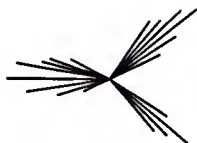


UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JULIO DE MESQUITA FILHO"  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

ALMEIRA DEL CARMEN SAMPSON SANDIA

PRINCÍPIO VARIACIONAL DE SCHWINGER EM ESPAÇOS CURVOS

São Paulo  
2009



**IFT**

Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual Paulista

---

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.012/09

## **Princípio Variacional de Schwinger em Espaços Curvos**

Almeira del Carmen Sampson Sandia

Orientador

*Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar*

Co-Orientador

*Prof. Dr. Cássius Anderson Miquele de Melo*

Setembro de 2009



*"I am among those who think that science has great beauty.*

*A scientist in his laboratory is not only a technician:*

*he is also a child placed before natural phenomena*

*which impress him like a fairy tale."*

Marie Curie.

## **Agradecimentos**

Gostaria de expressar meus mais sinceros agradecimentos ao Prof. Pimentel pela orientação, formação e ensino mais além da física.

Ao Prof. Cássius A. Miquele de Melo pela ajuda brindada durante este trabalho.

A CAPES e CNPq pelo financiamento nestes anos de estudo.

## Resumo

Realizamos um estudo da Mecânica Quântica em espaços curvos via Formulação Variacional de Schwinger. Primeiramente, introduzimos a Álgebra de Medida seguida da descrição do Princípio Variacional de Schwinger. Considerando espaços curvos encontramos uma generalização do momento na representação de coordenada sendo este uma derivada covariante. Consistente com o Princípio Variacional propomos um Hamiltoniano invariante sob transformações de coordenadas. Além disso, analisamos o caso mais simples em espaços curvos considerando uma partícula livre sobre um círculo.

**Palavras Chaves:** Princípio Variacional de Schwinger; Espaços Curvos.

**Áreas do conhecimento:** Mecânica Quântica; Mecânica Quântica em Espaços Curvos.

## **Abstract**

We study Quantum Mechanics on curved space by Schwinger's Variational approach. First, the Measurement Algebra is introduced followed by the Schwinger's Variational Principle. Taking into account the curved space, we find a generalization of the momentum in the coordinate representation which is considered a covariant derivate. Consistent with the Variational Principle we managed to suggest an invariant Hamiltonian under coordinate transformations. Furthermore, the simplest example on curved space is take into account: the free particle on a circle.

**Keywords:** Schwinger's Variational Principle; Curved Space.

**Knowledge Areas:** Quantum Mechanics; Quantum Mechanics in Curved Space.

---

# Sumário

---

|                                                                                       |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Introdução</b>                                                                     | <b>1</b>  |
| <b>1 Álgebra dos Símbolos de Medida</b>                                               | <b>4</b>  |
| 1.1 Símbolos de Medida . . . . .                                                      | 6         |
| 1.2 Propriedades Compatíveis . . . . .                                                | 7         |
| 1.3 Medidas que trocam o estado e propriedades não compatíveis . . . . .              | 8         |
| 1.4 Função de Transformação . . . . .                                                 | 9         |
| 1.5 O Traço . . . . .                                                                 | 11        |
| 1.6 Interpretação Estatística . . . . .                                               | 12        |
| 1.7 O Adjunto . . . . .                                                               | 14        |
| 1.8 Medidas Não Seletivas . . . . .                                                   | 15        |
| 1.9 Valor Esperado e Observáveis . . . . .                                            | 17        |
| 1.10 Matrizes . . . . .                                                               | 17        |
| <b>2 Princípio Variacional</b>                                                        | <b>20</b> |
| 2.1 Operadores Unitários . . . . .                                                    | 20        |
| 2.2 Transformações Unitárias Infinitesimais . . . . .                                 | 21        |
| 2.3 Variação da Função de Transformação . . . . .                                     | 22        |
| 2.4 Princípio da Ação Estacionária . . . . .                                          | 24        |
| 2.5 Relações de Comutação e Equações de Movimento . . . . .                           | 27        |
| 2.5.1 Equações de Movimento . . . . .                                                 | 29        |
| 2.6 Aplicações . . . . .                                                              | 31        |
| 2.6.1 Partícula Livre . . . . .                                                       | 31        |
| 2.6.2 Oscilador Harmônico Livre . . . . .                                             | 33        |
| <b>3 Variedades Riemannianas</b>                                                      | <b>39</b> |
| 3.1 Representação de Coordenadas e Invariância das<br>Relações de Comutação . . . . . | 39        |
| 3.2 Operador Momento em Variedades Riemannianas . . . . .                             | 42        |
| 3.3 Deslocamento Paralelo . . . . .                                                   | 43        |
| 3.4 Transformação de Coordenadas . . . . .                                            | 44        |
| 3.5 Hamiltoniano Quântico para uma Partícula Livre . . . . .                          | 46        |

|          |                                                         |           |
|----------|---------------------------------------------------------|-----------|
| 3.6      | Operador Principal de Hamilton . . . . .                | 47        |
| 3.6.1    | Equação Operacional de Hamilton-Jacobi . . . . .        | 47        |
| 3.7      | Aplicação: Partícula Livre sobre um círculo . . . . .   | 48        |
|          | <b>Conclusão</b>                                        | <b>54</b> |
| <b>A</b> | <b>Transformação de Coordenadas para o hamiltoniano</b> | <b>56</b> |
|          | <b>Bibliografia</b>                                     | <b>59</b> |



---

# Introdução

---

O formalismo de Schwinger fornece uma abordagem à Mecânica Quântica simples e teoricamente atrativa. Partindo de fundamentos básicos constrói-se toda a teoria quântica sem a necessidade de um processo de quantização. Semelhante a Dirac [1], Schwinger faz uma formulação quântica completamente independente da representação. Estes fatores fornecem uma vantagem para a extensão do formalismo de Schwinger a múltiplas aplicações; como se mostra nos trabalhos [2, 3]. Seguindo este pensamento, surge a motivação de se estudar um dos problemas mais antigos e controversos da Mecânica Quântica: a quantização de sistemas não-relativistas em espaços curvos

Dirac em 1932 [4] apresentou pela primeira vez uma tentativa de uma formulação Lagrangiana da Mecânica Quântica, trabalho que incentivou a formulação do Princípio de Ação de Feynman [5], e Princípio Variacional de Schwinger [6, 7]. Porém o desenvolvimento teórico de Schwinger inspirou-se também nos resultados experimentais; especialmente no experimento do Desvio Lamb, e nos experimentos de Nafe-Nelson-Rabi e Kush-Foley do momento anômalo do elétron. Buscando um formalismo fundamental para a Mecânica Quântica, Schwinger procurou o análogo quântico do Princípio de Hamilton: um Princípio variacional quântico fundamental [8].

