1931) dividida em duas etapas: a cinemática e a dinâmica.

Etapa Cinemática: procura-se inicialmente operadores $\hat{q}^0_k$ e $\hat{p}^0_k$, com $j = 1, 2, \ldots, f$, atuando num espaço de Hilbert e satisfazendo as relações de comutação

$$\left[\hat{q}^0_j, \hat{q}^0_k\right] = \left[\hat{p}^0_j, \hat{p}^0_k\right] = 0, \tag{108}$$

$$\left[\hat{q}^0_j, \hat{p}^0_k\right] = i\delta_{jk}. \tag{109}$$

von Neumann demonstrou que a solução é a seguinte: o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é o espaço $\mathcal{L}_2$ das funções $\psi(q_1, q_2, \ldots, q_f)$ de quadrado integrável em relação aos argumentos q_j, isto é

$$\int \psi^*(q_1, q_2, \ldots, q_f)\psi(q_1, q_2, \ldots, q_f) dq_1 dq_2 \ldots dq_f < \infty \tag{110}$$

e os operadores $\hat{q}^0_j$ e $\hat{p}^0_j$ são dados por

$$(\hat{q}^0_j\psi)(q_1, q_2, \ldots, q_f) = q_j\psi(q_1, q_2, \ldots, q_f) \tag{111}$$

$$(\hat{p}^0_j\psi)(q_1, q_2, \ldots, q_f) = -i\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q_1, q_2, \ldots, q_f) \tag{112}$$

Deve-se notar que essas realizações dos $\hat{q}^0_j$ e $\hat{p}^0_j$ são as da Mecânica Ondulatória de De Broglie e Schrödinger, e que o produto escalar em $\mathcal{H}$ é definido [**?**] por

$$(\psi'(q), \psi(q)) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi'^*(q_1, \ldots, q_f)\psi(q_1, \ldots, q_f) dq_1 \ldots dq_f \tag{113}$$

Etapa Dinâmica: Nos casos fisicamente interessantes tem-se $H(\hat{q}^0_j, \hat{p}^0_j)$ um operador hermitiano obtido do Hamiltoniano clássico $H(q^j, p_j)$ e que pelas relações (111, 112) é um operador diferencial $H(q_j, -i\partial/\partial q_j)$. Esse operador satisfaz a equação

$$i\frac{\partial\hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = H(q_j, -i\frac{\partial}{\partial q_j})\hat{U}(t,t_0) \tag{114}$$

com $\hat{U}(t,t_0)$ um operador tal que $\hat{U}(t_0,t_0) = 1$ e

$$\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0) = 1. \tag{115}$$

Com o operador $\hat{U}(t,t_0)$ define-se

$$\hat{q}_j(t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{q}^0_j(t)\hat{U}(t,t_0), \tag{116}$$

$$\hat{p}_j(t) = \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{p}^0_j(t)\hat{U}(t,t_0), \tag{117}$$

os quais satisfarão as relações (105, 106, 107) e (103, 104). Em partícular se,

$$\psi(q,t) = \hat{U}(t,t_0)\psi(q,t_0), \tag{118}$$

resulta da equação (114) que

$$i\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t} = H\left(q_j, -i\frac{\partial}{\partial q_j}\right)\psi(q,t), \tag{119}$$

uma equação à derivadas parciais, denominada Equação de Schrödinger, cujas soluções $\psi(q,t)$ descrevem o estado [**?**] do sistema dinâmico cujo Hamiltoniano é dado por $H(\hat{q}^0_j, \hat{p}^0_j)$.

Problema B.1

Considerando $H(q_j, p_j)$ *um polonômio nos* q_j *e* p_j, *verifique se* $\hat{q}_j(t)$ *e* $\hat{p}_j(t)$ *dados por* (116) *e* (117) *satisfazem as equações* (105), (106), (107) *e* (103), (104).

