



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JULIO DE MESQUITA FILHO"  
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS



Trabalho de Conclusão de Curso  
Curso de Graduação em Física

# **FORMALISMO CANÔNICO DA MECÂNICA CLÁSSICA ALICERCE DA MECÂNICA QUÂNTICA**

MIRIAN CASTEJON MOLINA

Orientador: Prof. Dr. Roberto Eugenio Lagos Monaco

Rio Claro – SP  
2011

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
Instituto de Geociências e Ciências Exatas  
Departamento de Física  
*Campus de Rio Claro*

MIRIAN CASTEJON MOLINA

**FORMALISMO CANÔNICO DA MECÂNICA CLÁSSICA  
ALICERCE DA MECÂNICA QUÂNTICA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas do Campus de Rio Claro, da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Roberto Eugenio Lagos Monaco

Rio Claro – SP  
2011

*À minha família.*

## AGRADECIMENTOS

*Agradeço primeiramente à minha família e parentes que sempre apoiaram as minhas escolhas, me dando força e incentivo.*

*Ao meu querido irmão Eduardo que sempre me acolhe com as melhores palavras, duras ou doces, mas necessárias para meu crescimento como pessoa.*

*Ao meu namorado André que sempre me ajuda da melhor forma e que atura minhas crises existenciais e meu desespero diariamente.*

*Aliás, agradeço a todas as pessoas que me convenceram que sou uma pessoa desesperada, isso me ajudou a me desesperar com menos frequência.*

*Agradeço ao meu melhor amigo João que segue ao meu lado há muitos anos, me ajudando nos momentos difíceis.*

*Agradeço aos meus amigos, Adelson e Tchoso pelas longas conversas cientificamente interessantes, pela sincera amizade e momentos inesquecíveis que levarei para sempre, principalmente a véspera da segunda prova de mecânica quântica.*

*Aos meus amigos, moradores e ex-moradores da Toka do Shrek por todo apoio desde meu primeiro ano em Rio Claro.*

*Um agradecimento especial ao Professor Lagos que me trouxe de volta a coragem para prosseguir na carreira científica quando eu me encontrava totalmente desmotivada. Seus conselhos juntamente com sua serenidade me deram forças para continuar.*

*Agradeço aos meus colegas de trabalho por sempre escutar meus desabafos.*

*Agradeço à todos meus amigos de sala por enfrentarmos juntos momentos de sufoco e desespero (olha o desespero aí de novo) e por compartilharmos também momentos de muita alegria.*

*Enfim, muitas pessoas merecem meus sinceros agradecimentos. Pessoas que de uma forma ou outra participaram da minha vida me acrescentando coisas essenciais para meu desenvolvimento.*

*Para finalizar, agradeço à inteligência infinita do meu subconsciente e à Paulaner.*

*”Veja o mundo num grão de areia. Veja o céu em um campo florido. Guarde o infinito na palma da mão, e a eternidade em uma hora de vida.”*

*(William Blake)*

## RESUMO

Apresentamos uma breve revisão do formalismo da mecânica analítica (clássica) e logo revisamos também as principais representações da mecânica quântica, destacando explicitamente as similitudes nas formas das equações correspondentes, e notando que essas formas contribuíram na formulação da mecânica quântica, sendo por suposto que evidências experimentais são os motores que movimentam a procura de uma nova física.

**Palavras chaves:** formalismo canônico. mecânica clássica. mecânica quântica.

## ABSTRACT

We present a succinct review of the canonical formalism of classical mechanics, followed by a brief review of the main representations of quantum mechanics. We emphasize the formal similarities between the corresponding equations. We notice that these similarities contributed to the formulation of quantum mechanics. Of course, the driving force behind the search of any new physics is based on experimental evidence.

**Keywords:** canonical formalism. classical mechanic. quantum mechanics.

# SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	8
2. FORMULAÇÃO CANÔNICA DA MECÂNICA CLÁSSICA.....	11
2.1 MECÂNICA NEWTONIANA.....	11
2.2 MECÂNICA LAGRANGEANA.....	14
2.3 MECÂNICA HAMILTONIANA.....	17
3. REPRESENTAÇÕES DA MECÂNICA QUÂNTICA.....	24
3.1 REPRESENTAÇÃO DE SCHROEDINGER.....	24
3.2 REPRESENTAÇÃO DE HEISENBERG.....	27
3.3 INTERPRETAÇÃO DE BOHM.....	34
4 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	39
REFERÊNCIAS .....	40
APÊNDICES.....	42
A.1 PARÊNTESES DE POISSON.....	42
A.2 OPERADORES.....	43



# 1 INTRODUÇÃO

Na primeira metade do século XX, houve uma grande mudança na nossa compreensão do Universo, surgindo uma nova maneira de explicar o mundo – a Mecânica Quântica. Esta estava em desacordo, sob vários aspectos, com as ideias da antiga mecânica Newtoniana e também com nosso senso comum. Entretanto a coisa mais notável sobre essas teorias é que previam com sucesso o comportamento observado dos sistemas físicos estudados naquela época. Passado já quase um século, toda a evidência experimental até agora confirma a teoria quântica.

Quando nos deparamos como estudantes com todo o formalismo da Mecânica Quântica, acreditamos que sua estrutura é totalmente nova e suas bases em nada se parecem com aquela antiga mecânica que estávamos familiarizados. Assim há certa dificuldade em relacionarmos o formalismo da Mecânica Quântica com o formalismo da Mecânica Clássica. Isso quando há a noção que existe tal conexão. Segundo Leech (1971) [1]:

*“É uma característica da história da mecânica o fato do estudo da física atômica haver sido acompanhado por uma negligência parcial do estudo da mecânica clássica. Isto conduziu a uma situação insatisfatória, na qual o físico devia assimilar os elementos da mecânica quântica sem entender os fundamentos clássicos sobre os quais estas matérias eram edificadas”.*

O meio mais conveniente de fazer a conexão entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica é através da Mecânica Analítica, pois a generalidade de seu formalismo ajuda a desenvolver a capacidade de abstração necessária para compreender as teorias Físicas contemporâneas. Sua estrutura matemática é muito rica e permite um primeiro contato com técnicas e conceitos que são frequentemente empregados nos mais variados ramos da física [2]. Dessa forma, podemos dizer que a Mecânica Analítica é o alicerce da física teórica atual. O intuito deste trabalho é mostrar que a Mecânica Clássica não é um item isolado dentro da física, que deve ser esquecido quando entramos em contato com a física moderna.

Num primeiro momento (Capítulo 2) faremos uma explanação do formalismo canônico da Mecânica Clássica expondo apenas os conceitos mais relevantes<sup>1</sup> para o desenvolvimento do restante do trabalho. Começamos expondo a Mecânica Newtoniana, com a qual estamos bem familiarizados e, em seguida, a Mecânica Lagrangeana e Hamiltoniana, que se baseiam no

---

<sup>1</sup> Para aprofundar os conhecimentos nesta área, sugere-se as referências encontradas no final deste trabalho.

Princípio de Hamilton (mínima ação) que estabelece que a evolução do sistema de uma certa configuração para outra é tal que o funcional ação é um mínimo. Embora este princípio já fosse conhecido na época de Lagrange devido aos estudos de Maupertuis e Euler, leva o nome de Hamilton pois este eliminou, em 1834, algumas restrições deste princípio.

O matemático italiano Joseph Louis Lagrange (1736-1813) desenvolveu a chamada Mecânica Lagrangeana, cujo formalismo considera uma função escalar  $L = L(q, \dot{q}, t)$  chamada Lagrangeana, que caracteriza o sistema estudado. Assim, um sistema pode ser descrito pelas equações de Lagrange, que são  $N$  (graus de liberdade) equações diferenciais de segunda ordem e invariantes sob uma transformação de coordenadas. Algumas das vantagens sobre a formulação newtoniana é que, além da forma invariante das equações, as forças são literalmente derivadas da função Lagrangeana.