As principais características do mundo microscópico são o aspecto de atomicidade e a natureza estatística dos eventos. Para descrever este comportamento matematicamente, Schwinger desenvolve a álgebra de medida com elementos completamente quânticos [9]. Por exemplo, se considerarmos o experimento de Stern-Gerlach e tentarmos descrever os distintos comportamentos do spin através de operações matemáticas, conseguiremos desenvolver toda uma álgebra descritiva baseada nas distintas medidas e resultados possíveis dependentes dos estados iniciais do sistema. Caracterizamos o processo de medição com os símbolos de medida. Esta álgebra apresenta elemento nulo e identidade para a soma e a multiplicação, sendo completa; o objeto principal da álgebra é a função de transformação que relaciona quaisquer dois estados, e carrega toda a informação estatística do sistema.

Coerente com a Álgebra de Medida, pode-se formular o Princípio Variacional para Mecânica Quântica. Este Princípio Variacional considera variações gerais da função de transformação que serão originadas pela ação dos geradores das variações sobre os estados inicial e final do sistema. As transformações unitárias infinitesimais

na Mecânica Quântica são um análogo das transformações canônicas na Mecânica Clássica, considerado um elemento principal na formulação variacional de Schwinger [10]. Ao mesmo tempo pode-se relacionar as variações da função de transformação com a variação de um operador hermitiano entre os estados, propondo ser este o operador “ação quântico”. Portanto, enuncia-se o Princípio de Ação Estacionária no qual *“a variação do operador ação que relaciona dois estados quaisquer é proporcional à diferença dos geradores das variações avaliados nos extremos”*

Uma vantagem dessa formulação é que a partir de um princípio de ação pode-se extrair tanto as equações fundamentais da dinâmica do sistema quanto às relações de comutação (anti-comutação) entre os operadores. Assim, se constrói uma teoria quântica sem a necessidade de um processo de quantização, ou seja, todos os elementos com que se constrói o formalismo têm origem quântico. Ressaltamos o fato de não se ter uma escolha de representação particular no momento de fazer as variações, sendo a formulação completamente geral.

Aqui abordamos a Mecânica Quântica em espaços curvos fazendo uso do Princípio do Schwinger. Observamos que as relações de comutação e as equações de movimento se conservam da mesma forma que o Princípio Variacional. Esta generalização do formalismo do Schwinger para espaços curvos teve como primeira tentativa o trabalho de DeWitt de 1957 [11], que ressaltou a importância das transformações unitárias na formulação ao estudar como os objetos da teoria mudam sob as distintas transformações unitárias quando consideramos que se está em um espaço curvo. Logo, em 1973 Kamo e Kawai, inspirados no artigo de DeWitt, estudam o problema da escolha de um hamiltoniano quântico dada a ambigüidade no ordenamento das quantidades canônicas no Hamiltonian. Nestes trabalhos Kawai *et. al.* propõem que o Hamiltoniano seja invariante sob certo grupo de transformações; transformações gerais de coordenadas, condição que restringe a escolha do Hamiltoniano [12, 13].

O presente trabalho está organizado em três partes principais: no Capítulo I desenvolvemos toda a cinemática da teoria; fazemos uma introdução simples à Álgebra de Medida com o experimento de Stern-Gerlach, usado para descrever os processos de medida e definir os objetos matemáticos básicos da álgebra e os símbolos de medida. Conseqüentemente, construímos toda a Álgebra de Medida baseada nos símbolos de medida e as funções de transformação.

No Capítulo II, em função das transformações unitárias infinitesimais, formulamos o Princípio Variacional, do qual se depreendem tanto as relações de comutação quanto as equações dinâmicas da teoria. Resolvemos dois exemplos ilustrativos do formalismo: a partícula livre e o oscilador harmônico livre.

Estendendo as idéias expostas nos Capítulos I e II, no Capítulo III fazemos uma generalização do formalismo de Schwinger a espaços curvos cujo objetivo principal de nossa abordagem é manter tanto as relações de comutação inalteradas quanto o Princípio Variacional e como consequência desta exigência o operador momento no espaço de coordenadas torna-se uma derivada *covariante* dependendo da geometria

do espaço. Além disso, vemos como os objetos da teoria transformam-se sob mudança de coordenadas, e assim em consistência com o formalismo propusemos um Hamiltoniano covariante resolvendo o problema da ambigüidade na escolha do Hamiltoniano. Para encerrar este capítulo, analisamos o comportamento da partícula livre sobre o círculo, este exemplo não apresenta grande dificuldade, encontramos a função de transformação e o espectro de energia.

Por último fazemos um resumo das idéias expostas no trabalho e expomos nossas conclusões sobre a formulação do Princípio Variacional em espaços curvos, além de apresentarmos futuras aplicações.

# Capítulo 1

---

## Álgebra dos Símbolos de Medida

---

A formulação variacional da Mecânica Quântica por Schwinger resulta do estudo dos fenômenos que em meados do século XX deram base à Eletrodinâmica Quântica, tanto o experimento do Desvio de Lamb do espectro de energia no átomo de Hidrogênio, quanto os experimentos de Nafe-Nelson-Rabi e Kusch-Foley do momento magnético anômalo do elétron. Schwinger centrou-se nestes experimentos e assim desenvolveu todo um formalismo e um ponto de vista para a descrição dos mesmos [14].