Com o estado do sistema dinâmico representado pela função $\psi(q,t)$ (função de onda, função de estado) o valor esperado de uma observável $f = f(q,p)$ é postulado como

$$\langle f \rangle = \int \psi(q,t)^* f(q, -i\partial/\partial q)\psi(q,t) dq. \tag{120}$$

No operador $f(q, -i\partial/\partial q)$ os termos envolvendo produtos de $\hat{q}$ e $\hat{p}$ são ordenados de forma conveniente tal que $\hat{f} = f(q, -i\partial/\partial q)$ seja um operador Hermitiano e apropriado do ponto de vista experimental. A função de estado $\psi = \psi(q,t)$ em (120) é normalizada, i.e.,

$$\int \psi(q,t)^*\psi(q,t) dq = \int |\psi(q,t)|^2 dq = 1. \tag{121}$$

C. Estados Estacionários

As funções de estado da forma

$$\psi(q,t) = \exp(-iEt)\varphi(q) \tag{122}$$

que satisfazem a Equação de Schrödinger (119) descrevem estados estacionários. Neste caso tem-se que $\varphi(q)$ obedece à equação

$$H\left(q, -i\frac{\partial}{\partial q}\right)\varphi(q) = E\varphi(q), \tag{123}$$

ou seja, $\varphi(q)$ são autofunções do operador $\hat{H} = H(q, -i\partial/\partial q)$ e a energia de sistema E, seu autovalor. A equação (123) é conhecida como Equação de Schrödinger independente do tempo.

Resolvendo-se a equação (123) obtém-se um conjunto de autofunções e correspondentes autovalores. Notando as funções por $\varphi_n(q)$ e o respectivo autovalor por E_n, ou seja,

$$H\left(q, -i\frac{\partial}{\partial q}\right)\varphi_n(q) = E_n\varphi_n(q), \tag{124}$$

mostra-se que essas funções $\varphi_n(q)$ satisfazem as relações

$$\int \varphi_n^*(q)\varphi_m(q) = \delta_{nm}, \tag{125}$$

$$\sum_n \varphi_n(q'')\varphi_n^*(q') = \delta(q'' - q'), \tag{126}$$

onde $\delta(q'' - q')$ é denominada delta de Dirac e tem a propriedade que

$$\int \varphi(q'')\delta(q'' - q')dq'' = \varphi(q'). \tag{127}$$

O conjunto de funções que satisfazem as relações (125) e (126) é dito ser um conjunto completo ortonormal do operador em estudo (no presente caso $\hat{H} = H(q, -i\partial/\partial q)$).

D. Um exemplo

Como um exemplo para elucidar alguns dos fatos da teoria considere uma partícula de massa m dentro de uma caixa podendo-se movimentar apenas na direção de x. Este sistema recebe o nome de partícula na caixa unidimensional; a partícula se encontra confinada entre duas barreiras de potencial infinito mas é livre para se movimentar dentro da caixa (veja figura 1). Para tratar o problema com a teoria quântica, comecemos formulando a teoria clâssica Hamiltoniana.

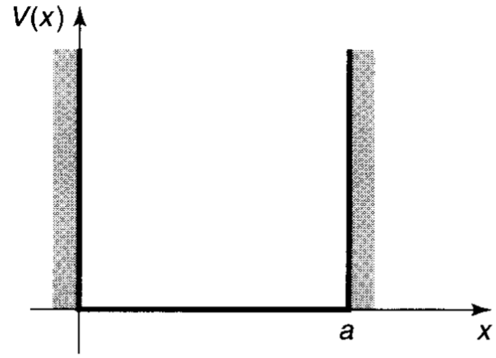

Figura 1: Poço de potencial infinito de longitude a.

1. *Mecânica Clássica*

1. Energia Potencial

$$V(x) = 0, \qquad \text{para } 0 \le x \le a,$$
$$V(x) \to \infty, \qquad \text{para } x < 0,\ x > a,$$

onde a é a dimensão da caixa.