Já o formalismo Hamiltoniano, criado em 1833 pelo matemático irlandês William Rowan Hamilton (1805-1865), também baseado no Princípio de Hamilton, considera uma função escalar denominada Hamiltoniana  $H = H(q, p, t)$ . Este formalismo descreve um sistema através das equações de Hamilton, que são  $2N$  equações diferenciais ordinárias de primeira ordem e que, combinadas, nos levam as equações de segunda ordem de Lagrange [4]. A vantagem da Hamiltoniana está na formalidade da teoria, que fornece um método flexível para a investigação da Mecânica Clássica e serve de fundamento para a Mecânica Quântica. Na formulação Hamiltoniana as coordenadas e os momentos são variáveis independentes, o que torna possível considerar mudanças de variáveis do espaço de fase que preservem a forma das equações de Hamilton. Isso permite, através de transformações canônicas, a escolha de variáveis que simplifiquem o problema [3].

Ainda no mesmo capítulo, falaremos sobre a teoria de Hamilton-Jacobi que desempenhou um papel crucial na construção da Mecânica Ondulatória por Schroedinger, apoiado na analogia entre a mecânica e a óptica geométrica desenvolvida por Hamilton no período de 1828 a 1837 [2]. Esta teoria reduz o problema de Hamilton de  $2N$  equações diferenciais ordinárias de primeira ordem para um problema equivalente de resolução de uma equação diferencial parcial de primeira ordem de  $N+1$  variáveis. Introduziremos a definição de Parênteses de Poisson necessária para expressar as equações de movimento e como veremos, uma ferramenta fundamental no momento da conexão com a Mecânica Quântica.

No próximo Capítulo (3) apresentaremos as representações de Heisenberg e de Schroedinger da Mecânica Quântica. Erwin Schroedinger (1887-1961) utiliza-se da mesma analogia de Hamilton entre óptica geométrica e Mecânica Analítica para formular sua mecânica ondulatória. Segundo Erwin Schroedinger, a Mecânica Clássica seria apenas uma forma

aproximada de uma mecânica com características ondulatórias, sua falha em escala microscópica poderia ser entendida como análoga ao fracasso da óptica geométrica na explicação dos fenômenos de interferência e difração [2]. Conforme Bertin (2007) [5]:

*“Enquanto a mecânica clássica estaria ligada à óptica geométrica, a mecânica quântica estaria conectada à óptica ondulatória. O limite estaria na capacidade da definição de trajetórias, que só é possível na óptica geométrica, onde consideramos que a trajetória tem dimensões muito maiores que o comprimento de onda. O conceito de trajetória não faz sentido na teoria ondulatória, na qual o comprimento de onda é grande em relação ao “caminho da luz”. Considerou-se, então, natural que nos sistemas quânticos a mecânica clássica não funcionasse, tanto quanto a óptica geométrica não poderia ser usada para problemas que envolvessem, por exemplo, a difração”.*

Na denominada representação de Schroedinger o estado de um sistema no instante  $t$  é representado por uma função de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  que contém toda informação sobre o sistema e onde os operadores estão associados à observáveis.

Na representação de Heisenberg formulada pelo físico alemão Werner Karl Heisenberg (1901-1976) o estado de um sistema é considerado fixo e o que evolui no tempo são os operadores que, como dissemos, estão associados a observáveis. Veremos que as equações de movimento dos operadores quânticos são similares às equações clássicas de Hamilton [6]. Esta representação aparece nos livros de Mecânica Quântica elementar de maneira muito resumida e geralmente é apresentada como ferramenta secundária ao formalismo de Schroedinger, fato que gerou uma motivação para discursar sobre o assunto.

Por fim, de maneira a complementar as representações da Mecânica Quântica, apresentaremos uma interpretação alternativa dada pelo físico americano David Joseph Bohm (1917-1992). A teoria surgiu porque de Broglie e Bohm, entre outros como Einstein e o próprio Schroedinger, não estavam totalmente satisfeitos com a falta de clareza do papel que a função de onda de Schroedinger desempenha na Mecânica Quântica [7]. O primeiro livro de Bohm, publicado em 1951, foi considerado por Albert Einstein a exposição mais clara que ele já havia visto sobre o assunto. Logo, as considerações finais são apresentadas (Capítulo 4) assim encerrando este trabalho na esperança de ter cumprido o seu intuito inicial.

## 2 FORMULAÇÃO CANÔNICA DA MECÂNICA CLÁSSICA

### 2.1 MECÂNICA NEWTONIANA

De acordo com as leis de Newton, o movimento de um sistema de  $N$  partículas com  $i$  graus de liberdade é representado pela solução de um sistema de  $N$  equações vetoriais do movimento:

$$\vec{F}_i = \frac{d\vec{p}_i}{dt} = \frac{d}{dt}(m_i\dot{\vec{r}}_i) \quad (1)$$

Onde  $\vec{F}$  é a força resultante que atua sobre uma  $i$ -ésima partícula de massa  $m$ , velocidade  $\vec{v}$ , momento linear  $\vec{p}$ , em que  $\vec{p} = m\vec{v}$  e localizada a uma distância  $r$ . Ou também pode ser representado por  $3N$  equações escalares da forma:

$$F_i = \frac{dp_i}{dt} = \frac{d}{dt}(m_i\dot{x}_i) \quad (2)$$

As equações do movimento são equações diferenciais de segunda ordem e exigem para sua solução a especificação de duas condições iniciais para cada par de variáveis  $x_i$ ,  $\dot{x}_i$ . É praxe especificar as condições iniciais num tempo inicial definido como  $t=0$ . Assim, é necessário especificar as  $6N$  condições iniciais  $x_i(0)$  e  $\dot{x}_i(0)$ .

Em seu *Principia* de 1687, Isaac Newton postulou as três leis do movimento que levam seu nome:

*1ª Lei:* Uma partícula livre (que não sofre nenhuma interação) ou está em repouso ou em movimento retilíneo com velocidade constante. Esta lei, também chamada “Lei da inércia ou de Galileu”, corresponde à apresentação do referencial inercial, que nada mais é do que um referencial para o qual a 1ª lei de Newton é válida [1]. Nas palavras de Lemos (2007) [2]:

*“A existência de um referencial inercial implica a existência de uma infinidade de outros, todos movendo-se entre si em linha reta com velocidade constante. Neste postulado está implícita a noção newtoniana de tempo absoluto, que “flui uniformemente sem relação com qualquer coisa externa” e é o mesmo em todos os referenciais inerciais”.*

2ª Lei: Quando uma partícula interage, seu estado de movimento é alterado segundo:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \quad (3)$$

Onde  $\vec{F}$  é a força resultante que atua sobre a partícula e  $\vec{p}$  é o seu momento linear. Este postulado pressupõe, implicitamente, que a cada partícula está associada uma constante positiva  $m$ , denominada massa, que é a mesma em todos os referenciais inerciais.

3ª Lei: Também conhecida como lei da ação e reação, ela diz que quando duas partículas interagem, a força numa delas possui o mesmo módulo, mesma direção e sentido contrário à força que atua na outra. Em outras palavras, a cada ação corresponde uma reação igual em intensidade e sentido oposto. Assim, se  $\vec{F}_{ij}$  é a força sobre a partícula  $i$  exercida pela partícula  $j$ , então:

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} \quad (4)$$

Além de opostas e iguais, as forças são dirigidas ao longo da linha que une as partículas.

A equação da  $i$ -ésima partícula de um sistema de  $N$  partículas é:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_{ij} + \vec{F}_i^{(e)} \quad (5)$$

Onde  $\vec{F}_i^{(e)}$  é a força externa sobre a  $i$ -ésima partícula. Se somarmos sobre todas as partículas teremos:

$$\sum_{i=1}^N m_i \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_{ij} + \sum_{i=1}^N \vec{F}_i^{(e)} = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i^{(e)} \quad (6)$$

Pois como  $\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}$ , a somatória  $\sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_{ij} = 0$

Como consideramos  $N$  partículas, devemos definir um vetor posição com respeito ao centro de massa do sistema. Assim:

$$\vec{r}_m = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i}{M} \quad (7)$$

Em que  $M$  é a soma de todas as massas do sistema.