Para fazer uma introdução ilustrativa à Álgebra de Medida consideremos o experimento de Otto Stern e Walther Gerlach [15], sobre a deflexão de átomos, exibindo estes um comportamento intrinsecamente quântico. O experimento consiste em um forno do qual um feixe orientado de átomos de prata é ejetado. Este feixe passa através de um campo magnético constante na direção perpendicular ao feixe, sendo então dividido em dois: um na direção paralela ao campo magnético e outro na direção anti-paralela.

O momento magnético do átomo vem a ser proporcional ao spin do elétron e, desta maneira, o spin só pode assumir dois valores:  $S_z+$  e  $S_z-$  (supondo que o campo magnético é aplicado na direção  $\hat{z}$ ). Podemos ter uma outra montagem no qual o campo é aplicado na direção  $\hat{x}$  e o feixe vindo da direção  $\hat{y}$  e, desta maneira obteríamos as polarizações  $S_x+$  e  $S_x-$ .

Introduzimos então uma sequência de medidas, ou seja, fazemos com que o feixe atravesse vários aparelhos tipo Stern-Gerlach. Primeiro consideraremos o caso mais simples, como o mostrado na Figura 1.1. O feixe que sai do forno entra em um aparelho SG $\hat{z}$ , e dele saem dois feixes com atributos  $S_z+$  e  $S_z-$ . Bloqueamos então o feixe  $S_z-$  e voltamos a passar o feixe restante,  $S_z+$ , no aparelho SG $\hat{z}$ . Dele sai apenas um feixe, com orientação  $S_z+$ , o que confirma o fato de que todos os átomos deste feixe estão orientados segundo  $S_z+$ .

Fizemos uma medida seletiva da propriedade  $S_z$ , o que entendemos como a seleção do atributo  $S_z+$ , seguida de sua confirmação.

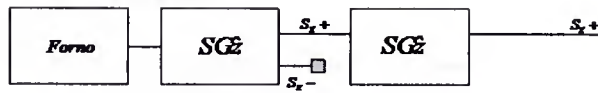


Figura 1.1:

O arranjo da Figura 1.2 nos mostra um feixe que sai do forno e entra em um aparelho  $SG\hat{z}$ , de onde saem dois feixes com orientações  $S_z+$  e  $S_z-$ . Bloqueamos o feixe  $S_z-$  e medimos a propriedade  $SG\hat{x}$  do outro feixe. O feixe que sai do aparelho tem então orientações de valor  $S_x+$  e  $S_x-$ , da propriedade  $S_x$ .

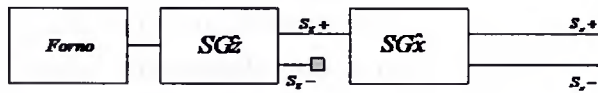


Figura 1.2:

Aqui vemos como podemos ter uma medida que muda o estado de sistema, passando da caracterização dada por  $S_z$  para aquela dada pela propriedade  $S_x$ .

Agora consideremos a Figura 1.3. O feixe sai do forno, entra em um aparelho  $SG\hat{z}$ , e dele saem dois feixes com orientações  $S_z+$  e  $S_z-$ . Em seguida, bloqueamos o feixe  $S_z-$  e voltamos a medir  $SG\hat{x}$  do feixe restante. Na saída do aparelho teremos feixes de valor  $S_x+$  e  $S_x-$  da propriedade  $S_x$ . Bloqueamos então o feixe  $S_x-$  e deixamos o feixe  $S_x+$  passar por mais um aparelho  $SG\hat{z}$ , e ao final teremos novamente dois feixes: um com orientação  $S_z+$  e outro com orientação  $S_z-$ , da propriedade  $S_z$ .

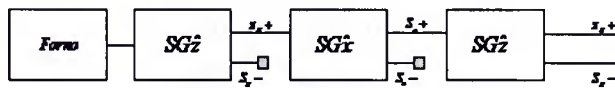


Figura 1.3:

Este experimento nos mostra que a medida da propriedade  $S_x$  destrói completamente qualquer informação obtida previamente ao medir  $S_z$ , estabelecendo uma relação estatística entre estas medidas consecutivas.



## 1.1 Símbolos de Medida

Consideremos um sistema físico idealizado no qual podemos medir qualquer quantidade física, por exemplo a propriedade  $A$ , que assume um número finito de valores  $a', a'', \dots, a^n$ . Se fizermos uma medida simples na qual o aparelho de medida seleciona os diferentes valores das quantidades físicas específicas, associamos a este processo um objeto matemático chamado *Símbolo de Medida*[9], representado por

$$\hat{M}_{a'}. \quad (1.1)$$

Este símbolo é lido como a medida seletiva\* que aceita sistemas com valor  $a'$  do observável  $A$  e rejeita todos os demais. Além disso, podemos ter dois atos de medição simples: um no qual o sistema mantém-se invariante, isto é, o resultado da medida são todos os valores possíveis, representado por  $\hat{1}$ , e outro no qual a medida não escolhe nenhum valor, dando resultado nulo, que é representado por  $\hat{0}$ .

Para criar uma álgebra de medida precisamos definir as diferentes operações matemáticas. Começamos definindo a multiplicação de Símbolos de Medida como a representação de atos sucessivos de medida a tempos diferentes. Se fizermos sucessivas medições do observável  $A$ , tendo resultado  $a'$ , obtemos a multiplicação dos símbolos de medida,

$$\hat{M}_{a'}\hat{M}_{a'} = \hat{M}_{a'}, \quad (1.2)$$

representando a confirmação da medida. Se realizarmos medidas sucessivas com resultados distintos, obtemos

$$\hat{M}_{a'}\hat{M}_{a''} = \hat{0}, \quad (1.3)$$

representando a incompatibilidade entre as medidas. Com base nisto definimos o elemento nulo e a unidade sob a multiplicação dos símbolos de medida da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \hat{1}\hat{M}_{a'} &= \hat{M}_{a'}\hat{1} = \hat{M}_{a'}, \\ \hat{1}\hat{1} &= \hat{1}, \\ \hat{1}\hat{0} &= \hat{0}\hat{1} = \hat{0}, \\ \hat{0}\hat{0} &= \hat{0}, \\ \hat{0}\hat{M}_{a'} &= \hat{M}_{a'}\hat{0} = \hat{0}. \end{aligned}$$