2. Energia Cinética

$$T = \frac{p_x^2}{2m}, \qquad m = \text{massa da partícula} \tag{128}$$

3. Hamiltoniano

$$H = T + V(x) = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) \tag{129}$$

ou seja,

$$H = \frac{p_x^2}{2m}, \qquad \text{para } 0 \le x \le a \tag{130}$$

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x), \qquad \text{com } V(x) \to \infty \qquad \text{para } x < 0,\ x > a \tag{131}$$

4. Parêntesis de Poisson

$$\{x, p_x\} = 1 \tag{132}$$

2. *Mecânica Quântica*

1. Etapa cinemática
   - x corresponde ao operador $\hat{x}^0$, Hermitiano;
   - p_x corresponde ao operador $\hat{p}_x^0$, Hermitiano;
   - O espaço de Hilbert onde os operadores atuam é o espaço das funções $\psi(x)$ tais que $\int |\psi(x)|^2 dx < \infty$.

Segue que,

$$\hat{x}^0\psi(x) = x\psi(x),$$
$$\hat{p}_x^0\psi(x) = -i\frac{\partial\psi(x)}{\partial x},$$

e então o comutador $\left[\hat{x}^0, \hat{p}_x^0\right]$ dará

$$\begin{aligned}\left[\hat{x}^0, \hat{p}_x^0\right]\psi(x) &= (\hat{x}^0\hat{p}_x^0 - \hat{p}_x^0\hat{x}^0)\psi(x)\\ &= \hat{x}^0\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) - \left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)x\psi(x)\\ &= \hat{x}^0\left(-i\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) + i\psi(x) + ix\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\\ &= -ix\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} + i\psi(x) + ix\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\\ &= i\psi(x),\end{aligned}$$

ou seja,

$$\left[\hat{x}^0, \hat{p}_x^0\right] = i. \quad (133)$$

2. Etapa dinâmica

- a $H(x, p_x)$ corresponde o operador $\hat{H} = H(x, -i\partial/\partial x)$,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (134)$$

ou seja,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}, \qquad \text{para } 0 \leqslant x \leqslant a \quad (135)$$
$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \qquad \text{com } V(x) \to \infty \qquad \text{para } x < 0, \ x \text{ (136)}$$

- O operador $\hat{U}(t, t_0)$ é determinado por

$$i\frac{\partial\hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t, t_0), \quad (137)$$

o que resulta em

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}. \quad (138)$$

- $\hat{x}(t)$ é obtido de $\hat{x}^0$ por:

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{x}^0e^{-i\hat{H}t}; \qquad t_0 = 0 \quad (139)$$

- $\hat{p}_x(t)$ é obtido de $\hat{p}_x^0$ por:

$$\hat{p}_x(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{p}_x^0e^{-i\hat{H}t}; \qquad t_0 = 0 \quad (140)$$

de onde segue que,

$$[\hat{x}(t), \hat{p}_x(t)] = i. \quad (141)$$

- A equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\left(x, -i\frac{d}{dx}\right)\psi(x,t) \quad (142)$$

e a equação de Schrödinger independente do tempo é

$$H\left(x, -i\frac{d}{dx}\right)\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \quad (143)$$

obtida, escrevendo-se $\psi(x,t) = e^{-iEt}\varphi(x)$ em (142).
No presente caso a equação (143) com os operadores de (133) resulta em

$$-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x), \qquad \text{para } 0 \leqslant x \leqslant a$$
$$\left(-\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x), \text{ com } V(x) \to \infty \text{ para } x < 0$$

Tendo obtido a equação (143), suas soluções darão a função de estado $\varphi_n(x)$ e o correspondente valor da energia do sistema E_n neste estado.