Agora reescrevendo (5) com relação ao centro de massa teremos que:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = M \frac{d^2 \vec{r}_m}{dt^2} = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i^{(e)} = \vec{F}^{(e)} \quad (8)$$

Assim, se  $\vec{F}^{(e)} = 0$  temos que o momento linear  $\vec{p}$  é constante, ou seja, o momento linear se conserva.

O momento angular de um sistema de  $N$  partículas é definido como:

$$\vec{L}_i = \vec{r}_i \times \vec{p}_i \quad (9)$$

Partindo de  $F = \frac{d\vec{p}}{dt}$

$$\vec{r}_i \times \vec{F}_i = \vec{r}_i \times \frac{d}{dt}(m_i \dot{\vec{r}}_i) = \frac{d}{dt}(\vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i) = \frac{d}{dt}(\vec{L}_i) \quad (10)$$

Somando sobre todas as partículas do sistema temos que a taxa de variação do momento angular total é igual a soma dos momentos de todas as forças, tanto internas quanto externas, que agem sobre o sistema:

$$\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{F}_i = \sum_{i=1}^N \frac{d}{dt}(\vec{L}_i) = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N (\vec{L}_i) = \frac{d\vec{L}}{dt} \quad (11)$$

Se a variação do momento angular total das forças externas é zero, segue-se que  $\vec{L} = \text{constante}$ , ou seja, o momento angular é conservado.

## 2.2 MECÂNICA LAGRANGEANA

Como vimos na seção anterior, a Mecânica Newtoniana parte das leis de Newton para seu desenvolvimento. Agora trabalharemos um novo formalismo mais geral que não mais partirá das leis de Newton e sim do chamado Princípio de Hamilton. Antes de dizer sobre o que seria este princípio, devemos ter em mente o conceito de coordenadas generalizadas que serão usadas daqui em diante.

Usamos as coordenadas para definir a posição no espaço de um conjunto de partículas. Em geral, nós podemos escolher qualquer conjunto de coordenadas para descrever o movimento de um sistema físico. Certas escolhas, contudo, provam ser mais econômicas que outras por causa da existência de restrições geométricas que restringem a configuração permitida de qualquer sistema [3]. Coordenadas generalizadas são qualquer coleção de coordenadas independentes  $q_i$  que são suficientes para especificar a configuração de um sistema de partículas. O número requerido de coordenadas generalizadas é igual ao número de graus de liberdade do sistema, que são as possibilidades de movimento nas dimensões do espaço considerado. Como exemplo, duas partículas (sem vínculos uma com a outra) precisam de seis coordenadas para sua descrição, pois o sistema tem seis graus de liberdade.

Admitimos que um sistema físico é descrito por  $N$  coordenadas generalizadas e seja caracterizado por uma certa função escalar  $L$ .

O Princípio de Hamilton, também chamado de princípio de mínima ação, estabelece que a evolução do sistema de uma certa configuração para outra é tal que a ação é um mínimo. A ação é definida como:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (12)$$

Em que a função  $L = L(q, \dot{q}, t)$  é chamada de Lagrangeana do sistema e, por simplicidade de apresentação, denota-se por  $q$  ao conjunto de coordenadas  $\{q_1, \dots, q_N\}$ , similarmente com as velocidades generalizadas  $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$ .

Em outras palavras, o trajeto real da partícula, entre os instantes  $t_1$  e  $t_2$  é aquele que minimiza a ação, se fixarmos os extremos da trajetória. Satisfazendo a condição de mínimo e não havendo relações de vínculos entre as coordenadas generalizadas, obtém-se a equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0 \quad (13)$$

A equação (13) foi obtida por Euler em 1744 e leva também o nome de Lagrange por ser a base da formulação lagrangeana.

Assim, na mecânica Lagrangeana, a trajetória de um sistema de partículas é obtido resolvendo a equação de Lagrange, que nos dá a evolução temporal do sistema.

A equação (13) representa para o formalismo Lagrangeano o que a segunda lei de Newton representa para o formalismo Newtoniano. Para resolvermos (13), é necessário conhecer a Lagrangeana  $L$  do sistema. A Lagrangeana de um sistema mecânico é definida como  $L = T - V$ , onde  $T$  é a energia cinética e  $V$  é a energia potencial do sistema. É interessante comentar que as equações de Euler-Lagrange são equivalentes às equações de Newton [3]. Pode-se dizer que a segunda lei de Newton tem “representações” equivalentes.

Se as coordenadas  $q_i$  não aparecem explicitamente na Lagrangeana, temos que  $\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$ , o que implica que  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0$ , e podemos dizer que nessas condições  $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  se conserva. Definimos  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  como o momento generalizado conjugado à variável  $q_i$ . Também definimos a força generalizada  $f_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$ . Dessa forma as equações de Lagrange são exatamente as equações de Newton (escalares) para cada par de coordenadas generalizadas.

$$\frac{d}{dt} (p_i) = f_i \quad (14)$$

Se derivarmos a Lagrangeana  $L(q, \dot{q}, t)$  em relação ao tempo teremos:

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t}$$



$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^N \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \\
&= \sum_{i=1}^N \left( \frac{d}{dt} p_i \dot{q}_i + p_i \ddot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t}
\end{aligned} \tag{15}$$

O termo entre parênteses é a derivada<sup>2</sup> de  $p_i \dot{q}_i$  e a expressão acima se torna:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \tag{16}$$

Se  $L$  não depender explicitamente do tempo,  $\frac{\partial L}{\partial t}$  será zero e (16) se tornará:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i \tag{17}$$

Arrumando (17) teremos:

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L \right) = 0 \tag{18}$$

Ou seja, o termo entre parênteses é igual a uma constante, o que significa que essa quantidade também se conserva. Chamaremos essa quantidade de  $H$ , que é conhecida como a Hamiltoniana do sistema. Temos, então, que  $H$  se conserva quando  $L$  não depender do tempo explicitamente. Assim:

$$H = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i) \tag{19}$$

Uma outra forma de obter a Hamiltoniana é fazendo uma transformada de Legendre da Lagrangeana. A transformada de Legendre [11] de uma função  $f(x)$  pode ser expressa como  $\Lambda = f(x) - x \frac{df(x)}{dx} = f(x) - xp(x)$ .

---

<sup>2</sup> Através da regra do produto

Assim, para  $L(q, \dot{q})$  fixando  $q$ , temos a função  $L(q, \dot{q}) = f(\dot{q})$  e o momento generalizado do sistema é  $p = \frac{\partial L(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial f(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}}$ . A transformada de Legendre pode ser representada como  $\Lambda(f)(p) = p\dot{q} - f(\dot{q}) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}) = H(q, p)$ . Vimos então que, fixado  $q$ , a Hamiltoniana na variável  $p$  é a transformada de Legendre da Lagrangeana na variável  $\dot{q}$ .

Se a energia potencial  $V$  do sistema depender apenas das coordenadas generalizadas, a Hamiltoniana será a energia total do sistema.

$$H = T + V \quad (20)$$

### 2.3 MECÂNICA HAMILTONIANA

Há ainda outra forma (“representação”) de descrever a mecânica clássica que está baseada no estudo da Hamiltoniana do sistema. Continuaremos partindo do princípio de Hamilton, porém agora a evolução temporal do sistema será dada pelas equações de Hamilton, que são equações diferenciais de primeira ordem e que, quando combinadas, levam às mesmas equações diferenciais obtidas pelo formalismo Lagrangeano, ou seja, a formulação Hamiltoniana é equivalente à formulação de Lagrange, que por sua vez, é equivalente à formulação de Newton.

