

O Princípio de Ação Quântica de Schwinger:

Aspectos do tratamento de sistemas dependentes
do tempo e interagentes



John Alexander Ramirez Bedoya

IFT-T.004/2013



Esta tese contou com o apoio financeiro da CAPES (Brasil).

O Princípio de Ação Quântica de
Schwinger:
Aspectos do tratamento de sistemas dependentes
do tempo e interagentes

TESE

apresentada ao Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista, Brasil

em cumprimento aos requisitos para a obtenção do título de

Doutor

Agosto de 2013

John Alexander Ramirez Bedoya

nascido em Santafé de Bogotá D.C., Colômbia

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar (orientador)
IFT/UNESP - São Paulo

Prof. Dr. Ademir Eugênio Santana
UnB - Brasília - DF

Prof. Dr. Diogenes Galetti
IFT/UNESP - São Paulo

Prof. Dr. Julio Marny Hoff da Silva
UNESP - Guaratinguetá

Prof. Dr. Dmitry Vasilevich
UFABC - São Paulo

Instituto de Física Teórica – UNESP
R. Dr. Bento Teobaldo Ferraz 271, bloco II
01140-070 São Paulo, Brasil

A mi esposa Leonora y a mi hijo José David, los puntos del universo a los cuales converjo, aquellas perturbaciones de mi camino que hacen que piense en que siempre podré dar un paso mas, que me dicen que hay infinitos caminos por recorrer y me hacen sentir que todo vale la pena solo por verlos sonreir.

Resumo

Nesta tese, tem-se por objetivo usar o princípio de ação quântica de Schwinger para estudar e caracterizar dois tipos de sistemas quânticos: o primeiro sendo um oscilador harmônico forçado, cujos parâmetros dependem explicitamente do tempo e o segundo, um conjunto de osciladores harmônicos que interagem linearmente. Mostra-se para o primeiro, que a forma funcional desse princípio, i.e. o operador que origina as variações generalizadas das variáveis dinâmicas do sistema, além de permitir a construção das funções de transformação para qualquer tipo de sistema quântico, ajuda à determinação das quantidades conservadas e, conseqüentemente, à dedução do seu espectro de energia e o conjunto de funções próprias quando existirem. Caso contrário, se o sistema é dependente do tempo, podem-se construir as álgebras dinâmicas que permitem estudá-lo de uma maneira alternativa. Da mesma forma, para o segundo sistema, são propostos dois conjuntos de estados e de operadores: um associado aos estados que cada elemento do sistema apresenta em presença da interação, conhecidos na literatura como estados vestidos e outro, que representa os modos normais do sistema como um todo. Ambos conjuntos de estados são usados na implementação do princípio de ação quântica, permitindo encontrar: as soluções exatas, o espectro de energia, as funções de onda e as amplitudes de transição entre quaisquer dois estados nos quais se possa encontrar o sistema. Em cada caso, serão dados alguns exemplos que se contrastarão com os resultados associados a outras abordagens teóricas.

Palavras-chave: Mecânica Quântica, Princípio de Ação Quântica, Sistemas Dependentes do Tempo, Invariantes Dinâmicos, Sistemas Interagentes.

Abstract

This thesis has the aim of using the Schwinger Quantum Action Principle to study and characterize two kind of quantum systems: the first one is a forced harmonic oscillator whose parameters explicitly depend on time and the second one, a set of harmonic oscillators which interacts linearly. We show for the first system that the functional form of this principle, *i.e.* the operator which causes the generalized variations of the dynamical variables of the system, besides allowing the construction of transformation functions of any kind of system, help to determine the associated conserved quantities and therefore to deduct the form of the *spectrum* and the set of the eigen-functions of the system, if they exist. Otherwise, if the system is time-dependent, the dynamical algebras which allows studying it in an alternative way can be constructed. Similarly, for the second system two sets of states and operators are proposed. The first one associated with the quantum state of each element of the system in the presence of interaction, known in the literature as *Dressed States* and the second one, which represents the normal modes of the system as a whole. Both sets of states are used in the implementation of the Quantum Action Principle allowing to find the exact solutions, the *spectrum*, wave functions and amplitudes between any two states in which the system can be found. In each case, a few examples will be given and the results are contrasted with results associated with other theoretical approaches.

Keywords: Quantum Mechanics, Quantum Action Principle, Time-Dependent Systems, Interacting Systems, Dynamical Invariants.

Sumário

Resumo	v
Abstract	vii
Agradecimentos	xi
1 Introdução	1
Referências Bibliográficas	5
2 O Princípio de Ação Quântica de Schwinger	9
2.1 Transformações Unitárias	10
2.2 Representação de um Operador	12
2.3 Transformações Infinitesimais Unitárias para Estados e Operadores	13
2.3.1 Variações Infinitesimais das Funções de Transformação . .	13
2.3.2 Transformações Infinitesimais Unitárias	14
2.4 Análise Dinâmica	16
2.5 O Operador de Ação e o Lagrangiano Quântico	17
2.6 O Princípio de Ação Quântica de Schwinger	18
2.7 Relações de Comutação Canônicas	21
2.8 Equações de Heisenberg	23
2.9 Equação de Schrödinger	24
2.10 Operadores Bem Ordenados de Dirac e Integração do Princípio Ação	25
2.11 A Equação de Hamilton-Jacobi Quântica	26
2.12 Exemplos de Aplicação do Princípio de Ação Quântica	27
2.12.1 Partícula Livre	27
2.12.2 Oscilador Harmônico	29
2.13 O Operador Hamiltoniano Bem Ordenado	31
2.13.1 Oscilador Harmônico	32
Referências Bibliográficas	35

3	Estudo de Sistemas Dependentes do Tempo	37
3.1	Sistemas dependentes do tempo	39
3.2	Oscilador harmônico forçado	41
3.2.1	Função de transformação para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo	45
3.2.2	Alguns Exemplos de Osciladores Harmônicos	45
3.3	Integrais de Movimento	47
3.3.1	Integrais de Movimento e o Princípio de Ação Quântica . .	48
3.4	Oscilador Harmônico com Freq. e Forç. Dependentes do Tempo .	53
3.5	Oscilador Harmônico com Frequência Dependente do Tempo . . .	55
3.5.1	Invariantes Lineares	56
3.5.2	Invariantes Quadráticos	57
	Referências Bibliográficas	61
4	Estudo de Sistemas Interagentes	63
4.1	Proposição do Modelo	65
4.1.1	Algumas Características da Matriz Ω^2	66
4.2	Os Operadores de Criação e Aniquilação	67
4.2.1	Os Operadores para os Estados Vestidos	68
4.2.2	Os Operadores para os Modos Normais	69
4.3	O lagrangiano e as Equações de Movimento	71
4.3.1	Equações de Movimento	71
4.4	Função de Transformação Generalizada	73
4.5	Espectro de Energia	74
4.6	Funções de transformação e Probabilidades de Transição	76
	Referências Bibliográficas	79
5	Conclusões e Perspectivas	81
	Referências Bibliográficas	85
A	Apêndice:	87

Agradecimentos

Agradeço à minha esposa Leonora, pelo amor, compreensão e apoio, ao meu filho José David pela força que me dá simplesmente por existir. Tudo é por vocês. Aos meus pais Gildardo e Luz Dary, a minha irmã Luz e a minha sobrinha Laura pelo amor e apoio apesar da distância.

Gostaria de expressar a minha gratidão ao Prof.Dr. Bruto Max Pimentel que foi mais do que um orientador, um amigo, cuja ajuda provou ser inestimável em muitos aspectos da minha vida e, que tem me ajudado a progredir neste caminho científico que, até agora, tem me mostrado que o trabalho duro leva a lugares que jamais suspeitamos.

Desde que cheguei aqui, ao Brasil, encontrei muitas pessoas que tornaram-se meus amigos para toda a vida, entre eles Alberto, Almeida, Carlos, Danuce, Franciane, Grow, Jackson, Lucho, Mario, Rodrigo e Sandrita os quais, cada um na sua maneira, tem me ajudado a dar um passo de cada vez rumo ao meu auto-entendimento como pessoa e como físico. Deles aprendi, em silêncio e pelo diálogo coisas que me fizeram revisar, pensar e melhorar cada um dos aspectos da minha vida; a eles agradeço. Também quero dar um agradecimento especial ao Rodrigo e Mário que leram pacientemente grandes apartes dos capítulos a seguir, tolerando meus abusos do português, procurando entender o que escrevia para me ajudar a expressar melhor as minhas idéias.

Agradeço aos professores Cassius A. M. de Melo, Dieter Schuch e Vladimir I. Man'ko, pela colaboração e frutíferas discussões sobre alguns dos conceitos e resultados aqui tratados.

Sou grato aos funcionários do IFT que fizeram por mim coisas além do seu trabalho.

Agradeço à *Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior* - CAPES pelo apoio financeiro.

São Paulo - SP
Julho, 2013.

John Alexander Ramirez Bedoya



Introdução

O aperfeiçoamento das técnicas experimentais nos últimos anos tem trazido à tona a existência de alguns fenômenos que só existiam na teoria. Isso tudo, graças à possibilidade de poder influenciar e controlar os estados quânticos que apresentam naturalmente os sistemas microscópicos. Entre os métodos experimentais, ressaltam-se aqueles em que a interação da radiação com a matéria é delicadamente controlada com o uso de campos magnéticos e elétricos, tanto estáticos quanto dependentes do tempo que são preparados cuidadosamente.

Dentre as técnicas experimentais acima mencionadas temos, como exemplo as Armadilhas de Íons, como as de Penning [1] e Paul [2]. Na armadilha de Penning as partículas são confinadas por uma combinação de campos magnéticos e elétricos estáticos; da mesma forma, na armadilha de Paul o confinamento é realizado por uma combinação de campos elétricos constantes e de radiofrequência em uma configuração quadrupolar. Assim, esse tipo de dispositivo permite manipular um número reduzido de partículas no seu interior, obtendo o controle de sistemas quânticos individuais como um átomo ou um elétron [3]. Da mesma forma, podemos tomar, como exemplo, um outro fenômeno que é causado pela variação dos campos com o tempo, o chamado Efeito Casimir Dinâmico [4, 5, 6, 7]. Neste se descreve a criação de fótons de um campo eletromagnético confinado entre duas placas refletoras, uma em frente a outra, que mudam a sua distância a uma frequência determinada.

De uma forma similar, os sistemas atômicos também podem ser influenciados quando confinados em cavidades ópticas. Nesses casos, estudam-se como se apresentam os mecanismos de radiação e como podem ser modificadas as características desses processos. Geralmente, os feixes de laser que manipulam os átomos

dentro das cavidades são preparados de tal forma que causam uma transição específica. Com isso, pode-se aplicar idealizações dos mecanismos de interação da radiação com a matéria como é o caso dos modelos de dois níveis, dentre os quais podemos citar o *Modelo semi-clássico de Rabi* e a sua versão quântica, o *Modelo de Jaynes-Cummings* [9, 10]. Nesses sistemas um conjunto de átomos confinados dentro de uma cavidade óptica interage com um feixe incidente.

Do ponto de vista teórico, a construção de modelos para os sistemas físicos acima mencionados implica no uso de abordagens nas quais os parâmetros do sistema são dependentes do tempo, ou os quais apresentam interações que geralmente conduzem a sistemas de equações de movimento que não podem ser resolvidas analiticamente. Assim, apesar da existência de uma grande variedade de abordagens teóricas para a resolução e o estudo da evolução temporal desse tipo de sistemas, geralmente só existem soluções para um número reduzido de casos cujas condições sobre a dependência temporal dos parâmetros ou nas características funcionais das interações devem ser satisfeitas.

Sendo assim, no caso de sistemas com parâmetros dependentes do tempo, os problemas existentes estão basicamente relacionados ao ordenamento temporal, à definição de espectros e ainda à integrabilidade. Seguindo nossos exemplos iniciais, podemos ver em [2, 3, 4], que tanto no tratamento teórico da Armadilha de Paul quanto no Efeito Casimir Dinâmico, o modelo físico a seguir é o de um Oscilador Harmônico Forçado, cujos parâmetros como a frequência e o mesmo forçamento¹, dependem do tempo. Ainda que só algumas funções da frequência fazem com que esse modelo seja exatamente solúvel, abordagens teóricas como o Método de Floquet [11], Fase de Berry [12], e métodos algébricos baseados nos grupos de simetrias dinâmicas do sistema [13, 14, 15], fornecem informação valiosa sobre o comportamento de ditos sistemas. É importante entender que cada uma dessas abordagens trabalha aspectos pertencentes a determinados regimes, seja na forma em que os parâmetros variam no tempo, intensidade dos mesmos ou nas estruturas existentes por trás da forma em que esses sistemas evoluem temporalmente.

Do mesmo modo, os sistemas físicos nos quais um ou vários átomos se encontram dentro de uma cavidade óptica, e que são o objetivo de estudo da eletrodinâmica quântica em cavidades, apresentam problemas que são dificilmente contornados pelas abordagens convencionais. Primeiro, dado que nos modelos que estudam a interação da radiação com a matéria, os potenciais de interação podem apresentar uma grande intensidade e geralmente possuem uma estrutura que implica em uma não linearidade, é difícil que os modelos usados apresentem uma solução que seja analítica. Isso devido à intensidade dos campos dentro das cavidades que geralmente é grande suficiente para tornar inviáveis os métodos perturbativos.

¹Em alguns trabalhos o modelo inclui um termo dissipativo proporcional à derivada temporal do operador de posição [4].

Contudo, uma abordagem teórica não perturbativa, que conduz a resultados analíticos no estudo dos fenômenos em sistemas como os acima mencionados, foi proposta por Cohen-Tannoudji, Serge Haroche e N. Polonsky, [16, 17, 18]. Nessa abordagem, o átomo dentro da cavidade interage com o campo eletromagnético de tal forma que os fótons que rodeiam o átomo o "*vestem*" formando um sub-sistema que interage com o resto de fótons do campo [16]. Os estados resultantes desse processo construtivo são chamados de *estados vestidos* e, como tais conformam uma base adequada para o estudo de quase qualquer fenômeno que possa se apresentar em cavidades ópticas. Uma outra abordagem, relacionada com a anteriormente mencionada, proposta por [19, 20, 21, 22, 23], foi desenvolvida para o caso em que temos interações do átomo com a matéria de maneira linear como é o caso da interação dipolar, podendo admitir extensões para o caso da partículas livres.

Como podemos ver, o estudo dos sistemas não relativísticos acima mencionados tem como característica o uso de uma grande variedade de métodos que intentam obter soluções exatas. Cada um desses métodos, explora uma característica única do sistema. Assim, o uso de simetrias e da resposta dos elementos dos sistemas ante uma interação com determinadas características fazem parte fundamental dessas abordagens.

Nesta tese, propomos o princípio de ação quântica como uma estrutura que é capaz de reunir todas essas abordagens em um corpo único. O Princípio de Ação Quântica de Schwinger [24] é uma das abordagens mais completas da Mecânica Quântica, que aliada à formulação da Integral de Trajetória proposta por Richard Feynman [25] são formalismos originados nos esforços de Dirac em estabelecer uma relação entre a função de transformação quântica e a ação clássica [26]. Esse princípio é uma caracterização diferencial das funções de transformação e procura, através do uso do cálculo variacional, encontrar a dinâmica dos sistemas quânticos por meio das relações existentes entre os operadores que representam as variáveis dinâmicas e às suas respostas diante de transformações infinitesimais associadas a pequenas variações causadas no sistemas.

A diferença da caracterização integral de Feynman é que o Princípio de Ação Quântica não precisa levar em conta o princípio de correspondência, já que não constitui um processo de quantização, dado que desde o começo é considerado como quântico [28, 27]. Da mesma forma, uma análise mais detalhada desse Princípio, como o efetuado em [29], mostra que podem ser incorporadas, no mesmo nível de importância, dois tipos de variáveis dinâmicas que podem se relacionar com as classes de variáveis conhecidas na estatística de partículas. Assim, esse princípio incorpora, em pé de igualdade, os dois tipos diferentes de variáveis dinâmicas da mecânica quântica; comutantes e anti-comutantes. São apenas estes dois tipos que são exigidos empiricamente pelas duas variedades conhecidas de estatísticas de partículas

Nesta tese, mostramos alguns aspectos do uso do Princípio de Ação Quântica de Schwinger para o estudo e caracterização de dois tipos de sistemas quânticos:

o primeiro, associado a um oscilador harmônico forçado, cujos parâmetros dependem explicitamente do tempo e, o segundo, dado por um conjunto de osciladores harmônicos que interagem linearmente. Os mesmos representam um modelo de teste para a interação da radiação com a matéria, que pode ser aplicado em Modelos tipo Caldeira-Legget, [30].

Para isso, no capítulo II nos aprofundaremos na descrição do Princípio de Ação Quântica, deduzindo a sua forma funcional. Mostraremos explicitamente as relações entre as transformações unitárias e infinitesimais unitárias com as alterações admissíveis que sofrem os estados do sistema e os operadores, todas elas relacionadas à existência de um único gerador; o operador $\hat{G}$. Da mesma forma, deduziremos de uma forma consistente as relações de comutação canônicas. Seguidamente, daremos alguns exemplos calculando explicitamente as funções de transformação para uma partícula livre e um oscilador harmônico com frequência constante.

No capítulo III, aproveitaremos as relações extraídas a partir do Princípio de Ação Quântica, deduzindo as funções de transformação para os osciladores paramétricos acima mencionados; começando pelo oscilador harmônico forçado e finalmente tomando como caso especial o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Logo depois, e aproveitando a forma funcional do Princípio de Ação Quântica, proporemos uma forma de encontrar todas as quantidades conservadas (geradores dos grupos de simetrias) associadas a um sistema quântico a partir do conhecimento da função de transformação. Mostraremos como essas integrais podem ser usadas para estudar as características de sistemas tanto dependentes quanto independentes do tempo.

Por último, no capítulo IV, abordaremos o problema de sistemas interagentes. Estudaremos um modelo de teste que consiste em um átomo ou molécula no centro de uma cavidade esférica que interage com os modos de um campo; que por simplicidade é considerado como escalar. Definiremos dois conjuntos de operadores de criação e aniquilação. O primeiro conjunto cria e aniquila os estados físicos reais que os componentes do sistema apresentam sob interação e o segundo cria e aniquila os estados que o conjunto completo campo-partícula possui. Esses estados são os verdadeiros estados de energia do sistema e, como tais, diagonalizam o hamiltoniano, caso diferente dos mencionados inicialmente.

No capítulo final, faremos algumas conclusões pertinentes e mostraremos possíveis perspectivas nas aplicações dos aspectos abordados neste trabalho.

Referências Bibliográficas

- [1] H. Dehmelt, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 525 (1990). [1](#)
- [2] W. Paul, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 531 (1990) ; [1](#), [2](#)
- [3] W. P. Schleich and H. Walther, *Elements of Quantum Information*, (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co KGaA, Weinheim, 2007) [1](#), [2](#)
- [4] V.V.Dodonov, A.V.Dodonov, *Jour.Rus.Laser Res*, **26**, 6 (2005); [1](#), [2](#)
- [5] V. V. Dodonov, A. B. Klimov, and V. I. Man'ko, *Phys. Lett. A*, **142**, 511 (1989); [1](#)
- [6] G. T. Moore, *J. Math. Phys.*, **11**, 2679 (1970).; [1](#)
- [7] S. A. Fulling, P. C. W. Davies, *Proc. Roy. Soc. London A*, **348**, 393 (1976). [1](#)
- [8] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe and D. Wineland, *Rev. Mod. Phys.*, **75**, 281 (2003).
- [9] E.T.Jaynes, Microwave Laboratory Report No. 502, Stanford University, 1958 [2](#)
- [10] E.T.Jaynes and F.W.Cummings, *Proc. I.E.E.E.*, **51**, 89 (1963) [2](#)
- [11] J. H. Shirley, *Phys. Rev.*, **138**, B979 (1965); Floquet, *Ann. de l'Ecole Norm. Sup.*, **12**, 47 (1883). [2](#)
- [12] S. Pancharatnam, *Proc. Indian Acad. Sci. A*, **44** 247 (1956); M. V. Berry. *Proc. R. Soc. Lond. A*, **392**, 45 (1984). [2](#)
- [13] H. R. Lewis, Jr., *Phys. Rev. Lett.*, **18**, 510 (1967); H. R. Lewis, Jr., *Jour. Math. Phys.*, **9**, 1976 (1968); H. R. Lewis, Jr. and W. B. Riessenfeld , *Jour. Math. Phys.*, **10**, 1458 (1969). [2](#)

- [14] R. S. Kaushal, *Int. J. Theor. Phys.*, **37** 1793 (1998). 2
- [15] M. Bertin, B. M. Pimentel and J.A. Ramirez, *J. Math.Phys.* , **53**,042104 (2012). 2
- [16] C. Cohen-Tannoudji, S. Haroche, "*Le concept d'atome "habillé" par des photons; Quelques exemples d'application in Polarisation, Matire et Rayonnement*", p. 191, Livre jubilaire en l'honneur d'Alfred Kastler édité par la Société Française de physique (Presses Universitaires de France, Paris, 1969) 3
- [17] N. Polonsky 1964 Doctoral thesis Ecole Normale Suprieure, Paris; N. Polonsky, C. Cohen-Tanoudji, *J. Physique* **26**, 409 (1965). 3
- [18] S. Haroche 1964 Doctoral thesis Ecole Normale Suprieure, Paris; C. Cohen Tanoudji, S. Haroche, *C.R. Acad. Sci.* **262**, 37 (1966). 3
- [19] N. P. Andion, A. P. C. Malbouisson, A. Mattos Neto, *Jour. Phys A*, **34**, 3735 (2001). 3
- [20] G. Flores-Hidalgo, A. P .C . Malbouisson, *Phys. Rev. A*, **66**, 042118 (2002). 3
- [21] G. Flores-Hidalgo, A. P .C . Malbouisson, Y. W. Milla, *Phys. Rev A*, **65**, 0634144 (2002). 3
- [22] R. Casana, G. Flores-Hidalgo and B.M. Pimentel., *Physica A*, **374** (2007) 600-610. 3
- [23] G. Flores-Hidalgo, Y. W. Milla, *Phys. Rev A* **38**, 7527 (2005). 3
- [24] J. S. Schwinger, Proc. Natl. Acad. of Sci. **45** 1542 - 1553 (1959) *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **45** 1542 - 1553 (1959); *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **46** 256 - 265 (1960); *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **46** 570 - 579 (1960); *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **46** 883 - 897 (1960); *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **46** 1401 - 1415 (1960); *Ibid*, Proc. Natl. Acad. of Sci. **47** 1075 - 1083 (1959). 3
- [25] R. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 36 (1948); R. Feynman and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (McGraw-Hill, New York, 1965). 3
- [26] P.A.M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, Band 3, Heft 1, 64 (1933). Uma versão traduzida do artigo pode ser encontrada em, *Selected Papers on Electrodynamics*, editada por Julian S. Schwinger (Dover Publications Inc.- New York - 1958), pp. 312. 3

- [27] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez , *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **33**, 3306 (2011) [3](#)
- [28] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, (Aceito para publicação-2013) [3](#)
- [29] J. S. Schwinger, "*Quantum Kinematics and Dynamics*", (W. A. Benjamin Publishers, New York 1970) [3](#)
- [30] A. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 211, 1981 [4](#)



O Princípio de Ação Quântica de Schwinger

O princípio de ação quântica é uma análise dinâmica das funções de transformação. Essa análise é realizada através do estudo das respostas dos sistemas diante de transformações que relacionam as diferentes representações que um sistema quântico possa ter, [2]. Nessa formulação, estudam-se as mudanças dos estados quânticos e dos observáveis, porém, o princípio de correspondência [2, 3] não é usado *a priori*, já que a grande diferença deste com o formalismo convencional da mecânica quântica, reside em que as relações de comutação entre as variáveis canônicas são deduzidas de maneira totalmente auto-consistentes [4, 2]. Também, como um princípio mais geral, as equações dinâmicas desses observáveis (equação de Heisenberg), assim como dos estados quânticos (equação de Schrödinger), são obtidas como casos especiais dependendo de quais condições forem exigidas para definir as variações do operador de ação quântico.

O elemento principal da mecânica quântica é a *função de transformação*, que surge quando pretendemos caracterizar um sistema quântico com uma série de medidas representadas por observáveis e também ao tentar estabelecer uma conexão entre as suas diferentes representações. A *função de transformação* contém todo o conhecimento ganho nos processos de caracterização quântica do sistema, pois preserva toda a informação do que acontece com ele na transição entre uma e outra descrição. Seguindo a álgebra de medida [5], qualquer mudança de um sistema, independente da sua natureza, pode ser representada por uma transformação unitária ou por uma transformação unitária infinitesimal; isto se dá porque ela preserva as características da estrutura do conjunto (ou espaço) onde

é aplicada, mantendo entre outras coisas a probabilidade invariante ¹.

Dessa forma, estabeleceremos a relação existente entre a *função de transformação*, as transformações unitárias e as transformações unitárias infinitesimais e mostraremos como essas nos permitirão estudar a descrição quântica das respostas de um sistema frente às mudanças globais. Quando efetuamos medidas sobre um sistema de natureza quântica, embora as mudanças do sistema em geral sejam imprevisíveis entre duas observações consecutivas, os seus efeitos determinam mudanças significativas no sistema, por tanto a causalidade tem que ser aplicada necessariamente. Podemos ver então que a evolução temporal de um sistema entre dois instantes de tempo: t e $t + \delta t$, deve ser equivalente a uma mudança de descrição; que, em princípio, deve estar conectada através de uma transformação unitária, da mesma forma que as variáveis dinâmicas do sistema [16]. Assim, com esse tipo de transformação, poderá ser estudada a evolução temporal dos estados do sistema quântico, bem como a evolução dos observáveis pelos quais esse sistema está sendo caracterizado.

Nas seguintes seções, será estudado o papel desempenhado pelas transformações unitárias na dinâmica quântica e também como elas estão relacionadas com as variações infinitesimais, tanto de operadores como de estados. Depois, estudaremos como essas variações infinitesimais podem ser conectadas de maneira consistente com as variações de um único operador, função das variáveis dinâmicas do sistema, derivando assim de maneira natural a forma geral do princípio de ação quântica de Schwinger e também do gerador dessas variações. Após a introdução do princípio de ação quântica, estudaremos como o gerador das variações do operador de ação quântica está relacionado com as variações admissíveis das variáveis dinâmicas da teoria. Da mesma forma, veremos também como essas variações podem ser usadas para derivar as relações de comutação, as descrições de Heisenberg, de Schrödinger e uma equação de Hamilton-Jacobi quântica. Por último, aplicaremos o princípio de ação quântica para encontrar a função de transformação de alguns sistemas simples, concluindo com algumas observações de sua implementação.

2.1 Transformações Unitárias

As medidas de uma característica A de um sistema quântico geram um conjunto completo de vetores e valores próprios que o representam [5]. Se fizermos medidas de novas características sobre tal sistema, teremos, igualmente, novas formas de representa-lo. Cada uma dessas representações está definida em um espaço que possui uma estrutura geométrica e operadores bem definidos. Esses espaços resultantes estão relacionados por meio de transformações que preservam as

¹Falamos que uma probabilidade se mantém invariante se ao representar os estados envolvidos em função de qualquer base genérica, ela continua sendo a mesma. Assim, ela deve ser independente da representação.

estruturas chamadas de unitárias. Assim, os espaços vetoriais, $\{|a_k\rangle\}$ e $\{|b_k\rangle\}$, associados aos observáveis A e B podem estar relacionados ao seguinte conjunto de operadores

$$U_{ab} = \sum_{k=1}^N |a_k\rangle \langle b_k| \quad \text{e} \quad U_{ba} = \sum_{k=1}^N |b_k\rangle \langle a_k|, \quad (2.1)$$

com

$$U_{ab}^\dagger = U_{ba}. \quad (2.2)$$

Pode-se mostrar, com auxílio de (2.1) e (2.2), que

$$U_{ab}U_{ba} = U_{ab}U_{ab}^\dagger = U_{ba}^\dagger U_{ba},$$

e que seu produto é unitário

$$\begin{aligned} U_{ab}U_{ba} &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |a_k\rangle \langle b_k| |b_l\rangle \langle a_l| \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |a_k\rangle \delta_{kl} \langle a_l| = \hat{1}. \end{aligned}$$

Igualmente, podemos mostrar que os operadores

$$U_{ba} = U_{ab}^\dagger = U_{ab}^{-1} \quad \text{e} \quad U_{ab}^\dagger = U_{ba} = U_{ba}^{-1}$$

também são unitários. Da expressão (2.1) podemos mostrar o efeito da atuação de U sobre os vetores $|a_k\rangle$ e $|b_k\rangle$

$$U_{ba} |a_k\rangle = |b_k\rangle \quad \langle a_k| U_{ab} = \langle b_k|. \quad (2.3)$$

Assim, dado que a transformação efetuada pelo operador U é unitária, podemos ver que ação de U sobre uma base ortonormal a transformará em uma outra base que também é ortonormal. Como consequência, temos que as relações geométricas são mantidas dado que o produto interno

$$\begin{aligned} \langle b_l| b_k\rangle &= \langle a_l| U_{ab}U_{ba} |a_k\rangle = \langle a_l| U_{ab}U_{ab}^{-1} |a_k\rangle \\ &= \delta_{kl} = \langle a_l| a_k\rangle, \end{aligned}$$

é conservado, assim como a norma que está relacionada com a probabilidade. Além disso, se introduzirmos uma terceira base associada a um operador C , $\{|c_k\rangle\}$ junto com os seus operadores associados U_{cb} e U_{ac} , podemos ver que ela é suscetível de ser composta com as outras transformações. Dessa forma, teríamos que

$$U_{ab} = U_{ac}U_{cb} \quad (2.4)$$

igualmente poderíamos introduzir tantas bases intermediárias e transformações quanto quiséssemos, mostrando assim que estas formam um grupo fechado; *i.e.* qualquer transformação unitária pode ser construída pela composição de uma ou infinitas transformações.