E. Solução da equação (143)

Consideremos inicialmente a equação (145). Esta equação para E_n finito e $\varphi_n(x)$ finito, tem seu lado direito finito; o lado esquerdo, no entanto, tende a infinito. Daí a solução é $\varphi_n(x)$ ser nulo para todo valor de x neste domínio $(x > 0,\ x < a)$. Assim tem-se

$$\varphi_n(x) = 0, \qquad \text{para } x > 0,\ x < a. \quad (146)$$

O fato que $\varphi_n(x) = 0$ neste domínio de x implica que a probabilidade de encontrar, por uma medida, a partícula nesta região é nula pois $|\varphi_n(x)|^2 = 0$.

Considerando a (144) tem-se que a solução geral dessa equação é

$$\varphi_n(x) = C_1e^{i\sqrt{2mE_n}x} + C_2e^{-i\sqrt{2mE_n}x}, \quad (147)$$

onde C_1 e C_2 são constantes a determinar impondo condições de contorno. No caso, para que haja continuidade da função $\varphi_n(x)$ dentro e fora da caixa é necessarío que

$$\varphi_n(0) = \varphi_n(a) = 0, \quad (148)$$

o que substituindo em (147) dá

$$\varphi_n(0) = C_1 + C_2 = 0 \quad (149)$$
$$\varphi_n(a) = C_1e^{i\sqrt{2mE_n}a} + C_2e^{-i\sqrt{2mE_n}a} = 0 \quad (150)$$

De (149) segue que $C_1 = -C_2$, o que substituindo em (150) dá

$$\text{se } \sqrt{2mE_n}a = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \sqrt{2mE_n}a = n\pi, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \quad (151)$$

ou ainda,

$$2mE_na^2 = n^2\pi^2 \qquad \Longrightarrow \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2}{2ma^2}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots . \tag{152}$$

Assim, impondo à partícula a condição de ficar entre "paredes"de uma caixa a energia já não pode ter qualquer valor; somente são permitidos determinados valores dados por (152) e que portanto dependem das dimensões da caixa: a energia está quantizada.

Para determinar as autofunções $\varphi_n(x)$ tem-se de (147) com $C_1 = -C_2$ que

$$\varphi_n(x) = A\text{sen}(\sqrt{2mE_n}x), \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2}{2ma^2} \tag{153}$$

onde A é uma constante a determinar.

Substituindo em $\varphi_n(x)$ o valor de E_n tem-se que

$$\varphi_n(x) = A\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

onde o valor $n = 0$ foi excluído porque corresponde á solução trivial $\varphi_0(x) = 0$. A constante A é determinada usando a condição (121) de normalização, ou seja,

$$A^2 \int_0^a \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

o que resulta em $A = \sqrt{2/a}$; assim a função de estado correspondente ao autovalor $E_n = n^2\pi^2/2ma^2$ é

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{154}$$

e o número n é dito ser o número quântico para o sistema em estudo.

F. Funções Ortogonais

Duas funções ψ_i e ψ_j das mesmas variáveis e definidas num mesmo intervalo são ortogonais se satisfazem a relação

$$\int \psi_i^*(x)\psi_j(x)dx = 0, \qquad i \neq j.$$

As funções obtidas na secção V E são todas ortogonais entre si pois,

$$\int_0^a \left(\sqrt{\frac{2}{a}}\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right)\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\text{sen}\left(\frac{m\pi x}{a}\right)\right) dx = \frac{2}{a}\int_0^a \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\text{sen}\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx$$

e chamando $y = \frac{\pi x}{a}$, $dy = \frac{\pi}{a}dx$, tem-se

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\pi \text{sen}(ny)\text{sen}(my)dy = 0, \qquad n \neq m. \tag{155}$$

Como as funções $\varphi_n(x)$ dadas por (147) são normalizadas, tem-se que $\{\varphi_n\}$ é um conjunto ortonormal de funções e escreve-se

$$\int \varphi_i^*(x)\varphi_j(x)dx = \delta_{ij} \tag{156}$$

Essa propriedade das funções $\{\varphi_n(x)\}$ é uma característica geral das autofunções de operadores Hermitianos, i.e., autofunções de operador Hermitiano caracterizadas por deferentes números quânticos são ortogonais. Também é uma propriedade geral dos operadores Hermitianos ter autovalores reais.