Partindo da Lagrangeana  $L = L(q, \dot{q}, t)$  faremos:

$$\begin{aligned} dL &= \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^N p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (21)$$

Através da derivada de  $p_i \dot{q}_i$  obtemos  $p_i d\dot{q}_i = d(p_i \dot{q}_i) - \dot{q}_i dp_i$  e substituindo em (21):

$$dL = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^N d(p_i \dot{q}_i) - \dot{q}_i dp_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (22)$$

Rearranjando os termos da equação acima temos:

$$d\left(\sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L\right) = \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (23)$$

Aplicando a definição dada em (19):

$$dH = \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (24)$$

O que mostra que a Hamiltoniana  $H$  depende das variáveis  $p$ ,  $q$  e  $t$ . Assim  $H = H(q, p, t)$ .

Usando a equação de Euler-Lagrange  $\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$  na equação (24):

$$dH = \sum_{i=1}^N \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^N \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (25)$$

Agora derivaremos a Hamiltoniana  $H$ :

$$dH = \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (26)$$

Comparando as expressões obtidas em (25) e (26) podemos fazer as seguintes associações:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (27)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (28)$$

As expressões (27) e (28) são conhecidas como as *Equações de Hamilton* e constituem a forma canônica de Hamilton das equações do movimento. Também podemos fazer a associação:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad (29)$$

A partir da Hamiltoniana podemos chegar à Equação de Hamilton-Jacobi. Esta equação geralmente é obtida a partir de uma transformação canônica (mudança de variáveis que preservam a física do sistema, neste caso, a forma das equações de Hamilton) onde procura-se uma nova e equivalente Hamiltoniana com valor nulo, resultando numa integração trivial das equações de movimento. Resulta-se que a ação é a função geratriz desta transformação, que satisfaz uma equação (não trivial). Porém, como mostrado no trabalho de A. Small e K. S. Lam [8], a equação de Hamilton-Jacobi pode ser obtida como uma consequência direta da integral de ação, dada em (12), dispensando o tratamento usual através das transformações canônicas.

Consideraremos então, por simplicidade, um sistema com um grau de liberdade apenas, que logo, pode facilmente ser generalizado para três dimensões e vários corpos. Começaremos pela expressão (12) que, como visto anteriormente, é a integral de ação. É preciso também lembrar que  $L = p\dot{q} - H$  sendo  $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ . De (12) tiramos que

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= L \rightarrow \frac{dS}{dt} = p\dot{q} - H \\ \frac{dS}{dt} &= p \frac{dq}{dt} - H \rightarrow dS = p dq - H dt \end{aligned} \quad (30)$$

Ou seja,  $S=S(q,t)$ .

Reescrevemos a integral expressa em (12) da seguinte forma:

$$S(q, t) = \int_{t_0}^t p\dot{q} dt - \int_{t_0}^t H dt \quad (31)$$

Substituindo  $\dot{q} dt$  em (31) lembrando que  $\dot{q} = dq/dt$ .

$$S(q, t) = \int_{q_0}^q p dq - \int_{t_0}^t H dt \quad (32)$$

Esta expressão pode ser reescrita da seguinte forma:

$$S(q, t) = \int_{q_0}^q \frac{\partial S}{\partial q} dq - \int_{t_0}^t \frac{\partial S}{\partial t} dt \quad (33)$$

O que nos mostra que:

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p \quad (34)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \quad (35)$$

Sendo a Hamiltoniana dependente de  $q$ ,  $p$  e  $t$  e com  $p$  expresso em (34) obtemos a equação de Hamilton-Jacobi:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) \quad (36)$$

A teoria de Hamilton-Jacobi pode ser considerada “*o auge da mecânica analítica*”, segundo N. Lemos (2007) [2]. Isso porque é uma importante ferramenta para a integração das equações de movimento. A teoria de Hamilton-Jacobi desempenhou um papel muito importante na construção da mecânica ondulatória de Schroedinger apoiado numa analogia feita por Hamilton entre a mecânica e a ótica geométrica.

Brevemente, a ótica geométrica ou de raios, é o regime de alta frequência ou, equivalentemente, o limite de comprimento de onda pequeno da equação de ondas clássica. Nesse regime, a fase das ondas varia (no espaço e no tempo) muito rapidamente quando comparada com a variação da amplitude das ondas. Considerando um meio não homogêneo com índice de refração  $n(x)$  e  $c$  sendo a velocidade da luz no vácuo, a equação de ondas (clássica) é dada por

$$\nabla^2 \Psi = \frac{n^2(x)}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad (37)$$

A onda pode ser representada, pela amplitude  $A(x, t)$  e a fase  $\varphi(x, t) = kS(x) - \omega t$  (a separação espaço temporal da fase foi explicitada, sendo  $k = \frac{\omega}{c}$  o número de onda), da forma geral:

$$\Psi(x, t) = A(x)e^{i(kS(x) - \omega t)} \quad (38)$$

Uma expansão sistemática da fase num parâmetro pequeno resulta, no caso clássico, na aproximação de Jeffreys e Lord Rayleigh, e, no caso quântico (equação de Schroedinger), na aproximação semi clássica de Wenzel, Kramers e Brillouin (também Jeffreys e Rayleigh) (WKB-JR). Apresentamos a solução na ordem mais baixa no presente trabalho. Substituindo na equação de ondas (37) têm-se duas equações para  $S$  e  $A$ :

$$\nabla^2 A + k^2 A(n^2 - (\nabla S)^2) = 0 \quad (39)$$

$$2\nabla A \nabla S + A \nabla^2 S = 0 \quad (40)$$

No limite da ótica geométrica a amplitude varia muito lentamente quando comparada com a variação da fase, podemos assim desprezar a segunda derivada espacial da amplitude na equação (39), obtendo a denominada aproximação eikonal.

$$(\nabla S(x))^2 = n(x)^2 \quad (41)$$

equação idêntica a equação de Hamilton-Jacobi fazendo a identificação:

$$(\nabla S)^2 = n^2(x) = 2m(E - V(x)) \quad (42)$$

Na analogia de Hamilton, no regime da ótica geométrica, as ondas (ou raios) podem ser consideradas como partículas num potencial  $V$  relacionado com o índice de refração  $n$  através da equação (42). Hamilton poderia também ter considerado a analogia inversa, que partículas em certo regime podem ser consideradas como ondas com comprimento de ondas muito pequeno associando o potencial mecânico a um índice de refração dado pela última equação.

Veremos mais adiante que há um vínculo muito estreito entre esta formulação da Mecânica Clássica com a formulação de Schroedinger da Mecânica Quântica.

A partir de agora, consideraremos uma grandeza genérica  $A = A(q, p, t)$  definida no espaço de fases. A sua evolução temporal é dada por

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (43)$$

onde  $i$  percorre todos os graus de liberdade do problema.

Pretendemos que esta expressão represente uma evolução temporal acompanhando as equações de movimento, por isso devemos usar as equações de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (44)$$

Substituindo (44) na expressão (43) a evolução temporal de  $A$  torna-se:

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (45)$$

Definimos os *Parênteses de Poisson* (ver Apêndice A.1) para duas variáveis dinâmicas como:

$$\{F, G\} = \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \quad (46)$$

e assim podemos reescrever a equação (45) da forma compacta:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (47)$$

Que também pode ser representada de uma forma mais elegante:

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial A}{\partial q_i} & \frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \frac{\partial A}{\partial p_i} & \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{array} \right| + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (48)$$

Substituindo  $A$  pelas variáveis dinâmicas  $q$  ou  $p$  temos as equações de Hamilton em termos dos parênteses de Poisson.

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\} \quad (49)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \left\{ \frac{\partial q_i}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial q_i}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\} \quad (50)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (51)$$

Agora considerando o momento  $p$ :

$$\frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\} \quad (52)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \left\{ \frac{\partial p_i}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial p_i}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\} \quad (53)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (54)$$

Para os dois casos,  $\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial p_i}{\partial t} = 0$ , pois tanto  $q_i$  quanto  $p_i$  não dependem do tempo explicitamente, em outras palavras, a dependência temporal das variáveis dinâmicas é exclusivamente via a solução das equações diferenciais correspondentes. Dessa forma obtemos, através dos parênteses de Poisson, as equações de Hamilton.