2.2 Representação de um Operador

A representação matricial de um operador foi construída na base de medidas sucessivas por diferentes tipos de observáveis sobre um sistema já caracterizado [5]. Em vista disso, podemos ver que um operador genérico $\hat{X}$, para o qual não foi especificada a sua base de vetores associada, pode ser expresso em qualquer base, enquanto ela for completa. Assim, dada a base $\{|a_k\rangle\}$, construída como produto da caracterização de um sistema quântico pelo observável $\hat{A}$, ela pode ajudar-nos a expressar o operador $\hat{X}$ da seguinte forma

$$\hat{X} = \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle |a_k\rangle \langle a_l|.$$

Dado a relação anterior, podemos ver que a ação do operador $\hat{X}$ sobre um vetor do espaço gerado por $\hat{A}$ produz um outro vetor que pode ser expresso como uma combinação dos elementos da base $\{|a_k\rangle\}$,

$$\hat{X} |a_m\rangle = \sum_{k=1}^N \langle a_m | \hat{X} | a_k \rangle |a_k\rangle,$$

e seu dual por,

$$\langle a_m | \hat{X} = \sum_{k=1}^N \langle a_k | \hat{X} | a_m \rangle \langle a_k|.$$

Da mesma forma que expressamos o operador $\hat{X}$ na base de vetores gerados pelo operador $\hat{A}$, também podemos representar o operador $\hat{A}$ na base de seus vetores próprios. Essa representação é chamada de *representação espectral* do operador $\hat{A}$, porque ela é escrita em função dos elementos de $E[\hat{A}]$ ² e dos projetores em cada sub-espaço $|a_k\rangle \langle a_l|$. Portanto, podemos ver que

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \langle a_k | \hat{A} | a_l \rangle |a_k\rangle \langle a_l| \\ &= \sum_{l=1}^N a_l |a_l\rangle \langle a_l|, \end{aligned}$$

na qual é aplicada a equação de valores próprios $\hat{A} |a_l\rangle = a_l |a_l\rangle$. Com a teoria desenvolvida até aqui, podemos ainda mostrar que se os espaços vetoriais associados a dois observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$, que satisfazem as equações de valores próprios

$$\hat{A} |a_l\rangle = a_l |a_l\rangle, \quad \hat{B} |b_l\rangle = b_l |b_l\rangle,$$

²Chamamos de $E[\hat{A}]$ ao espectro do operador $\hat{A}$, isto é $E[\hat{A}] = \{a_0, a_1, a_2, \dots\}$

estão relacionados por transformações unitárias do tipo (2.3) e suas representações espectrais são

$$A = \sum_{l=1}^N a_l |a_l\rangle \langle a_l|, \quad B = \sum_{l=1}^N b_l |b_l\rangle \langle b_l|,$$

então eles poderão estar relacionados da seguinte forma

$$\begin{aligned} B &= \sum_{l=1}^N b_l U_{ba} |a_l\rangle \langle a_k| U_{ab} = U_{ba} \left(\sum_{l=1}^N a_l |a_l\rangle \langle a_k| \right) U_{ab} \\ &= U_{ba} A U_{ab}, \end{aligned}$$

se e somente se compartilharem o mesmo espectro, ou seja $b_l = a_l$.

2.3 Transformações Infinitesimais Unitárias para Estados e Operadores

Na seção anterior, observamos que com o uso de transformações unitárias podemos representar os observáveis de um sistema em função das estruturas geométricas associadas a outros observáveis que os caracterizam. Também vimos que se dois desses observáveis compartilham o mesmo espectro, podem ser relacionados através de uma transformação unitária. Dessa forma, as transformações unitárias são úteis para descrever as respostas de um sistema diante de diferentes medidas³. Para uma análise mais detalhada do que acontece quando temos variações no sistema ocasionadas por uma medida, analisaremos, de forma geral, a influência sobre os sistemas e as suas estruturas associadas quando fazemos transformações que induzem pequenas variações chamadas diferenciais pelo seu caráter geométrico especial.

2.3.1 Variações Infinitesimais das Funções de Transformação

As funções de transformação satisfazem as seguintes regras de composição:

$$\langle b_l | a_m \rangle = \sum_n \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle \quad (2.5)$$

$$\langle b_l | a_m \rangle = \overline{\langle a_m | b_l \rangle}. \quad (2.6)$$

Podemos tomar as variações de uma função de transformação como a diferenciação sobre uma função dependente dos estados envolvidos, assim

$$\delta \langle b_l | a_m \rangle = \sum_c [\delta \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle + \langle b_l | c_n \rangle \delta \langle c_n | a_m \rangle] \quad (2.7)$$

³Uma exceção desta observação pode se dar quando descrevemos a evolução de sistemas dissipativos.

e

$$\delta \langle b_l | a_m \rangle = \delta \overline{\langle a_m | b_l \rangle}. \quad (2.8)$$

Até este ponto temos estabelecido algumas relações entre operadores e estados, somadas a essas podemos introduzir a variação da função de transformação como o elemento matricial do operador $\delta \widehat{W}_{ab}$ ⁴.

$$\delta \langle a_m | b_l \rangle = i \langle a_m | \delta \widehat{W}_{ab} | b_l \rangle, \quad (2.9)$$

que é o elemento matricial do operador infinitesimal δW_{ab} . Assim, a definição desse operador infinitesimal pode ser usada para expressar (2.7) como

$$\langle b_l | \delta \widehat{W}_{ba} | a_m \rangle = \sum_n \left[\langle b_l | \delta \widehat{W}_{bc} | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle + \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | \delta \widehat{W}_{ca} | a_m \rangle \right] \quad (2.10)$$

$$= \langle b_l | \delta \widehat{W}_{bc} + \delta \widehat{W}_{ca} | a_m \rangle \quad (2.11)$$

que, a partir de uma forma similar a (2.4), nos permite extrair a seguinte relação; $\delta \widehat{W}_{ba} = \delta \widehat{W}_{bc} + \delta \widehat{W}_{ca}$. Manipulando os índices podemos mostrar que se $c = a$, obtemos $\delta \widehat{W}_{aa} = 0$; da mesma forma que se $b = a$ temos $\delta \widehat{W}_{ac} = -\delta \widehat{W}_{ca}$, assim como para a relação adjunta, onde

$$\delta \overline{\langle a_m | b_l \rangle} = -i \langle b_l | \delta \widehat{W}_{ab}^\dagger | a_m \rangle = i \langle a_m | \delta \widehat{W}_{ab}^\dagger | b_l \rangle,$$

que nos permite mostrar a relação de inversão similar àquela que temos com as transformações unitárias, $\delta \widehat{W}_{ca} = \delta \widehat{W}_{ac}^\dagger$, mostrando que todo operador infinitesimal $\delta \widehat{W}$ definido da forma (2.9) é auto-adjunto. Assim, o i anteposto à função de transformação tem o objetivo de fazer com que o operador $\delta \widehat{W}_{ab}$ seja hermitiano [13].

2.3.2 Transformações Infinitesimais Unitárias

Uma transformação infinitesimal representa uma pequena mudança no elemento em que é aplicada, seja operador ou estado; como tal pode ser considerada uma pequena deformação da operação de identidade [5, 16]. Esse tipo de transformação está associado às transformações unitárias, já que, quando contínuas, são funções de parâmetros que definem as suas características de tal forma que o valor nulo desse parâmetro recobre a unidade. Isso pode ser visto se considerarmos uma expansão da transformação unitária em forma de série em função do(s) parâmetro(s)

$$\hat{U}(\alpha) = 1 + i\hat{G}(\alpha) - \frac{(\hat{G}\alpha)^2}{2!} + i\frac{(\hat{G}\alpha)^3}{3!} \dots, \quad (2.12)$$

⁴Esta relação será mostrada na próxima seção e pode ser desenvolvida a partir das transformações dos estados e do operador hermitiano $\widehat{W}$

com isso, quando os parâmetros associados são pequenos o bastante, o caráter infinitesimal da transformação pode ser considerado tomando em (2.12) os termos com valor significativo da função paramétrica $\hat{G}(\alpha)$. Assim e sem perda de generalidade temos

$$\hat{U}(\alpha) \sim 1 + i\hat{G}(\alpha), \quad (2.13)$$

nessa expressão, $\hat{G}$, é o gerador das transformações infinitesimais dependendo das características da dinâmica do sistema [13]. Seguindo essa ideia, as transformações infinitesimais consideradas como pequenas deformações da unidade podem ser tomadas como

$$\begin{aligned} \hat{U} - 1 &\sim i\hat{G}, \\ \hat{U}^\dagger - 1 &\sim -i\hat{G}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde os operadores infinitesimais $\hat{G}$ são da mesma natureza que $\delta\hat{G}$. Nessa ordem de ideias, a transformação de um vetor pela transformação unitária

$$\hat{U}^\dagger |a_l\rangle \sim (1 - i\hat{G}_{ab}) |a_l\rangle \sim |b_l\rangle, \quad (2.15)$$

e a de seu dual

$$\langle a_l| \hat{U} \sim \langle a_l| (1 + i\hat{G}_{ab}) \sim \langle b_l|, \quad (2.16)$$

pode ser expressa no nível infinitesimal respectivamente, como

$$-i\hat{G}_{ab} |a_l\rangle = |b_l\rangle - |a_l\rangle = \delta |a_l\rangle, \quad (2.17)$$

e

$$i \langle a_l| \hat{G}_{ab} = \langle b_l| - \langle a_l| = \delta \langle a_l|. \quad (2.18)$$

Levando-se em conta os fatos anteriores, podemos ainda derivar a forma da variação infinitesimal de um operador genérico $\hat{X}$, sabendo também que a transformação unitária $\hat{U}$ considerada em (2.9) pode ser expressa como uma transformação do tipo (2.12). Observando que

$$\langle b_k| \hat{X} |b_l\rangle = \langle a_k| \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger |a_l\rangle,$$

a transformação do operador $\hat{X}$ pode ser posta em função da variação dos estados onde $|b_l\rangle = |a_l\rangle + \delta |a_l\rangle$ e $\langle b_l| = \langle a_l| + \delta \langle a_l|$; dessa forma

$$\langle b_k| \hat{X} |b_l\rangle = \langle a_k| \hat{X} |a_l\rangle + \langle a_k| \hat{X} (\delta |a_l\rangle) + (\delta \langle a_k|) \hat{X} |a_l\rangle + (\delta \langle a_k|) \hat{X} (\delta |a_l\rangle), \quad (2.19)$$

onde até primeira ordem, podemos ver que

$$\langle b_k| \hat{X} |b_l\rangle - \langle a_k| \hat{X} |a_l\rangle = \langle a_k| \hat{X} (\delta |a_l\rangle) + (\delta \langle a_k|) \hat{X} |a_l\rangle. \quad (2.20)$$

Também podemos tomar a variação do elemento matricial $\langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle$ levando em conta que as variações acontecem apenas nos estados, obtendo assim

$$\delta \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle = (\delta \langle a_k |) X | a_l \rangle + \langle a_k | X (\delta | a_l \rangle), \quad (2.21)$$

na qual identificando termo a termo as expressões (2.20) e (2.21) podemos chegar à seguinte expressão

$$\begin{aligned} \delta \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle &= \langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle - \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle \\ &= \langle a_k | \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger | a_l \rangle - \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle, \end{aligned} \quad (2.22)$$

da qual podemos finalmente extrair a forma que a variação teria quando ela é posta no operador. Obtendo assim: $\delta \hat{X} = \hat{U} \hat{X} \hat{U}^\dagger - \hat{X}$, podemos mostrar que em primeira ordem, a forma da variação do operador depende unicamente dos geradores das transformações infinitesimais $\hat{G}$, obtendo que

$$\delta \hat{X} = -i [\hat{X}, \hat{G}], \quad (2.23)$$

em que a expressão $[\hat{X}, \hat{G}] = \hat{X} \hat{G} - \hat{G} \hat{X}$ está relacionada com o comutador e, como tal, satisfaz todas as suas características.

2.4 Análise Dinâmica

Até este momento as mudanças dos sistemas em nível quântico têm sido vinculadas com transformações entre espaços vetoriais abstratos, construídos em associação aos operadores e às medidas realizadas, todas estas, associadas unicamente à análise cinemática proporcionada pela álgebra da medida [5]. Tais características são medidas apenas em um único instante de tempo. Essas mudanças, poderiam auxiliar no estudo da dinâmica desses sistemas se pudéssemos associar um lugar no espaço físico e uma ordem nesses acontecimentos, o tempo. Para isso, em analogia com a Mecânica Clássica, os observáveis físicos devem ser expressos em função das variáveis dinâmicas do sistema, como a posição e a velocidade ou em alguns casos em função de operadores que são funções dessas variáveis, como o momento angular. Assim, sua evolução dependerá das características do sistema e seu meio. A toda mudança de um sistema físico tem-se associado uma nova descrição e também uma transformação unitária ou infinitesimal unitária que as relaciona [2, 7]. Assim, se em cada instante de tempo associarmos uma descrição diferente e, como tal, uma relação entre elas, poderíamos então associar essas mudanças às transformações sobre os estados ou sobre os operadores. Essas representações deverão ser ordenadas, tomando um instante de tempo considerado como o tempo inicial t_0 e, então iniciar as medidas dele até um tempo final t , com $t > t_0$. Dessa forma, se o sistema no tempo t_0 está caracterizado pelo conjunto de quantidades $\{|b(t_0)\rangle\}$, e num instante posterior, tempo t_1 , é caracterizado pelas

quantidades $\{|a(t_1)\rangle\}$, a função de transformação entre esses dois conjuntos de medidas será dada pela expressão

$$\langle a(t_1)|b(t_0)\rangle, \quad (2.24)$$

em que cada um dos conjuntos associados são estados próprios dos observáveis $A(t_1)$ e $B(t_0)$, que são não necessariamente compatíveis.

2.5 O Operador de Ação e o Lagrangiano Quântico

A função de transformação (2.24) que relaciona as representações de um sistema entre dois instantes fixos de tempo, está diretamente relacionada com sua dinâmica ao nível quântico. Portanto, podemos ver que seguindo a construção (2.22) e (2.19), o operador que gera as variações relacionadas com a dinâmica pode ser definido por meio do seguinte postulado fundamental:

Existe uma classe especial de alterações infinitesimais para a qual os operadores associados $\delta\hat{S}_{t,t_0}$ são obtidos por variações apropriadas de um único operador, o operador de ação $\hat{S}_{t,t_0}$

$$\delta\langle a(t)|b(t_0)\rangle = \langle a(t)|\delta\hat{S}_{t,t_0}|b(t_0)\rangle \quad (2.25)$$

onde

$$\delta\hat{S}_{t,t_0} = \delta \left[\hat{S}_{t,t_0} \right].$$

Desta forma, dada a propriedade aditiva mostrada em (2.11), se dividirmos o intervalo de tempo (t_0, t) em intervalos infinitesimais de tempo de tamanho Δt , podemos ver que a transformação relaciona as descrições do sistema $\{|a\rangle\}$, no tempo t , e $\{|b\rangle\}$, no tempo t_0 , é uma soma de elementos infinitesimais que pode se expressar como

$$\hat{S}_{t,t_0} = \sum_{t_0}^t \hat{S}_{t_0+\Delta t,t}. \quad (2.26)$$

Assim, no limite em que o $\Delta t \rightarrow 0$ é muito pequeno, a soma anterior pode ser expressa como

$$\hat{S}_{t,t_0} = \int_{t_0}^t \hat{L}(t)dt. \quad (2.27)$$

O operador quântico $\hat{L}(t)$ deve ser dependente das variáveis dinâmicas do sistema, tendo assim $\hat{L}(t) = \hat{L}(\hat{q}, \frac{d\hat{q}}{dt}; t)$. Em analogia com a Mecânica Clássica, este operador será tomado como o **lagrangiano** quântico do sistema que deverá ser um operador auto-adjunto [13].

2.6 O Princípio de Ação Quântica de Schwinger

As variações infinitesimais de estados e de operadores estão diretamente associadas à existência do operador $\hat{G}$ que pode depender das variáveis dinâmicas que descrevem o sistema em um espaço físico. Desta forma, seguindo a ideia que para cada instante de tempo existe uma representação do sistema, variações de tais descrições estariam associadas ao operador $\hat{G}$ avaliado nesse tempo particular.

Tomando as expressões em (2.17) e (2.18), as variações de uma função de transformação como (2.24) serão dadas por

$$\begin{aligned}\delta [\langle a(t) | b(t_0) \rangle] &= [\delta \langle a(t) |] | b(t_0) \rangle + \langle a, t | [\delta | b(t_0) \rangle] \\ &= i \langle a(t) | \hat{G} | b(t_0) \rangle - i \langle a, t | \hat{G}_0 | b(t_0) \rangle \\ &= i \langle a(t) | (\hat{G} - \hat{G}_0) | b(t_0) \rangle,\end{aligned}\tag{2.28}$$

na qual tomando (2.25), podemos relacionar a variação dada em (2.28) com a variação desse único operador $\hat{S}_{t,t_0}$, como

$$\begin{aligned}\delta [\langle a(t) | b(t_0) \rangle] &= i \langle a(t) | (\hat{G} - \hat{G}_0) | b(t_0) \rangle \\ &= \langle a(t) | \delta \hat{S}_{t,t_0} | b(t_0) \rangle = \langle a(t) | \delta \left\{ \int_{t_0}^t \hat{L}(t) dt \right\} | b(t_0) \rangle.\end{aligned}\tag{2.29}$$

A dependência necessária de $\hat{L}(t)$ sobre as variáveis dinâmicas do sistema nos leva a ver o operador de ação $\hat{S}$ como um funcional e a $\delta \hat{S}_{t,t_0}$ como variação frente a mudanças das variáveis dinâmicas $\hat{q}$ e $\dot{\hat{q}} = \frac{d\hat{q}}{dt}$. Lembrando as definições feitas em (2.22) e comparando-as com a expressão (2.28), segue que as variações do operador de ação dependem fundamentalmente dos valores do parâmetro temporal nos tempos inicial e final. Portanto, dado que as variações dos operadores podem se dar em função das variações dos estados, estas dependerão essencialmente das variações de t . Portanto, podemos expressar as variações do operador $\hat{S}$ [8],

$$\delta \hat{S} = \int_{t'_0}^{t'} d\tau \hat{L}(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) - \int_{t_0}^t d\tau \hat{L}(\hat{q}(\tau), \dot{\hat{q}}(\tau), \tau),$$

em que as variações temporais são dadas por

$$\delta t = t' - t.$$

Tomando o valor das variáveis dinâmicas do sistema no tempo t' , podemos definir as expressões para as variações generalizadas desses operadores como totais e de ponto(forma), sendo as totais àquelas que levam em conta a mudança que ocorre quando transforma a função e o ponto

$$\delta \hat{q} = \hat{q}'(t') - \hat{q}(t),$$

e as de forma àquelas quando muda apenas a forma funcional da variável dinâmica, sendo esta avaliada no mesmo ponto

$$\delta_0 \hat{q} = \hat{q}'(t) - \hat{q}(t),$$

obtendo finalmente

$$\delta \hat{q} = \delta_0 \hat{q} + \frac{d\hat{q}(t)}{dt} \delta t. \quad (2.30)$$

Com isto, a expressão para $\delta \hat{S}$ é dada por

$$\begin{aligned} \delta \hat{S} &= \int_{t_0+\delta t_0}^{t+\delta t} d\tau \hat{L}'(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) - \int_{t_0}^t d\tau \hat{L}(\hat{q}(\tau), \dot{\hat{q}}(\tau), \tau) \\ &= \int_{t_0}^t d\tau \left\{ \hat{L}'(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) - \hat{L}(\hat{q}(\tau), \dot{\hat{q}}(\tau), \tau) \right\} \\ &\quad + \int_{t_0+\delta t_0}^{t_0} d\tau \hat{L}(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) + \int_t^{t+\delta t} d\tau \hat{L}(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau). \end{aligned}$$

Além disso, analisando parte por parte este integrando, podemos ver que

$$\begin{aligned} \delta_0 \hat{L} &= \hat{L}'(\hat{q}'(t), \dot{\hat{q}}'(t), t) - \hat{L}(\hat{q}(t), \dot{\hat{q}}(t), t) \\ &= \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}} \delta_0 \hat{q} + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{q}}} \delta_0 \left(\dot{\hat{q}} \right), \end{aligned}$$

corresponde às variações de forma do operador Lagrangiano. Os dois termos restantes podem ser avaliados levando em conta o caráter infinitesimal de δt , assim

$$\begin{aligned} \hat{L}'(\hat{q}'(t), \dot{\hat{q}}'(t), t) \delta t \Big|_{t_0}^t &= \int_{t_0+\delta t_0}^{t_0} d\tau \hat{L}(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) \\ &\quad + \int_t^{t+\delta t} d\tau \hat{L}(\hat{q}'(\tau), \dot{\hat{q}}'(\tau), \tau) \\ &= \hat{L}(\hat{q}(t), \dot{\hat{q}}(t), t) \delta t + \left(\frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}} \delta_0 \hat{q} + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{q}}} \delta_0 \left(\dot{\hat{q}} \right) \right) \delta t \Big|_{t_0}^t. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Por último, dado que as variações δ_0 não implicam em transformações do tempo, estas comutam com o operador de derivada, fornecendo assim

$$\delta_0 \left(\frac{d\hat{q}}{dt} \right) = \frac{d}{dt} (\delta_0 \hat{q}).$$

Portanto, rearranjando os termos em (2.31), tem-se que a variação do operador de ação é dada pela seguinte expressão

$$\delta\hat{S} = \left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \delta\hat{q} - \left\{ \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \dot{\hat{q}} - \hat{L}(t) \right\} \delta t \right) \Big|_{t_0}^t + \int_{t_0}^t dt \left\{ \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \right) \right\} \delta_0 \hat{q}. \quad (2.32)$$

Esse resultado é um princípio dinâmico inteiramente relacionado com a variação generalizada do operador de ação quântico. Similarmente ao princípio de ação clássica, que relaciona essas variações com as trajetórias físicas do sistema e quantidades conservadas [8], o caso quântico não apresentando trajetórias no espaço de fase físico, associa os conjuntos de estados e operadores às configurações de um sistema quântico descritas pelas variáveis dinâmicas definidas nos tempos t_0 e t que, portanto, devem estar associadas com as equações de movimento para os operadores. Assim, dado que construímos esse princípio dinâmico mantendo as variações apenas sobre os estados, variações arbitrárias sobre a variável temporal t , é natural se pensar que o resultado final (2.32) dependa apenas das variações das variáveis dinâmicas nos tempos t_0 e t . Com isto, a expressão (2.32) deve ser independente da dinâmica do sistema, o que significa

$$\int_{t_0}^t dt \left\{ \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \right) \right\} \delta_0 \hat{q} = 0.$$

Isto mostra que no nível quântico a ação é considerada estacionária ou invariante ante transformações, preservando a dinâmica. Por conseguinte, essa integral deve ser independente de qualquer expressão que dê conta de algum elemento relacionado com as equações de movimento.

Dado o raciocínio anterior, temos que a variação do operador de ação quântica será dada por

$$\delta\hat{S} = \left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \delta\hat{q} - \left\{ \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \dot{\hat{q}} - \hat{L}(t) \right\} \delta t \right) \Big|_{t_0}^t,$$

esse resultado é conhecido como o princípio de ação quântica. Da mesma maneira que (2.29) faz com que a variação da ação dependa apenas dos valores de um operador $\hat{G}$ nos instantes de tempo inicial e final, podemos tomar que

$$\delta\hat{S} = i(\hat{G} - \hat{G}_0),$$

onde

$$\hat{G} = \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \delta\hat{q} - \left\{ \frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \dot{\hat{q}} - \hat{L}(t) \right\} \delta t.$$

Seguindo a definição clássica de momento generalizado, temos que

$$\frac{\partial\hat{L}}{\partial\dot{\hat{q}}} \equiv \hat{p}.$$

Além disso, para casos nos quais não tenhamos vínculos, podemos definir o Hamiltoniano

$$\hat{H} \equiv \hat{p} \cdot \dot{\hat{q}} - \hat{L}(t),$$

onde o operador $\hat{G}$ é dado por

$$\hat{G} = \hat{p} \delta \hat{q} - \hat{H} \delta t, \quad (2.33)$$

A anterior é a forma hamiltoniana do princípio de ação quântica, fundamental para estudar a dinâmica quântica dada em termos de equações diferenciais de primeira ordem.