G. Valor médio (valor esperado)

A relação (120) tem um significado que pode ser resumido no seguinte: dado um operador $\hat{f}$ que corresponde a uma propriedade física f e um conjunto de sistemas idênticos descritos pela função de estado ψ, o resultado de uma série de medições da propriedade f em diferentes membros do conjunto, em geral não é o mesmo. Em consequência, obtém-se uma distribuição de valores e o valor médio é dado por:

$$\langle f\rangle = \int \psi^*(q,t)\hat{f}\psi(q,t)dq. \tag{157}$$

com $\int \psi^*(q,t)\psi(q,t)dq$.

Problema G.1

Considere o estado $\varphi_2(x)$ da partícula numa caixa unidimensional. Determine o valor médio do momento linear p_x neste estado. Determine também o valor esperado (valor médio) da energia no mesmo estado. Explique os resultados obtidos.

H. Formulação de Dirac e Álgebra de Lie

Consideremos a equação (120) e a solução

$$\psi(q,t) = e^{-i\hat{H}t}\psi(q,0), \qquad \hat{H} = H(q, -i\partial/\partial q), \tag{158}$$

da equação de Schrödinger dependente do tempo. Então a equação (120) pode ser escrita como

$$\langle f\rangle = \int \psi^*(q,0)e^{i\hat{H}t}f(q,-i\partial/\partial q)e^{-i\hat{H}t}\psi(q,0). \tag{159}$$

Essa equação possibilita definir o observável Hermitiano dependente do tempo

$$\hat{f}(t) = e^{i\hat{H}t}f(q,-i\partial/\partial q)e^{-i\hat{H}t} \tag{160}$$

incorporando a dinâmica quântica, com as funções de estado permanecendo fixas no tempo. Em particular para q e $-i\partial/\partial q$ ter-se-á

$$\hat{q}(t) = e^{i\hat{H}t} q e^{-i\hat{H}t}, \tag{161}$$

$$\hat{p}(t) = e^{i\hat{H}t}\left(-i\frac{\partial}{\partial q}\right)e^{-i\hat{H}t}, \tag{162}$$

de onde segue que

$$[\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t)] = 0, \qquad [\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t)] = 0, \qquad [\hat{q}_j(t), \hat{p}_k(t)] = \delta_{jk}, \tag{163}$$

ou seja, retoma-se o Problema de Heisenberg.

Problema H.1

1. *Usando a* (160) *verifique que:*

$$\frac{d\hat{f}(t)}{dt} = \left[\hat{f}(t), \hat{H}\right] \tag{164}$$

2. *Sendo* $\hat{f}(t), \hat{g}(t)$ *e* $\hat{h}(t)$ *operadores Hermitianos verifique se:*

$$\left[\hat{f}(t), \hat{g}(t)\right] = -\left[\hat{g}(t), \hat{f}(t)\right]; \qquad \left[\hat{f}(t), \kappa\right] = 0 \tag{165a}$$

$$\left[\hat{f}(t), \hat{g}(t)\right]\hat{h}(t) + \hat{g}(t)\left[\hat{f}(t), \hat{h}(t)\right] = \left[\hat{f}(t), \hat{g}(t)\hat{h}(t)\right] \tag{165b}$$

$$\left[\hat{f}(t), \hat{g}(t) + \hat{h}(t)\right] = \left[\hat{f}(t), \hat{g}(t)\right] + \left[\hat{f}(t), \hat{h}(t)\right] \tag{165c}$$

$$\left[\hat{f}(t), [\hat{g}(t), \hat{h}(t)]\right] + \left[\hat{h}(t), [\hat{f}(t), \hat{g}(t)]\right] + \left[\hat{g}(t), [\hat{h}(t), \hat{f}(t)]\right] = 0 \tag{165d}$$