Os parênteses de Poisson são importantes não apenas para o formalismo da mecânica clássica; na linguagem de parênteses de Poisson é que se passa de uma maneira mais imediata da mecânica clássica à quântica. Este processo é conhecido como quantização canônica.



### 3 REPRESENTAÇÕES DA MECÂNICA QUÂNTICA

#### 3.1 REPRESENTAÇÃO DE SCHROEDINGER

Como mencionamos no capítulo anterior, a teoria de Hamilton-Jacobi desempenhou um papel muito importante na construção da mecânica ondulatória de Schroedinger. Imaginemos uma partícula em uma dimensão com potencial  $V(x)$  e com a Hamiltoniana igual a:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (55)$$

Considerando que o sistema seja conservativo. Pela equação de Hamilton-Jacobi (36) temos que:

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (56)$$

Lembrando que  $H$  depende de  $q$ ,  $\frac{\partial S}{\partial q}$  e  $t$  e igualando (55) e (56):

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (57)$$

Como mostrado nos textos [2] e [8] para sistemas com energia conservativa podemos separar a função  $S$  (ação) como

$$S = W(x) - Et \quad (58)$$

Resultando na identificação da constante de separação  $E$  com a energia.

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t} = E \quad (59)$$

$W(x)$  é denominada a função principal de Hamilton. Como  $\frac{\partial S}{\partial x} = p$  temos que

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial x} = p \quad (60)$$

Substituindo em (57):

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + V(x) - E = 0 \quad (61)$$

De onde obtemos o valor do momento  $p$ :

$$\frac{\partial W}{\partial x} = \sqrt{2m(E - V)} = p \quad (62)$$

Se a derivada de  $W$  em relação a  $x$  é  $p$ , então  $W = px$ . Portanto,  $S = px - Et$ . Percebemos que esta expressão é similar à fase de uma função de onda de uma partícula livre  $\psi = e^{iS}$ , exceto por um fator  $1/\hbar$ . Supondo a forma  $W = k \ln \psi$  (transformação utilizada por Schroedinger para deduzir sua famosa equação, em analogia com a entropia) e substituindo na expressão (61) chegamos a:

$$\frac{k^2}{2m} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + (V - E)\psi^2 = 0 \quad (63)$$

Schroedinger supôs, então, que a expressão acima fosse diferente de zero<sup>3</sup>, na nova mecânica, [11] e denotando aquele “resto” pela função  $R \left( \psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}, x \right)$ , tem-se que

$$\frac{k^2}{2m} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + (V - E)\psi^2 = R \left( \psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}, x \right) \quad (64)$$

Schroedinger então sugeriu que a integração de  $R$  em todo o espaço deveria ser um mínimo.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} R \left( \psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}, x \right) dx = \text{mínimo} \quad (65)$$

Aplicando na equação de Euler-Lagrange para o funcional acima definido:

---

<sup>3</sup> Esta escolha não fica clara nos textos do próprio Schroedinger.

$$\frac{\partial R}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)} = 0 \quad (66)$$

E fazendo o desenvolvimento chegamos a:

$$\frac{-k^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \quad (67)$$

“Ajustando”  $k = \hbar$  (uma constante experimental não acessível a Hamilton e obtida por Planck em experimentos sobre o corpo negro) finalmente obtemos a equação de Schroedinger:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \quad (68)$$

Esta equação pode ser facilmente generalizada a três dimensões. Assim, na denominada representação de Schroedinger da Mecânica Quântica o estado do sistema considerado, no instante  $t$  é representado pela função de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  que contém toda informação sobre o sistema. Interpreta-se  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  como a densidade de probabilidade de encontrar a partícula na posição  $\vec{r}$  no tempo  $t$  (consequentemente a integral da densidade de probabilidade em todo o espaço deve ser a unidade, ou seja a função de onda é normalizada). A evolução temporal do sistema é dada pela equação de Schroedinger (também denominada a equação de evolução da função de onda):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (69)$$

A equação (69) é a equação de Schroedinger dependente do tempo, expressa em termos do operador Hamiltoniano.

O estado de um sistema evolui no tempo de acordo com:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (70)$$

Onde  $U(t, t_0)$  é o chamado operador evolução temporal e pode ser escrito como:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (71)$$

Derivando os dois lados da expressão (71) temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \hat{H}U(t, t_0) \quad (72)$$

$U(t, t_0)$  é solução da equação diferencial acima, satisfazendo a condição inicial

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (73)$$

O vetor ket  $|\psi(t)\rangle$  evolui no tempo de acordo com a equação de Schroedinger. Em outras palavras, vai de  $|\psi(t_0)\rangle$  para  $|\psi(t)\rangle$  por uma transformação unitária em que  $U(t, t_0)$  é um operador unitário (ver Apêndice A.2) definido por (72) e por (73) [9]. Assim, conhecendo o estado dinâmico  $|\psi(t)\rangle$  do sistema para um dado instante inicial  $t_0$ , somos capazes de prever a distribuição estatística dos resultados de qualquer medição realizada sobre o sistema em um determinado momento posterior.

### 3.2 REPRESENTAÇÃO DE HEISENBERG

Na descrição de Heisenberg o que evolui são os operadores associados aos observáveis e o estado do sistema físico é considerado fixo no tempo [6]. Diferentemente da representação de Schroedinger, considera-se aqui medidas de observáveis no estado  $\psi(0)$ .

No mundo quântico, as grandezas observáveis são obtidas mediante atuação de operadores hermitianos (ver Apêndice A.2) sobre funções de estado. Assim, supomos uma equação de autovalor em que um operador  $\hat{A}$  atuando em uma função  $\psi$  gera  $a$  como autovalor [3]. Temos assim a seguinte equação de autovalores:

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad (74)$$

Vejamos como esse operador  $\hat{A}$  evolui no tempo. O operador  $\hat{A}$  depende das variáveis (operadores) dinâmicas como, por exemplo, a posição e o momentum, que por sua vez

dependem do tempo, (esta dependência via as variáveis dinâmicas denomina-se dependência temporal implícita), alguns parâmetros também podem depender do tempo, sendo então denominada dependência temporal explícita. Começemos por derivar a expressão (74).

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{da}{dt} \psi + a \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (75)$$

Da equação de Schroedinger  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ , onde  $\hat{H}$  é um operador hermitiano, obtemos:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{H}\psi}{i\hbar} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi \quad (76)$$

Substituindo (76) em (75) temos:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \hat{A} \hat{H} \psi = \frac{da}{dt} \psi - \frac{i}{\hbar} a \hat{H} \psi \quad (77)$$

Considerando  $\hat{H} \hat{A} \psi = \hat{H} a \psi = a \hat{H} \psi$

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \hat{A} \hat{H} \psi + \frac{i}{\hbar} a \hat{H} \psi = \frac{da}{dt} \psi$$

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \hat{A} \hat{H} \psi + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{A} \psi = \frac{da}{dt} \psi$$

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \psi = \frac{da}{dt} \psi \quad (78)$$

Lembrando a definição de comutadores, mostrada no Apêndice A.2,  $[A, B] = AB - BA$

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \psi = \frac{da}{dt} \psi$$

$$\left( \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \right) \psi = \frac{da}{dt} \psi \quad (79)$$

Percebemos que a equação (79) é uma equação de autovalores. Como supomos em (74), um operador  $\hat{A}$  atuando em uma função  $\psi$  gera  $a$  como autovalor. Assim se o autovalor agora é  $\frac{da}{dt}$ , temos que o operador é  $\frac{d\hat{A}}{dt}$ . Dessa forma podemos fazer uma comparação, onde o termo entre parênteses na equação (79) corresponde ao operador:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \quad (80)$$