2.7 Relações de Comutação Canônicas

Seguindo as formas analisadas em (2.25), o princípio de ação quântica assume a seguinte forma

$$\delta [\langle a(t) | b(t_0) \rangle] = \langle a(t) | \left(\hat{p} \delta \hat{q} - \hat{H} \delta t \right) \Big|_{t_0}^t | b(t_0) \rangle. \quad (2.34)$$

Donde podemos ver claramente a forma do elemento matricial do operador (2.6). Levando em conta que o operador $\hat{G}$, gera as transformações infinitesimais unitárias dos operadores e variáveis dinâmicas do sistema. Podemos tomar como ponto de partida a expressão (2.23), para estudar as variações sobre o operador posição $\hat{q}$,

$$\begin{aligned} \delta \hat{q}^i &= -i [\hat{q}^i, \hat{G}] \\ &= -i \hat{p}^j [\hat{q}^i, \delta \hat{q}_j] - i [\hat{q}^i, \hat{p}^j] \delta \hat{q}_j + i [\hat{q}^i, \hat{H}] \delta t, \end{aligned}$$

da mesma forma, segue para o operador momento $\hat{p}$

$$\begin{aligned} \delta \hat{p}_i &= -i [\hat{p}_i, \hat{G}] \\ &= -i \hat{p}^j [\hat{p}_i, \delta \hat{q}_j] - i [\hat{p}_i, \hat{p}^j] \delta \hat{q}_j + i [\hat{p}_i, \hat{H}] \delta t, \end{aligned}$$

aqui usamos a propriedade $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$. Restringindo a análise para o caso em que não temos variações no tempo ($\delta t = 0$)

$$\begin{aligned} \delta \hat{q}^i &= -i \hat{p}^j [\hat{q}^i, \delta \hat{q}_j] - i [\hat{q}^i, \hat{p}^j] \delta \hat{q}_j, \\ \delta \hat{p}_i &= -i \hat{p}^j [\hat{p}_i, \delta \hat{q}_j] - i [\hat{p}_i, \hat{p}^j] \delta \hat{q}_j. \end{aligned} \quad (2.35)$$

As expressões anteriores mostram como são as variações infinitesimais das variáveis dinâmicas do sistema causadas pelo gerador $\hat{G}$. Podemos ver que esse gerador, 2.33, inclui apenas as variações do operador de posição $\hat{q}$. Desta forma,

se quisermos ter um quadro completo, isto é; como são as variações das variáveis dinâmicas do sistema quando temos variações agora sobre o momento, temos que fazer uma transformação sobre $\hat{G}$. Esse caso recíproco pode ser obtido aproveitando a analogia existente entre o operador de ação clássica e a sua invariância frente a adição de termos de fronteira. Isto pode ser ilustrado da seguinte maneira: quando tomarmos uma lagrangiana da forma

$$\overline{\hat{L}} = \hat{L} + \frac{d\hat{\Lambda}}{dt},$$

teremos que a ação (2.27) se transforma em

$$\overline{\hat{S}}_{t,t_0} = \int_{t_0}^t \overline{\hat{L}} dt = \int_{t_0}^t \hat{L} dt + \hat{\Lambda} \Big|_{t_0}^t,$$

e, por conseguinte, a variação da ação é dada por

$$\delta \overline{\hat{S}}_{t,t_0} = \overline{\hat{G}} - \overline{\hat{G}}_0 = \left(\hat{G} + \delta \hat{\Lambda} \right) - \left(\hat{G}_0 + \delta \hat{\Lambda}_0 \right).$$

Assim, a fim de expressar as relações recíprocas entre as variações dos operadores do momento e da posição por efeito das variações do momento, escolhamos o operador $\hat{\Lambda} = -\hat{p} \cdot \hat{q}$, com o qual não teremos consequências sobre a dinâmica do sistema e, se há apenas a troca de $\hat{p}$ por $\hat{q}$ em $\hat{G}$, o que nos permitirá obter as relações desejadas equivalentes a (2.35), assim

$$\begin{aligned} \overline{\hat{G}}_0 - \hat{G}_0 &= \delta \hat{\Lambda}_0, \\ \overline{\hat{G}}_1 - \hat{G}_1 &= \delta \hat{\Lambda}_1, \end{aligned}$$

com

$$\delta \hat{\Lambda} = -\delta \hat{p} \cdot \hat{q} - \hat{p} \cdot \delta \hat{q}.$$

Disso segue

$$\overline{\hat{G}} = -\delta \hat{p} \cdot \hat{q} - \hat{H} \delta t,$$

que, conseqüentemente, com (2.35) e tomando ($\delta t = 0$), origina as seguintes expressões para as variações dos operadores

$$\begin{aligned} \delta \hat{q}_i &= i \delta \hat{p}_k [\hat{q}_i, \hat{q}_k] + i [\hat{q}^i, \delta \hat{p}_k] \hat{q}_k, \\ \delta \hat{p}_i &= i \delta \hat{p}_k [\hat{p}_i, \hat{q}_k] + i [\hat{p}_i, \delta \hat{p}_k] \hat{q}_k. \end{aligned} \quad (2.36)$$

As variações generalizadas (2.35) e (2.36) foram construídas para a situação em que os operadores $\hat{q}_i$ e $\hat{p}_j$ são variáveis mutuamente independentes; isto se expressa fazendo com que as variações relativas sejam nulas

$$\delta_p \hat{q}_i = \delta_q \hat{p}_i = 0,$$

dai deve-se satisfazer as seguintes identidades

$$\begin{aligned} -i\hat{p}_j [\hat{q}_i, \delta\hat{q}_j] - i [\hat{q}_i, \hat{p}_j] \delta\hat{q}_j &= \delta\hat{q}_i, \\ i\delta\hat{p}_k [\hat{q}_i, \hat{q}_k] + i [\hat{q}_i, \delta\hat{p}_k] \hat{q}_k &= 0, \\ -i\hat{p}_j [\hat{p}_i, \delta\hat{q}_j] - i [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \delta\hat{q}_j &= 0, \\ i\delta\hat{p}_k [\hat{p}_i, \hat{q}_k] + i [\hat{p}_i, \delta\hat{p}_k] \hat{q}_k &= \delta\hat{p}_i. \end{aligned}$$

Em seguida, considerando a álgebra de medida para observáveis compatíveis temos

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_k] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

Assim, uma das possíveis soluções para esse sistema é dada por

$$\begin{aligned} [\hat{q}_i, \delta\hat{p}_k] &= [\hat{p}_i, \delta\hat{q}_j] = 0, \\ [\hat{p}_i, \delta\hat{p}_k] &= [\hat{q}_i, \delta\hat{q}_j] = 0, \end{aligned}$$

com o que obtemos de maneira natural

$$[\hat{q}^i, \hat{p}^j] = i\delta_{ij}, \quad (2.37)$$

$$[\hat{q}^i, \hat{q}^j] = 0, \quad (2.38)$$

$$[\hat{p}^i, \hat{p}^j] = 0, \quad (2.39)$$

que são as relações de comutação usuais para as variáveis que descrevem a dinâmica do sistema, os operadores de posição e momento.

2.8 Equações de Heisenberg

Na seção anterior estudamos como são as variações dos operadores quando não envolvemos o tempo, porém o objetivo do estudo da dinâmica de sistemas quânticos é a evolução temporal. Para isso, tomaremos agora somente a parte do gerador que envolve o tempo, $\hat{G}_t = -\hat{H}\delta t$. Em essência, o operador $\hat{G}_t$ esta relacionado com a transformação unitária que relaciona as descrições do sistema em um tempo t com a que o sistema terá no tempo $t + \delta t$; portanto, podemos ver que tomando um operador $\hat{A}$, função das variáveis dinâmicas do sistema $\hat{q}$, $\hat{p}$ e o parâmetro t , a sua variação dependerá basicamente das variações das variáveis dinâmicas, temos assim

$$\delta\hat{A} = \hat{A}(\hat{q}(t + \delta t), \hat{p}(t + \delta t), t) - \hat{A}(\hat{q}(t), \hat{p}(t), t).$$

Tomando como referência (2.30) e, supondo que não teremos variações de forma, segue

$$\hat{q}(t + \delta t) = \hat{q} + \delta\hat{q} = \hat{q}(t) + \frac{d\hat{q}(t)}{dt}\delta t;$$

e, com $\delta\hat{q} = \frac{d\hat{q}}{dt}\delta t$ e $\delta\hat{p} = \frac{d\hat{p}}{dt}\delta t$, temos que $\delta\hat{A}$ é dado por

$$\begin{aligned}\delta\hat{A} &= \hat{A}(\hat{q}(t+\delta t), \hat{p}(t+\delta t), t) - \hat{A}(\hat{q}(t), \hat{p}(t), t) \\ &= \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{q}} \frac{d\hat{q}}{dt} + \frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}} \frac{d\hat{p}}{dt} \right) \delta t \\ &= \left(\frac{d\hat{A}}{dt} - \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right) \delta t.\end{aligned}$$

Finalmente, retomando a expressão (2.23), temos

$$\delta\hat{A} = -i [\hat{A}, \hat{H}] \delta t = \left(\frac{d\hat{A}}{dt} - \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right) \delta t,$$

obtendo, por fim, a equação diferencial

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -i [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}, \quad (2.40)$$

que é a equação de Heisenberg para a evolução temporal de um observável $\hat{A}$.

2.9 Equação de Schrödinger

Na seção anterior encontramos a equação de Heisenberg apenas considerando variações sobre os operadores. Podemos agora considerar o caso em que as variações da função de transformação são dadas pelas variações nos estados. Assim, retomando o caso geral (2.34) e também as condições sobre os estados tal que a ação do gerador $\hat{G}$ sobre o estado inicial seja nula, *i.e.*

$$\hat{G}_0 |b(t_0)\rangle = \delta |b(t_0)\rangle = 0 \quad (2.41)$$

e não nulas para tempos posteriores,

$$\delta \langle a(t) | = \langle a(t) | \hat{G}.$$

Podemos obter ainda que

$$\delta [\langle a(t) | b(t_0) \rangle] = i \langle a(t) | \left(\hat{p}\delta\hat{q} - \hat{H}\delta t \right) | b(t_0) \rangle.$$

Uma vez que a função de transformação $\langle a(t) | b(t_0) \rangle$ está relacionada com a medida da característica a de $\hat{A}$ quando o sistema está no estado b de $\hat{B}$, ou, em outras palavras, a projeção do vetor $|b(t_0)\rangle$ no vetor $|a(t)\rangle$, podemos tomar o caso geral em que temos $\langle q|\psi\rangle$; onde o estado inicial representa o estado quântico do sistema $|b(t_0)\rangle = |\psi\rangle$ medido em um sistema coordenado, associado ao operador $\hat{q}$, assim

$$\delta \langle q|\psi\rangle = i \langle q | \left(\hat{p}\delta\hat{q} - \hat{H}\delta t \right) | \psi \rangle.$$

Pela relação, $[\hat{p}, \delta\hat{q}] = 0$, a expressão precedente toma a seguinte forma

$$\delta \langle q|\psi \rangle = \delta q i \langle q|\hat{p}|\psi \rangle - i \langle q|\hat{H}|\psi \rangle \delta t. \quad (2.42)$$

Entretanto, se considerarmos a função de transformação como uma função dependente das variáveis q e t , a variação total será dada por

$$\delta \langle q|\psi \rangle = \delta q \frac{\partial \langle q|\psi \rangle}{\partial q} + \delta t \frac{\partial \langle q|\psi \rangle}{\partial t}; \quad (2.43)$$

em que, por simples comparação de (2.42) com (2.43), resulta imediatamente nas equações

$$i \langle q|\hat{p}|\psi \rangle = \frac{\partial \langle q|\psi \rangle}{\partial q}, \quad (2.44a)$$

e

$$\frac{\partial \langle q|\psi \rangle}{\partial t} = -i \langle q|\hat{H}|\psi \rangle. \quad (2.44b)$$

Esta última é a equação de Schrödinger que descreve a evolução temporal dos estados do sistema; a primeira (2.44a) permite associar as representações dos valores próprios dos operadores de momento no espaço de coordenadas

$$i\hat{p} \rightarrow \frac{\partial}{\partial q}, \quad (2.45)$$

a equação, eq.(2.44b), tem uma grande importância, já que ela é independente da representação do sistema, dependendo somente do parâmetro de evolução temporal.

2.10 Operadores Bem Ordenados de Dirac e Integração do Princípio Ação

Usar a mecânica lagrangiana na teoria quântica, essencialmente a integral de ação, foi ideia de P.A.M. Dirac [4], para poder associar o conceito de derivadas e funções aos operadores e, portanto, às funções de transformação. Introduziu também o conceito de operador bem ordenado, que não é senão o rearranjo de uma função de operadores para facilitar a sua avaliação como um elemento matricial.

Se considerarmos o elemento matricial de uma função de operadores da forma

$$\langle a'| F(\hat{A}, \hat{B}) | b'' \rangle$$

em que cada operador, $\hat{A}$ e $\hat{B}$, representa um conjunto de observáveis, podemos estabelecer se existe uma relação algébrica entre os operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$, e uma

possível expansão em série de potências da função $F(\hat{A}, \hat{B})$. Os produtos dessa série poderão ser rearranjados de tal forma que se possa construir uma nova função ordenada

$$\mathcal{F}(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_k f_k(\hat{A}) g_k(\hat{B}), \quad (2.46)$$

onde teríamos que

$$\begin{aligned} \langle a' | F(A, B) | b'' \rangle &= \langle a' | \sum_k f_k(A) g_k(B) | b'' \rangle \\ &= \sum_k f_k(a') g_k(b'') \langle a' | b'' \rangle \\ &= \mathcal{F}(a', b'') \langle a' | b'' \rangle. \end{aligned} \quad (2.47)$$

A função dos operadores $\mathcal{F}(\hat{A}, \hat{B})$ recebe o nome de operador bem ordenado [2, 4]. Assim, se usamos (2.47) para avaliar a variação do operador ação (2.25), temos para $\delta\widehat{\mathcal{W}}_{t,t_0}$ a versão bem ordenada

$$\delta\langle a(t_1) | b(t_0) \rangle = i\langle a(t_1) | \delta\hat{S}_{t_0,t_1} | b(t_0) \rangle = i\delta\mathcal{W}_{t_0,t_1} \langle a(t_1) | b(t_0) \rangle. \quad (2.48)$$

Portanto, fazendo a integração, temos que a função de transformação é dada por

$$\langle a(t_1) | b(t_0) \rangle = e^{i\mathcal{W}_{t_0,t_1}} \quad (2.49)$$

Essa forma particular é justamente a forma proposta por Dirac em [4].

2.11 A Equação de Hamilton-Jacobi Quântica

A expressão (2.49) para a função de transformação nos permite obter uma equação análoga à equação de Hamilton-Jacobi. Assim, tomando a forma da equação de Schrödinger (2.44b), vemos que

$$-i\langle q | \hat{H} | \psi \rangle = \frac{\partial \langle q | \psi \rangle}{\partial t} = \frac{\partial e^{i\mathcal{W}_{t_0,t}}}{\partial t} = i \frac{\partial \mathcal{W}_{t,t_0}}{\partial t} e^{i\mathcal{W}_{t,t_0}}, \quad (2.50)$$

donde, por comparação, obtemos

$$\langle q | -\hat{H} | \psi \rangle = \langle q | \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t_0,t}}{\partial t} | \psi \rangle.$$

Similarmente para (2.44a), segue

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q | \psi \rangle}{\partial q} &= i\langle q | \hat{p} | \psi \rangle = \frac{\partial e^{i\mathcal{W}_{t,t_0}}}{\partial q} = i \frac{\partial \mathcal{W}_{t,t_0}}{\partial q} \langle q | \psi \rangle \\ \langle q | \hat{p} | \psi \rangle &= \langle q | \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t,t_0}}{\partial \hat{q}} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Dessa maneira podemos ver as seguintes equações operatoriais que estabelecem o sistema de equações de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}}{\partial t} + \hat{H} = 0, \quad (2.51a)$$

e para o momento generalizado

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{q}} = \hat{p}. \quad (2.51b)$$

2.12 Exemplos de Aplicação do Princípio de Ação Quântica

Tomaremos alguns exemplos simples de sistemas conhecidos para mostrar a aplicação do princípio de ação quântica. Primeiramente, calcularemos as funções de transformação para sistemas quânticos simples, usando unicamente as soluções clássicas do sistema, a integral da ação clássica, e a equação de hamilton quântica. A seguir, introduziremos a noção de operador hamiltoniano bem ordenado com o qual calcularemos a função do transformação para o oscilador harmônico.

2.12.1 Partícula Livre

A função de transformação associada à partícula livre em nível quântico está associada ao estudo da propagação de sistemas livres de interações como pacotes de onda no espaço livre, forma usada no estudo de espalhamento quando considerada em três dimensões. Aqui, por simplicidade estudaremos o caso unidimensional, cujo principal objetivo é mostrar que um dos exemplos mais frequentes da mecânica quântica pode ser tratado simplesmente com princípio de ação quântica de Schwinger.

A ação clássica da partícula livre é dada por

$$S = \frac{1}{2}m \frac{(q - q_0)^2}{t - t_0}.$$

Tomando essa expressão como operador, assumindo *a priori* um ordenamento dos tempos menores à esquerda, temos que a ação quântica é dada por

$$\hat{S} = \frac{1}{2}m \frac{\hat{q}^2 - \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0}{t - t_0}. \quad (2.52)$$

Logo, podemos usar as equações operacionais de Hamilton-Jacobi (2.51) se assumirmos que o operador principal de Hamilton tem a seguinte forma

$$\widehat{\mathcal{W}} = \hat{S} + \hat{\phi}(t), \quad (2.53)$$

em que incluímos o termo $\hat{\phi}(t)$ para dar conta dos termos que se originam no ordenamento assumido em (2.52), obtendo assim

$$\widehat{\mathcal{W}} = \frac{1}{2}m \frac{\hat{q}^2 - \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0}{t - t_0} + \hat{\phi}.$$

Logo, usando a relação canônica $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, entre o momento $\hat{p}$ dado em (2.51b) e a posição, podemos derivar a relação de comutação dos operadores de posição para tempos diferentes, assim

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\hat{q}, m \frac{\hat{q} - \hat{q}_0}{t - t_0} \right] = i\hbar,$$

o que conduz a

$$\hat{q}_0 \hat{q} = \frac{i\hbar}{m} (t - t_0) + \hat{q} \hat{q}_0.$$

Dessa forma, o operador hamiltoniano pode ser expresso como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{m}{2} \left(\frac{\hat{q} - \hat{q}_0}{t - t_0} \right)^2 \\ &= \frac{m}{2(t - t_0)^2} \left\{ \hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - \frac{i\hbar}{m} (t - t_0) - 2\hat{q}\hat{q}_0 \right\}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Ainda, usando a expressão anterior combinada com (2.53) e (2.51a), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \hat{H} \\ &= -\frac{m}{2(t - t_0)^2} \{ \hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 \} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t}; \end{aligned}$$

em seguida, comparando a expressão anterior com (2.54) e solucionando a equação diferencial para $\hat{\phi}$, obtemos

$$\hat{\phi} = \hat{\phi}_0 + \frac{i\hbar}{2} \ln(t - t_0).$$

Na expressão anterior devemos observar que $\hat{\phi}_0 = \phi_0 \hat{1}$; portanto, se tomarmos $\phi_0 = \frac{i\hbar}{2} \ln(\mathcal{A})$, com $\mathcal{A}$ sendo uma constante arbitrária, obtemos a seguinte forma para a função $\hat{\phi}(t)$

$$\hat{\phi}(t) = \frac{i\hbar}{2} \ln\{(t - t_0)\mathcal{A}\}.$$

Resultando assim, $\widehat{\mathcal{W}}$ tem a forma

$$\widehat{\mathcal{W}} = \frac{1}{2}m \frac{\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0}{t - t_0} + \frac{i\hbar}{2} \ln(\mathcal{A}(t - t_0))$$

e, usando a forma geral de (2.49), segue que a função de transformação é dada por

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{A(t - t_0)}} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{(q - q_0)^2}{t - t_0} \right\}.$$

Para determinarmos a constante $\mathcal{A}$, podemos usar a condição

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \delta(q - q_0).$$

Assim, se usarmos a seguinte sucessão de funções para a delta de Dirac

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} \exp(-n^2 y^2) = \delta(y),$$

podemos ver que se tomarmos

$$y \rightarrow q - q_0,$$

e

$$n^2 = \frac{m}{2i\hbar(t_0 - t)},$$

a função de transformação (2.49) resulta em:

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{im}{2\pi\hbar(t - t_0)}} \exp \left[-\frac{m}{2i\hbar} \frac{(q - q_0)^2}{t - t_0} \right]. \quad (2.55)$$

2.12.2 Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico é o modelo de maior utilidade na mecânica quântica, dada a forma do seu espectro e as relações algébricas dos seus operadores associados. Assim como a forma em que estão construídos seus estados é útil no estudo de inúmeros sistemas quântico nos quais as interações permitem a existência de um equilíbrio estável. Este modelo atua como uma excelente aproximação em todas as teorias que tratam sistemas com pequenas oscilações como alguns sólidos, o espectro vibracional de moléculas, alguns sistemas em óptica quântica, etc. Em nível geral, seus estados quânticos são de grande riqueza, contando entre eles os estados comprimidos e os estados coerentes que são os estados mais clássicos associados ao campo electromagnético.

A função de transformação associada ao oscilador harmônico pode ser calculada via integral de Feynman [10], mas para este caso e outros de sistemas quânticos simples, o princípio de ação quântica de schwinger fornece uma grande economia de cálculos, obtendo os mesmos resultados.

Trataremos aqui a forma fundamental da função de transformação que pode ser associada com este modelo. A ação quântica para o oscilador harmônico será

dada pela expressão⁵

$$\hat{S} = \frac{m\omega}{2\sin\omega(t-t_0)} \{ (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) \cos\omega(t-t_0) - 2\hat{q}_0\hat{q} \}.$$

Além disso, usando (2.51b), o momento é dado por

$$\hat{p} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{q}} = \frac{m\omega}{\sin\omega(t-t_0)} \{ \hat{q} \cos\omega(t-t_0) - \hat{q}_0 \}. \quad (2.56)$$

Como discutido no exemplo anterior, para conhecermos as relações de comutação entre os operadores de posição em diferentes tempos, $\hat{q}_0$ e $\hat{q}$, podemos usar a relação de comutação entre as variáveis canônicas, desta forma

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\hat{q}, \frac{m\omega}{\sin\omega(t-t_0)} \{ \hat{q} \cos\omega(t-t_0) - \hat{q}_0 \} \right],$$

obtendo assim

$$\hat{q}_0\hat{q} = \hat{q}\hat{q}_0 + \frac{i\hbar\sin\omega(t-t_0)}{m\omega}. \quad (2.57)$$

Agora, tomando o ordenamento dado em (2.57) e a forma do momento (2.56), segue que o operador hamiltoniano é escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{m\omega^2}{2\sin^2\omega(t-t_0)} \{ \hat{q}^2 \cos^2\omega(t-t_0) - 2\hat{q}\hat{q}_0 \cos\omega(t-t_0) + \hat{q}_0^2 \} \\ &\quad - \frac{i\hbar\omega}{2} \cot\omega(t-t_0) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2. \end{aligned}$$

Se asumirmos novamente a existência da função $\hat{\phi}$, a expressão (2.51a)

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \hat{H}, \quad (2.58)$$

nos fornece

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} &= -\frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{\sin^2\omega(t-t_0)} \{ (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) \cos^2\omega(t-t_0) - 2\hat{q}_0\hat{q} \cos\omega(t-t_0) \} \\ &\quad - \frac{m\omega^2}{2} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2). \end{aligned}$$

Dessa forma, comparando-a com a equação para $\hat{\mathcal{W}}$ obtemos o termo

$$\hat{\phi} = i\frac{\hbar}{2} \ln(A\sin\omega(t-t_0)).$$

⁵Aqui assumimos um ordenamento idêntico ao do exemplo anterior.

Sendo assim, a amplitude de transição possui a seguinte forma

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{A \sin \omega(t - t_0)}} \exp \left\{ \frac{im\omega \{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega(t - t_0) - 2q_0 q \}}{2\hbar \sin \omega(t - t_0)} \right\}.$$

Seguindo novamente a mesma metodologia do exemplo anterior, obtemos $A = \frac{2\pi i \hbar}{m\omega}$. Assim, a expressão para a função de transformação do oscilador harmônico é dada por

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t - t_0)}} \exp \left[\frac{im\omega \{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega(t - t_0) - 2q_0 q \}}{2\hbar \sin \omega(t - t_0)} \right]. \quad (2.59)$$

Esta função de transformação, chamada também de propagador, é usada para calcular a evolução temporal de qualquer estado inicial em que o sistema possa estar. Um exemplo em que podemos aplicar esta função de transformação, é o da evolução temporal de pacotes de onda em potenciais harmônicos que evoluem no tempo como estados coerentes [11].

2.13 O Operador Hamiltoniano Bem Ordenado para a Obtenção das Funções de Transformação

Até agora, construímos as funções de transformação usando a ação do sistema e as equações de Hamilton-Jacobi em nível quântico. Nesta seção mostraremos uma forma alternariva de derivar tais funções de transformação. Como vimos ao longo deste trabalho o Hamiltoniano quântico tem sido um ponto de partida em todas as nossas análises. De fato os princípios da mecânica quântica foram construídos via analogias com uma dinâmica hamiltoniana. No caso do princípio de ação quântica, também é possível encontrar as funções de transformação usando a intervenção direta do hamiltoniano. Para isso, podemos começar tomando as equações dinâmicas de Heisenberg (2.40) para o momento $\hat{p}$ e a posição $\hat{q}$,

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}, \hat{H}]. \quad (2.60)$$

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}]. \quad (2.61)$$

Logo, tomando (2.44b) e fazendo neste caso $|\psi\rangle = |q_0\rangle$, o hamiltoniano *bem ordenado*, $\hat{H}(q, q_0; t) \rightarrow \mathcal{H}(q, q_0; t)$, induz à seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q | q_0 \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{\mathcal{H}}(q, q_0; t) | q_0, t_0 \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(q, q_0; t) \langle q | q_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Para integrar o resultado anterior, precisamos explicitar a possível dependência de $\langle q|q_0\rangle$ com q e q_0 . Portanto, ao integrar a equação anterior devemos considerar a existência de uma função $\mathcal{A}(q, q_0)$, com isto a função de transformação é dada por

$$\langle q|q_0\rangle = \mathcal{A}(q, q_0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(q, q_0; \tau) d\tau \right]. \quad (2.63)$$

A constante de normalização $\mathcal{A}(q, q_0)$ pode ser determinada com a ajuda das equações dadas em (2.44a) e da mesma forma que nos exemplos anteriores, deve-se respeitar a condição

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q|q_0\rangle = \delta(q - q_0).$$

2.13.1 Oscilador Harmônico

Trataremos novamente o exemplo do oscilador harmônico, mas agora usando o Hamiltoniano bem ordenado. Como sabemos, o hamiltoniano quântico do sistema é dado por

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2. \quad (2.64)$$

Assim, tomando as equações de Heisenberg para (2.60) e (2.61), temos

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -\hat{q}m\omega^2 \quad (2.65)$$

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}. \quad (2.66)$$

Em seguida, fazendo uso das condições iniciais $\hat{p}(t_0 = 0) = \hat{p}_0$ e $\hat{q}(t_0 = 0) = \hat{q}_0$, obtemos a seguinte expressão para o momento

$$\hat{p} = \frac{m\omega}{\sin \omega t} \hat{q}_0 - m\omega \frac{\cos \omega t}{\sin \omega t} \hat{q}. \quad (2.67)$$

Desta forma, substituindo no Hamiltoniano (2.64), temos

$$\hat{H}(q, q_0; t) = \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) - \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0 \hat{q} + \hat{q} \hat{q}_0), \quad (2.68)$$

o hamiltoniano anterior pode ser ordenado usando a relação que existe entre $\hat{q}$ e $\hat{q}_0$. Para isso, podemos usar as relações de comutação canônicas e (2.67), para obter

$$[\hat{q}, \hat{q}_0] = i\hbar \frac{\sin \omega t}{m\omega}.$$

Portanto, a forma bem ordenada do Hamiltoniano (2.68) é dada por

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{q}, \hat{q}_0; \tau) = \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) - m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} \hat{q} \hat{q}_0 + \frac{i\hbar \omega \cos \omega t}{2 \sin \omega t}.$$

Agora, com o hamiltoniano ordenado, podemos solucionar (2.62), que possui a seguinte forma

$$\frac{\partial \langle q|q_0 \rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (q_0^2 + q^2) - m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} q q_0 + \frac{i\hbar\omega}{2} \frac{\cos \omega t}{\sin \omega t} \right) \langle q|q_0 \rangle,$$

que através da integração em t , resulta na seguinte solução:

$$\langle q|q_0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{\mathcal{A} \sin \omega t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega t} \{ (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) \cos \omega t - 2\hat{q}_0 \hat{q} \} \right\}. \quad (2.69)$$

Para determinar a forma de $\mathcal{A}(q, q_0)$ devemos fazer uso de (2.44a), em que

$$\frac{\partial \langle q|q_0 \rangle}{\partial q} = \left(\sqrt{\mathcal{A} \sin \omega t} \frac{\partial}{\partial q} \sqrt{\frac{1}{\mathcal{A} \sin \omega t}} \right) \langle q|q_0 \rangle + \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{\sin \omega t} \{ \hat{q} \cos \omega t - \hat{q}_0 \} \right\} \langle q|q_0 \rangle,$$

assim, comparando com o resultado de (2.67), temos que

$$\frac{i}{\hbar} \langle q|\hat{p}|\psi \rangle = -\frac{m\omega}{\sin \omega t} (\cos \omega t \hat{q} - \hat{q}_0).$$

da mesma forma para p_0 ,

$$\frac{\partial}{\partial q} \sqrt{\frac{1}{\mathcal{A} \sin \omega t}} = \frac{\partial}{\partial q_0} \sqrt{\frac{1}{\mathcal{A} \sin \omega t}} = 0.$$

A constante A na expressão obtida em (2.69) pode ser encontrada, tomando o limite $t \rightarrow \delta$, quando δ é uma quantidade muito pequena, verificando $\langle q|q_0 \rangle = \delta(q - q_0)$ assim

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\lim_{t \rightarrow \delta} \langle q|q_0 \rangle \right) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sqrt{\frac{1}{\mathcal{A} \sin \omega \delta}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega \delta} \{ \hat{q} - \hat{q}_0 \}^2 \right\} = \delta(q - q_0).$$

Com esse resultado obtemos a mesma função de transformação para o oscilador hamônico que em (2.59)

$$\langle q|q_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2i \hbar \sin \omega t} \{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega t - 2q_0 q \} \right\}.$$

Referências Bibliográficas

- [1] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Rev. Bras. de Ens. Fís.*. (Aceito para publicação - 2013) [9](#), [81](#)
- [2] P.A.M. Dirac, *Princípios de Mecânica Cuântica* (Ediciones Ariel - Madrid 1967). [9](#), [16](#), [26](#)
- [3] D. J. Toms, *The Schwinger action principle and effective action* (Cambridge University Press - Cambridge 2007) [9](#)
- [4] T. W. B. Kibble, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* , Vol. 249, No. 1258 (Jan. 13, 1959), pp. 441-444. [9](#)
- [5] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez , *Rev. Bras. Ens. Fís.*, v. 33, n. 3, 3306 (2011) [9](#), [10](#), [12](#), [14](#), [16](#)
- [6] J. S. Schwinger, "*Quantum Kinematics and Dynamics*", (Westview Press, New York 1991) [10](#), [14](#), [71](#), [73](#)
- [7] J. S. Schwinger, Quantum Mechanics "*Symbolism of Atomic Measurements*", (Springer, Tokio 2001) [16](#)
- [8] E.C.G. Sudarshan and N.Mukunda, *Classical Dynamics: A Modern Perspective*, (John Willey - New York 1974) [18](#), [20](#)
- [9] P.A.M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, Band 3, Heft 1 (1933), pp. 64-72. Uma versão traduzida do artigo pode ser encontrada em, *Selected Papers on Electrodynamics*, editada por Julian S. Schwinger (Dover Publications, New York - 1958), pp. 312. [25](#), [26](#), [81](#)
- [10] C. Grosche and Frank S., *J.Math.Phys*, **36**, 5, 1995. [29](#)
- [11] A. F. R. De Piza, *Mecânica Quântica* (EDUSP - São Paulo 2003). [31](#)

- [12] J. S. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951).; Ibid, *Phys. Rev.* **91**, 713 (1953).; Ibid, *Phys. Rev.* **91**, 728 (1953); Ibid, *Phys. Rev.* **92**, 1283 (1953).; Ibid, *Phys. Rev.* **93**, 615 (1954); Ibid, *Phys. Rev.* **94**, 1362 (1954). [81](#)
- [13] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, <http://arxiv.org/pdf/1101.0025.pdf> , (arXiv:1101.0025). [81](#)

3

Estudo de Sistemas Dependentes do Tempo

O estudo de sistemas quânticos nos quais os parâmetros variam no tempo, ou sistemas não-estacionários, é de grande utilidade devido ao fato que tais variações condicionam tanto a dinâmica quanto o resultado da medida. Com isto, a análise desse tipo de sistemas é importante para vários campos de pesquisa dentre os quais se incluem a física atômica e molecular, química e a informação quânticas. Do ponto de vista teórico, a possibilidade do controle dos parâmetros externos de um sistema permite, em princípio, manipular os vários aspectos do sistema quântico como transições entre estados selecionados e a evolução temporal, brindando assim uma ferramenta poderosa para o estudo de uma infinidade de fenômenos e também para o desenvolvimento de ferramentas para a manipulação de sistemas microscópicos. Alguns dos resultados obtidos a partir desses estudos têm sido importantes em aplicações como a eletrodinâmica quântica em cavidades, óptica quântica, armadilhas de ions e a condensação de Bose-Einstein.