Contudo, pode existir o caso no qual ao medirmos o observável  $A$  obtemos dois valores possíveis  $a'$  ou  $a''$ . Esta medida é definida como a soma das medidas com resultado  $a'$  e  $a''$  respectivamente, isto é,

$$\hat{M}_{a'} + \hat{M}_{a''},$$

---

\*Com medida seletiva nos referimos aqui àquela que envolve um ato de medida seguido de sua verificação

para generalizar isto, consideremos uma medida que possa dar como resultado qualquer dos valores possíveis do observável  $A$ , tal que,

$$\hat{M}_{a'} + \hat{M}_{a''} + \dots + \hat{M}_{a^n} = \sum_a \hat{M}_a.$$

Entretanto, já que a medida que tem como resultado todos os valores possíveis do observável  $A$  é representada pelo operador  $\hat{1}$  podemos fazer a identificação

$$\sum_a \hat{M}_a = \hat{1}, \quad (1.4)$$

encontrando assim a relação de completeza para os símbolos de medida, que será de grande importância para desenvolver a álgebra da medida.

O operador  $\hat{0}$  define a identidade aditiva da álgebra como:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{a_1} + \hat{0} &= \hat{0} + \hat{M}_{a_1} = \hat{M}_{a_1}, \\ \hat{1} + \hat{0} &= \hat{0} + \hat{1} = \hat{1}, \\ \hat{0} + \hat{0} &= \hat{0}. \end{aligned}$$

A multiplicação de símbolos de medida tem propriedade distributiva, isto é, a multiplicação da soma é igual à soma das multiplicações, ou seja

$$\hat{M}_{a'} \left( \sum_a \hat{M}_a \right) = \hat{M}_{a'} \hat{M}_{a'} + \hat{M}_{a'} \left( \sum_{a \neq a'} \hat{M}_a \right).$$

Das relações (1.2) e (1.3) temos que

$$\hat{M}_{a'} \left( \sum_a \hat{M}_a \right) = \hat{M}_{a'} + \hat{0} + \hat{0} + \dots = \hat{M}_{a'}.$$

Agora podemos expressar as expressões (1.2) e (1.3) simplesmente como

$$\hat{M}_{a'} \hat{M}_{a''} = \delta(a', a'') \hat{M}_{a'}, \quad (1.5)$$

onde definimos  $\delta(a', a'')$  como o *Símbolo Delta de Kronecker*, com a propriedade

$$\delta(a', a'') \equiv \delta_{a'a''} = \begin{cases} \hat{1}, & \text{se } a' = a''; \\ \hat{0}, & \text{se } a' \neq a''. \end{cases}$$

## 1.2 Propriedades Compatíveis

Duas propriedades  $A_1$  e  $A_2$  são ditas compatíveis se a medida feita em uma delas não destrói o conhecimento ganho anteriormente pela medida da outra. Tomadas as medidas  $\hat{M}_{a'_1}$  e  $\hat{M}_{a'_2}$ , podemos atribuir simultaneamente os valores  $a'_1$  à propriedade

$A_1$  e  $a'_2$  à propriedade  $A_2$ , ou seja, estas medidas comutam. Representamos a medida composta por <sup>†</sup>

$$\hat{M}_{a'_1 a'_2} \equiv \hat{M}_{a'_1} \hat{M}_{a'_2} = \hat{M}_{a'_2} \hat{M}_{a'_1}.$$

Definiremos como um conjunto completo de quantidades físicas compatíveis o conjunto  $\{A_j\}$  cujos elementos são compatíveis entre si a pares e, além disso, não existe outro elemento compatível com todos os elementos do conjunto  $\{A_j\}$ ; desta forma o conjunto é máximo.

O símbolo de medida

$$\hat{M}_{a'} = \prod_j \hat{M}_{a'_j},$$

representa uma medida completa, tal que o sistema possui valores definidos pelo número máximo de atributos compatíveis entre si. Ao realizar uma medida completa, estaremos obtendo o conhecimento ótimo do estado de um sistema determinado. Entretanto, logo após a medida completa  $\hat{M}_{a'}$  o sistema se encontrará no estado  $a'$ .

### 1.3 Medidas que trocam o estado e propriedades não compatíveis

De forma mais geral, define-se um símbolo da forma

$$\hat{M}_{a' a''}, \quad (1.6)$$

o qual representa a medida seletiva do observável  $A$ , em que o sistema é aceito no estado  $a''$  e é deixado no estado  $a'^{\dagger}$ . Podemos observar que o símbolo  $\hat{M}_{a'}$  é um caso especial de (1.6) em que  $a' = a''$ ,

$$\hat{M}_{a'} = \hat{M}_{a' a'}.$$

Toda a álgebra desenvolvida até aqui é igualmente válida para os objetos da forma (1.6). Então, se multiplicarmos dois destes símbolos temos

$$\hat{M}_{a' a''} \hat{M}_{a'' a^{iv}} = \hat{M}_{a' a^{iv}}$$

e

$$\hat{M}_{a' a''} \hat{M}_{a''' a^{iv}} = \hat{0},$$

de onde concluímos que

$$\hat{M}_{a' a''} \hat{M}_{a''' a^{iv}} = \begin{cases} \hat{M}_{a' a^{iv}}, & \text{se } a'' = a''', \\ \hat{0}, & \text{se } a'' \neq a'''. \end{cases}$$

<sup>†</sup>Entende-se por uma medida composta a realização sucessiva de medidas, sejam estas compatíveis ou não.

<sup>‡</sup>Sendo o Símbolo de Medida lido da direita para a esquerda.