Esta equação é conhecida como a *Equação de movimento de Heisenberg*. Podemos notar uma semelhança com a equação clássica em termos de Poisson (47), se identificarmos os parênteses de Poisson e o comutador via

$$\frac{1}{i\hbar} [A, B] \rightarrow \{A, B\} \quad (81)$$

Podemos também pensar de outra forma, analisando a evolução do valor esperado de um operador dado. O valor esperado de um observável é dado por:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t)^* A \psi(x, t) dx \quad (82)$$

Um operador hermitiano, como mostrado no *Apêndice A.2*, satisfaz a relação:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (83)$$

e assim podemos reescrever como:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A}^\dagger \psi(x, t))^* \psi(x, t) dx \quad (84)$$

Verificaremos como  $\langle \hat{A} \rangle$  varia no tempo:

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \hat{A}\psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \frac{\partial\psi}{\partial t} dx \quad (85)$$

Daqui em diante escreveremos a função  $\psi(x,t)$  apenas como  $\psi$  para simplificar a visualização das fórmulas. Voltando à relação (76), que é a equação de Schrodinger, e substituindo-a na relação acima temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \hat{A}\psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi dx \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{H}^* \psi^* \hat{A}\psi - \psi^* \hat{A} \hat{H}\psi) dx \right] + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \psi dx \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (\hat{H}^* \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \psi dx \right] + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \psi dx \end{aligned}$$

Da relação (83) temos:

$$\psi^* \hat{H} = (\hat{H}^\dagger \psi)^* = \hat{H}^* \psi^* \quad (86)$$

E assim

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \psi dx \right] + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \psi dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (87) \end{aligned}$$

Que simbolicamente pode ser escrita como

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{[\hat{A}, \hat{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \quad (88)$$

Ou seja, derivamos por outro caminho a equação de movimento de Heisenberg. Isto sugere novamente que relações quânticas podem ser obtidas formalmente das correspondentes clássicas pela correspondência

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B] \quad (89)$$

O valor esperado de um observável  $A$ , que é um operador linear hermitiano, para um dado estado  $|\psi(t)\rangle$  é definido como:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (90)$$

Como visto na seção precedente, podemos escrever  $|\psi(t)\rangle$  da seguinte maneira:

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \quad (91)$$

Onde  $U(t) = U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$

Assim segue que o valor esperado de  $A$ , representado em (90) pode ser escrito, utilizando (91), da seguinte forma:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi(0) \rangle \quad (92)$$

Da expressão (92) tiramos que

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (93)$$

Nas palavras de Perez (1995) [6], a estatística de medidas de  $A(t)$  no estado  $\psi(0)$  é a mesma obtida para as medidas de  $A$  no estado  $\psi(t)$ . Derivando a expressão (93):

$$\begin{aligned} \frac{dA(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} H e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} + e^{\frac{i}{\hbar} H t} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} H t} A H e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \\ &= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} H t} (H A - A H) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} + e^{\frac{i}{\hbar} H t} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \end{aligned}$$



$$= \frac{i}{\hbar}(HA - AH) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Da equação acima resulta novamente a equação de Heisenberg do movimento:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (94)$$

Faremos agora uma comparação com a representação de Schroedinger exposta na seção 3.1. Reescreveremos a equação (70) da seguinte maneira:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle \quad (95)$$

Onde o subíndice  $S$  representa *Schroedinger*.

O vetor descrito acima representa o estado dinâmico do sistema no tempo  $t$ . Agora ele será transformado em um vetor estacionário, pois na representação de Heisenberg o que evolui é o operador e não mais a função  $\psi$ .

$$|\psi_S(t_0)\rangle = U^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_H\rangle \quad (96)$$

Onde o subíndice  $H$  representa *Heisenberg*.

Do mesmo modo, um operador da representação de Schroedinger se transforma em:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0) \quad (97)$$

Agora derivando a equação acima obtemos:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A_S U + U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger A_S \frac{\partial U}{\partial t} \quad (98)$$

Levando em conta a equação (42) tiramos que

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{H}{i\hbar} U \quad e \quad \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = -U^\dagger \frac{H}{i\hbar}$$

Utilizando essas expressões pode-se escrever:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dA_H}{dt} &= -U^\dagger H A_S U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger A_S H U \\ &= U^\dagger [A_S, H] U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U \end{aligned} \quad (99)$$

Onde  $H$  é o Hamiltoniano da representação de Schroedinger. Iremos, então, introduzir o Hamiltoniano da representação de Heisenberg da seguinte forma:

$$H_H = U^\dagger H U H \quad (100)$$

$$\text{Assim } U^\dagger [A_S, H] U = [A_H, H_H] \text{ e } \frac{\partial A_H}{\partial t} = U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U.$$

Então teremos:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_H, H_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \quad (101)$$

Como mostrado, as representações de Schroedinger e de Heisenberg são equivalentes. Segundo Messiah (1961) [9].

*“Na prática, a representação de Schroedinger é mais frequentemente usada, porque ela se presta melhor para os cálculos. De fato, a equação de Schroedinger, uma equação entre vetores, é a priori mais fácil de resolver que a equação de Heisenberg que é uma equação entre operadores. No entanto, certas propriedades de sistemas quânticos são mais imediatamente aparentes na representação de Heisenberg”.*

Como visto no capítulo anterior, partindo da equação clássica (47) e considerando a quantidade  $A$  como as variáveis  $q_i$  e  $p_i$ , temos as relações:

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (102)$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (103)$$

Da mesma forma na Mecânica Quântica, partindo de (80) e utilizando os resultados listados no *Apêndice A.2*, chegamos a equações formalmente idênticas às equações canônicas de Hamilton da Mecânica Clássica:

$$\hat{q}_i = \frac{1}{\sqrt{-1} \hbar} [\hat{q}_i, H] = \frac{\partial H}{\partial \hat{p}_i} \quad (104)$$

$$\hat{p}_i = \frac{1}{\sqrt{-1} \hbar} [\hat{p}_i, H] = -\frac{\partial H}{\partial \hat{q}_i} \quad (105)$$

(onde por clareza de apresentação o número imaginário  $i$  é escrito como  $\sqrt{-1}$  para não confundir com o índice  $i$ ).

Cada quantidade física do sistema clássico corresponde uma quantidade física do sistema quântico. A única diferença está no fato de que as quantidades físicas clássicas obedecem às regras da álgebra ordinária, enquanto que seus análogos quânticos são operadores que obedecem regras da álgebra não comutativa. Mas, na medida em que é possível identificar as expressões da álgebra não comutativa com as expressões da álgebra ordinária, as equações do movimento das quantidades quantizadas são idênticas aquelas de suas análogas clássicas [9]. Uma notável exceção é o spin (momento angular intrínseco) que não tem análogo clássico para partículas atômicas.

## 2.3 INTERPRETAÇÃO DE BOHM

Só para completar esta apresentação sucinta da Mecânica Quântica apresentamos a denominada interpretação de Bohm, criada pelo físico americano David Bohm. Esta é uma interpretação física alternativa da equação de Schroedinger. Novamente consideramos o caso de uma dimensão, sendo trivialmente generalizado para mais dimensões. Começamos com a equação de Schroedinger [10]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi \quad (106)$$

Sem perder generalidade a função  $\psi$  pode ser escrita como uma representação polar de um número complexo [12], como já considerado na aproximação eikonal e mencionado como o ponto de partida da aproximação WKB-JR:

$$\psi = R(x, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} \quad (107)$$

Onde  $R = |\psi|$  e  $S$  é proporcional ao ângulo de  $\psi$  no plano  $\mathbb{C}$ , sendo  $R$  e  $S$  funções reais.