Existem vários problemas associados à abordagem teórica de sistemas não-estacionários, alguns dos quais são: a natureza não comutativa dos operadores que determinam as variáveis canônicas do sistema, a possibilidade de que as bases do espaço de Hilbert em que se define o sistema possam mudar em tempos consecutivos, problemas de ordenamento temporal, a não existência de suficientes integrais de movimento o que impede conhecer a sua dinâmica exatamente, bem como a impossibilidade, na maioria dos casos, de definir um espectro e um conjunto de funções próprias. Dessa forma, ainda que não exista uma maneira geral de se tratar esses sistemas, se o Hamiltoniano que define o sistema satisfizer determinadas condições, por exemplo, a periodicidade dos parâmetros ou ainda a intensidade das interações; métodos alternativos aos perturbativos, os quais são

baseados na definição de álgebras ou nas características da dependência temporal do potencial de interação, é possível contornar alguns dos problemas indicados acima.

Um exemplo particular desse tipo de sistemas é o oscilador harmônico com frequência e força externa dependentes do tempo. Esse modelo é amplamente usado em uma infinidade de problemas físicos, nos quais tanto os parâmetros internos, como a frequência, quanto os externos, como campos dependentes do tempo ou forças mecânicas aplicadas diretamente sobre o sistema [1], podem ser controlados. Assim, um modelo como esse é frequentemente usado para descrever interações eletromagnéticas [2, 3, 4], Dinâmica Molecular, óptica quântica [2, 3, 5, 6], física de aceleradores [7], armadilhas de íons [3], para o desenho de sistemas ótico-mecânicos acoplados [1], assim como vários outros modelos nos quais se tem osciladores interagindo.

Do ponto de vista teórico, esse modelo é exatamente solúvel somente para algumas funções particulares da frequência ¹, ainda assim a sua solução pode ser abordada por vários métodos dentre os quais podemos citar: o método de Floquet [8] que é usado quando a frequência é periódica, fase de Berry [9], usada quando obtemos uma variação adiabática nos parâmetros do sistema, a Teoria de Perturbações dependente do tempo, usada para a análise de pequenas variações paramétricas e, por fim, os métodos baseados em simetrias, como o estudo dos invariantes dinâmicos do sistema, usados para definir as funções de transformação e também a evolução temporal do sistema [2, 3, 10, 11, 12].

Neste capítulo, usaremos o princípio de ação quântica de Schwinger [13] para estudar oscilador harmônico com frequência e força externa dependentes do tempo e consequentemente o caso especial quando a força externa é nulo, que remete ao oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Como mostramos no primeiro capítulo, esse formalismo permite o estudo de qualquer tipo de sistema quântico, incluindo os sistemas não-estacionários. Isso é associado ao fato que o operador $\hat{G}$, que é o gerador das transformações infinitesimais generalizadas do sistema, admite a possibilidade de fazer variações generalizadas no tempo [13, 14]. Como foi discutido no capítulo anterior, é possível encontrar elementos suficientes para caracterizar qualquer sistema a partir da função de transformação. Com isso, se o sistema for estacionário poderemos determinar também o seu espectro e seu conjunto de funções próprias, caso existam. Da mesma forma, neste capítulo mostraremos que se o sistema em questão for não estacionário, além de podermos derivar a função de transformação, poderemos também introduzir ferramentas associadas às simetrias do sistema determinadas com base na formu-

¹No trabalho [15], são estudadas algumas funções para as quais a equação diferencial

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + W(t) y = 0,$$

tem uma solução exata.

lação de integrais de movimento, em total analogia com o Teorema de Noether. Dessa forma, teremos a possibilidade de construir ferramentas para o estudo da evolução temporal do sistema.

Sendo assim, na primeira seção apresentaremos uma pequena discussão sobre o estudo de sistemas quânticos dependentes do tempo via o princípio de ação quântica; na segunda seção derivaremos de forma detalhada a função de transformação para o Oscilador Harmônico com frequência e termo de força dependentes do tempo. Em seguida, na terceira seção e, como caso particular dessa função de transformação, obteremos a função de transformação para o caso não forçado. Na quarta e quinta seções, com auxílio de conceitos análogos ao teorema de Noether em nível Clássico, derivaremos as primeiras integrais de movimento para esses sistemas determinando as estruturas associadas para a sua completa integração. E, finalmente, com as estruturas derivadas nas primeiras seções analisaremos o oscilador harmônico, encontrando o seu espectro e as suas funções próprias.

3.1 Sistemas dependentes do tempo e o princípio de ação quântica de schwinger

Geralmente, quando o hamiltoniano ou lagrangiano que representa um sistema quântico apresenta dependência temporal explícita, em poucos casos conduz a equações que admitem uma solução exata. Como falamos na introdução deste capítulo, o seu tratamento depende tanto da estrutura do hamiltoniano quanto da forma em que os seus parâmetros dependem do tempo.

Nesta seção, usaremos unicamente o princípio de ação quântica de Schwinger para tratar dois sistemas quânticos desse tipo: o primeiro deles será o oscilador harmônico com frequência e força externa dependentes do tempo e, posteriormente, como caso especial, o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Sendo ambos casos bastante aplicados, veremos assim como o Princípio de Ação Quântica de Schwinger permite extrair de forma sistemática toda a informação relacionada à dinâmica e também à estrutura das soluções do sistema.

O princípio de ação quântica de Schwinger pode tratar a evolução temporal de qualquer tipo de sistema quântico, independentemente da estrutura e da dependência dos seus parâmetros, dado que a função de transformação, que é o elemento principal, está diretamente relacionada ao operador de evolução temporal, o que pode ser visto diretamente se tomarmos o fato que no elemento

$$\langle a(t) | b(t_0) \rangle, \quad (3.1)$$

o estado $\langle a(t) |$, é o produto da evolução temporal de um estado inicial $\langle a(t_0) |$ dada pelo operador $\hat{U}(t_0, t)$,

$$\langle a(t) | = \langle a(t_0) | \hat{U}(t, t_0), \quad (3.2)$$

que satisfaz as relações obtidas na seção 2.2, da mesma forma que:

1. $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$,
2. $\hat{U}(t, s) \hat{U}(s, t) = \hat{U}(t, s) \hat{U}^\dagger(t, s) = \hat{I}$,
3. $\hat{U}(t, s) \hat{U}(s, t_0) = \hat{U}(t, t_0)$,

onde temos que t_0 , s e t são tempos nos quais podemos definir a evolução temporal do sistema. Com isso a função de transformação (3.1), pode ser escrita como

$$\langle a(t) | b(t_0) \rangle = \langle a(t_0) | \hat{U}(t_0, t) | b(t_0) \rangle, \quad (3.3)$$

que será o elemento matricial do operador $\hat{U}$, na base mista $\{|b(t_0)\rangle\}$ e $\{|a(t_0)\rangle\}$. Pode-se mostrar que, usando simplesmente a equação de Schrödinger, o operador $\hat{U}$ presente na função de transformação também é uma solução dessa equação. Para isso, podemos tomar $|q(t_0)\rangle \equiv |q_0, t_0\rangle$ como condição inicial

$$\langle q, t | = \langle q, t_0 | \hat{U}(t_0, t),$$

assim, essa função de transformação terá a seguinte forma

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \langle q, t_0 | \hat{U}(t, t_0) | q_0, t_0 \rangle.$$

Tomando a derivada parcial respeito do tempo e com a ajuda da equação de Schrödinger, obtemos

$$\langle q_0, t_0 | \hat{U}(t, t_0) \hat{H}(t) | q_0, t_0 \rangle = -i \frac{\partial}{\partial t} \langle q_0, t_0 | \hat{U}(t, t_0) | q_0, t_0 \rangle, \quad (3.4)$$

$$= -i \langle q_0, t_0 | \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} | q_0, t_0 \rangle, \quad (3.5)$$

que fornece a seguinte equação ao relacionar o operador $\hat{U}$ com $\hat{H}$

$$-i \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{U}(t, t_0) \hat{H}(t). \quad (3.6)$$

Segundo a forma funcional do princípio de ação quântica que expressa a forma do gerador das transformações que deixam invariante a ação, vemos que a parte encarregada das variações no tempo é o Hamiltoniano. Assim, o operador de evolução temporal é um elemento de um grupo contínuo, em que o gerador das translações no tempo é o mesmo Hamiltoniano. Quando esse último independe do tempo, a integração da equação (3.6) é simples, deixando o estudo da evolução temporal a determinação das funções próprias e dos valores próprios desse operador. Os sistemas representados por um operador desse tipo são sistemas nos quais a energia é conservada, sendo, conseqüentemente, chamados de sistemas estacionários.

Levando em consideração esses aspectos, podemos observar que a uma eventual dependência temporal do hamiltoniano que descreve o sistema não permite

que a energia permaneça constante, isto é que ela seja uma constante de movimento. Dessa forma, não se tem a possibilidade de definir, na maioria dos casos, um conjunto de estados estacionários e conseqüentemente um espectro de energia para todo tempo. Os formalismos existentes, abordam separadamente as diferentes características do sistema como a forma em que os parâmetros evoluem, a intensidade das interações dependentes do tempo ou ainda a taxa à qual variam tais interações. O princípio de ação quântica pode proporcionar todos os resultados oferecidos por essas formulações, isto é, além de poder estudar a evolução temporal, também poderemos obter as integrais de movimento que nos permitirão determinar os invariantes de movimento associadas aos formalismos de Dodonov *et-al* [2, 6]. Começaremos por derivar a função de transformação para o Oscilador Harmônico com Frequência e força externa dependentes do tempo.

3.2 Função de transformação para o oscilador harmônico com frequência e força externa dependentes do tempo

A função de transformação para sistemas que tem um hamiltoniano quadrático pode ser calculada diretamente usando a fórmula de Van Vleck - Pauli [16, 17], na qual unicamente é preciso calcular a ação clássica. Apesar disso, o primeiro método desenvolvido para tratar sistemas nos quais os seus parâmetros dependem do tempo foi proposto os trabalhos de K. Husimi [18], que mostrou, através de um ansatz, que as soluções para a equação de Schrödinger desse sistema poderiam ter uma forma gaussiana. Nessa proposta, os parâmetros da função de transformação estão relacionados aos parâmetros do problema através de uma série de equações diferenciais tipo Riccati ². Posteriormente, Khandekar e Lavande usaram o formalismo de Integral de caminho de Feynman [19], encontrando também um conjunto de equações diferenciais para os parâmetros, dessa vez relacionados com a equação diferencial de Ermakov [15].

Alternativamente, existem outras abordagens nas quais é possível calcular a função de transformação associada a sistemas quânticos nos quais o hamiltoniano depende explicitamente do tempo. A primeira é a abordagem de Lewis-Riesenfeld [10], na qual os estados estacionários associados a uma integral de movimento hermitiana do sistema formam uma base com a qual se pode expressar as soluções da equação de Schrödinger. A segunda abordagem, similar à anterior, também faz uso da existência de integrais de movimento do sistema, mas agora explorando a relação que estas tem com a função de transformação [7].

Nesta seção, calcularemos a função de transformação, para o Oscilador Harmônico com Frequência e força externa dependentes do tempo em uma dimensão, usando o Formalismo de Ação quântica de Schwinger. Para isso, usaremos as

²Ver equações 1.3 em [18]

equações de Hamilton-Jacobi quânticas estudadas no primeiro capítulo desta tese. Como ponto de partida para obter a integral de ação, tomaremos o Lagrangiano Quântico do sistema definido como

$$\hat{L} = \frac{m}{2} \left(\frac{d\hat{q}(t)}{dt} \right)^2 - \frac{m}{2} \omega^2(t) \hat{q}^2(t) + \lambda F(t) \hat{q}(t), \quad (3.7)$$

e a equação de movimento segue

$$\frac{d^2 \hat{q}(t)}{dt^2} + \omega^2 \hat{q}(t) = \frac{\lambda}{m} F(t). \quad (3.8)$$

Devido à linearidade da equação (3.8), podemos assumir de maneira geral, que a solução geral do problema é dada por

$$\hat{q}(t) = \hat{a}f(t) + \hat{b}g(t) + h(t), \quad (3.9)$$

na qual $f(t)$ e $g(t)$ são soluções da equação diferencial homogênea

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2 \right) \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

em que essas funções tomarão os seguintes valores iniciais

$$f(t_{0/1}) = f_{0/1}, \quad \text{e}, \quad g(t_{0/1}) = g_{0/1},$$

também, $h(t)$ é a solução da equação diferencial não-homogênea (3.8)

$$h(t) = \frac{\lambda}{mC} \int_{t_0}^t (f(s)g(t) - g(s)f(t)) F(s) ds, \quad (3.11)$$

na qual

$$C = f(t)\dot{g}(t) - g(t)\dot{f}(t), \quad (3.12)$$

finalmente, exigimos que a função $h(t)$ apresente os seguintes valores nos tempos t_0 e t_1 , como condições no contorno

$$h(t_0) = 0, \quad \text{e}, \quad h(t_1) = h_1.$$

Da mesma forma, completamos a descrição da expressão (3.9), definindo os operadores $\hat{a}$ e $\hat{b}$, cuja forma pode ser determinada exigindo que a solução satisfaça as seguintes condições iniciais

$$\begin{aligned} \hat{q}(t_0) &= \hat{q}_0 = \hat{a}f_0 + \hat{b}g_0, \\ \hat{q}(t_1) &= \hat{q}_1 = \hat{a}f_1 + \hat{b}g_1 + h_1, \end{aligned}$$

com isso, tomando $f_0 g_1 - f_1 g_0 \neq 0$ a solução geral para este sistema deve ter a forma

$$\hat{q}(t) = \frac{1}{f_0 g_1 - g_0 f_1} \{ [f(t) g_1 - g(t) f_1] \hat{q}_0 + [f_0 g(t) - g_0 f(t)] \hat{q}_1 - [f_0 g(t) - g_0 f(t)] h_1 \} + h(t). \quad (3.13)$$

Usando a equação de movimento (3.8) e o lagrangiano (3.7) a integral de ação

$$\hat{S} = \int_{t_0}^{t_1} \hat{L}(t) dt,$$

é dada por

$$\hat{S} = \frac{m}{2} \hat{q} \dot{\hat{q}} \Big|_{t_0}^{t_1} + \frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^{t_1} \hat{q} F dt,$$

e, substituindo (3.13) na expressão anterior obtemos

$$\begin{aligned} \hat{S}(\hat{q}_1, t_1; \hat{q}_0, t_0) &= \frac{m}{2(f_0 g_1 - g_0 f_1)} \left([f_0 \dot{g}_1 - g_0 \dot{f}_1] \hat{q}_1^2 + [\dot{g}_0 f_1 - \dot{f}_0 g_1] \hat{q}_0^2 - 2C \hat{q}_1 \hat{q}_0 \right) \\ &+ \frac{\lambda \hat{q}_1}{(f_0 g_1 - g_0 f_1)} \int_{t_0}^{t_1} (f_0 g(s) - g_0 f(s)) F(s) ds \\ &+ \frac{\lambda \hat{q}_0}{(f_0 g_1 - g_0 f_1)} \int_{t_0}^{t_1} [f(s) g_1 - g(s) f_1] F(s) ds \\ &+ \frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^{t_1} \left\{ \frac{f_0(g(t_1)h(r) - g(r)h(t_1)) - g_0(f(t_1)h(r) - f(r)h(t_1))}{f_0 g(t_1) - g_0 f(t_1)} \right\} F(r) dr. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Com a forma explícita da integral de ação (3.14), podemos usar as equações de Hamilton quânticas

$$\frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{q}} = \hat{p}, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial t} + \hat{H} = 0,$$

na qual o hamiltoniano $\hat{H}$ é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{q}^2 - \lambda F \hat{q}, \quad (3.16)$$

e o operador $\widehat{\mathcal{W}}$ é o operador de ação quântica bem ordenado, no sentido de Dirac. Essa expressão pode ser associada à integral de ação (3.14), onde assumiremos o ordenamento de tempos menores à esquerda, desta forma o efeito do ordenamento se manifestará no operador $\hat{\phi}$

$$\widehat{\mathcal{W}} = \hat{S} + \hat{\phi}. \quad (3.17)$$

Nessa expressão $\hat{\phi}$ é um operador proporcional à unidade, $\hat{I}$, que depende unicamente do tempo. Por simplicidade, a seguir tomaremos $t_1 \rightarrow t$, e sem perda de generalidade, obtemos

$$\begin{aligned} \hat{S}(\hat{q}, t; \hat{q}_0, t_0) &= \frac{m}{2(f_0 g - g_0 f)} \left([f_0 \dot{g} - g_0 \dot{f}] \hat{q}^2 + [\dot{g}_0 f - \dot{f}_0 g] \hat{q}_0^2 - 2C \hat{q} \hat{q}_0 \right) \\ &+ \frac{\lambda \hat{q}}{(f_0 g - g_0 f)} \int_{t_0}^t (f_0 g(s) - g_0 f(s)) F(s) ds \\ &+ \frac{\lambda \hat{q}_0}{(f_0 g - g_0 f)} \int_{t_0}^t [f(s) g - g(s) f] F(s) ds \\ &+ \frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t \left\{ \frac{f_0(g h(r) - g(r) h) - g_0(f h(r) - f(r) h)}{f_0 g - g_0 f} \right\} F(r) dr. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Com isso o momento $\hat{p}$, dado por (3.15) é

$$\begin{aligned}\hat{p} &= \frac{m}{(f_0g - g_0f)} \left([f_0\dot{g} - g_0\dot{f}] \hat{q} - C\hat{q}_0 \right) \\ &+ \frac{\lambda}{(f_0g - g_0f)} \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds,\end{aligned}\quad (3.19)$$

donde

$$\begin{aligned}\frac{\hat{p}^2}{2m} &= \frac{m^2}{2m(f_0g - g_0f)^2} \left([f_0\dot{g} - g_0\dot{f}]^2 \hat{q}^2 + C^2\hat{q}_0^2 - C [f_0\dot{g} - g_0\dot{f}] \{\hat{q}, \hat{q}_0\} \right) \\ &+ \lambda\hat{q} \frac{(f_0\dot{g} - g_0\dot{f})}{(f_0g - g_0f)^2} \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \\ &- \frac{\lambda C}{(f_0g - g_0f)^2} \hat{q}_0 \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \\ &+ \frac{\lambda^2}{2m(f_0g - g_0f)^2} \left[\int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \right]^2.\end{aligned}\quad (3.20)$$

Assim, usando (3.19), a relação de ordenamento entre as variáveis $\hat{q}$ e $\hat{q}_0$ tem a seguinte forma

$$\hat{q}_0\hat{q} = i\hbar \left(\frac{f_0g - g_0f}{Cm} \right) + \hat{q}\hat{q}_0.$$

Dessa forma o hamiltoniano do sistema na sua forma bem ordenada é

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m}{2(f_0g - f_{g_0})} \left(\hat{q}^2 [f_0\dot{g} - g_0\dot{f}] + \hat{q}_0^2 [f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0] - 2C\hat{q}\hat{q}_0 \right) \right) \\ &- \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\lambda\hat{q}}{f_0g - f_{g_0}} \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \right) \\ &- \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\lambda\hat{q}_0}{f_0g - f_{g_0}} \int_{t_0}^t [f(s)g - g(s)f] F(s) ds \right) \\ &\frac{\partial}{\partial t} \frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t \left\{ h(r) + \frac{(g_0f(r) - f_0g(r))h}{f_0g - g_0f} \right\} F(r) dr - \frac{\partial}{\partial t} \ln \left(\frac{i\hbar}{2} [f_0g - g_0f] \right),\end{aligned}\quad (3.21)$$

da qual podemos mostrar que, usando (3.17), o operador $\hat{\phi}$ satisfaz

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \ln \left(\frac{i\hbar}{2} [f_0g - g_0f] \right).$$

Assim, tomando as expressões (3.2) e (3.21), obtemos finalmente que a função de transformação, dada por

$$\begin{aligned}\langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}(f_0g - f_{g_0})}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(q^2[f_0\dot{g} - g_0\dot{f}(t)] + q_0^2[f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0] - 2Cqq_0)}{2(f_0g - f_{g_0})} \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{f_0g - f_{g_0}} q_0 \int_{t_0}^t [f(s)g - g(s)f] F(s) ds \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{f_0g - f_{g_0}} q \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{2} \int_{t_0}^t \left\{ h(r) + \frac{(g_0f(r) - f_0g(r))h}{f_0g - g_0f} \right\} F(r) dr \right\}.\end{aligned}\quad (3.22)$$

3.2.1 Função de transformação para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo

Como caso especial do exemplo anterior, podemos ver por simples inspeção que se fizermos $F(t) \equiv 0$, recuperamos a função de transformação para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo, que pode ser obtida por um procedimento idêntico, partindo do lagrangiano que descreve o sistema, dado por

$$\hat{L} = \frac{1}{2}m \left(\frac{d\hat{q}(t)}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2(t)\hat{q}(t)^2,$$

em que a equação de Euler-Lagrange é

$$\frac{d^2\hat{q}(t)}{dt^2} + \omega^2(t)\hat{q}(t) = 0. \quad (3.23)$$

Podemos propor uma solução da equação (3.23) idêntica à (3.9), se tomarmos $h(t) = 0$, que conduz à expressão

$$\hat{q}(t) = \hat{a}f(t) + \hat{b}g(t),$$

com a que obtemos as soluções gerais³, incluindo as condições iniciais $\hat{q}(t_0) = \hat{q}_0$ e $\dot{\hat{q}}(t_1) = \dot{\hat{q}}_1$, como

$$\hat{q} = \frac{1}{f_0g_1 - f_1g_0} (\hat{q}_0 [g_1f - f_1g] + \hat{q}_1 [f_0g - g_0f]), \quad (3.24)$$

na qual, $f_0g_1 - f_1g_0 \neq 0$.

Uma vez obtida expressão (3.24) podemos, calcular a integral da ação

$$\hat{S} = \int_{t_0}^{t_1} \hat{L} \left(\hat{q}, \frac{d\hat{q}}{dt}; t \right) dt,$$

fazendo o termo da força $F(t) = 0$, em (3.22), obtendo finalmente, a função de transformação para o sistema em questão

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{mC}{2\pi i (f_0g - f_1g_0)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m \left(q^2 [f_0\dot{g} - g_0\dot{f}(t)] + q_0^2 [f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0] - 2Cqq_0 \right)}{2(f_0g - f_1g_0)} \right\}. \quad (3.25)$$

3.2.2 Alguns Exemplos de Osciladores Harmônicos

A função de transformação (3.25) tem sido extensamente estudada na literatura nas mais diversas situações, e notamos que se escolhermos determinadas frequências podemos obter de maneira direta algumas funções de transformação já conhecidas na literatura.

³Da mesma forma que na seção anterior, notaremos por $f = f(t)$, $g = g(t)$, $f_{0/1} = f(t_{0/1})$ e $g_{0/1} = g(t_{0/1})$ fazendo distinção quando o argumento for diferente

Oscilador com Frequência Constante

A primeira que recuperaremos é a função de transformação para o caso em que a frequência é constante. Podemos ver, sem perda de generalidade, que se tomarmos as soluções de (3.23) para $\omega(t) = \omega_0$, temos

$$f(t) = \cos[\omega_0 t] e, \quad g(t) = \sin[\omega_0 t],$$

assim, teremos que

$$\begin{aligned} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \sqrt{\frac{mC}{2\pi i \sin[\omega(t-t_0)]}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t-t_0)]} [q^2 \cos[\omega(t-t)] - qq_0] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t-t_0)]} [q_0^2 \cos[\omega(t-t)] - qq_0] \right\} \end{aligned} \quad (3.26)$$

que é a função de transformação para o oscilador harmônico com frequência constante no tempo.

Oscilador com Frequência Dependente do Tempo - Fatorização de Ermakov

Da mesma forma podemos também recuperar o resultado tradicional em que se tem em conta uma solução da forma

$$f(t) = \rho(t) \cos[\gamma(t)] e, \quad g(t) = \rho(t) \sin[\gamma(t)]$$

cujas função de transformação é dada por

$$\begin{aligned} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \sqrt{\frac{mC}{2\pi i \rho(t) \rho_0 \sin[\gamma(t)-\gamma_0]}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left(q^2 \frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} - \hat{q}_0^2 \frac{\dot{\rho}_0}{\rho_0} \right) \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m \{ (q_0^2 \dot{\gamma}_0 + q^2 \dot{\gamma}(t)) \cos[\gamma(t)-\gamma_0] - 2qq_0 \rho^2(t) \dot{\gamma}(t) \}}{2 \sin[\gamma(t)-\gamma_0]} \right\}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Oscilador com Frequência Dependente do Tempo - Fatorização Não Adiabática

Como um caso especial, podemos usar o anzats proposto por [21] no qual consideramos soluções do tipo

$$\begin{aligned} f(t) &= A(t) e^{i \int_{t_0}^t \omega(\tau) d\tau} = A(t) e^{i\Omega(t)}, \\ g(t) &= B(t) e^{-i \int_{t_0}^t \omega(\tau) d\tau} = B(t) e^{-i\Omega(t)}, \end{aligned}$$

cujas característica principal é que as equações diferenciais para as funções $A(t)$ e $B(t)$, são da forma

$$\ddot{A} + i\omega\dot{A} + iA\dot{\omega} = 0, \quad (3.28)$$

$$\ddot{B} - i\omega\dot{B} - iB\dot{\omega} = 0 \quad (3.29)$$

cujas forma funcional é linear diferentemente da forma da equação de Ermakov [15], e cujas soluções estão relacionadas de uma forma mais simples com as soluções da

equação clássica do oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Tomando $\Omega(t) = \int_{t_0}^t \omega(\tau) d\tau$, temos que a função de transformação é dada por

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{imC(t)}{2\pi\hbar F_0(t)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2F_0(t)} \left(q^2 \dot{F}_0(t) + q_0^2 F_1(t) - 2qq_0 C(t) \right) \right\},$$

na qual definimos

$$\begin{aligned} F_0(t) &= A_0 B(t) \exp[-i\Omega(t)] - B_0 A(t) \exp[i\Omega(t)], \\ F_1(t) &= \left[\dot{B}_0 - i\omega_0 B_0 \right] A(t) \exp[i\Omega(t)] - \left[\dot{A}_0 + i\omega_0 A_0 \right] B(t) \exp[-i\Omega(t)]. \end{aligned}$$

3.3 Integrais de Movimento

Classicamente, a relação entre simetrias e leis de conservação é bem estabelecida no nível lagrangiano e hamiltoniano através do teorema de Noether. Essas leis de conservação são expressas em função das variáveis dinâmicas do sistema e das equações de movimento. No formalismo Hamiltoniano, as quantidades conservadas resultam ser os geradores das transformações canônicas infinitesimais, fato extremamente importante para se construir as soluções de um sistema, já que em geral, o conhecimento completo das funções que representam as simetrias do sistema implica na possibilidade de se encontrar a forma exata de suas trajetórias físicas no espaço de fase [22].