Agora podemos construir uma expressão mais simples

$$\hat{M}_{a'a''}\hat{M}_{a'''a^{iv}} = \delta_{a''a'''}\hat{M}_{a'a^{iv}}. \quad (1.7)$$

Note-se que em princípio a multiplicação de Símbolos de Medida da forma (1.6), não é necessariamente comutativa

$$\hat{M}_{a'a''}\hat{M}_{a'''a^{iv}} \neq \hat{M}_{a'''a^{iv}}\hat{M}_{a'a''}.$$

A seguir estudaremos um pouco mais o significado do símbolo de medida da forma (1.6). Até este momento só vimos medidas compostas que resultam em uma nova medida seletiva multiplicada pelo operador  $\hat{1}$  ou  $\hat{0}$ . Consideremos agora uma medida composta mais geral, envolvendo conjuntos completos de propriedades não compatíveis umas com as outras. Sejam os conjuntos de propriedades  $A, B, C, \dots$ , não compatíveis. O símbolo  $\hat{M}_{ab}$  representará a medida seletiva que aceita só os sistemas no estado  $b$  e os deixa no estado  $a$  e, então, podemos simbolizar a medida composta de propriedades não compatíveis como

$$\hat{M}_{ab}\hat{M}_{cd} = \langle b|c \rangle \hat{M}_{ad}, \quad (1.8)$$

onde  $\langle b|c \rangle$  é um número que caracteriza a relação estatística entre os estados  $b$  e  $c$ . Daí, concluímos que no caso especial (1.7) podemos estabelecer a relação

$$\langle a'|a'' \rangle = \delta_{a'a''},$$

onde  $a'$  e  $a''$  são valores definidos da propriedade  $A$ .

## 1.4 Função de Transformação

Consideremos o caso especial das medidas consecutivas<sup>§</sup>,

$$\hat{M}_a\hat{M}_{cd} = \langle a|c \rangle \hat{M}_{ad}$$

e

$$\hat{M}_{ab}\hat{M}_c = \langle b|c \rangle \hat{M}_{ac},$$

e somemos estas expressões sobre  $a$  e  $c$  respectivamente. Lembrando que a adição de todas as possíveis medidas é identicamente igual a  $\hat{1}$ , e fazendo uso das propriedades de multiplicação dos símbolos de medida, encontramos as relações

$$\sum_a \hat{M}_a\hat{M}_{cd} = \hat{M}_{cd} = \sum_a \langle a|c \rangle \hat{M}_{ad}$$

e

$$\sum_c \hat{M}_{ab}\hat{M}_c = \hat{M}_{ab} = \sum_c \langle b|c \rangle \hat{M}_{ac}.$$

---

<sup>§</sup>Será importante respeitar a ordem da multiplicação dos Símbolos de Medida.

Conseguimos assim escrever um Símbolo de Medida como combinação linear de outros símbolos, em termos de coeficientes do tipo  $\langle e|f \rangle$ , os quais nomeamos *Função de Transformação*, já que transformam um símbolo em outro. Logo,  $\langle a|b \rangle$  e  $\langle b|c \rangle$  são as funções de transformação no caso anterior. Desta maneira pode-se estabelecer uma equivalência entre dois conjuntos de propriedades completamente diferentes por meio das funções de transformação. Por exemplo, podemos expressar a medida realizada por  $\hat{M}_{ab}$  em função dos  $\hat{M}_{cd}$  como

$$\begin{aligned}\hat{M}_{ab} &= \sum_c \hat{M}_c \hat{M}_{ab} \sum_d \hat{M}_d, \\ &= \sum_c \hat{M}_c \sum_d \langle b|d \rangle \hat{M}_{ad}, \\ &= \sum_c \sum_d \langle b|d \rangle \langle c|a \rangle \hat{M}_{cd}.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Vejamos as propriedades das funções de transformação com base no que desenvolvemos até aqui. Consideremos a expressão

$$\sum_b \hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_c = \sum_b \langle a|b \rangle \langle b|c \rangle \hat{M}_{ac}.$$

Por outro lado, de (1.4) temos que

$$\sum_b \hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_c = \hat{M}_a \hat{M}_c = \langle a|c \rangle \hat{M}_{ac}.$$

Comparando estas duas equações, achamos uma relação entre as diferentes funções de transformação

$$\langle a|c \rangle = \sum_b \langle a|b \rangle \langle b|c \rangle.\tag{1.10}$$

Um caso especial desta relação é

$$\sum_b \langle a'|b \rangle \langle b|a'' \rangle = \langle a'|a'' \rangle = \delta_{a'a''},$$

e analogamente

$$\sum_a \langle b'|a \rangle \langle a|b'' \rangle = \langle b'|b'' \rangle = \delta_{b'b''},$$

Se tomarmos  $a' = a'' = a$ ,  $b' = b'' = b$  e em ambos casos somarmos tanto em  $a$  e  $b$ , obtemos

$$\sum_a^{N'} \sum_b^N \langle a|b \rangle \langle b|a \rangle = \sum_a^{N'} \hat{1} = N',$$

$$\sum_b^N \sum_a^{N'} \langle b|a \rangle \langle a|b \rangle = \sum_b^N \hat{1} = N.$$

Se  $\langle b|a \rangle \langle a|b \rangle$  comutarem, ou seja,

$$\langle b|a \rangle \langle a|b \rangle = \langle a|b \rangle \langle b|a \rangle,$$

então

$$N = N',$$

o que significaria que  $N$ , o número de estados possíveis do sistema, é independente da escolha de propriedades a serem medidas, representando então a quantidade de graus de liberdade do sistema. Por construção, a quantidade de Símbolos de Medida torna-se  $N^2$ . Conseqüentemente, as combinações lineares de Símbolos de Medida formarão os elementos de uma álgebra linear de dimensionalidade  $N^2$ , chamada *Álgebra de Medida*.