Substituindo (107) na equação de Schroedinger

$$i\hbar \frac{\partial \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right) + V(x) \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right) \quad (108)$$

Onde:

$$\frac{\partial \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right)}{\partial t} = \frac{\partial R}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} S} + R \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

$$\nabla^2 \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right) = e^{\frac{i}{\hbar} S} \left\{ \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{\partial R}{\partial x} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial R}{\partial x} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} + R \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + R \frac{i^2}{\hbar^2} \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} \right\}$$

Assim a equação de Schroedinger fica:

$$i\hbar \left\{ \frac{\partial R}{\partial t} + R \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 R + \frac{i}{\hbar} \nabla R \nabla S + \frac{i}{\hbar} \nabla R \nabla S + R \frac{i}{\hbar} \nabla^2 S - \frac{R}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right\} + V(x) R$$

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} - R \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \{ 2\nabla R \nabla S + R \nabla^2 S \} + R \left\{ \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right\}$$

Identificando a parte real e a parte imaginária temos que:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \{ 2\nabla R \nabla S + R \nabla^2 S \} \quad (109)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \left\{ \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right\} \quad (110)$$

Convenientemente escrevemos

$$P = \psi^* \psi \quad (111)$$

Em que  $P$  é a densidade de probabilidade e que também escrevemos como:

$$P = \left( R e^{-\frac{i}{\hbar} S} \right) \left( R e^{\frac{i}{\hbar} S} \right) = R^2 \quad (112)$$

Partindo da equação (109) e substituindo  $R$  por  $P^{1/2}$  escrevemos:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial P}{\partial t} \left( P^{-\frac{1}{2}} \right) + \frac{1}{2m} P^{\frac{1}{2}} \nabla^2 S + \frac{1}{m} \frac{1}{2} \nabla P \left( P^{-\frac{1}{2}} \right) \nabla S = 0$$

$$\frac{1}{2} \left( P^{-\frac{1}{2}} \right) \left\{ \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{P^{\frac{1}{2}}}{P^{-\frac{1}{2}}} \nabla^2 S + \frac{1}{m} \nabla P \nabla S \right\} = 0$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{m} \{ P \nabla^2 S + \nabla P \nabla S \} = 0 \quad (113)$$

Nota-se que o termo entre chaves na equação acima é a derivada (pela regra do produto) de  $P \nabla S$ . Assim:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \left( P \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad (114)$$

Que é a equação da continuidade, para um fluido com densidade  $P$  (exatamente uma densidade de probabilidade) e com fluxo  $J = \frac{\nabla S}{m} P$ , sendo  $\frac{\nabla S}{m}$  a velocidade hidrodinâmica do fluido. Assim, a partícula é vista como tendo uma posição definida, com uma distribuição de probabilidade  $P$  que pode ser calculada da função de onda  $\psi$ . A equação (114) expressa a conservação da probabilidade, assim como para os fluidos expressa a conservação da massa. O momento associado a  $\frac{\nabla S}{m}$  é  $p = \nabla S$  tal como é definido no formalismo clássico de Hamilton-

Jacobi. Podemos visualizar esta analogia voltando à equação (110) e substituindo novamente  $R$  por  $P^{1/2}$ .

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(x) - \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 P}{P} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla P)^2}{P^2} \right] = 0 \quad (115)$$

No limite clássico, ou seja, quando  $\hbar$  tende a zero, a expressão (115) se torna:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(x) = 0 \quad (116)$$

Identificando a Hamiltoniana como:

$$H = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(x) \quad (117)$$

E assim encontramos uma equação tipo Hamilton-Jacobi.

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0 \quad (118)$$

Temos aqui uma coincidência notável e sugestiva.

Na Mecânica Quântica, onde  $\hbar \neq 0$ , a partícula, além de influenciada por um potencial  $V(x)$ , também está influenciada por um “potencial quântico” [10] que chamaremos de  $U(x)$ .

$$U(x) = -\frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 P}{P} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla P)^2}{P^2} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \quad (119)$$

Em outras palavras, a equação para  $S$  implica que as partículas se movem sob ação de uma força que não é inteiramente derivável do potencial clássico  $V(x)$ , mas também tem a contribuição do potencial quântico  $U(x)$  [7]. Podemos então escrever a equação de Hamilton-Jacobi da seguinte maneira:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V_{genérico}(x) = 0 \quad (120)$$

Em que

$$V_{genérico}(x) = V_{clássico}(x) + V_{quântico}(x)$$

A interpretação de Bohm generaliza a teoria da onda piloto de Louis de Broglie, a qual apresenta que ambos, onda e partícula são reais. A função de onda evolui de acordo com a equação de Schroedinger e de algum modo “guia” a partícula. Diferentemente da interpretação de Copenhague, a interpretação de Bohm é determinística. Isto quer dizer que o estado de um sistema evolui suavemente através do tempo, sem o colapso da função de onda no momento da medição. Porém, vale ressaltar que esta interpretação não é muito divulgada, e apresenta algumas dificuldades, como o fato do potencial quântico não ter análogo clássico. Estudos em andamento [7], se bem sucedidos, resultariam numa teoria alternativa da mecânica quântica. Nós apresentamos a Interpretação de Bohm, entre outras razões por também ter uma conexão com o formalismo clássico.

## 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao longo deste trabalho tentamos expor de uma forma clara e sucinta o formalismo da Mecânica Clássica levando à transição com a Mecânica Quântica. É claro que existe ainda muita coisa a ser explorada neste assunto.

Desenvolvemos os conceitos básicos das formulações Lagrangeana e Hamiltoniana, pois como vimos, através de tais formalismos é que se passa de uma maneira mais natural para a Mecânica Quântica. Fizemos uma passagem pela magnífica teoria de Hamilton-Jacobi que foi o ponto de partida para Schroedinger formular sua mecânica ondulatória e contribuir para o alicerce da nova mecânica.

Vimos que assim como o limite clássico da Mecânica Quântica na formulação de Heisenberg é a Mecânica Clássica expressa na linguagem dos parênteses de Poisson. O limite clássico da Mecânica Quântica na formulação de Schroedinger é a teoria de Hamilton-Jacobi.

Assim percebemos que há um vínculo muito estreito entre os formalismos da Mecânica Clássica e da Mecânica Quântica. Assunto este que poderia ser abordado com mais tempo e atenção nos cursos de graduação em Física de modo a subsidiar aos alunos a criação deste elo entre “as mecânicas”. Dessa forma, haveria mais elementos para amadurecer a compreensão da Mecânica Quântica.

Fizemos também uma pequena exploração pela interpretação de Bohm, que é um modo alternativo de ver a equação de Schroedinger e, embora não seja muito popular entre os físicos, merece que dediquemos alguma atenção, mesmo que para criticá-la.

Espero ter contribuído humildemente com este trabalho e ter despertado o interesse para a leitura mais aprofundada sobre o assunto, preferencialmente as referências citadas em seguida.



## REFERÊNCIAS

- [1] LEECH, J.W. **Mecânica Analítica**. Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico S.A., 1971.
- [2] N.A. LEMOS, **Mecânica Analítica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2ª ed, 2007.
- [3] NETO, J.B. **Mecânica Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2004.
- [4] LANDAU, L.D. & LIFSHITZ, E.M. **Mechanics**. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 3ª ed, 1976.
- [5] M.C. BERTIN, B.M. PIMENTEL e P.J. POMPEIA, “Formalismo de Hamilton-Jacobi à la Carathéodory” **Rev. Bra. Ensino Fís.** 29 (2007) 393.
- [6] J.F. PEREZ, “Usando a Representação de Heisenberg” **Rev. Bra. Ensino Física** 17 (1995) 123.
- [7] J. BERNSTEIN, “More about Bohm’s Quantum” **Am. J. Phys** 79 (2011) 601.
- [8] A. SMALL e K. S. LAM, “Simple Derivations of the Hamilton-Jacobi Equation and the eikonal equation without the use of canonical transformations” **Am. J. Phys** 79 (2011) 678.
- [9] MESSIAH, A. **Quantum Mechanics**. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1961.
- [10] D A BOHM, “Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of HiddenVariables I” **Phys. Rev.** 85 (1952) 166.
- [11] Apostila de Mecânica Analítica (Prof. Dr. Roberto E. Lagos Monaco)
- [12] E. MADELUNG, “The hydrodynamical picture of quantum theory” **Z. Phys.** 40 (1926) 322.