Por outro lado, em mecânica quântica, o fato de se conhecer o conjunto de operadores que representam as simetrias do sistema quântico, levam à sua caracterização completa. Esse conjunto que contém todos os operadores correspondentes aos geradores infinitesimais das transformações unitárias ajuda a construir uma álgebra, associada a um conjunto de valores-próprios e vetores-próprios, que são os valores experimentais das propriedades físicas e estados quânticos nos quais pode ser encontrado o sistema, que por sua vez estão associados ao conjunto completo de observáveis compatíveis com os quais pode-se caracterizar o sistema.

Dependendo do sistema quântico, existem vários tipos de quantidades conservadas, integrais de movimento ou invariantes os quais definem as suas simetrias; seja do sistema físico ou das suas soluções das equações que caracterizam a sua dinâmica. Alguns desses invariantes estão relacionados às simetrias do espaço tal como podemos observar, por exemplo, no átomo de hidrogênio; onde devido à presença de um potencial central, da interação eletromagnética, temos que o espaço apresenta uma simetria esférica; porém, além dessa simetria, a natureza das mesmas interações no sistema, que é análoga a um sistema de dois corpos em gravitação, está assinalada pelo vetor de Laplace-Runge-Lenz (LRL). Essa simetria na mecânica quântica permite encontrar de maneira completa o espectro do átomo de hidrogênio [23, 24], isso é devido ao fato que junto aos três geradores do momento angular e a energia, dada pelo hamiltoniano, é adicionado um novo gerador associado ao vetor LRL. Esse gerador adicional é o responsável pela degenerescência dos níveis de energia; assim, o grupo de simetria final é $SO(4)$.

O tipo de simetria como a LRL é chamado de simetria accidental ou simetria oculta, que geralmente é associada às mesmas interações entre os elementos do sistema, e, junto com as simetrias do espaço, são de vital importância quando se estudam os espectros e a

estrutura de estados dos sistemas quânticos que as manifestam [8]. Dado que as simetrias de um sistema, isto é, o conjunto de operadores que comutam com o hamiltoniano, realmente indicam a existência de uma degenerescência, é claro que a ação de um desses geradores sobre um estado do sistema, produzirá outros estados com a mesma energia, porém a ação desses operadores sobre esses estados do sistema não produzirá nenhuma mudança. Por outro lado, se existir um operador associado a uma simetria do tipo LRL pode-se construir geradores cuja ação sobre os estados próprios do sistema produzirá outros estados próprios do mesmo sistema, mas com diferente valor para a energia, dessa forma são construídos todos os estados estacionários do sistema.

Como exemplo dessas simetrias, podemos citar os operadores de criação e aniquilação para um oscilador harmônico com frequência constante, apresentados adiante em (3.40), que além de serem quantidades conservadas, ainda que não comutem com o hamiltoniano, são simetrias das soluções do sistema; isto é, que transformam uma solução em outra que também é solução para a equação de Schrödinger. Assim, resulta que é possível caracterizar totalmente o sistema se as suas simetrias ou quantidades conservadas são conhecidas. Um exemplo disso é a conexão entre integrais de movimento ou invariantes dinâmicos e as funções de transformação [9], em que se faz um extenso uso da teoria de grupos no estudo da dinâmica de sistema quânticos.

Da mesma forma que as simetrias associadas aos sistemas estacionários podem nos ajudar a caracterizar o sistema e construir seu espectro; as integrais de movimento dependentes do tempo que podem ser associadas aos sistemas não-estacionários, como os tratados nesta seção, podem nos ajudar a abordar sua completa caracterização [10]. Esse tipo de integrais ou invariantes dependentes do tempo, passam a desempenhar um papel similar que à simetria LRL no átomo de hidrogênio e cumprem relações como àquelas que são satisfeitas no regime estacionário [8, 9]; porém, os estados e valores-próprios associados a esses invariantes dependentes do tempo não se referem à energia e sim a outros operadores representados por quantidades que permanecem invariantes. Como tais, os estados próprios associados a esses invariantes estão relacionados com as soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo associada ao sistema [10].

3.3.1 Integrais de Movimento e o Princípio de Ação Quântica

Nesta seção, mostraremos que as quantidades conservadas no nível quântico estão todas contidas na função de transformação

$$\langle a(t) | b(t_0) \rangle,$$

isso é possível dado que esse elemento representa a relação existente entre duas bases de estados; a base $\{|b(t_0)\rangle\}$, que foi construída através de um conjunto maximal de observáveis compatíveis com valores-próprios b , que para esse caso podem ser chamados de $\hat{B}$ e, a base de estados $\{|a(t)\rangle\}$ com valores-próprios a ; que da mesma forma que a base anterior também foi construída através de um conjunto de observáveis compatíveis $\hat{A}$, no qual temos $t > t_0 > 0$.

O Princípio de Ação Quântica mostra que as variações generalizadas da ação são dadas em termos das variações de um único operador chamado de operador de ação

quântica, assim que

$$\delta\langle q, t|q_0, t_0\rangle = i\langle q, t|\delta\hat{S}_{t,t_0}|q_0, t_0\rangle;$$

além disso, vimos no segundo capítulo que a variação do operador de ação depende unicamente dos valores do gerador das variações generalizadas $\hat{G}$ calculadas nos instantes de tempo inicial e final. Daqui temos que

$$\delta\hat{S}_{t,t_0} = \hat{G} - \hat{G}_0.$$

O gerador $\hat{G}(t)$ representa transformações que deixam a dinâmica do sistema invariante, além disso representa a forma geral de todas as transformações possíveis para o sistema. Se dentre essas transformações tomarmos os geradores dos quais possamos exigir que

$$\delta\hat{S}_{t,t_0} = 0, \quad (3.30)$$

obtemos uma forma análoga ao Teorema de Noether. Os geradores que satisfazem a relação (3.30), que serão notados por $\hat{I}(t)$, são quantidades conservadas ou integrais de movimento do sistema; esse fato pode ser mostrado tomando para isso que a forma dada para às variações do operador de ação é basicamente a integral da derivada total de uma função das variáveis dinâmicas do sistema

$$\delta\hat{S} = \int_{t_0}^t \frac{d\hat{I}(t)}{dt} dt = \hat{I}(t)|_{t_0}^t.$$

Assim, tomando (3.30) a expressão anterior é análoga a ter

$$\frac{d\hat{I}}{dt} = 0.$$

Finalmente, a partir do Princípio de Ação Quântica, teremos

$$\delta\langle q, t|q_0, t_0\rangle = i\langle q, t|\hat{I} - \hat{I}_0|q_0, t_0\rangle = 0, \quad (3.31)$$

com o que poderemos associar que o valor inicial do operador determinará a sua forma em qualquer instante tempo posterior, isto é,

$$\langle q, t|\hat{I}_0|q_0, t_0\rangle = \langle q, t|\hat{I}|q_0, t_0\rangle,$$

Vimos no primeiro capítulo que, dependendo da forma funcional do Lagrangiano do sistema, os geradores das transformações infinitesimais unitárias $\hat{G}$ são funções tanto do momento quanto da posição. Dessa forma, podemos assumir que se o operador $\hat{I}_0$ é um dos geradores das transformações de simetria do sistema, a sua dependência com as funções dinâmicas do sistema será dada de forma similar por

$$\langle q, t|\hat{I}_0|q_0, t_0\rangle = \langle q, t|\hat{I}(\hat{q}, \hat{p}, t)|q_0, t_0\rangle, \quad (3.32)$$

assim, sabendo que

$$\begin{aligned} \langle q, t|\hat{p}|q_0, t_0\rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \langle q, t|q_0, t_0\rangle, \\ \langle q, t|\hat{q}|q_0, t_0\rangle &= q \langle q, t|q_0, t_0\rangle, \end{aligned} \quad (3.33)$$

podemos mostrar que as constantes de movimento, definidas como funções dos operadores de momento e posição no instante inicial, junto com os parâmetros do sistema definidos no mesmo instante são preservadas durante toda a evolução temporal, assim, funcionalmente, podemos tomar

$$I\left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, t\right) \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = I_0 \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \quad (3.34)$$

a expressão acima, embora simples, permite em princípio calcular qualquer quantidade conservada que possa ser associada ao sistema⁴

O valor numérico das constantes de movimento coincide com o valor das condições iniciais. Isso é verdade basicamente porque esse tipo de sistemas apresenta uma evolução hamiltoniana. Assim, se a evolução temporal mantém constantemente a conexão com as condições iniciais, é visto que

$$[\hat{q}_0, \hat{p}_0] = [\hat{q}, \hat{p}],$$

dessa forma, sendo o fato de que a evolução temporal é dada por um operador unitário, isto é

$$\begin{aligned} \hat{q} &= \hat{U}^\dagger(t_0, t) \hat{q}_0 \hat{U}(t_0, t), \\ \hat{p} &= \hat{U}^\dagger(t_0, t) \hat{p}_0 \hat{U}(t_0, t), \end{aligned}$$

é possível mostrar que

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\hat{U}^\dagger(t_0, t) \hat{q}_0 \hat{U}(t_0, t), \hat{U}^\dagger(t_0, t) \hat{p}_0 \hat{U}(t_0, t) \right] = \hat{U}^\dagger(t_0, t) [\hat{q}_0, \hat{p}_0] \hat{U}(t_0, t).$$

⁴Da mesma maneira que os operadores $\hat{I}$ fazem com que as variações da ação sejam dadas na forma (3.30), podemos escolher um tipo mais geral de geradores, os quais denominaremos $\hat{J}$, que produzem um tipo mais geral de variações na ação, as quais se expressam como

$$\delta \hat{S} = \int_{t_0}^t \frac{d\hat{F}}{dt} dt. \quad (3.35)$$

Na expressão acima, a presença do operador $\hat{F}(t)$ não afeta a dinâmica do sistema e isso é devido a que em (4) o termo dentro da integral só depende das condições no contorno. Assim, a variação do operador de ação em função dos operadores $\hat{J}$ e $\hat{F}$ é dada por

$$\delta \hat{S} = \int_{t_0}^t \frac{d\hat{F}}{dt} dt = \hat{J} - \hat{J}_0,$$

portanto, a variação da função de transformação é dada por

$$\delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \langle q, t | \hat{J} - \hat{J}_0 | q_0, t_0 \rangle = \langle q, t | \hat{F} - \hat{F}_0 | q_0, t_0 \rangle,$$

se definirmos um novo tipo de gerador $\hat{A} = \hat{J} + \hat{F}$, conseguimos expressar

$$A\left(q, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, t\right) \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = A_0 \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \quad (3.36)$$

que nos permite usar as mesmas considerações tomadas para os operadores $\hat{I}$ e as suas quantidades associadas.

Assim, essa conexão se torna evidente pelo fato de que é necessário que as condições iniciais possam ser expressas, em qualquer tempo como uma combinação dos invariantes do sistema.

Com um exemplo simples, mas significativo, podemos derivar as integrais de movimento associadas ao oscilador harmônico com frequência constante. Para isso, tomaremos a função de transformação associada a esse sistema deduzida anteriormente (3.26). Como já foi discutido, sabemos que o hamiltoniano é independente do tempo e por conseguinte o sistema é estacionário; portanto, a energia é uma constante de movimento. Ademais dada a estrutura do hamiltoniano, é sabido que é fatorizável. Esse sistema apresenta integrais de movimento que são lineares no momento e na posição, que junto ao Hamiltoniano nos permitem construir uma álgebra que nos permite deduzir o espectro e as funções próprias do sistema. Com isso, seguindo a equação funcional (3.34) sendo $\hat{I}$ linear em $\hat{q}$ e $\hat{p}$, podemos encontrar essas integrais de movimento levando em conta tanto o momento inicial quanto a posição inicial; dessa forma, tomando

$$\begin{aligned}\langle q, t | \hat{p} | q_0, t_0 \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \\ \langle q, t | \hat{p}_0 | q_0, t_0 \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial q_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle,\end{aligned}$$

é possível obter

$$\begin{aligned}-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t-t_0)]} [2q \cos[\omega(t-t_0)] - 2q_0] \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial q_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= -\frac{m\omega}{2 \sin[\omega(t-t_0)]} [2q_0 \cos[\omega(t-t_0)] - 2q] \langle q, t | q_0, t_0 \rangle,\end{aligned}$$

das quais seguem as seguintes relações em nível de operadores

$$\begin{aligned}\hat{p} &= \frac{m\omega}{\sin[\omega(t-t_0)]} [\hat{q} \cos[\omega(t-t_0)] - \hat{q}_0], \\ \hat{p}_0 &= -\frac{m\omega}{\sin[\omega(t-t_0)]} [\hat{q}_0 \cos[\omega(t-t_0)] - \hat{q}].\end{aligned}$$

Podemos manipular as equações anteriores para obtermos o momento e a posição inicial escritos da seguinte forma

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \hat{q} \cos[\omega(t-t_0)] - \frac{\sin[\omega(t-t_0)]}{m\omega} \hat{p} \\ \hat{p}_0 &= m\omega \sin[\omega(t-t_0)] \hat{q} + \cos[\omega(t-t_0)] \hat{p}.\end{aligned}\tag{3.37}$$

Como dito anteriormente, é possível mostrar que estas são integrais de movimento. Para isso, podemos tomar a derivada temporal das expressões anteriores para $\hat{q}_0$ e $\hat{p}_0$ encontrando assim

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{q}_0}{dt} &= \left(\frac{d\hat{q}}{dt} - \frac{\hat{p}}{m} \right) \cos[\omega(t-t_0)] - \frac{\sin[\omega(t-t_0)]}{m\omega} \left(m\omega^2 \hat{q} - \frac{d\hat{p}}{dt} \right), \\ \frac{d\hat{p}_0}{dt} &= \cos[\omega(t-t_0)] \left(\frac{d\hat{p}}{dt} + m\omega^2 \hat{q} \right) + m\omega \sin[\omega(t-t_0)] \left(-\frac{d\hat{q}}{dt} + \frac{\hat{p}}{m} \right).\end{aligned}$$

Logo, usando as equações de hamilton para o Oscilador Harmônico com frequência constante

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{q}}{dt} &= \hat{p}, \\ \frac{d\hat{p}}{dt} &= -\omega^2 \hat{q},\end{aligned}$$

é fácil mostrar que

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{q}_0}{dt} &= 0, \\ \frac{d\hat{p}_0}{dt} &= 0,\end{aligned}$$

Ademais, dado que podemos mostrar que o conjunto $\{\hat{q}_0, \hat{p}_0\}$ dado em (3.37), é formado por constantes de movimento do sistema qualquer combinação dessas também será uma constante de movimento. Além disso, por construção, formam uma transformação unitária que também é canônica, ou seja que preserva as relações de comutação

$$[\hat{q}_0, \hat{p}_0] = [\hat{q}, \hat{p}].$$

Acrescenta-se que, o par canônico $\{\hat{q}_0, \hat{p}_0\}$ pode ser reescrito em termos das soluções complexas da equação diferencial clássica para o oscilador harmônico $\{e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}\}$. Dessa forma, (3.37) é expresso como

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \frac{1}{2}e^{i\omega(t-t_0)} + \left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \frac{1}{2}e^{-i\omega(t-t_0)}, \\ \hat{p}_0 &= -m\omega i \left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \frac{1}{2}e^{i\omega(t-t_0)} + m\omega i \left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \frac{1}{2}e^{-i\omega(t-t_0)}.\end{aligned}$$

As expressões anteriores ainda podem ser reescritas em função dos seguintes operadores não hermitianos,

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\hat{a} &= \frac{1}{2}\left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \\ \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\hat{a}^\dagger &= \frac{1}{2}\left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right),\end{aligned}$$

em que, fazendo uso de (3.3.1), obtemos

$$\begin{aligned}\hat{a} &= e^{-i\omega(t-t_0)}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q}_0 + \frac{i}{m\omega}\hat{p}_0\right) \\ \hat{a}^\dagger &= e^{i\omega(t-t_0)}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q}_0 - \frac{i}{m\omega}\hat{p}_0\right).\end{aligned}$$

Sendo tanto $\hat{q}_0$ quanto $\hat{p}_0$ constantes de movimento, podemos exprimir as relações anteriores em função dos operadores

$$\begin{aligned}\hat{a}_0 &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(\hat{q}_0 + \frac{i}{m\omega}\hat{p}_0\right), \\ \hat{a}_0^\dagger &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(\hat{q}_0 - \frac{i}{m\omega}\hat{p}_0\right).\end{aligned}\tag{3.38}$$

Assim, podemos finalmente definir a evolução temporal desses operadores como

$$\begin{aligned}\hat{a} &= e^{-i\omega(t-t_0)}\hat{a}_0, \\ \hat{a}^\dagger &= e^{i\omega(t-t_0)}\hat{a}_0^\dagger,\end{aligned}\tag{3.39}$$

Notamos claramente que o Hamiltoniano é uma constante de movimento, dado que pode se expressar em função dos operadores $(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ e $(\hat{a}_0^\dagger, \hat{a}_0)$ equivalentemente. Podemos também notar que esses operadores se encontram na representação de Heisenberg e na de Schrödinger. Uma vez obtidas as relações acima, vemos que o hamiltoniano pode ser reescrito em função destes operadores como

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}_0\hat{a}_0^\dagger + \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0\right).$$

Os operadores $\{\hat{a}^\dagger, \hat{a}\}$ constituem uma álgebra, com a qual podemos determinar o espectro do sistema. Portanto, usando

$$\begin{aligned}\left[\hat{H}, \hat{a}^\dagger\right] &= \hbar\omega\hat{a}^\dagger, \\ \left[\hat{H}, \hat{a}\right] &= -\hbar\omega\hat{a}, \\ \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] &= \hat{1}.\end{aligned}\tag{3.40}$$

Podemos mostrar que para os estados teremos

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{(n+1)}|n+1\rangle, \\ \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle.\end{aligned}\tag{3.41}$$

Além disso, tomando a forma funcional dos operadores de momento e posição na base de coordenadas $\hat{q} \rightarrow x$, e $\hat{p} \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, podemos mostrar ainda que a forma da função de onda na representação de coordenadas do estado de mínima energia, como $\varphi_0(x) = \langle x|0\rangle$ para o oscilador harmônico, é dado por

$$\varphi_0(x) = N_0 \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\},$$

em que N_0 é uma constante de normalização. O restante dos estados pode ser construído através da aplicação recorrente do operador $\hat{a}^\dagger$; assim $(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle$. Portanto, na representação de coordenadas, os estados terão a seguinte forma

$$\varphi_n(x) = \frac{N_n}{\sqrt{n!}}\left(\frac{2\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\varphi_0(x),$$

em que, assim como na função do estado fundamental, aqui a constante N_n é a constante de normalização.

3.4 Quantidades Conservadas para o Oscilador Harmônico com Frequência e Força Externa Dependentes do Tempo

Deduziremos as integrais de movimento para o oscilador harmônico com frequência e força externa dependentes do Tempo, partindo da função de transformação (3.25). Primeiramente, deduziremos as integrais de movimento lineares, usando novamente as equações

$$\begin{aligned}\langle q, t|\hat{p}|q_0, t_0\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\langle q, t|q_0, t_0\rangle, \\ \langle q, t|\hat{p}_0|q_0, t_0\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial q_0}\langle q, t|q_0, t_0\rangle,\end{aligned}$$

cuja forma explícita é dada por

$$\begin{aligned}-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\langle q, t|q_0, t_0\rangle &= \frac{1}{f_0g-fg_0}\left\{m\left(q\left[f_0\dot{g}-g_0\dot{f}\right]-Cq_0\right)\right\}\langle q, t|q_0, t_0\rangle \\ &\quad + \frac{1}{f_0g-fg_0}\left\{\lambda\int_{t_0}^t(f_0g(s)-g_0f(s))F(s)ds\right\}\langle q, t|q_0, t_0\rangle, \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial q_0}\langle q, t|q_0, t_0\rangle &= -\frac{1}{(f_0g-fg_0)}\left\{m\left(q_0\left[f\dot{g}_0-g\dot{f}_0\right]-Cq\right)\right\}\langle q, t|q_0, t_0\rangle \\ &\quad - \frac{1}{(f_0g-fg_0)}\left\{\lambda\int_{t_0}^t[f(s)g-g(s)f]F(s)ds\right\}\langle q, t|q_0, t_0\rangle.\end{aligned}$$

Estas expressões nos permitem obter os seguintes operadores

$$\begin{aligned}\hat{p} &= \frac{1}{(f_0g-fg_0)}\left\{m\left(\hat{q}\left[f_0\dot{g}-g_0\dot{f}\right]-C\hat{q}_0\right)+\lambda\int_{t_0}^t(f_0g(s)-g_0f(s))F(s)ds\right\}, \\ \hat{p}_0 &= -\frac{1}{(f_0g-fg_0)}\left\{m\left(\hat{q}_0\left[f\dot{g}_0-g\dot{f}_0\right]-C\hat{q}\right)+\lambda\int_{t_0}^t[f(s)g-g(s)f]F(s)ds\right\}.\end{aligned}$$

Temos novamente um sistema de duas equações algébricas com duas incógnitas. Assim, novamente consideramos os seguintes invariantes lineares para o sistema

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \frac{[f_0\dot{g}-g_0\dot{f}]}{C}\hat{q} - \frac{(f_0g-fg_0)}{mC}\hat{p} + \frac{\lambda}{mC} \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds, \\ \hat{p}_0 &= -\frac{m(f\dot{g}_0-\dot{f}_0g)}{C}\hat{q} + \frac{[f\dot{g}_0-g\dot{f}_0]}{C}\hat{p} + \frac{\lambda}{C} \int_{t_0}^t \left\{ \dot{f}_0g(s) - \dot{g}_0f(s) \right\} F(s) ds,\end{aligned}$$

na qual C é dada por (3.12). Da mesma forma que na seção anterior, pode se mostrar que para este caso também temos $\frac{d\hat{q}_0}{dt} = 0$, e $\frac{d\hat{p}_0}{dt} = 0$.

Dessa forma, temos que $\{\hat{q}_0, \hat{p}_0\}$ também é um par de constantes de movimento. Consequentemente, da mesma forma que no caso do oscilador harmônico com frequência constante, as soluções linearmente independentes do sistema são

$$\begin{aligned}-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\langle q, t|q_0, t_0\rangle &= \frac{1}{f_0g-fg_0} \left\{ m \left(q [f_0\dot{g} - g_0\dot{f}] - Cq_0 \right) \right\} \langle q, t|q_0, t_0\rangle \\ &\quad + \frac{1}{f_0g-fg_0} \left\{ \lambda \int_{t_0}^t (f_0g(s) - g_0f(s)) F(s) ds \right\} \langle q, t|q_0, t_0\rangle, \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial q_0}\langle q, t|q_0, t_0\rangle &= -\frac{1}{(f_0g-fg_0)} \left\{ m \left(q_0 [f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0] - Cq \right) \right\} \langle q, t|q_0, t_0\rangle \\ &\quad - \frac{1}{(f_0g-fg_0)} \left\{ \lambda \int_{t_0}^t [f(s)g - g(s)f] F(s) ds \right\} \langle q, t|q_0, t_0\rangle.\end{aligned}$$

Aqui encontramos operadores análogos àqueles propostos para o oscilador harmônico com frequência constante; mas no caso tratado aqui os operadores têm a forma

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma} &= \sqrt{\frac{m}{i\hbar C}} \left(\dot{g}\hat{q} - g\frac{\hat{p}}{m} + \frac{\lambda}{m} \int_{t_0}^t g(s) F(s) ds \right), \\ \hat{\Phi} &= \sqrt{\frac{m}{i\hbar C}} \left(\dot{f}\hat{q} - f\frac{\hat{p}}{m} + \frac{\lambda}{m} \int_{t_0}^t f(s) F(s) ds \right),\end{aligned}\tag{3.42}$$

nos quais podemos ver a presença de um termo associado ao força externa. Com os operadores (3.42), que são funções lineares do momento e da posição, podemos construir o operador hermiteano $\hat{\Theta}$, dado pela seguinte expressão

$$\hat{\Theta} = \frac{1}{2} \left\{ \hat{\Gamma}\hat{\Phi} + \hat{\Phi}\hat{\Gamma} \right\}.\tag{3.43}$$

O operador acima é chamado de integral de movimento quadrática [8, 9, 10] e, diferentemente do Hamiltoniano associado a este sistema, é que permanece constante durante a evolução temporal. Também, pode-se ver que os operadores (3.42) e o operador $\hat{\Theta}$ são invariantes que obedecem a relações similares às que possuem os operadores de criação e aniquilação do oscilador harmônico (3.40)

$$\begin{aligned}[\hat{\Theta}, \hat{\Gamma}] &= \hat{\Gamma} \\ [\hat{\Theta}, \hat{\Phi}] &= -\hat{\Phi} \\ [\hat{\Phi}, \hat{\Gamma}] &= \hat{1}.\end{aligned}\tag{3.44}$$

As relações (3.44) sugerem que os estados próprios e o espectro do operador $\hat{\Theta}$ são idênticos aos que apresenta o Oscilador Harmônico. Da mesma forma, podemos determinar a forma dos estados próprios de $\hat{\Theta}$ na representação de coordenadas, se tomarmos que

$$\varphi_0(x) = \langle x|0\rangle,$$

na qual o estado de mínima energia $|0\rangle$ é definido

$$\hat{\Phi}|0\rangle = 0|0\rangle,$$

Isto porque $\hat{\Phi}$ toma o papel de operador de decida na álgebra construída em (??). Dessa forma, a sua função de onda na representação de coordenadas é dada por

$$\varphi_0(x) = N_0 e^{-\frac{mx^2\dot{f}}{2\hbar i f} - \frac{x\lambda}{\hbar i f} \int_{t_0}^t f(s)F(s)ds},$$

em que novamente N_0 é uma constante de normalização. Os outros estados, podem ser construídos com a aplicação sucessiva do operador $\hat{\Gamma}$ sobre o estado $|0\rangle$, da seguinte forma $(\hat{\Gamma})^n |0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle$. Assim, na representação de coordenadas, as funções de onda terão a seguinte forma

$$\varphi_n(x) = \frac{N_n}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m}{i\hbar C} \right)^{\frac{n}{2}} \left(\dot{g}x + i\frac{\hbar}{m}g\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\lambda}{m} \int_{t_0}^t g(s)F(s)ds \right)^n \varphi_0(x), \quad (3.45)$$

aqui N_n é uma constante para a normalização.

Finalmente, podemos ver que o invariante quadrático Θ apresenta um conjunto de funções de onda dadas por (3.45); essas funções apresentam uma dependência temporal explícita, mas os seus valores-próprios associados são independentes do tempo. Ademais, dado que essas funções formam uma base ortonormal e completa e apresentam uma relação com o hamiltoniano dada por

$$\frac{\partial \hat{\Theta}}{\partial t} = i [\hat{\Theta}, \hat{H}]; \quad (3.46)$$

elas permitem construir qualquer condição inicial em que possa estar o sistema, como mostrado por Lewis *et al.* [10], ver Apêndice A.