Introduzindo a noção de **Vetor de Estado**, poderemos expressar a álgebra desenvolvida até aqui de uma forma que nos é mais familiar. O Vetor de Estado é aquele vetor que caracteriza o estado do sistema e sobre o qual o Símbolo de Medida atua. Estudando como é essa ação, podemos ver o Símbolo de Medida como o ato de destruição e criação de um estado. Consideremos o símbolo  $\hat{M}_{a'a''}$ , o qual só atua sobre estados caracterizados por  $a''$ <sup>¶</sup> e faz emergir estados caracterizados com  $a'$ . Usando a notação de Dirac o Símbolo de Medida é representado por

$$\hat{M}_{a'a''} = |a'\rangle \langle a''|,$$

onde  $|a'\rangle$  simboliza o ato de criação. Considerando as relações (1.4) e (1.5), análogas às relações de completeza e ortogonalidade do espaço Euclideano, podemos entender o  $|a'\rangle$  como um vetor em um espaço mais geral que o Euclideano e, conseqüentemente,  $\langle a'|$  simboliza o ato de destruição. Portanto, a função de transformação em (1.8) pode ser entendida como o produto interno entre os vetores  $\langle b|$  e  $|c\rangle$ . Os elementos da álgebra da medida são chamados Operadores.

## 1.5 O Traço

O traço é uma operação que só atua sobre os símbolos de medida estabelecendo uma relação entre eles e uma respectiva função de transformação, sendo essa uma correspondência linear entre operadores e números

$$Tr \hat{M}_{ab} = \langle b|a \rangle. \quad (1.11)$$

A relação (1.11) sempre se mantém, e isto pode ser verificado ao expressar o

---

<sup>¶</sup>Aqui estamos considerando que o símbolo de medida atua da direita para a esquerda.

Símbolo de Medida em função de outro símbolo como em (1.9)

$$\begin{aligned}
 Tr \hat{M}_{ab} &= Tr \left( \sum_c \sum_d \langle b|d\rangle \langle c|a\rangle \hat{M}_{cd} \right) \\
 &= \sum_c \sum_d \langle b|d\rangle \langle c|a\rangle Tr \hat{M}_{cd} \\
 &= \sum_c \sum_d \langle b|d\rangle \langle c|a\rangle \langle d|c\rangle \\
 &= \langle b|a\rangle.
 \end{aligned} \tag{1.12}$$

Podemos destacar também as seguintes propriedades do traço:

a. O traço de um símbolos de medida de propriedades compatíveis é igual ao Símbolo Delta de Kronecker, assim

$$Tr \hat{M}_{a'a''} = \delta_{a'a''} \rightarrow Tr \hat{M}_{a'} = 1.$$

b. O traço de um produto de símbolo de medida é o produto dos traços,

$$\begin{aligned}
 Tr (\hat{M}_{ab} \hat{M}_{cd}) &= \langle b|c\rangle Tr \hat{M}_{ad} \\
 &= \langle b|c\rangle \langle d|a\rangle = \langle d|a\rangle \langle b|c\rangle \\
 &= Tr (\hat{M}_{cd}) Tr (\hat{M}_{ab}) = Tr (\hat{M}_{ab}) Tr (\hat{M}_{cd}).
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

sendo o traço independente da ordem da multiplicação e aplicável para quaisquer elementos da álgebra de medida.

## 1.6 Interpretação Estatística

Precisamos definir uma quantidade que carregue a informação física do sistema, portanto independente do observador. Já que as funções de transformação dependem da representação, não podem conter a informação física. Para inferir esta quantidade consideremos a seqüência de medidas  $\hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_a$ , que difere de  $\hat{M}_a$  como consequência do distúrbio causado pela medida do estado intermediário  $B$ . Somente uma fração dos sistemas selecionados pela medida inicial da propriedade  $A$  é transmitida através do aparelho completo

$$\hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_a = \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle \hat{M}_a,$$

onde a mudança da medida  $\hat{M}_a$ , ao ser filtrada por  $\hat{M}_b$  e restituída ao estado  $a$ , é expressa pelo número

$$p(b, a) = \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle. \tag{1.14}$$

A medida intermediária pode ser feita de várias formas:

a. Uma medida intermediária que só seleciona o valor  $b$  da propriedade  $B$

$$\hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_a = \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle \hat{M}_a,$$

$$p(b, a) = \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle,$$

- b.** Uma medida intermediária que pode selecionar dois valores da mesma propriedade  $B$ : ou  $b$  ou  $b'$

$$\hat{M}_a (\hat{M}_b + \hat{M}_{b'}) \hat{M}_a = \hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_a + \hat{M}_a \hat{M}_{b'} \hat{M}_a,$$

$$p(b \vee b', a) = \langle a | (b) \langle b + b' | \langle b' | a \rangle$$

$$p(b \vee b', a) = \langle a | b \rangle \langle b | a \rangle + \langle a | b' \rangle \langle b' | a \rangle$$

$$p(b \vee b', a) = p(b, a) + p(b', a),$$

- c.** Uma medida intermediária que selecione todos os possíveis valores da propriedade  $B$

$$\hat{M}_a \sum_b \hat{M}_b \hat{M}_a = \hat{M}_a \hat{1} \hat{M}_a = \hat{M}_a,$$

$$p(\hat{1}, a) = \langle a | \sum_b (|b\rangle \langle b|) | a \rangle$$

$$= \sum_b \langle a | b \rangle \langle b | a \rangle = \langle a | \hat{1} | a \rangle$$

$$= \sum_b p(b, a) = 1.$$

Desta maneira  $p(b, a)$  é a probabilidade de que uma medida  $\hat{M}_b$  realizada sobre um estado  $a$  dê como resultado  $b$ . Por ser uma probabilidade, interessa-nos que seja um número positivo, tendo assim duas possibilidades:

- a.** Se a função de transformação  $\langle a | b \rangle$  é real e cumpre com a condição  $\langle a | b \rangle = \langle b | a \rangle$ , então a probabilidade é

$$p(b, a) = (\langle a | b \rangle)^2 \geq 0,$$

mais ainda, já que a soma de todas as probabilidades é um, este é um valor máximo de probabilidade

$$0 \leq p(b, a) \leq 1.$$

- b.** Se  $\langle a | b \rangle$  é um número complexo e cumpre com a condição  $\langle b | a \rangle = \langle a | b \rangle^*$ , então

$$p(b, a) = |\langle a | b \rangle|^2 \geq 0.$$

Também encontramos uma relação direta entre a probabilidade e o Traço da multiplicação de Símbolos de Medida, sendo

$$p(a, b) = \text{Tr}(\hat{M}_a \hat{M}_b).$$

## 1.7 O Adjunto

Temos lido a ação dos Símbolos de Medida da direita para a esquerda, porém isso é uma convenção, também poderíamos ler os eventos da esquerda para a direita e a interpretação física não deveria se alterar. Portanto, definimos uma operação matemática que relaciona as duas possíveis convenções. Esta operação é nomeada o *Adjunto*, e é simbolizada por  $\dagger$  (adaga).