## **Bibliografia Consultada**

[13] H. GOLDSTEIN. **Classical Mechanics**, 1950.

[14] E.O.G. GIACAGLIA. **Mecânica Analítica**, 1978.

[15] ARYA, A. P. **Introduction to Classical Mechanics**, 1998.

[16] N. ZETTLI. **Quantum Mechanics: concepts and applications**, 2009.

[17] R.L. LIBOFF. **Introductory Quantum Mechanics**, 2003.

[18] T.W.B. KIBBLE. **Mecânica Clássica**, 1970.

[19] <http://www.ifi.unicamp.br>. **Tópicos de Mecânica Clássica** (Prof. Marcus A. M. de Aguiar).

[20] <http://www.youtube.com/user/MecanicaAnaliticaUFF>. **Canal de Mecânica Analítica** (Prof. N.A. Lemos).

## APÊNDICES

### A.1 PARÊNTESES DE POISSON

Os Parênteses de Poisson aparecem naturalmente na equação que rege o movimento de uma variável dinâmica qualquer.

Considera-se um sistema cuja Hamiltoniana é dada por  $H = H(q, p, t)$  em que são dadas as equações de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{e} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Imaginemos uma função qualquer  $F = F(q, p, t)$  e a derivamos no tempo substituindo as equações de Hamilton.

$$\frac{dF}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

$$\frac{dF}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t}$$

Agora define-se o Parênteses de Poisson para duas variáveis dinâmicas.

$$\{F, G\} = \sum_i \left( \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right)$$

Portanto, a equação de movimento de uma variável qualquer pode ser expressa por:

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

Por exemplo, as próprias equações de Hamilton podem ser expressas nessa linguagem:

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\}$$

Os Parênteses de Poisson de duas variáveis dinâmicas são uma propriedade dessas variáveis e não depende da escolha de variáveis canônicas para o cálculo de  $\{ \}$ .

Para finalizar, é importante vermos algumas propriedades algébricas dos Parênteses de Poisson:

i) antissimetria:  $\{A, B\} = -\{B, A\}$  com  $\{A, A\} = 0$ .

ii) linearidade:  $\{\alpha A + \beta B, C\} = \alpha\{A, C\} + \beta\{B, C\}$  desde que  $\alpha$  e  $\beta$  sejam constantes ou dependam apenas do tempo.

iii)  $\{AB, C\} = A\{B, C\} + \{A, C\}B$

iv) identidade de Jacobi:  $\{\{A, B\}, C\} + \{\{B, C\}, A\} + \{\{C, A\}, B\} = 0$

É interessante ressaltar que o comutador de dois operadores na Mecânica Quântica satisfaz essas quatro propriedades.

## A.2 OPERADORES

Um operador é um ente matemático que estabelece uma relação funcional entre dois espaços vetoriais. Em outras palavras, é uma instrução matemática que atua sobre uma função.

Um operador é usualmente representado por uma letra maiúscula com “ ^ ”. Sendo  $\hat{Q}$  um operador qualquer, quando aplicado sobre uma função  $\psi$  gera um autovalor  $q$  que no formalismo quântico representam os observáveis, associado às variáveis dinâmicas representadas pelo operador  $\hat{Q}$ . Assim temos:

$$\hat{Q}\psi = q\psi$$

conhecida como equação de autovalores.

Por exemplo, o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  atuando sobre uma função  $\psi$  gera um autovalor, que é a (auto) energia do sistema. Assim temos a seguinte equação de autovalores para a energia:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Na convenção estabelecida, um operador opera sobre a função imediatamente a sua direita. Abaixo listamos alguns operadores que serão úteis neste trabalho (na representação  $x$ ):

Observável	Operador	Instrução Matemática
Posição: $x$	$\hat{x}$	$x$
Momento: $p_x$	$\hat{p}_x$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
Momento (3D): $\vec{p}$	$\hat{p}$	$-i\hbar \nabla$
Energia Cinética: $T$	$\frac{\hat{p}^2}{2m}$	$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2$
Momento ao quadrado: $p^2$	$\hat{p}^2$	$-\hbar^2 \nabla^2$
Energia Total: $H$	$\hat{H}$	$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$

*Álgebra de operadores* (considerando funções arbitrárias  $f$  e  $g$ ):

Adição/Subtração:  $(\hat{A} \pm \hat{B})f = \hat{A}f \pm \hat{B}f$

Produto:  $(\hat{A} \hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f)$

Igualdade  $\hat{A} = \hat{B}$  :  $\hat{A}f = \hat{B}f$

Operador nulo:  $\hat{O}f = 0$

Operador unidade:  $\hat{I}f = f$

Um operador é dito unitário se sua inversa coincide com seu adjunto:

$$U^{-1} = U^\dagger$$

Um operador adjunto  $U^\dagger$  satisfaz a relação :

$$\langle f|U^\dagger g \rangle = \langle U^* f|g \rangle$$

Ou seja, é a matriz transposta e complexa.

E assim podemos escrever:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I = 1$$

Onde  $I$  é o operador unidade.

Associatividade:  $(\hat{A} \hat{B} \hat{C})f = \hat{A} \hat{B}(\hat{C}f)$

Comutatividade: nem sempre  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  comutam, ou seja, nem sempre  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ .

Definimos agora o comutador entre dois operadores como:

$$[\hat{A}, \hat{B}]f = \hat{A}\hat{B}f - \hat{B}\hat{A}f$$

Assim se  $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$  dizemos que os operadores comutam e se for diferente de zero, os operadores não comutam.

Linearidade: um operador é dito linear se:

$$i) \hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g$$

$$ii) \hat{A}(cf) = c\hat{A}f$$

Entre os operadores lineares existe um grupo de operadores que são de grande importância na mecânica quântica, são eles os operadores hermitianos. (Todos os operadores na mecânica quântica são hermitianos.)

### *Operadores Hermitianos*

Um operador é dito hermitiano se satisfaz a seguinte condição para um operador  $\hat{A}$ , e definindo o operador adjunto ao operador  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  como  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ :

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int (\hat{A}^\dagger \psi)^* \psi d\tau$$

Ou seja,  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ .

Consequências da hermiticidade:

i) Os operadores hermitianos possuem autovalores reais;

ii) As autofunções de um operador hermitiano são, ou podem ser escolhidas de tal forma que sejam ortogonais;

iii) As autofunções de um operador linear hermitiano formam um conjunto completo e ortogonal de funções;

Todos os operadores “aceitáveis” na Mecânica Quântica são hermitianos.

Listamos algumas propriedades dos comutadores (por simplicidade de apresentação omitem-se o “^” dos operadores genéricos  $A(q,p)$  e  $B(q,p)$  e dos específicos  $q$ ,  $p$  e  $H$  :

As quatro propriedades algébricas dos Parênteses de Poisson listadas no apêndice anterior são cumpridas pelos comutadores, simplesmente substituindo  $\{ , \}$  por  $[ , ]$ .

Pode ser mostrado (um bom exercício na disciplina de mecânica quântica) a propriedade:

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-1-s}$$

Sabemos que em mecânica clássica

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

sendo  $\delta_{ij}$  o tensor identidade (delta de Kroenecker). Também em mecânica quântica tem-se uma expressão análoga para os operadores correspondentes

$$[q_i, p_j] = \sqrt{-1} \hbar \delta_{ij}$$

Assim é fácil demonstrar (para os índices implícitos  $i=j$ )

$$[q, p^n] = \sqrt{-1} n \hbar p^{n-1}$$

$$[p, q^n] = -\sqrt{-1} n \hbar q^{n-1}$$

Logo, expandindo  $A$  em Taylor, em potências  $q_i^n p_j^m$ , pode ser mostrado (fácil, mas tediosamente) que:

$$[p_i, A] = -\sqrt{-1} \hbar \frac{\partial A}{\partial q_i}$$

$$[q_i, A] = \sqrt{-1} \hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}$$