3.5 Quantidades Conservadas para o Oscilador Harmônico com Frequência Dependente do Tempo

Assim como nas seções anteriores, deduziremos de forma explícita as constantes de movimento associadas ao oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Para isso, usando (3.34) na função de transformação (3.25) e tomando novamente as expressões para o momento nos instantes inicial e final, obtemos

$$\begin{aligned} \langle q, t | \hat{p} | q_0, t_0 \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \\ \langle q, t | \hat{p}_0 | q_0, t_0 \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial q_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \end{aligned}$$

que, na sua forma funcional, resulta em

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{m}{2(f_0 g - f g_0)} \left(2q \left[f_0 \dot{g} - g_0 \dot{f} \right] - 2C q_0 \right) \langle q, t | q_0, t_0 \rangle, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial q_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= -\frac{m}{2(f_0 g - f g_0)} \left(2q_0 \left[f \dot{g}_0 - g \dot{f}_0 \right] - 2C q \right) \langle q, t | q_0, t_0 \rangle. \end{aligned}$$

Com isso, da mesma forma que no exemplo anterior, determinamos

$$\begin{aligned}\hat{p} &= \frac{m}{(f_0g - fg_0)} \left(\hat{q} [f_0\dot{g} - g_0\dot{f}] - C\hat{q}_0 \right), \\ \hat{p}_0 &= -\frac{m}{(f_0g - fg_0)} \left(\hat{q}_0 [f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0] - C\hat{q} \right).\end{aligned}$$

Como no exemplo de frequência constante, podemos aqui solucionar o conjunto de equações anteriores, para então obter o par

$$\hat{q}_0 = \frac{[f_0\dot{g} - g_0\dot{f}]}{C} \hat{q} - \frac{(f_0g - fg_0)}{C} \frac{\hat{p}}{m}, \quad (3.47)$$

$$\hat{p}_0 = \frac{[f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0]}{C} \hat{p} - m \frac{[f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0]}{C} \hat{q}. \quad (3.48)$$

Agora, tomando a derivada temporal, podemos ver que quando as variáveis de posição e momento satisfazem as equações de hamilton associadas ao sistema, formam um par $\hat{q}_0$ e $\hat{p}_0$ de constantes de movimento, explicitamente

$$\frac{d\hat{q}_0}{dt} = \frac{[f_0\dot{g} - g_0\dot{f}]}{C} \left(\frac{d\hat{q}}{dt} - \frac{\hat{p}}{m} \right) - \frac{(f_0g - fg_0)}{C} \frac{1}{m} \left(\frac{d\hat{p}}{dt} + m\omega^2\hat{q} \right) = 0, \quad (3.49)$$

e,

$$\frac{d\hat{p}_0}{dt} = m \frac{[f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0]}{C} \left(\frac{\hat{p}}{m} - \frac{d\hat{q}}{dt} \right) + \frac{[f\dot{g}_0 - g\dot{f}_0]}{C} \left(\frac{d\hat{p}}{dt} + m\omega^2\hat{q} \right) = 0. \quad (3.50)$$

Essas duas constantes de movimento nos permitiram encontrar o que se conhece como invariantes lineares, que, como os operadores de subida e descida para o oscilador harmônico, são úteis para encontrar estruturas associadas às quantidades conservadas do sistema.

3.5.1 Invariantes Lineares

Tomando novamente as integrais de movimento $\hat{q}_0$ e $\hat{p}_0$ (3.48), podemos agrupá-las segundo a independência das condições iniciais da seguinte forma

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \frac{f_0}{C} \left(\dot{g}\hat{q} - \frac{g}{m}\hat{p} \right) - \frac{g_0}{C} \left(\dot{f}\hat{q} - \frac{f}{m}\hat{p} \right), \\ \hat{p}_0 &= -\frac{m\dot{g}_0}{C} \left(\dot{f}\hat{q} + f\frac{\hat{p}}{m} \right) + \frac{\dot{f}_0m}{C} \left(\dot{g}\hat{q} - g\frac{\hat{p}}{m} \right).\end{aligned}$$

Dado o fato que uma superposição de constantes de movimento também é uma constante de movimento, fica explícito que as seguintes constantes também podem ser constantes de movimento

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma} &= \sqrt{\frac{m}{i\hbar C}} \left(\dot{g}\hat{q} - \frac{g}{m}\hat{p} \right), \\ \hat{\Phi} &= \sqrt{\frac{m}{i\hbar C}} \left(\dot{f}\hat{q} - \frac{f}{m}\hat{p} \right).\end{aligned}$$

Esse último fato pode ser provado tomando a derivada temporal de $\hat{\Gamma}$ e $\hat{\Phi}$, em que, além de tomar as equações de Hamilton para as variáveis canônicas, devemos lembrar que f e

g são soluções da equação clássica para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Então, temos que esses operadores constituem uma transformação canônica e unitária e também satisfazem

$$[\hat{\Phi}, \hat{\Gamma}] = 1.$$

Com isso os novos operadores podem ser relacionados com as condições iniciais, através da forma

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \frac{1}{A} \left(f_0 \hat{\Gamma} - g_0 \hat{\Phi} \right), \\ \hat{p}_0 &= \frac{m}{A} \left(\dot{f}_0 \hat{\Gamma} - \dot{g}_0 \hat{\Phi} \right).\end{aligned}$$

Vemos também que podemos expressar os operadores $\{\hat{\Gamma}, \hat{\Phi}\}$ em função dos operadores $\{\hat{q}_0, \hat{p}_0\}$ como

$$\begin{aligned}\hat{\Phi} &= \frac{A}{C} \left(\dot{f}_0 \hat{q}_0 - f_0 \frac{\hat{p}_0}{m} \right), \\ \hat{\Gamma} &= \frac{A}{C} \left(\dot{g}_0 \hat{q}_0 - g_0 \frac{\hat{p}_0}{m} \right),\end{aligned}$$

o que nos mostra que os invariantes lineares $\{\hat{\Gamma}, \hat{\Phi}\}$ são igualmente determinados pelas condições iniciais.

3.5.2 Invariantes Quadráticos

Da mesma forma que as integrais de movimento lineares, o produto dessas integrais também serão invariantes. Vimos anteriormente que, no caso do oscilador harmônico com frequência independente do tempo, o hamiltoniano do sistema pode ser expresso como o produto dos invariantes lineares associados. Nesse caso, oscilador harmônico com frequência dependente do tempo o invariante a ser deduzido, ainda que não seja o hamiltoniano, é uma quantidade que apresenta dimensões de energia e é conservada. A fim de determinar esse invariante, tomemos os invariantes associados a posição e momento iniciais

$$\begin{aligned}\hat{q}_0 &= \frac{1}{A} \left(f_0 \hat{\Gamma} - g_0 \hat{\Phi} \right), \\ \hat{p}_0 &= \frac{m}{A} \left(\dot{f}_0 \hat{\Gamma} - \dot{g}_0 \hat{\Phi} \right).\end{aligned}$$

A construção dos invariantes quadráticos exige que exploremos todos os possíveis produtos desses invariantes lineares, para assim, encontrarmos as quantidades que desejamos. Portanto, temos que os invariantes quadráticos associados são

$$\begin{aligned}\hat{q}_0^2 &= \frac{1}{A^2} \left(f_0^2 \hat{\Gamma}^2 - f_0 g_0 \hat{\Gamma} \hat{\Phi} - g_0 f_0 \hat{\Phi} \hat{\Gamma} + g_0^2 \hat{\Phi}^2 \right), \\ \hat{p}_0^2 &= \frac{m^2}{A^2} \left(\dot{f}_0^2 \hat{\Gamma}^2 - \dot{g}_0 \dot{f}_0 \hat{\Gamma} \hat{\Phi} - \dot{g}_0 \dot{f}_0 \hat{\Phi} \hat{\Gamma} + \dot{g}_0^2 \hat{\Phi}^2 \right), \\ \hat{q}_0 \hat{p}_0 &= \frac{m}{A^2} \left(\dot{f}_0 f_0 \hat{\Gamma}^2 - \dot{g}_0 f_0 \hat{\Gamma} \hat{\Phi} - g_0 \dot{f}_0 \hat{\Phi} \hat{\Gamma} + g_0 \dot{g}_0 \hat{\Phi}^2 \right), \\ \hat{p}_0 \hat{q}_0 &= \frac{m}{A^2} \left(f_0 \dot{f}_0 \hat{\Gamma}^2 - g_0 \dot{f}_0 \hat{\Gamma} \hat{\Phi} - \dot{g}_0 \hat{\Phi} f_0 \hat{\Gamma} + \dot{g}_0 g_0 \hat{\Phi}^2 \right)\end{aligned}$$

Seguindo, podemos inverter essas relações, isto é, expressar os invariantes quadráticos em função das potências quadráticas de Γ e Φ . Assim, usando a forma matricial

$$\frac{1}{A^2} \begin{pmatrix} f_0^2 & -f_0 g_0 & -g_0 f_0 & g_0^2 \\ m^2 \dot{f}_0^2 & -m^2 \dot{g}_0 \dot{f}_0 & -m^2 \dot{g}_0 \dot{f}_0 & m^2 \dot{g}_0^2 \\ m \dot{f}_0 f_0 & -m \dot{g}_0 f_0 & -m g_0 \dot{f}_0 & m \dot{g}_0 g_0 \\ m \dot{f}_0 f_0 & -m g_0 \dot{f}_0 & -m \dot{g}_0 f_0 & m \dot{g}_0 g_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Gamma}^2 \\ \hat{\Gamma} \hat{\Phi} \\ \hat{\Phi} \hat{\Gamma} \\ \hat{\Phi}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{q}_0^2 \\ \hat{p}_0^2 \\ \hat{q}_0 \hat{p}_0 \\ \hat{p}_0 \hat{q}_0 \end{pmatrix},$$

é possível determinar o seguinte conjunto de expressões

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}^2 &= \frac{m}{i\hbar C} \left(\dot{g}^2 \hat{q}^2 + \frac{g^2}{m^2} \hat{p}^2 - \frac{\dot{g}g}{m} \{\hat{q}, \hat{p}\} \right), \\ \hat{\Gamma} \hat{\Phi} &= \frac{m}{i\hbar C} \left(\dot{f} \dot{g} \hat{q}^2 + \frac{fg}{m^2} \hat{p}^2 - \frac{\dot{g}f}{m} \hat{q} \hat{p} - \frac{\dot{f}g}{m} \hat{p} \hat{q} \right), \\ \hat{\Phi} \hat{\Gamma} &= \frac{m}{i\hbar C} \left(\dot{f} \dot{g} \hat{q}^2 + \frac{fg}{m^2} \hat{p}^2 - \frac{\dot{f}g}{m} \hat{q} \hat{p} - \frac{\dot{g}f}{m} \hat{p} \hat{q} \right), \\ \hat{\Phi}^2 &= \frac{m}{i\hbar C} \left(\dot{f}^2 \hat{q}^2 + \frac{f^2}{m^2} \hat{p}^2 - \frac{\dot{f}f}{m} \{\hat{q}, \hat{p}\} \right). \end{aligned}$$

Ainda, observando cuidadosamente, notamos que podemos construir um invariante hermiteano através do produto simétrico,

$$\hat{I}_Q = \frac{1}{2} \{ \hat{\Gamma}, \hat{\Phi} \} = \frac{m}{i\hbar C} \left(\dot{f} \dot{g} \hat{q}^2 - (fg + \dot{g}f) \frac{1}{2m} \{\hat{p}, \hat{q}\} + \frac{fg}{m^2} \hat{p}^2 \right),$$

bem como, podemos construir um outro invariante quadrático se tomarmos os dois invariantes complexos Γ^2 e Φ^2 e dois números complexos $\{z, z^*\}$. Disso segue outros dois invariantes que podem ser associados como

$$\begin{aligned} \hat{I}_C &= \frac{1}{2} (z^* \hat{\Gamma}^2 + z \hat{\Phi}^2) \\ &= \frac{m}{i4\hbar C} \left\{ (z^* \dot{g}^2 + z \dot{f}^2) \hat{q}^2 - \frac{1}{m} (z^* \dot{g}g + z f \dot{f}) \{\hat{q}, \hat{p}\} + \left(\frac{z^* f^2}{m^2} + \frac{z g^2}{m^2} \right) \hat{p}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Podemos, da mesma forma que nas seções anteriores, também construir as relações de comutação entre os invariantes lineares e quadráticos deduzidos nesta seção. Assim, temos

$$\begin{aligned} [\hat{I}_Q, \hat{\Gamma}] &= \hat{\Gamma} \\ [\hat{I}_Q, \hat{\Phi}] &= -\hat{\Phi} \\ [\hat{\Phi}, \hat{\Gamma}] &= \hat{1}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Igualmente para $\hat{I}_C$ temos

$$\begin{aligned} [\hat{I}_C, \hat{\Gamma}] &= z \hat{\Phi} \\ [\hat{I}_C, \hat{\Phi}] &= -z^* \hat{\Gamma} \\ [\hat{\Phi}, \hat{\Gamma}] &= \hat{1}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

nas expressões anteriores, à diferença das relações estabelecidas com entre os operadores $\hat{\gamma}$ e $\hat{\Phi}$ e o operador $\hat{\Theta}$ as relações com $\hat{I}_C$ tem um peso diferente para cada uma das raízes; essa característica é similar ao que acontece com os geradores dos estados comprimidos.

A similaridade do operador $\hat{\Theta}$ com o hamiltoniano de um oscilador harmônico com frequência constante, quando expresso em função dos operadores de criação e aniquilação

como os dados em (3.38) e (3.39). Nos mostra que é natural pensar que além de apresentar uma estrutura de estados e de espectro similar, existem estados coerentes e comprimidos [3, 6, 8]. Assim, um tratamento simples onde exigimos que um estado genérico $|\zeta\rangle$ seja estado próprio do operador $\hat{\Phi}$, assim

$$\hat{\Phi}|\zeta\rangle = \zeta|\zeta\rangle, \quad (3.54)$$

implicara que

$$|\zeta\rangle = \exp\{\zeta\hat{\Gamma} - \zeta^*\hat{\Phi}\}|0\rangle, \quad (3.55)$$

que é a definição padrão de estado coerentes para o oscilador harmônico. Neste caso, o papel que desempenharia o hamiltoniano é agora estendido ao invariante quadrático $\hat{\theta}$; da mesma forma ocorre quando consideramos estados comprimidos, relacionados agora com estados do invariante $\hat{I}_C$.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Schliesser and T. J. Kippenberg, *Physics* **4**, 97 (2011). [38](#)
- [2] A. Malkin, V. I. Man'ko and D. A. Trifonov., *Phys. Lett.* **30A**, 7 (1969). [38](#), [41](#)
- [3] R. J. Glauber, *Laser Manipulation of Atoms and Ions: Proceedings of the International Enrico Fermi School, Course 118, Varenna, Italy, July 1-19, 1992*, E. Arimondo, W. D. Phillips, F. Strumia, (Eds., North Holland, Amsterdam, 1992, p. 643-660.) [38](#), [59](#)
- [4] L. F. Urrutia and E. Hernandez, *Int. Jour. Theor. Phys.* **23**, 1105 (1984). [38](#)
- [5] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, *"Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics"* (John Wiley & Sons. Inc. 1989) [38](#)
- [6] V. I. Man'ko. *"Introduction to Quantum Optics"*, arXiv:quant-ph/9509018v1 29 Sep 1995. [38](#), [41](#), [59](#), [83](#)
- [7] E. D. Courant and H. S. Snyder, *Annals of Physics* **281**, 360408 (2000); doi:10.1006aphy.2000.6012. ; Ken Takajama, *IEEE - Transactions on Nuclear Science*, Vol. **NS-30**, No. 4, August 1983. [38](#)
- [8] J. H. Shirley, *Phys. Rev.* **138**, B979 (1965); Floquet, *Ann. de l'Ecole Norm. Sup.* **12**, 47 (1883). [38](#)
- [9] S. Pancharatnam, *Proc. Indian Acad. Sci. A* **44** (1956) 247; M. V. Berry. *Proc. R. Soc. Lond. A* **392**, 45 (1984). [38](#)
- [10] H. R. Lewis, Jr. , *Phys. Rev. Lett.* **18**, 510 (1967); H. R. Lewis, Jr. , *Jour. Math. Phys.* **9**, 1976 (1968); H. R. Lewis, Jr. and W. B. Riessenfeld , *Jour. Math. Phys.* **10**, 1458 (1969). [38](#), [41](#), [48](#), [55](#)
- [11] R. S. Kaushal, Construction of exact invariants for time dependent classical dynamical systems, *Int. J. Theor. Phys*, **37**, 1793 (1998). [38](#)
- [12] M. Bertin, B.M.Pimentel and J.A. Ramirez, *J. Math. Phys.* **53**, 042104 (2012); [38](#), [83](#)

- [13] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez , *Revista Brasileira de Ensino de Física*. (Aceito para publicação - 2013) [14](#), [15](#), [17](#), [38](#)
- [14] J. S. Schwinger, "*Quantum Kinematics and Dynamics*", (Westview Press, New York 1991) [38](#)
- [15] V. P. Ermakov, *Univ. Jzv. Kiev* **20**, No. 91, (1880); V. P. Ermakov, "*Second-order differential equations: conditions of complete integrability*", (translated by A. O. Harin), *Appl. Anal. Discr. Math.* **2**, 123-145 (2008). [38](#), [41](#), [46](#)
- [16] D. Khandekar, S. V. Lawande., V. Bhagwat, "*Path Integral Methods and Their Applications*", (World Scientific Publishing, New York 1993) [41](#)
- [17] J.H. Van Vleck, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **14**, 178 (1928); W. Pauli, *Ausgewalte Kapitel der Feldquantisierung* (Lecture Notes ETH Zurich, 1952, pp 139-52). [41](#)
- [18] Kôdi Husimi, *Prog. Theor. Phys*, **9**, 4 (1953). [41](#)
- [19] D.Khandekar, S. V. Lawande, *J. Math. Phys.* **16**, 384 (1975); D. Khandekar, S. V. Lawande, *J. Math. Phys.* **20**, 9 (1979) [41](#)
- [20] V. V. Dodonov, I. A. Malkin, and V. I. Man'ko, *Int. Jour. Phys*, **14**, 37 (1975); [41](#), [83](#)
- [21] C. A. M. de Melo, B. M. Pimentel, J. A. Ramirez, "*Non-Adiabatic Solution to the Time Dependent Quantum Harmonic Oscillator*", arXiv:1101.0025 [quant-ph]. [46](#)
- [22] K. S. Mallesh, S. Chaturvedi, V. Balakrishnan, R. Simon and N. Mukunda, *Resonance* **16**, 2 (2011); K. S. Mallesh, S. Chaturvedi, V. Balakrishnan, R. Simon and N. Mukunda, *Resonance* **16**, 3 (2011). [47](#)
- [23] V. A. Fock, *Z. Physik***98**, 145 (1935); L.D. Faddeev, L.A. Khal'fin, I.V. Komarov., "*V.A. Fock- Selected works : quantum mechanics and quantum field theory*" (Chapman & Hall/CRC - 2004) [47](#)
- [24] W. Pauli, *Z. Physik* **36**, 336 (1926); English translation in *Sources of Quantum Mechanics*, edited by B. L. van der Waerden (North-Holland, Amsterdam, 1967). [47](#)
- [25] V.I.Man'ko, "*Quantum invariants and state system generatin algebra*"; (Group Theoretical Methods in Physics: Proceedings of the Third Yurmala Seminar, Yurmala, Ussr, 22-24 May 1985, Vol 1 - VNU Science Press - Utrech - The Netherlands - 1986) [48](#), [54](#), [59](#), [83](#)
- [26] V.V. Dodonov and I. V. Man'ko, "*Invariants and evolution of nonstationary systems*", (Nova Science Publ. Commack NY - 1989) [48](#), [54](#), [83](#)
- [27] V.V. Dodonov and I. V. Man'ko, "*Quantum Nonstationary Oscillator: Models and Applications*", *Journal of Russian Laser Research* **16**, 1 (1995). [48](#), [54](#), [83](#)
- [28] W. Magnus and S. Winkler, *Hill's Equation* (Dover Publ., New York, 1979).

4

Estudo de Sistemas Interagentes

No estudo de sistemas interagentes, como os que tratam as interações da radiação com a matéria, obter soluções exatas às equações de movimento resulta em uma tarefa difícil ou quase impossível. Contudo, existem abordagens teóricas fundamentadas nas características das interações, como a sua intensidade ou seu comportamento assintótico. Tais características, permitem tratamentos perturbativos ou computacionais que dão uma ideia de qual é a forma funcional das soluções. Ainda assim, não são todas as situações físicas que satisfazem essas condições. Visto que, sistemas que apresentam uma interação de grande intensidade entre seus componentes, como é o caso da cromodinâmica quântica a baixas energias ou os acoplamentos ressonantes entre átomos e campos eletromagnéticos fortes fogem dessas abordagens.

Em contraste, existem situações nas quais os sistemas mencionados acima podem ser reduzidos a casos mais simples, por exemplo o *modelo semi-clássico de Rabi* e na sua versão quântica o *modelo de Jaynes-Cummings* [1, 2]. Ainda que sendo idealizações do problema geral, são ricos em fenomenologia e também admitem abordagens não perturbativas. Esses dois modelos são exemplos de sistemas confinados que geralmente são descritos por um simples átomo que interage com um dos modos do campo de radiação dentro de uma cavidade e pertencem a uma subárea da óptica Quântica chamada eletrodinâmica quântica em cavidades ou CQED pelas sua sigla em inglês. Uma abordagem generalizada da CQED, na qual podem ser tratados sistemas que não admitem um tratamento perturbativa e que conduz a resultados analíticos, foi proposta por Cohen-Tannoudji, Serge Haroche e Nicole Polonsky [3, 4, 5] introduzindo o conceito de *Átomo Vestido*.

Nessa abordagem, o átomo ou molécula dentro de uma cavidade interage com o campo eletromagnético de tal forma que os fótons que o envolvem constituem um subsistema que interage fracamente com o restante do campo. Dessa forma, o átomo

encontra-se "*vestido*" pelos fótons do campo [3]. Em consequência, o sistema se divide em duas partes: a primeira o sistema campo-átomo, no qual o modo do campo que causa a transição no átomo e o átomo mesmo é considerado como uma parte indivisível do sistema e a segunda o resto de modos do campo, os quais não interagem diretamente com o átomo mas que mudam as suas características. Assim, estudam-se os processos de radiação em cavidades em uma base de estados conveniente para tratar casos que de outra forma não poderiam ser abordados com os procedimentos inicialmente comentados.

No entanto, uma limitação da teoria dos átomos vestidos é dada pela perda de generalidade quando as interações apresentam um caráter não-linear. Nesse caso a determinação dos estados associados a esses sistemas perde a sua rigorosidade [6]. Uma extensão desses conceitos, chamada de Coordenadas Vestidas ou Renormalizadas [7, 8, 9], foi formulada para tratar sistemas nos quais as interações se dão de tal maneira que o acoplamento entre o átomo e os modos do campo é linear. Situações como essas estão presentes no contexto de interação radiação matéria quando a distribuição de carga que representa o átomo é considerada dipolar.

A abordagem de coordenadas renormalizadas foi usada inicialmente no estudo do problema da interação de um oscilador harmônico com os modos de um campo escalar dentro de uma cavidade esférica [7]. Nesse contexto, esse modelo de teste representa um problema de radiação simples em que os resultados obtidos são os mesmos que os obtidos por outras formulações [10, 11, 12]. Como pode ser visto nas referências [7, 8, 9, 10, 11], independentemente do tipo de abordagem adotada, seja a mecânica quântica operatorial ou o formalismo de integral de caminho [10, 11], os resultados oferecidos sempre estiveram acompanhados da necessidade da representação do sistema em algum espaço coordenado.

Neste capítulo, apresentaremos uma abordagem alternativa ao tratamento do modelo representado por um oscilador harmônico interagindo com os modos de um campo escalar sem massa usando o princípio de ação quântica de Schwinger. Diferentemente das abordagens anteriormente comentadas, não usaremos o conceito de *coordenada vestida*. Assim, construiremos dois conjuntos de operadores de criação e aniquilação para os estados quânticos que pode ter cada um dos componentes do sistema. O primeiro conjunto estará associado aos estados físicos mensuráveis de cada componente individual em presença da interação; isto é, para o oscilador harmônico e cada modo do campo. O segundo conjunto estará associado aos modos normais do sistema, em que cada um desses modos expressará estados do conjunto oscilador-modos do campo. Dessa forma, chamaremos ao primeiro conjunto de *operadores de criação e aniquilação de estados vestidos* (DSO) do sistema e o segundo conjunto de *operadores de criação e aniquilação de estados normais* (NMO) do sistema.

Sendo assim, o conteúdo deste capítulo estará organizado da seguinte forma: na primeira seção explicaremos detalhadamente o modelo, definiremos a matriz de interação e faremos um aparte matemático sobre as suas características. Na segunda seção passaremos a construir os dois conjuntos de operadores de criação e aniquilação. Logo após, usando o princípio de ação quântica introduzido no segundo capítulo, deduziremos as equações de movimento e calcularemos a função de transformação; primeiramente na base dos operadores geradores dos modos normais do sistema e, posteriormente, a partir

dessa função de transformação calcularemos a mesma na base dos operadores geradores dos estados vestidos. Por ultimo, deduziremos o espectro de energia para o sistema e a forma das probabilidades de transição entre os estados individuais dos elementos do sistema.

4.1 Proposição do Modelo

Para os nossos propósitos, nesta seção usamos um modelo em que um oscilador harmônico interage linearmente com um campo escalar no centro de uma esfera. Sendo esse uma simplificação do modelo que trata a interação de um dipolo com um campo eletromagnético no centro de uma cavidade esférica [7]. Denominando a posição do oscilador como $q_0(t)$ e o campo escalar como $\phi(\mathbf{r}, t)$, podemos partir diretamente das equações de movimento

$$\ddot{q}_0(t) + \omega_0^2 q_0(t) = 2\pi\sqrt{g} \int_0^R d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r}), \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) = 2\pi\sqrt{g} q_0(t) \delta(\mathbf{r}), \quad (4.1b)$$

nas quais g é a constante de acoplamento entre o campo escalar e o oscilador. Também, usamos $c = 1$ e R como o raio da esfera. Assim, tomam-se as condições sobre a coordenada radial $\mathbf{r}$ tal que o campo $\phi(\mathbf{r}, t)$ é diferente de zero só em $0 < \mathbf{r} < R$. A solução do problema se exprime realizando uma expansão do campo escalar da seguinte forma

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) \phi_k(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

na qual dada a geometria do sistema, uma expansão em termos de ondas planas não resulta conveniente. Portanto, em seu lugar, usamos uma expansão apropriada do campo escalar em termos dos modos ressonantes que podem se dar numa estrutura esférica; essas funções $\phi_k(\mathbf{r})$ são expressas em uma base esférica conveniente e as frequências desses modos são dadas em função da geometria. Dai, obtemos o seguinte conjunto de equações diferenciais

$$\ddot{q}_0(t) + \omega_0^2 q_0(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \eta \omega_k q_k(t), \quad (4.3a)$$

$$\ddot{q}_k(t) + \omega_k^2 q_k(t) = \eta \omega_0 q_0(t). \quad (4.3b)$$

Para o caso das equações (4.3a) e (4.3b), ainda que o acoplamento entre os modos do campo escalar e o oscilador é constante; escalaremos a uma nova constante de acoplamento que dependerá de cada modo na forma $c_k = \eta \omega_k$. Na qual, $\omega_k = \frac{\pi k}{R}$ e $\eta = \sqrt{2g}$.

A estrutura de oscilador harmônico dada ao elemento no centro da esfera representa os níveis de um átomo idealizado ou o espectro vibracional de uma molécula. Além disso, interação linear esta justificada no fato que esse elemento é representado por uma

pequena distribuição de carga. Assim, podemos usar a aproximação de grandes comprimentos¹ e o gauge de Göppert-Mayer para o campo eletromagnético [5, 12], levando a uma interação tipo dipolo elétrico. Podemos então tomar o modelo resultante como um sistema constituído por uma partícula, assumida como um oscilador harmônico, acoplada aos modos de um campo de radiação que é considerado, pela simplicidade, um campo escalar [7, 10]. O operador hamiltoniano simetrizado associado à descrição anterior pode ser expresso da seguinte forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left\{ \hat{p}_0^2 + \omega_0^2 \hat{q}_0^2 + \sum_{k=1}^N (\hat{p}_k^2 + \omega_k^2 \hat{q}_k^2) \right\} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N c_k (\hat{q}_0 \hat{q}_k + \hat{q}_k \hat{q}_0), \quad (4.4)$$

no qual o índice 0 é reservado para o oscilador no centro da esfera e os índices $k = 1, \dots, N$ serão reservados aos modos do campo escalar.

O hamiltoniano simetrizado pode ser escrito em uma forma matricial, de onde podemos definir os vetores

$$\begin{aligned} \hat{p}^T &= (\hat{p}_0, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N), \\ \hat{q}^T &= (\hat{q}_0, \hat{q}_1, \dots, \hat{q}_N), \end{aligned} \quad (4.5a)$$

obtendo a forma funcional,

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{p}^T \hat{p} + \frac{1}{2} \hat{q}^T \Omega^2 \hat{q}, \quad (4.6)$$

na qual a matriz Ω^2 , que de agora em diante será chamada matriz de interação, tem a seguinte forma

$$\Omega^2 = \begin{pmatrix} \omega_0^2 & -c_1 & -c_2 & \dots & -c_N \\ -c_1 & \omega_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ -c_2 & 0 & \omega_2^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -c_N & 0 & 0 & \dots & \omega_N^2 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

A matriz acima resume todas as interações existentes no sistema, tanto aquelas aportadas pelas condições de contorno do sistema, associadas à geometria do sistema, que estão manifestas nas frequências dos modos do campo, quanto aquelas dadas pela interação dipolar. É importante ver que (4.7) pode ser simetrizada, dado que o potencial está no centro da esfera, em outro caso teríamos que fazer uma modificação.