O elemento  $\langle b|a \rangle$  na convenção sinistra, tem o mesmo significado que  $\langle a|b \rangle$  na convenção destra, assim a probabilidade  $p(a, b)$  é simétrica, sendo construída a partir do produto  $\langle b|a \rangle \langle a|b \rangle$ , então

$$p(a, b) = p(b, a),$$

por ser independente da convenção escolhida a probabilidade contém o significado físico do sistema.

O Adjunto de um Símbolo de Medida vem definido como

$$\hat{M}_{ab}^\dagger = \hat{M}_{ba},$$

$$\hat{M}_{a'a}^\dagger = \hat{M}_{aa'}.$$

em particular

$$\hat{M}_a^\dagger = \hat{M}_a,$$

definindo assim o símbolo de medida auto-adjunto.

A operação adjunta tem as seguintes propriedades sob a multiplicação de Símbolos de Medida:

$$\begin{aligned} (\hat{M}_{ab}\hat{M}_{cd})^\dagger &= \hat{M}_{cd}^\dagger \hat{M}_{ab}^\dagger \\ &= \hat{M}_{dc} \hat{M}_{ba}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

sendo o adjunto do produto de símbolos igual ao produto dos adjuntos na ordem oposta. Mas ainda, podemos expressar a multiplicação de Símbolos de Medida através das funções de transformação, e assim

$$\begin{aligned} \hat{M}_{ab}\hat{M}_{cd} &= \langle b|c \rangle \hat{M}_{ad} \\ (\hat{M}_{ab}\hat{M}_{cd})^\dagger &= \hat{M}_{dc}\hat{M}_{ba} \\ &= \langle b|c \rangle^* \hat{M}_{da}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

observamos que ao aplicar o Adjunto, os números são substituídos por seus complexos conjugados.

Por outro lado, a aplicação do adjunto dentro da álgebra conjugada é denominada transposição

$$\hat{X}^T = \hat{X}^{*\dagger} = \hat{X}^{\dagger*},$$



cumprindo com as propriedades

$$\begin{aligned}(\hat{X} + \hat{Y})^T &= \hat{X}^T + \hat{Y}^T \\ (\hat{X}\hat{Y})^T &= \hat{X}^T \hat{Y}^T \\ (\lambda \hat{X})^T &= \hat{X}^T \lambda^T.\end{aligned}\tag{1.17}$$

A aplicação do adjunto sobre a soma de símbolos de medida é a soma dos símbolos adjuntos;

$$(\hat{M}_{aa'} + \hat{M}_{a''a'''})^\dagger = \hat{M}_{aa'}^\dagger + \hat{M}_{a''a'''}^\dagger,$$

como consequência o símbolo  $\hat{1}$  é auto-adjunto

$$\hat{1}^\dagger = \left( \sum_a \hat{M}_a \right)^\dagger = \sum_a \hat{M}_a^\dagger = \sum_a \hat{M}_a = \hat{1}.$$

## 1.8 Medidas Não Seletivas

Consideremos uma seqüência de medidas geral, na qual se muda o estado inicial do sistema, por exemplo

$$\hat{M}_a \hat{M}_b \hat{M}_c = \langle a|b \rangle \langle b|c \rangle \hat{M}_{ac},$$

definindo assim a *Amplitude de Probabilidade* como  $\langle a|b \rangle \langle b|c \rangle$ . Neste caso, a probabilidade de passar do estado  $c$  para o estado  $a$  através da medida intermediária  $B$ , é dada por

$$p(a, b, c) = |\langle a|b \rangle \langle b|c \rangle|^2.$$

Temos três casos de medidas possíveis:

- a. Uma medida intermediária que é dada por  $\hat{M}_b$ , em que é selecionado um valor  $b$  da propriedade  $B$ , e desta forma a probabilidade da medida é dada por

$$\begin{aligned}p(a, b, c) &= |\langle a|b \rangle \langle b|c \rangle|^2 \\ &= p(a, b) p(b, c).\end{aligned}\tag{1.18}$$

- b. Uma medida que aceita todos os valores de  $b$

$$\begin{aligned}p\left(a, \sum_b \hat{M}_b, c\right) &= p(a, \hat{1}, c) \\ &= |\langle a|c \rangle|^2 \\ &= p(a, c).\end{aligned}\tag{1.19}$$

- c. Uma medida não seletiva da propriedade  $B$ ; isto significa que a realização de uma medida  $\hat{M}_b$  é feita, mas sem selecionar algum valor em particular  $b$ . Então



a probabilidade  $p(a, \hat{b}, c)$  deve ser a soma de todas as possíveis escolhas dos estados intermediários  $b$

$$p(a, \hat{b}, c) = \sum_b p(a, b) p(b, c). \quad (1.20)$$

Notemos que em geral (1.19) e (1.20) não são iguais, ainda que em ambas situações não tenhamos obtido um valor específico da propriedade  $B$ . A diferença entre estas probabilidades radica em que no primeiro caso não se realiza medida alguma e no segundo, a medida é feita sem selecionar algum valor específico. Isto põe em evidência o fato de que as *Medidas perturbam o sistema*. Para se ter isto mais claro, tomemos a probabilidade  $p(a, \hat{1}, c)$  de maneira que