A relação (164) mostra que os observáveis (Operadores Hermitianos) constantes de movimentos são quantidades que terão o comutador com $\hat{H}$, o operador Hamiltoniano, nulo. A relações (165a, 165b, 165c, 165d) mostram que o comutador (também chamado de Lei de Composição de Dirac), associando a cada par de observáveis quânticas uma terceira observável, tem todas as propriedades exigida de um produto de Lie. Além disso o conjunto de todas observáveis quânticas é fechado pela adição e pelo comutador, e a equação (164) é "idêntica" à equação (63), exceto pelo significado da Lei de Composição, ou seja, o comutador de Dirac em (164) e o Parêntesis de Poisson em (63). Segue então que existe uma estrutura de álgebra de Lie tanto no conjunto de observáveis clássicas (funções) como de observáveis quânticos (Operadores Hermitianos). Deve-se notar, no entanto, que a estrutura completa de álgebra de Lie da mecânica clássica com o Parêntesis de Poisson não pode ser preservada em mecânica quântica com o comutador de Dirac sendo a lei de composição, e com a correspondência de Dirac

$$\{f, g\} = h \qquad \Longrightarrow [\hat{f}, \hat{g}] = \hat{h}. \tag{166}$$

Na realidade, somente um certo subconjunto de observáveis segue a correspondência de Dirac (166) no sentido que um subconjunto qualquer, formando de três observáveis clássicas f, g, h, relacionadas pelo parêntesis de Poisson, dá um conjunto de observáveis quânticas $\hat{f}, \hat{g}, \hat{h}$ relacionadas pelo comutador. Um exemplo de tal subconjunto é o formado por observáveis da forma

$$f = \frac{1}{2} f^{(2)}_{ab} X_a X_b + f^{(1)}_a X_a + f^{(0)}, \tag{167}$$

com soma em a e b; $a, b = 1, 2, \ldots, 2n$; $f^{(2)}_{ab} = f^{(2)}_{ba}$, $f^{(1)}_a$ e $f^{(0)}$ constantes; $X_i = q_i, X_{i+n} = p_i$, sendo o parêntesis de Poisson escrito como

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial X_a}\Omega_{ab}\frac{\partial g}{\partial X_b}, \qquad (\text{soma em} a, b) \tag{168}$$

e

$$\Omega_{ab} = \begin{cases} 1 \text{ para } a = b - n \\ -1 \text{ para } a = b + n \\ 0 \text{ nos outros casos} \end{cases} \tag{169}$$

VI. CONCLUSÃO

No presente minicurso apresentamos a formulação Lagrangiana, Hamiltoniana e de Poisson da Mecânica Clássica sem o uso de princípio variacional; a estrutura de álgebra de Lie com o Parêntesis de Poisson como produto de Lie foi realçada em alguns aspectos como por exemplo no estudo de transformações canônicas. A Teoria Quântica foi introduzida por intermédio do Problema de Heisenberg e a solução de von Neumann. A relação entre a solução de von Neumann e a formulação usual em termos da equação de Schrödinger dependente e independente do tempo foi apresentada. Concluindo o minicurso, o processo geral de quantização foi apresentado discutindo-se em termos de álgebra de Lie para qual subconjunto de observáveis a estrutura completa de álgebra de Lie da Mecânica Clássica é preservada em Mecânica Quântica.

Para ampliar o conhecimento dos itens desenvolvidos no minicurso há vários textos, alguns citados na seção Para saber mais.

VII. PARA SABER MAIS

1. E.C.G. Sudarshan e N. Mukunda, *Classical Dynamics: A Modern Perspective*, John Wiley, N. York (1974).

2. N.A. Lemos, *Mecânica Analitica*, Livraria da Física, S. Paulo (2007).

3. J. David M. Vianna, A. Fazzio e S. Canuto, *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos*, Livraria da Física, S. Paulo (2004).

4. P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, The Clarendon Press, Oxford (1947).

5. J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, N. York, (1955).