4.1.1 Algumas Características da Matriz Ω^2

Como a matriz (4.7) é simétrica, podemos encontrar uma transformação ortogonal $\mathbf{T}$, tal que teríamos uma transformação de similaridade a uma nova matriz desta vez diagonal

¹Essa aproximação considera o tamanho da distribuição de carga do sistema pequena suficiente para ser comparada aos comprimentos de onda do campo incidente. Dessa forma na expansão multipolar da distribuição é suficiente tomar apenas os dois primeiros termos.

$\mathbf{D}^2 = \mathbf{T}\mathbf{\Omega}^2\mathbf{T}^T$. Na qual $\mathbf{D}^2 = \text{diag} \{\Omega_0^2, \Omega_1^2, \Omega_2^2, \dots, \Omega_N^2\}$. Desta forma, podemos encontrar qualquer potência α da matriz $\mathbf{\Omega}$ na qual tomando $\mathbf{D}^\alpha = \text{diag} \{\Omega_0^\alpha, \Omega_1^\alpha, \Omega_2^\alpha, \dots, \Omega_N^\alpha\}$, teremos o seguinte

$$\mathbf{\Omega}^\alpha = \mathbf{T}\mathbf{D}^\alpha\mathbf{T}^T, \quad (4.8)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}$ e, para os nossos propósitos consideramos cada valor-próprio $\Omega_i^\alpha \geq 0$ de $\mathbf{D}^\alpha$. Para definir o conjunto especial de operadores de criação e aniquilação que usaremos mais adiante, precisamos calcular a raiz quadrada de $\mathbf{\Omega}^2$. Dessa forma, tomando $\mathbf{\Omega}^2 = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}$, ou $\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}}$, e $\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}^T = \mathbf{T}^T \cdot \mathbf{T} = \mathbf{1}$, obtemos

$$\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega} = \mathbf{T}\mathbf{D}\mathbf{T}^T \cdot \mathbf{T}\mathbf{D}\mathbf{T}^T, \quad (4.9)$$

daí, tomando $\mathbf{D} = \text{diag} \{\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N\}$, temos

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{T}\mathbf{D}\mathbf{T}^T. \quad (4.10)$$

4.2 Os Operadores de Criação e Aniquilação

A estrutura quadrática do hamiltoniano (4.6) sugere que de forma similar a um oscilador harmônico, existe a possibilidade de definir um conjunto de operadores de criação e aniquilação para este sistema. Ainda assim, a forma da interação apesar de ser linear não permite uma definição direta deles. Para poder defini-los, devemos usar as características da Matriz de Interação (4.7) e recorrer indiretamente a alguns conceitos que se originam em sistemas de osciladores harmônicos acoplados em nível clássico.

Nesta seção veremos que modo similar ao caso clássico, em nível quântico o estado de movimento de cada oscilador do sistema oscilador-campo por separado depende dos estados de movimento dos outros elementos do sistema; isso devido à presença da interação. Da mesma forma, existem estados de movimento do sistema como um todo que constituem os seus movimentos fundamentais; sendo estes últimos chamados de modos normais.

Dessa forma, estamos falando de dois conjuntos de operadores: o primeiro, que relata os movimentos e as excitações de cada elemento do sistema e o segundo, que relata os movimentos e as excitações do sistema como um todo. No primeiro conjunto, cada oscilador apresenta um comportamento especial e isso é dado porque seus movimentos estão afetados pela presença dos outros elementos no sistema. No segundo conjunto, o coletivo de elementos do sistema apresenta estados de movimento os quais tem uma frequência própria associada, cada combinação de movimentos é única podendo ser considerados em conjunto como um sistema de osciladores desacoplados.

Dadas as características dos dois conjuntos de operadores mencionados acima denominaremos de operadores de criação e aniquilação de estados vestidos ou DSO aos operadores que descrevem as excitações das componentes individuais do sistema. Da mesma forma, o segundo conjunto será chamado de operadores de criação e aniquilação dos modos normais ou NMO. Assim, a continuação construiremos os dois conjuntos de operadores de criação e aniquilação e estabeleceremos uma relação simples entre eles.

4.2.1 Os Operadores para os Estados Vestidos

Os operadores de criação e aniquilação que definiremos estão associados às excitações que apresentam as componentes do sistema quando a interação é considerada. Dessa forma, esses operadores criarão uma superposição dos estados mensuráveis de cada componente do sistema. Os DSO e os estados que eles criam são chamados de vestidos dado que, da mesma forma que ocorre a modificação do momento magnético de um átomo pelo acoplamento deste com um campo de radiofrequência, ver [3] seção C, as frequências e as constantes de acoplamento de cada oscilador se afetam pela interação com os outros elementos do sistema. Assim, os estados de energia criados pelos operadores são diferentes com relação aos que apresentariam as componentes do sistema se não houvesse interação.

Dessa forma, seguindo a estrutura das matrizes (4.8), os operadores DSO estão dados pelas seguintes expressões

$$\begin{aligned}\hat{y} &= \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}} (\hat{q} + i\mathbf{\Omega}^{-1}\hat{p}), \\ \hat{y}^T &= \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} (\hat{q}^T + i\hat{p}^T \mathbf{\Omega}^{-1}) \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}}, \\ \hat{y}^\dagger &= \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}} (\hat{q} - i\mathbf{\Omega}^{-1}\hat{p}), \\ \hat{y}^{\dagger T} &= \sqrt{\frac{1}{2\hbar}} (\hat{q}^T - i\hat{p}^T \mathbf{\Omega}^{-1}) \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{4.11}$$

na qual os operadores $\hat{y}$, $\hat{y}^\dagger$ e seus transpostos, são vetores da forma

$$\begin{aligned}\hat{y}^T &= (\hat{y}_0 \quad \hat{y}_1 \quad \dots \quad \hat{y}_k), \text{ e, } \hat{y} = \begin{pmatrix} \hat{y}_0 \\ \hat{y}_1 \\ \vdots \\ \hat{y}_k \end{pmatrix}, \\ \hat{y}^{\dagger T} &= (\hat{y}_0^\dagger \quad \hat{y}_1^\dagger \quad \dots \quad \hat{y}_k^\dagger), \text{ e, } \hat{y}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{y}_0^\dagger \\ \hat{y}_1^\dagger \\ \vdots \\ \hat{y}_k^\dagger \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Podemos observar que as transformações dadas na seção 4.1.1 as quais levam aos operadores (4.12) preservam as relações canônicas

$$\begin{aligned}[\hat{y}, \hat{y}^\dagger] &= \hat{y}^T \hat{y}^\dagger - \hat{y}^{\dagger T} \hat{y} = \frac{1}{2\hbar} \{-2i\hat{q}^T \hat{p} + 2i\hat{p}^T \hat{q}\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \{\hat{p}^T \hat{q} - \hat{q}^T \hat{p}\} = 1,\end{aligned}\tag{4.12}$$

por essa razão a transformação $(\hat{q}, \hat{p}) \rightarrow (\hat{y}, \hat{y}^\dagger)$ é uma transformação canônica. Podemos tomar as relações inversas a (4.12), para encontrar

$$\begin{aligned}
\hat{q} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \mathbf{\Omega}^{-\frac{1}{2}} (\hat{y} + \hat{y}^\dagger), \\
\hat{p} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}} (\hat{y}^\dagger - \hat{y}), \\
\hat{q}^T &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{y}^T + \hat{y}^{\dagger T}) \mathbf{\Omega}^{-\frac{1}{2}}, \\
\hat{p}^T &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{y}^{\dagger T} - \hat{y}^T) \mathbf{\Omega}^{\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{4.13}$$

assim, substituindo (4.13) no hamiltoniano (4.6) temos a forma de hamiltoniano de estados vestidos

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \left\{ \hat{y}^{\dagger T} \mathbf{\Omega} \hat{y} + \hat{y}^T \mathbf{\Omega} \hat{y}^\dagger \right\}. \tag{4.14}$$

Precisamos conhecer a dinâmica de cada componente do sistema. Porém, o fato que os estados tanto do oscilador no centro da esfera quanto os modos do campo sejam dependentes entre si impede que possamos considerá-los de maneira isolada. Isso é evidenciado no fato que os estados criados pelos DSO estão em uma complicada forma na superposição. Para poder solucionar este problema, podemos fazer uma transformação desses operadores geradores dos estados vestidos para o conjunto dos operadores geradores dos modos normais do sistema. Essa transformação, pode ser realizada usando a transformação $\mathbf{T}$ que foi usada na seção 4.1.1. Assim, podemos expressar o sistema como um conjunto de osciladores harmônicos desacoplados e resolver o problema em uma forma exata, para depois conhecer, por exemplo o comportamento da oscilador no centro da esfera e os modos do campo que estão sendo considerados. Assim, na seguinte seção introduziremos tais operadores.

4.2.2 Os Operadores para os Modos Normais

O hamiltoniano (4.14) não está na sua forma diagonal. Ainda assim, a matriz $\mathbf{\Omega}$ que contém toda a informação sobre as interações apresenta uma estrutura similar à frequência de um oscilador harmônico quando apresentado na forma matricial. Para evidenciar tal estrutura, precisamos levá-la à forma diagonal. Assim, com ajuda de $\mathbf{T}$, o hamiltoniano (4.14) que está expresso na base DSO pode ser transformado à base dos operadores de criação e aniquilação dos modos normais.

Assim, tomando a forma da matriz (4.10), os operadores NMO estão dados pelas seguintes expressões

$$\begin{aligned}
\hat{\xi} &= \mathbf{T}^T \hat{y} \quad ; \quad \hat{\xi}^T = \hat{y}^T \mathbf{T}, \\
\hat{\xi}^\dagger &= \mathbf{T}^T \hat{y}^\dagger \quad ; \quad \hat{\xi}^{\dagger T} = \hat{y}^{\dagger T} \mathbf{T},
\end{aligned} \tag{4.15}$$

nos quais

$$\hat{\xi}^T = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0 & \hat{\xi}_1 & \dots & \hat{\xi}_k \end{pmatrix}, \text{ e, } \hat{\xi} = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0 \\ \hat{\xi}_1 \\ \vdots \\ \hat{\xi}_k \end{pmatrix},$$

da mesma forma que os seus adjuntos

$$\hat{\xi}^{\dagger T} = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0^\dagger & \hat{\xi}_1^\dagger & \dots & \hat{\xi}_k^\dagger \end{pmatrix}, \text{ e, } \hat{\xi}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0^\dagger \\ \hat{\xi}_1^\dagger \\ \vdots \\ \hat{\xi}_k^\dagger \end{pmatrix}.$$

Assim, o hamiltoniano (4.14) pode ser transformado na sua forma diagonal

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \hat{\xi}^{\dagger T} \mathbf{D} \hat{\xi} + \hat{\xi}^T \mathbf{D} \hat{\xi}^\dagger \right\} \\ &= \sum_{k=0}^N \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \hat{\xi}_k \hat{\xi}_k^\dagger \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Tomando as relações $[\hat{\xi}_j, \hat{\xi}_k^\dagger] = \delta_{j,k}$, essa última expressão pode ser escrita

$$\hat{H} = \hbar \sum_{k=0}^N \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \frac{1}{2} \right) = \hbar \hat{\xi}^{\dagger T} \mathbf{D} \hat{\xi} + \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \mathbf{D}. \quad (4.17)$$

Dado que as expressões (4.16) e (4.17) estão dadas na base dos modos normais do sistema, as chamaremos daqui em diante hamiltonianos dos modos normais ou hamiltonianos na base NMO.

O conjunto de operadores de criação e aniquilação dos modos normais cria e aniquila as excitações do coletivo. Isso é, cria e aniquila excitações tanto do campo completo como do oscilador no centro da esfera com um número fixo de *quanta*. Esses modos estão relacionados ao comportamento coletivo do sistema e não com a dinâmica de cada um dos seus componentes ao nível individual. Em efeito, graças à transformação $\mathbf{T}$ que estabelece uma relação entre os operadores $(\hat{y}^\dagger, \hat{y})$ e $(\hat{\xi}^\dagger, \hat{\xi})$; os estados de cada componente do sistema, estados vestidos, podem ser expressos como uma combinação dos estados associados aos modos normais do sistema e vice-versa.

Os modos normais se apresentam em igual número que as componentes do sistema e constituem, graças a sua natureza, um conjunto de osciladores harmônicos os quais estão desacoplados. Da mesma forma, cada um desses modos apresenta uma frequência própria que está definida pelas características de todo o coletivo. Isso, dado que eles são essencialmente uma superposição linear dos estados de movimento de cada elemento do sistema. Igualmente, dado que o movimento de cada elemento do sistema se dá por uma combinação única de modos normais, podemos inferir que seus movimentos não obedecerão a uma frequência única. Por tanto, os estados quânticos associados a cada elemento do sistema não são estados próprios do sistema.

Cada Modo Normal representa uma forma na qual a energia é trocada entre os elementos do sistema e ela dependerá do número de "*quanta*" que estejam disponíveis entre o campo e o oscilador. Dado que o número dessas excitações é fixa, a quantidade de modos do campo tidos em conta determinarão a dimensão do espaço de Hilbert a ser usado. Também, dado que o conjunto dos NMO são em essência osciladores harmônicos desacoplados. Os estados quânticos associados a esses podem ser representados

como o produto tensorial dos estados associados a cada um desses osciladores. Porém, para o caso dos estados vestidos não existe forma de expressar os estados do campo e do oscilador no centro da esfera como um produto tensorial. Isso quer dizer que os estados próprios do sistema expressos como superposição de estados vestidos não pode ser expresso como um produto tensorial dos estados associados a cada componente do sistema.

4.3 O lagrangiano e as Equações de Movimento

Precisamos encontrar o lagrangiano da teoria posto que é necessário para a implementação do princípio de ação quântica de Schwinger. Assim, dados os hamiltonianos (4.14) ou (4.17) e como o sistema não apresenta vínculos, a transformada inversa de Legendre é dada por

$$\hat{L} = \frac{1}{2} \hat{p}^T \cdot \frac{d\hat{q}}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d\hat{q}^T}{dt} \cdot \hat{p} - \hat{H},$$

usando a transformação dada em (4.13) temos para (4.14) que o lagrangiano do sistema na representação de estados vestidos é

$$\begin{aligned} \hat{L} = & i \frac{\hbar}{4} \left\{ \left(\hat{y}^{\dagger T} - \hat{y}^T \right) \left(\frac{d\hat{y}}{dt} + \frac{d\hat{y}^\dagger}{dt} \right) \right\} \\ & + i \frac{\hbar}{4} \left\{ \left(\frac{d\hat{y}^T}{dt} + \frac{d\hat{y}^{\dagger T}}{dt} \right) \left(\hat{y}^\dagger - \hat{y} \right) \right\} - \hat{H} \\ = & \frac{i\hbar}{4} \left\{ \hat{y}^{\dagger T} \frac{d\hat{y}}{dt} - \hat{y}^T \frac{d\hat{y}^\dagger}{dt} \right\} \\ & - \frac{\hbar}{2} \left\{ \hat{y}^{\dagger T} \mathbf{\Omega} \hat{y} + \hat{y}^T \mathbf{\Omega} \hat{y}^\dagger \right\}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

e com a transformação realizada em (4.15) o lagrangiano baseado em (4.17) tem a seguinte forma na base de Estados Normais

$$\begin{aligned} \hat{L} = & \frac{\hbar}{2} \left\{ i \hat{\xi}^{\dagger T} \frac{d\hat{\xi}}{dt} - i \hat{\xi}^T \frac{d\hat{\xi}^\dagger}{dt} - \left(\hat{\xi}^{\dagger T} \mathbf{D} \hat{\xi} + \hat{\xi}^T \mathbf{D} \hat{\xi}^\dagger \right) \right\} \\ = & \frac{\hbar}{2} \sum_{k=0}^N \left\{ i \hat{\xi}_k^{\dagger} \frac{d\hat{\xi}_k}{dt} - i \hat{\xi}_k \frac{d\hat{\xi}_k^\dagger}{dt} - \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \hat{\xi}_k \hat{\xi}_k^\dagger \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

vale dizer que temos desprezado os termos relacionados com derivadas totais, dado que esses termos não afetam a dinâmica dada pela ação.

4.3.1 Equações de Movimento

Podemos usar o princípio de ação quântica [16] para a dedução das equações de movimento dos operadores, *i.e.* as equações de Heisenberg. Primeiramente, precisamos efetuar uma variação no lagrangiano quântico (4.19) na representação de modos normais,

dado que nessa base de operadores as equações matriciais são diagonais e a expressão de qualquer quantidade que emerge dali é suscetível de ser manipulada. Assim depois de alguns cálculos temos

$$\begin{aligned} \delta \hat{L} = & \frac{\hbar}{2} \delta \hat{\xi}^{\dagger T} \left(i \frac{d\hat{\xi}}{dt} - \mathbf{D} \hat{\xi} \right) - \frac{\hbar}{2} \hat{\xi}^T \mathbf{D} \delta \hat{\xi}^{\dagger} \\ & - \delta \hat{\xi}^T \left(i \frac{d\hat{\xi}^{\dagger}}{dt} + \mathbf{D} \hat{\xi}^{\dagger} \right) - \frac{\hbar}{2} \hat{\xi}^{\dagger T} \mathbf{D} \delta \hat{\xi} \\ & + \frac{i\hbar}{2} \hat{\xi}^{\dagger T} \frac{d(\delta \hat{\xi})}{dt} - \frac{i\hbar}{2} \hat{\xi}^T \frac{d(\delta \hat{\xi}^{\dagger})}{dt}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

tomando $\delta \hat{L} = 0$ temos

$$\begin{aligned} i \frac{d\hat{\xi}}{dt} - \mathbf{D} \hat{\xi} &= 0, \text{ e } i \frac{d\hat{\xi}^{\dagger}}{dt} + \mathbf{D} \hat{\xi}^{\dagger} = 0, \\ i \frac{d\hat{\xi}^T}{dt} - \hat{\xi}^T \mathbf{D} &= 0, \text{ e } i \frac{d\hat{\xi}^{\dagger T}}{dt} - \hat{\xi}^{\dagger T} \mathbf{D} = 0, \end{aligned}$$

as soluções das equações matriciais (4.20) são dadas por

$$\begin{aligned} \hat{\xi}(t) &= \exp[-i\mathbf{D}t] \hat{\xi}(t_0), \text{ e } \hat{\xi}^{\dagger}(t) = \exp[i\mathbf{D}t] \hat{\xi}^{\dagger}(t_0), \\ \hat{\xi}^T(t) &= \hat{\xi}^T(t_0) \exp[-i\mathbf{D}t], \text{ e } \hat{\xi}^{\dagger T}(t) = \hat{\xi}^{\dagger T}(t_0) \exp[i\mathbf{D}t], \end{aligned} \quad (4.21)$$

nas quais $\hat{\xi}(t_0)$, $\hat{\xi}^{\dagger}(t_0)$, $\hat{\xi}^T(t_0)$ e $\hat{\xi}^{\dagger T}(t_0)$ são definidos como o conjunto de operadores no instante inicial em $t = t_0$. Tais operadores apresentam uma forma similar à expressão

$$\hat{\xi}(t_0) = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0(t_0) \\ \hat{\xi}_1(t_0) \\ \hat{\xi}_2(t_0) \\ \vdots \\ \hat{\xi}_N(t_0) \end{pmatrix}.$$

Finalmente, temos que as expressões dadas em (4.21) têm uma forma similar a

$$\begin{aligned} \hat{\xi}(t) &= \begin{pmatrix} \hat{\xi}_0(t) \\ \hat{\xi}_1(t) \\ \hat{\xi}_2(t) \\ \vdots \\ \hat{\xi}_N(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp\{-i\Omega_0 t\} \hat{\xi}_0(t_0) \\ \exp\{-i\Omega_1 t\} \hat{\xi}_1(t_0) \\ \exp\{-i\Omega_2 t\} \hat{\xi}_2(t_0) \\ \vdots \\ \exp\{-i\Omega_N t\} \hat{\xi}_N(t_0) \end{pmatrix} \\ &= \exp\{-i\mathbf{D}t\} \hat{\xi}(t_0). \end{aligned}$$

4.4 Função de Transformação Generalizada

Seguindo a estrutura dada no princípio de ação quântica, o operador $\hat{G}(t)$ é o gerador de todas as transformações infinitesimais admissíveis para o sistema. A sua forma funcional pode ser derivada tomando as soluções das equações dadas em (4.19) e o hamiltoniano (4.17), assim

$$\begin{aligned}\delta \left[\langle \xi^\dagger, t | \xi, t_0 \rangle \right] &= \langle \xi^\dagger, t | \hat{G}(t) - \hat{G}(t_0) | \xi, t_0 \rangle \\ &= \langle \xi^\dagger, t | \left(\hat{p} \delta \hat{q} - \hat{H} \delta t \right) |_{t_0}^{t_1} | \xi, t_0 \rangle,\end{aligned}$$

daí, tomando as relações (4.12) e o hamiltoniano (4.14), temos que o operador $\hat{G}(t)$, é dado pela seguinte expressão

$$\hat{G} = i \frac{\hbar}{2} \left(\hat{y}^{\dagger T} - \hat{y}^T \right) \left(\delta \hat{y} + \delta \hat{y}^\dagger \right) - \frac{\hbar}{2} \left\{ \hat{y}^{\dagger T} \mathbf{\Omega} \hat{y} + \hat{y}^T \mathbf{\Omega} \hat{y}^\dagger \right\} \delta t. \quad (4.22)$$

Assim, usando as transformações (4.15) na última expressão, obtemos

$$\hat{G} = \hbar \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{i}{2} \left(\hat{\xi}_k^\dagger \delta \hat{\xi}_k - \hat{\xi}_k \delta \hat{\xi}_k^\dagger \right) - \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \frac{1}{2} \right) \delta t \right\}. \quad (4.23)$$

Com isso, tomando as soluções para um componente genérico k

$$\begin{aligned}\hat{\xi}_k &= \exp \{ -i \Omega_k t \} \hat{\xi}_k(t_0), \\ \hat{\xi}_k^\dagger &= \hat{\xi}_k^\dagger(t_0) \exp \{ i \Omega_k t \},\end{aligned} \quad (4.24)$$

podemos calcular a amplitude de transição $\langle \xi^\dagger, t_1 | \xi, t_0 \rangle$. Primeiro, precisamos resolver a equação variacional (4.23), na qual tomando (4.24) temos para $\delta \hat{\mathcal{W}} = \hat{G}(t) - \hat{G}(t_0)$

$$\begin{aligned}\delta \hat{\mathcal{W}} &= \hbar \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{i}{2} \left(\hat{\xi}_k^\dagger \delta \hat{\xi}_k(t_0) e^{-i \Omega_k t} - \hat{\xi}_k(t_0) \delta \hat{\xi}_k^\dagger e^{-i \Omega_k t} \right) \right. \\ &\quad \left. - \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \frac{1}{2} \right) \delta t \right\}.\end{aligned}$$

Dessa forma, tomando $\left[\hat{\xi}_k^\dagger, \delta \hat{\xi}_k \right] = \left[\delta \hat{\xi}_k^\dagger, \hat{\xi}_k \right] = 0$ que são as relações de comutação derivadas desde o Princípio Variacional de Schwinger [16], temos que

$$\delta \hat{\mathcal{W}} = -\hbar \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{i}{2} \delta \left\{ \hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k(t_0) \right\} e^{-i \Omega_k t} - \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \frac{1}{2} \right) \Omega_k \delta t \right\},$$

assim, efetuando uma integração da equação (4.23), temos

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{W}} &= -i \hbar \sum_{k=0}^N \hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k(t_0) e^{-i \Omega_k t} - \frac{\hbar}{2} \sum_{k=0}^N \Omega_k t \\ &= -i \hbar \sum_{k=0}^N \hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k(t_0) e^{-i \Omega_k t} - \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \mathbf{D} t,\end{aligned}$$

da qual finalmente usando (2.49), obtemos a função de transformação

$$\begin{aligned}\langle \xi^\dagger, t_1 | \xi, t_0 \rangle &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t + \sum_{k=0}^N \xi_k^\dagger \xi_k(t_0) e^{-i\Omega_k t} \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t \right\} \exp \left\{ \vec{\xi}^\dagger e^{-i\mathbf{D}t} \vec{\xi}(t_0) \right\}.\end{aligned}\quad (4.25)$$

4.5 Espectro de Energia

Na base de modos normais, o sistema é totalmente diagonal e equivalente a um conjunto de N osciladores harmônicos independentes, em que cada um é realmente um movimento coletivo de todo sistema. Dada a transformação $\mathbf{T}$ que representa no nível quântico uma transformação canônica, o espectro na base de modos normais deve ser o mesmo que na base vestida. Assim, temos que na base de modos normais, o hamiltoniano é expresso na base diagonal do sistema e seus estados podem ser tratados como o espaço de Hilbert produto de N osciladores harmônicos independentes, assim

$$\hat{H} = \sum_{k=0}^N \hat{H}_k = \hbar \sum_{k=0}^N \Omega_k \left(\hat{\xi}_k^\dagger \hat{\xi}_k + \frac{1}{2} \right), \quad (4.26)$$

em que

$$\hat{H}_k = \hat{1}_0 \otimes \hat{1}_1 \otimes \dots \otimes \hat{1}_{k-1} \otimes \hat{h}_k \otimes \hat{1}_{k+1} \otimes \dots \otimes \hat{1}_N. \quad (4.27)$$

Também, a identidade do k -ésimo espaço de Hilbert ² é dada por

$$\hat{1}_k = \sum_{n_k} |n_k\rangle \langle n_k|, \quad (4.28)$$

além de que a identidade total para o sistema é dada por

$$\hat{1} = \prod_{i=0}^N \hat{1}_i = \prod_{i=0}^N \sum_{n_i} |n_i\rangle \langle n_i| \quad (4.29)$$

$$= \prod_{i=0}^N \sum_{n_i} |n_i\rangle \langle n_i|. \quad (4.30)$$

Um elemento genérico desse conjunto de estados é dado por

$$|N\rangle = |n_0, n_1, \dots, n_N\rangle = |n_0\rangle \otimes |n_1\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle, \quad (4.31)$$

assim, a ação do hamiltoniano sobre os estados-próprios leva a seguinte expressão

$$\begin{aligned}\hat{H} |n_0, n_1, \dots, n_N\rangle &= \sum_{k=0}^N \hat{H}_k |n_0, n_1, \dots, n_N\rangle \\ &= \sum_{k=0}^N |n_0\rangle \otimes \dots \otimes \hat{h}_k |n_k\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle \\ &= \sum_{k=0}^N E_{n_k} |n_0, n_1, \dots, n_N\rangle\end{aligned}$$

²Podemos ver algumas características da representação do operador número em [17].

e assim temos

$$E_{n_0 n_1 \dots n_N} = \sum_{k=0}^N E_{n_k}. \quad (4.32)$$

A expressão (4.32) é a forma genérica dos elementos do espectro do sistema e, podemos conhecer qual é a forma dos valores-próprios, tomando a amplitude de transição para o sistema no estado inicial

$$|\xi, t_0\rangle = \prod_{k=0}^N |\xi_k, t_0\rangle = |\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t_0\rangle, \quad (4.33)$$

avaliando a amplitude $\langle \xi^\dagger, t | \xi, t_0 \rangle = \langle \xi^\dagger, t_0 | e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} | \xi, t_0 \rangle$, usando as relações (4.29) e fazendo uso das relações de ortogonalidade $\langle n_i | m_j \rangle = \delta_{m,m;i,j}$, temos

$$\begin{aligned} |\xi, t\rangle &= e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} |\xi, t_0\rangle \\ &= \exp \left\{ -i\frac{t}{\hbar} \sum_{k=0}^N \hat{H}_k \right\} |\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t_0\rangle \\ &= \exp \left\{ -i\frac{t}{\hbar} \sum_{k=0}^N E_k \right\} \prod_{k=0}^N \langle n_k | \xi_k, t_0 \rangle. \end{aligned}$$

Usando agora os projetores sobre os vetores-próprios do sistema normal, podemos utilizar a expansão (4.33), para obter

$$\langle \xi^\dagger, t | \xi, t_0 \rangle = \prod_{j=0}^N \left(\sum_{n_j} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_j} t} |\langle n_j | \xi_j, t_0 \rangle|^2 \right). \quad (4.34)$$

Comparando a expressão (4.34) com a expansão para a função de transformação (4.25)

$$\langle \xi^\dagger, t | \xi, t_0 \rangle = \prod_{k=0}^N \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi_k^{\dagger n} \xi_k^n(t_0)}{n!} e^{-i\Omega_k(n+\frac{1}{2})t}, \quad (4.35)$$

vemos elementos similares, mas primeiramente precisamos mudar a forma em que são somados. Para fazer isso, podemos lembrar que cada oscilador na base de modos normais é idêntico aos outros, apenas diferenciado pela sua frequência. Dessa forma, podemos mudar a forma de somar sobre $n_j \rightarrow j$ em (4.34), obtendo assim

$$\begin{aligned} &\prod_{k=0}^N \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_k} t} |\langle n_k | \xi_k, t_0 \rangle|^2 \right) \\ &= \prod_{k=0}^N \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi_k^{\dagger n} \xi_k^n(t_0)}{n!} e^{-i\Omega_k(n+\frac{1}{2})t}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Dessa maneira, se tomarmos o estado $|\xi_k, t_0\rangle$ na representação do operador número associado à base de modos normais $|n_k\rangle$ na forma

$$|\langle \xi_k^\dagger, t_0 | n_k \rangle| = \frac{\xi_k^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}, \text{ and } |\langle \xi_k^\dagger, t_0 | n_k \rangle| = \frac{\xi_k^n}{\sqrt{n!}},$$

podemos ver, no expoente, a forma exata do espectro do sistema

$$\begin{aligned} E_{n_0 n_1 \dots n_N} &= \sum_{k=0}^N E_{n_k} = \sum_{k=0}^N \hbar \Omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \\ &= \sum_{k=0}^N \hbar \Omega_k n_k + \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \mathbf{D} \end{aligned}$$

assim desde a expressão anterior para o espectro, podemos ver que a energia do vácuo é

$$E_{\underbrace{0, 0, 0, 0 \dots 0}_{N\text{-times}}} = \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \mathbf{D} = \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \mathbf{\Omega}.$$

4.6 Funções de transformação e Probabilidades de Transição

A expressão para a amplitude de transição (4.25) está dada na base normal do sistema. Porém, essa informação está em uma forma pouco conveniente se queremos estudar o comportamento de um elemento individual do sistema. Isso porque os estados associados aos NMO são uma superposição dos estados DSO. Podemos analisar a expressão (4.34) e (4.35), para extrair a informação de que precisamos

$$\langle M | e^{-i \frac{\hat{H}}{\hbar} t} | N \rangle = \prod_{k=0}^N e^{-i \hbar \Omega_k (n_k + \frac{1}{2}) t} \delta_{m_k, n_k} \quad (4.37)$$

essa expressão representa a amplitude de probabilidade que o sistema esteja no estado $|N\rangle$ e faça uma transição para o estado $|M\rangle$, porém essa amplitude só mostra a transição entre dois estados representados na base de modos normais do sistema. Dessa forma, para extrair a informação física, como o comportamento do oscilador no centro da esfera ou a dinâmica de um modo específico, precisamos analisar a amplitude de transição entre os estados vestidos do sistema; isto é realizado na base não diagonalizada. Para isso propomos reformular a amplitude de transição generalizada na representação de DSO que pode ser realizada com o uso das transformações (4.15)

$$\xi_k^\dagger = \sum_{j=0}^N t_{jk} y_j^\dagger, \quad (4.38)$$

na qual o operador $\xi_k^\dagger$ cria um *quantum* de energia no modo normal k -ésimo, equivalentemente a criar um *quantum* de energia em cada elemento do sistema com o índice j . Assim, a expressão (4.35) é dada por

$$\langle y^\dagger, t | y, t_0 \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \text{Tr} \mathbf{D} t \right\} \prod_{r=0}^N \prod_{s=0}^N \exp \left\{ y_s^\dagger f_{rs}(t) y_r(t_0) \right\}, \quad (4.39)$$

onde é definida

$$\sum_{k=0}^N t_{sk} t_{kr} e^{-i\Omega_k t} = f_{rs}(t). \quad (4.40)$$

A expressão (4.39) é a amplitude generalizada para o sistema na representação de estados vestidos. Nessa forma podemos extrair a transição entre qualquer dois estados, sejam dos modos do campo ou do oscilador no centro da esfera do sistema original

$$\langle y_s^\dagger, t | y_r, t_0 \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t \right\} \exp \left\{ y_s^\dagger f_{rs}(t) y_r(t_0) \right\}. \quad (4.41)$$

Da mesma forma que para a amplitude calculada em função dos modos normais, podemos decompor a expressão anterior na base de número para os estados vestidos, isto é

$$|\langle y_k^\dagger, t_0 | \bar{n}_k \rangle| = \frac{y_k^{\dagger \bar{n}_k}}{\sqrt{\bar{n}_k!}} \quad \text{e} \quad |\langle y_k^\dagger, t_0 | \bar{m}_k \rangle| = \frac{y_k^{\bar{m}_k}}{\sqrt{\bar{m}_k!}}, \quad (4.42)$$

na qual a linha nos índices só indica que são excitações dos elementos individuais do sistema e não estão relacionados aos modos normais. Assim, uma expansão de (4.41)

$$\langle y_s^\dagger, t | y_r, t_0 \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t \right\} \sum_{\bar{n}=0}^{\infty} \frac{y_s^{\dagger \bar{n}}}{\sqrt{\bar{n}!}} f_{rs}^{\bar{n}}(t) \frac{y_r^{\bar{n}}(t_0)}{\sqrt{\bar{n}!}},$$

na qual os sub-índices r e s estão relacionados à componente do sistema, temos a amplitude de transição

$$\begin{aligned} \langle n_s, t | n_r \rangle &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t \right\} \left[\sum_{k=0}^N t_{sk} t_{kr} e^{-i\Omega_k t} \right]^n \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{2} Tr \mathbf{D} t \right\} \sum_{\substack{0 \leq l_m \leq n \\ \sum_{j=0}^m l_j}} \frac{n!}{l_0! l_1! l_2! \dots l_m!} \prod_{p=0}^m (t_{sk} t_{kr} e^{-i\Omega_k t})^{l_p}. \end{aligned}$$

Para probabilidades, podemos mostrar

$$\sum_{r=0}^N |f_{rs}(t)|^2 = 1,$$

sabendo que $\mathbf{T}$ é ortogonal. Isso, porque expressando $\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}^T = \mathbf{I}$ em função dos seus componentes $t_{r,s}$, temos a relação

$$\sum_{k=0}^N t_{r,k} t_{k,s} = \delta_{r,s}. \quad (4.43)$$

Assim, temos que essas expressões escritas para os índices $n = 0$, para o oscilador no centro da esfera e $k = \{1, \dots, N\}$ para o campo, conduzem às seguintes expressões

$$\begin{aligned} |f_{00}(t)|^2 + \sum_{k=0}^N |f_{0k}(t)|^2 &= 1, \\ |f_{k_1 0}(t)|^2 + \sum_{k_2=0}^N |f_{k_1 k_2}(t)|^2 &= 1. \end{aligned}$$

Tais expressões estão relacionadas com a probabilidade de ter uma transição entre quaisquer dois elementos do sistema com n quanta. Assim, o átomo ou qualquer modo do campo inicialmente no n -ésimo estado excitado pode fazer uma transição a qualquer outro estado do sistema em um tempo posterior [7, 10].

Referências Bibliográficas

- [1] E.T.Jaynes, Microwave Laboratory Report No. 502, Stanford University, 1958 [63](#)
- [2] E.T.Jaynes and F.W.Cummings, Proc. I.E.E.E. **51**, 89 (1963) [63](#)
- [3] C. Cohen-Tannoudji, S. Haroche, "*Le concept d'atome "habillé" par des photons; Quelques exemples d'application in Polarisation, Matiere et Rayonnement*", p. 191, Livre jubilaire en l'honneur d'Alfred Kastler édité par la Société Française de Physique (Presses Universitaires de France, 1969) [63](#), [64](#), [68](#)
- [4] N. Polonsky 1964 Doctoral thesis Ecole Normale Supérieure, Paris; Polonsky N., Cohen-Tannoudji C., *J. Physique* **26**, 409 (1965). [63](#), [84](#)
- [5] S. Haroche 1964 Doctoral Thesis Ecole Normale Supérieure, Paris; Cohen Tannoudji C., Haroche S., *C.R. Acad. Sci.* **262**, 37 (1966). [63](#), [66](#), [84](#)
- [6] A. P. C. Malbouisson "*Time evolution of confined quantum systems - a non perturbative approach- JHEP Proceedings-Workshop on Integrable theories, solitons and duality* (2002). [64](#)
- [7] N. P. Andion, A. P. C. Malbouisson, A. Mattos Neto, *Jour. Phys A* **34**, 3735-3749 (2001). [64](#), [65](#), [66](#), [78](#)
- [8] G. Flores-Hidalgo, A. P .C . Malbouisson, *Phys. Rev. A* **66**, 042118 (2002). [64](#)
- [9] G. Flores-Hidalgo, A. P .C . Malbouisson, Y. W. Milla, *Phys. Rev A* **65**, 0634144 (2002). [64](#)
- [10] R.Casana, G.Flores-Hidalgo and B.M. Pimentel., *Physica A* **374** (2007) 600-610. [64](#), [66](#), [78](#)
- [11] G. Flores-Hidalgo, Y. W. Milla, *Phys. Rev A* **38**, 7527 (2005). [64](#)
- [12] C. Cohen-Tannoudji, 1994 "*Atoms in Electromagnetic Fields*" (Singapore: World Scientific); C. Cohen-Tannoudji, "*Optical pumping and interactions of atoms with the electromagnetic field*", in "Cargese lectures in physics", Vol.2, ed. by Levy M. (Gordon and Breach, New-York, 1968), p.347. [64](#), [66](#), [84](#)

- [13] A. O. Caldeira and, A. J. Legget, *Physica A* **121**(1983) 587.
- [14] B. B. L. Hu, J. P. Paz, Y.-h. Zhang, *Phys. Rev. D* **45** (1992) 219.
- [15] W. Guo, *Phys. Rev A* **80**, 033828 (2009). E. K. Irish *PRL* **99**, 173601 (2007)
- [16] J. S. Schwinger, *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **45**, 1542-1553(1959), Ibid. , *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **46**, 256-265(1960), Ibid. , *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **46**, 570-579(1960), Ibid. , *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **46**, 883-897(1960), Ibid. , *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **46**, 1401-1415(1960), Ibid. , *Proc. Natl. Acad. of Sci.* **47**, 1075-1083(1961), Schwinger, Julian S. , "*Quantum Kinematics and Dynamics*", (W.A. Benjamin Publishers,1970) [10](#), [14](#), [71](#), [73](#)
- [17] F. A. Berezin, "*The Method of Second Quantization*", (Academic Press, New York – 1966) [74](#)

5

Conclusões e Perspectivas

O princípio de ação quântica de Schwinger oferece uma abordagem geral e diferente da mecânica quântica, permitindo o estudo de fenômenos que acontecem em nível microscópico de uma maneira completa, já que expressa a dinâmica dos operadores e dos estados quânticos da forma mais geral possível envolvendo diretamente as diferentes descrições da mecânica quântica a partir de um único princípio. Assim, desde o seu fundamento na teoria algébrica da medida [1], esse formalismo nasce como quântico, perdendo qualquer referência ao comportamento clássico do sistema não sendo, portanto, um procedimento de quantização. Dessa forma, as relações fundamentais como a não comutação entre variáveis canônicas são decorrência da exigência da independência cinemática das variáveis dinâmicas [1, 2]. Esta independência cinemática restringe o tratamento mostrado aqui para sistemas que não apresentam vínculos, porém a abordagem de teorias como a eletrodinâmica quântica é possível, como é mostrado em [3].

As características dadas aos processos de medida e as formas em que foram tomadas as respostas e as variações dos observáveis que descrevem o sistema, estão associadas a uma dinâmica descrita através de equações diferenciais de primeira ordem, mostrando a ligação com a formulação hamiltoniana de forma direta. Originalmente, a proposta da inclusão da lagrangiana para o estudo da dinâmica no nível quântico foi feita por Dirac [4], argumentando entre outras coisas que a sua invariância relativística; fazendo da formulação lagrangiana uma versão mais geral possível para diferentes propósitos. Podemos ver que a forma final do Princípio de Ação se respalda esta ideia, mas Schwinger usa a forma mais conveniente da lagrangiana na sua forma canônica, *i.e.* em função do momento e da posição, evitando que as equações para os observáveis sejam de segunda ordem no tempo. Este princípio é particularmente rico em analogias com a mecânica Clássica, já que o gerador $\hat{G}$ que é obtido a partir da variação da ação, está relacionado

com todas as transformações infinitesimais admissíveis que podem ser feitas sobre as variáveis dinâmicas do sistema e as quais estão relacionadas com transformações unitárias que preservam tanto a estrutura como as características do sistema estudado. Também vimos que entre essas transformações unitárias temos: evolução temporal, transformações canônicas da mesma forma que as quantidades conservadas, em uma maneira análoga ao teorema de Noether.

Como é sabido, a caracterização de um sistema quântico só é completa se os estados associados aos observáveis que o caracterizam, os seus valores próprios e/ou o operador de evolução temporal são conhecidos; isso, equivale; a que equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\Psi\rangle, \quad (5.1)$$

seja solucionada exatamente. No entanto, existem sistemas para os quais não se tem a possibilidade de construir uma caracterização desse tipo. Um exemplo desse tipo de sistemas, é aquele para o qual há uma dependência explícita do tempo, já que na maioria dos casos a dependência temporal do hamiltoniano $\hat{H}(t)$ não permite que a existência de estados estacionários e, conseqüentemente, um espectro para a energia possam ser considerados.

Nesses casos, o princípio de ação quântica de Schwinger permite construir a função de transformação, isso sempre que seja possível conseguir a integral de ação no nível quântico. Além disso, foi mostrado que tomando só as equações fornecidas na caracterização generalizada de um sistema quântico; como foram as equações de Schrödinger e o fato de identificar a evolução temporal com uma transformação unitária, conseguimos mostrar que podemos estudar a evolução temporal de qualquer sistema quântico isso dado que esse Princípio fornece a possibilidade de derivar a equação diferencial para o operador de evolução temporal

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}. \quad (5.2)$$

Assim, as funções de transformação para os exemplos propostos como foram os osciladores harmônicos paramétricos com frequência e/ou forçamento dependentes do tempo, foram derivadas supondo o conhecimento das soluções generalizadas do problema Clássico. Para isso, foi aproveitado o fato de que as equações de movimento para os sistemas mencionados acima são lineares. Dessa forma, não tivemos nenhuma dificuldade em compor as formas quânticas dos operadores de posição e momento conseguindo a integral de ação.

Também conseguimos mostrar que é possível, a partir do Princípio de Ação Quântica, conhecer os outros aspectos do sistema como o são: espectro e funções próprias. Isso, sabendo que o operador $\hat{G}$, depende de forma explícita dos operadores de posição e de momento. Assim, dado que este gera todas as transformações infinitesimais generalizadas sob as quais a ação permanece invariante, conseguimos em uma completa analogia com o Teorema de Noether, o conjunto de operadores que representam as transformações que fazem com que as variações da ação sejam nulas ou estacionárias, isto é

$$\delta \hat{S}_{t,t_0} = 0.$$

Esses operadores estão relacionados com as quantidades conservadas do sistema, são os geradores das simetrias associados à transformação que representam, por exemplo, o momento angular para rotações ou a energia para a evolução temporal, etc. Dessa forma, através da relação

$$\delta\langle q, t|q_0, t_0\rangle = i\langle q, t|\hat{A} - \hat{A}_0|q_0, t_0\rangle = 0, \quad (5.3)$$

encontramos que os operadores $\hat{A}$ que representam as simetrias do sistema.

Como foi visto no primeiro capítulo, o operador $\hat{G}$ é o responsável pelas transformações infinitesimais dos operadores no sistema, portanto é lógico pensar que os operadores $\hat{A}$ também são geradores das transformações infinitesimais unitárias. Dessa forma, podemos ver que a nossa definição de quantidade conservada e simetria em nível quântico está diretamente relacionada ao teorema de Wigner [5], já que toda quantidade conservada obtida do princípio de ação quântica através desse procedimento é de fato o gerador de uma transformação infinitesimal unitária.

Com a análise proposta para encontrar as simetrias de sistemas quânticos, conseguimos encontrar um conjunto de operadores com os quais, dependendo o caso, foi possível construir uma álgebra que permitiu complementar a caracterização de cada sistema tratado. O primeiro exemplo, dado pelo oscilador harmônico com frequência constante, no qual obtivemos os operadores de criação e aniquilação e o hamiltoniano do sistema. Com os quais, além de obter o espectro de energia conseguimos construir os estados próprios e as funções de onda. Da mesma forma, para os sistemas dependentes explicitamente do tempo, embora o hamiltoniano não seja uma constante de movimento, conseguimos construir um operador hermitiano associado. Assim, de modo similar ao oscilador com frequência constante, o referido operador apresenta um espectro e um conjunto de funções próprias com os quais se pode construir de maneira exata os estados de posição de momento acessíveis ao sistema.

Um dos fatos importantes, desta abordagem é o fato de conseguir derivar a partir de um mesmo princípio os resultados associados a outros métodos para o tratamento analítico de sistemas que apresentam um hamiltoniano dependente do tempo, como é o caso do tratamento de sistemas quânticos não estacionários como os de Dodonov, Man'ko, Malkin e Trifonov [6, 7, 8, 9, 10] e as abordagens operatoriais de Lewis e Riesenfeld [11].

Vale a pena mostrar que as integrais de movimento, derivadas nesta tese pelo princípio de ação quântica, para o oscilador harmônico com frequência dependente de tempo, podem ser derivadas diretamente através das equações de movimento dos sistemas [12]. Isso, sem a necessidade de recorrer a nenhuma estrutura adicional para a análise do sistema, como uma estrutura lagrangiana ou hamiltoniana; obtendo assim, de primeiros princípios uma nova abordagem para o tratamento deste tipo de problema. Além disso, temos preparado para submeter a publicação um estudo mais completo de sistemas paramétricos nos que se envolvem sistemas como o oscilador harmônico forçado e com frequência dependentes do tempo [13].

Também, temos preparado para submeter para publicação um trabalho em que estudamos em uma maior extensão as expressões aqui derivadas nas quais obtivemos uma versão do Teorema de Noether em nível quântico a partir do princípio de ação quântica de Schwinger. Neste trabalho, temos estudado de maneira generalizada as

estruturas de diferentes teorias em uma dimensão e tratamos alguns tópicos referentes a esse estudo em várias dimensões; isso visando futuramente expandir este estudo à teoria de campos [14].

No caso dos sistemas interagentes como os tratados no último capítulo, mostramos que é possível definir sem ambiguidade uma transformação em que as analogias com um sistema clássico de osciladores pode ser considerada. Aquí, o sistema como um todo pode ser considerado devido à sua estrutura, como um conjunto de osciladores no qual cada um apresenta uma constante de acoplamento diferente. Com o tratamento proposto, pode-se definir os modos normais e os estados vestidos, como os estados que apresenta o conjunto completo de osciladores e como os estados que cada oscilador apresentará em presença da interação. Dessa forma, ao estudar os estados ao nível quântico podemos ver que existe uma maneira de expressar os estados de um dos osciladores ainda em interação em função dos modos normais do sistema.

Da mesma forma, vimos que foram introduzidos os *operadores de estados vestidos*, que são, em algum sentido, uma generalização dos estados vestidos propostos em [4, 5, 12]. Para o nosso caso, a seleção de produtos de estados do oscilador-campo não é feita *a priori*, é a mesma estrutura dos DSO que faz a seleção dos estados verdadeiros em que os elementos do sistema podem ser encontrados, deixando que o verdadeiro estado de uma componente do sistema possa ser expresso como uma combinação linear dos modos normais do sistema.

É importante ver que os DSO são uma combinação linear de estados que apresenta cada um dos elementos do sistema quando a interação esta presente. Essa característica pode ser vista nos parâmetros do sistema já que dependem da frequência que é redefinida como

$$\omega \rightarrow \Omega(\omega_0, \{\omega_j\}, \{c_k\}; j, k \in \{1, 2, \dots, N\}).$$

Também, é mostrado que a transformação $\mathbf{T}$ aplicada sobre o sistema preserva a estrutura canônica da teoria. Assim, as funções de transformação na representação de modos normais e estados vestidos possuem a mesma informação. Também pode ser visto que a função de transformação na representação de estados vestidos, é de uma grande utilidade, dado que ela permite conhecer a função de transformação entre os estados e cada um dos elementos do sistema, essa informação é de utilidade para encontrar todas as características da evolução temporal do sistema. Também, a forma algébrica em que é abordado o problema, permite uma manipulação que se torna simples quando da implementação de cálculos, deixando o uso de teoria de series e álgebra linear.

Temos escrito um trabalho, [15], fazendo uma proposição mais formal dos sistemas de estados vestidos e de modos normais, procurando estabelecer uma teoria generalizada para o sistema tratado nesta tese, temos por objeto posteriormente levar esse sistema à consideração de infinitos modos normais e a fazer aplicações em sistemas abertos e no uso do princípio de ação quântica para trajetórias temporalmente fechadas para fazer tratamentos térmicos de maneira mais conveniente.

Referências Bibliográficas

- [1] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 33, n. 3, 3306 (2011). [81](#)
- [2] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Revista Brasileira de Ensino de Física*. (Aceito para publicação-2013) [9](#), [81](#)
- [3] J. S. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951).; Ibid, *Phys. Rev.* **91**, 713 (1953).; Ibid, *Phys. Rev.* **91**, 728 (1953); Ibid, *Phys. Rev.* **92**, 1283 (1953).; Ibid, *Phys. Rev.* **93**, 615 (1954); Ibid, *Phys. Rev.* **94**, 1362 (1954). [81](#)
- [4] P.A.M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, Band 3, Heft 1 (1933), pp. 64-72. Uma versão traduzida do artigo pode ser encontrada em, *Selected Papers on Electrodynamics*, editada por Julian S. Schwinger (Dover Publications, Inc. - 1958), pp. 312. [25](#), [26](#), [81](#)
- [5] V. Bargmann, *Jour. Math. Phy.* **5**, no. 7, Jul 1964.; E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Atomic Spectra* (Academic Press, Expanded and Improved Edition, 1959) p.p. 233-236. [83](#)
- [6] V. I. Man'ko. "*Introduction to Quantum Optics*", arXiv:quant-ph/9509018v1 29 Sep 1995. [38](#), [41](#), [59](#), [83](#)
- [7] V. V. Dodonov, I. A. Malkin, and V. I. Man'ko, *Int. Jour. Phys*, **14**, 37 (1975); [41](#), [83](#)
- [8] V.I.Man'ko, "*Quantum invariants and state system generating algebra*"; (Group Theoretical Methods in Physics: Proceedings of the Third Yurmala Seminar, Yurmala, Ussr, 22-24 May 1985, Vol 1 - VNU Science Press - Utrech - The Netherlands - 1986) [48](#), [54](#), [59](#), [83](#)
- [9] V.V. Dodonov and I. V. Man'ko, "*Invariants and evolution of nonstationary systems*", (Nova Science Publ. Commack NY - 1989) [48](#), [54](#), [83](#)
- [10] V.V. Dodonov and I. V. Man'ko, "*Quantum Nonstationary Oscillator: Models and Applications*", *Journal of Russian Laser Research* **16**, 1 (1995). [48](#), [54](#), [83](#)

- [11] H. R. Lewis, Jr. , *Phys. Rev. Lett.* **18**, (1967) 510; H. R. Lewis, Jr. , *Jour. Math. Phys.* **9**, (1968) 1976; H. R. Lewis, Jr. and W. B. Riessenfeld , *Jour. Math. Phys.* **10**, (1969) 1458. [83](#)
- [12] M. Bertin, B.M.Pimentel and J.A. Ramirez, *J. Math. Phys.* **53**, 042104 (2012); <http://dx.doi.org/10.1063/1.3702824>. [38](#), [83](#)
- [13] M. Bertin, B.M.Pimentel and J.A. Ramirez, "*The polynomial dynamical invariants for the harmonic osillator with time-dependent frequency and force - via equations of motion*" *Jour. Math. Phys* (a ser submetido). [83](#)
- [14] M. Bertin, B.M.Pimentel and J.A. Ramirez, "*Quantum Noether Theorem a Schwinger's Action Principle Derivation*", *Jour. Math. Phys* (a ser submetido). [84](#)
- [15] C.A.M. de Melo , B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, "*Radiation Processes via Dressed and Normal States Operators Picture in a Schwinger's Variational Principle Approach*", *Physica A*(a ser submetido). [84](#)



Apêndice:

Seja $\hat{I}$ um invariante hermitiano associado ao Hamiltoniano $\hat{H}$. Suponhamos que o invariante satisfaça a seguinte equação de valores próprios

$$\hat{I}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad (\text{A.1})$$

na qual temos que os estados $\{|\lambda\rangle\}_{\lambda \in \mathbb{N}}$ formam uma base ortonormal, $\langle \bar{\lambda} | \lambda \rangle = \delta_{\bar{\lambda}, \lambda}$. Além disso, dado que o invariante $\hat{I}$ satisfaz $\frac{d\hat{I}}{dt} = 0$, a seguinte relação é satisfeita

$$\frac{\partial \hat{I}}{\partial t} = i [\hat{I}, \hat{H}]. \quad (\text{A.2})$$

Assim, se o estado $|\varphi\rangle$ é uma solução da equação de Schrödinger, podemos provar também que $|\bar{\varphi}\rangle = \hat{I}|\varphi\rangle$ é uma solução.

Para demonstrar isso, podemos tomar a derivada parcial do estado

$$\frac{\partial |\bar{\varphi}\rangle}{\partial t} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} |\varphi\rangle + \hat{I} \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t},$$

na qual, usando (A.2) e sabendo que $|\varphi\rangle$ satisfaz

$$\frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} = -i\hat{H}|\varphi\rangle, \quad (\text{A.3})$$

encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\bar{\varphi}\rangle}{\partial t} &= i [\hat{I}, \hat{H}] |\varphi\rangle + \hat{I} \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} \\ &= i (\hat{I}\hat{H} - \hat{H}\hat{I}) |\varphi\rangle + \hat{I} \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} \\ &= i\hat{I} \left(\hat{H}|\varphi\rangle - i\frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} \right) - i\hat{H}\hat{I}|\varphi\rangle, \end{aligned}$$

o que finalmente mostra que

$$\frac{\partial |\bar{\varphi}\rangle}{\partial t} = -i\hat{H}|\bar{\varphi}\rangle,$$

também satisfaz a equação (A.3).

Além disso, se tomarmos a derivada parcial da equação (A.1)

$$\frac{\partial \hat{I}}{\partial t}|\lambda\rangle + \hat{I}\frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial t}|\lambda\rangle + \lambda\frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t},$$

e usando (A.2), obtemos

$$i\left[\hat{I}, \hat{H}\right]|\lambda\rangle + \hat{I}\frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial t}|\lambda\rangle + \lambda\frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t},$$

e, dessa forma, calculando o elemento matricial da equação anterior com $\langle \bar{\lambda} |$, obtemos

$$i(\bar{\lambda} - \lambda)\langle \bar{\lambda} | \hat{H} | \lambda \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta_{\bar{\lambda}, \lambda} - (\bar{\lambda} - \lambda)\langle \bar{\lambda} | \frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t}.$$

Assim, se $\lambda = \bar{\lambda}$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0,$$

igualmente, se $\lambda \neq \bar{\lambda}$, obtemos

$$i(\bar{\lambda} - \lambda)\left(\langle \bar{\lambda} | \hat{H} | \lambda \rangle + \langle \bar{\lambda} | \frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t}\right) = 0,$$

o que diz que o estado $|\lambda\rangle$ é uma solução da equação de Schrödinger a menos duma fase, que pode ser assumida como dependente do valor λ , obtendo então

$$|\underline{\lambda}\rangle = e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle.$$

Substituindo a forma deste estado na equação de Schrödinger, temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle}{\partial t} &= -i\hat{H}e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle \\ &= \frac{\partial i\phi_\lambda}{\partial t}e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle + e^{i\phi_\lambda}\frac{\partial |\lambda\rangle}{\partial t}, \end{aligned}$$

assim, novamente calculando o valor esperado com o elemento $|\bar{\lambda}\rangle = e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle$, temos

$$\phi_\lambda = \int_{t_0}^t \langle \bar{\lambda} | i \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{H}(\tau) | \lambda \rangle d\tau.$$

Consequentemente, dado que os estados próprios de $\hat{I}$ formam uma base completa, temos que qualquer solução da equação de Schrödinger deve poder se expressar da seguinte forma

$$|\varphi\rangle = \sum_{\lambda} e^{i\phi_\lambda}|\lambda\rangle.$$