$$\begin{aligned} p(a, \hat{1}, c) &= |\langle a|c \rangle|^2 = \langle a|c \rangle \langle c|a \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \sum_{b''} \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle + \sum_{b', b'' \neq b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \\ &= \sum_{b'} |\langle a|b' \rangle \langle b'|c \rangle|^2 + \sum_{b', b'' \neq b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \\ &= p(a, \hat{b}, c) + \sum_{b', b'' \neq b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Como observamos, podemos derivar a probabilidade  $p(a, \hat{b}, c)$  da probabilidade  $p(a, \hat{1}, c)$ . Porém, se quisermos eliminar o segundo termo da expressão (1.21), propomos

$$\sum_{b'} \hat{M}_{b'} \rightarrow \sum_{b'} \hat{M}_{b'} e^{i\phi(b')} = \sum_{b'} |b' \rangle e^{i\phi(b')} \langle b'|, \quad \phi(b') \in \mathbf{R}$$

retomando o anterior

$$\begin{aligned} p(a, \hat{1}, c) &= \sum_{b'} \langle a|b' \rangle^* e^{-i\phi(b')} \langle b'|c \rangle^* \sum_{b''} \langle a|b'' \rangle e^{i\phi(b'')} \langle b''|c \rangle \\ &= p(a, \hat{b}, c) + \sum_{b', b'' \neq b'} \langle a|b' \rangle^* \langle b'|c \rangle^* \langle a|b'' \rangle \langle b''|c \rangle e^{i(\phi(b'') - \phi(b'))}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

Se escolhermos as fases  $\phi(b)$  como variáveis aleatórias igualmente distribuídas, o segundo termo da última linha acima se anula e obtemos

$$p(a, \hat{b}, c) = p\left(a, \hat{M}_b\left(e^{i\phi(b)}\right), c\right) = \left|\left\langle a \left| \hat{M}_b\left(e^{i\phi(b)}\right) \right| c \right\rangle\right|^2,$$

o símbolo de medida  $\hat{M}_b(e^{i\phi(b)})$  representa a medida não-seletiva e respeita as demais

regras da Álgebra de Medida. Suponhamos que algumas dessas fases são escolhidas de tal forma a serem números imaginários puros, extremamente maiores que os demais,

$$\phi(b) = i\infty \rightarrow e^{i\phi(b)} = e^{i(i\infty)} = e^{-\infty} = 0,$$

se isto ocorre para todo  $b \neq b'$ , onde  $\phi(b') \in \mathbb{R}$ , então a medida intermediária se reduz a

$$\hat{M}_b(e^{i\phi(b)}) = e^{i\phi(b')} \hat{M}_{b'},$$

a medida seletiva é re-obtida através da anulação que ocorre em todos os estados, exceto em dois de fase real tal que  $\phi(b') \cong \phi(b'')$ , e então temos

$$\hat{M}_b(e^{i\phi(b)}) = e^{i\phi(b')} (\hat{M}_{b'} + \hat{M}_{b''})$$

Finalmente, se todas as fases são reais e aproximadamente iguais a uma fase comum, obtém-se a medida que aceita todos os estados,

$$\hat{M}_b(e^{i\phi(b)}) = \hat{1}$$

## 1.9 Valor Esperado e Observáveis

O valor esperado da propriedade  $A$  para sistemas no estado  $b$  é o valor médio dos possíveis valores de  $A$ , ponderados pela probabilidade de obter um resultado  $b$  ao fazer a medição de  $\hat{M}_b$  sobre o estado  $a$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_b &= \sum_a a p(a|b) = \sum_a a \text{Tr}(\hat{M}_a \hat{M}_b) \\ &= \langle b | \left( \sum_a |a\rangle a \langle a| \right) | b \rangle, \end{aligned} \quad (1.23)$$

onde definimos o *Observável* como a quantidade a ser medida

$$A = \sum_a |a\rangle a \langle a| = \sum_a a \hat{M}_a, \quad (1.24)$$

então o valor esperado será

$$\langle A \rangle_b = \langle b | A | b \rangle.$$

## 1.10 Matrizes

Os símbolos de medida formam uma base para a representação de qualquer operador. Desta maneira, podemos expressar qualquer observável  $A$  em termos dos Símbolos de Medida

$$\begin{aligned}
A &= \hat{1}A\hat{1} = \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| A \sum_{b''} |b''\rangle \langle b''| \\
&= \sum_{b'b''} \langle b'| A |b''\rangle \hat{M}_{b'b''},
\end{aligned} \tag{1.25}$$

sendo  $A$  uma combinação linear dos símbolos de medida  $\hat{M}_{b'b''}$ , caracterizados por seus respectivos números  $\langle b'| A |b''\rangle$ . Estes podem ser ordenados em uma matriz  $n \times n$ .

A soma de observáveis, pode ser expressa nesta representação como

$$\begin{aligned}
A + C &= \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| (A + C) \sum_{b''} |b''\rangle \langle b''| \\
&= \sum_{b'b''} (\langle b'| A |b''\rangle + \langle b'| C |b''\rangle) \hat{M}_{b'b''},
\end{aligned} \tag{1.26}$$

assim, a soma de matrizes associadas a dois operados diferentes é igual a matriz da soma dos operadores

$$\langle b'| (A + C) |b''\rangle = \langle b'| A |b''\rangle + \langle b'| C |b''\rangle.$$

A multiplicação dos observáveis  $A$  e  $C$  na representação dos símbolos de medida é dada por

$$\begin{aligned}
AC &= \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| A \hat{1} C \sum_{b''} |b''\rangle \langle b''| \\
&= \sum_{b'b''} \langle b'| A \hat{1} C |b''\rangle \hat{M}_{b'b''} \\
&= \sum_{b'b''} \sum_{b'''} \langle b'| A |b'''\rangle \langle b'''| C |b''\rangle \hat{M}_{b'b''},
\end{aligned} \tag{1.27}$$

porém,

$$\langle b'| AC |b''\rangle = \sum_{b'''} \langle b'| A |b'''\rangle \langle b'''| C |b''\rangle.$$

Se multiplicamos o observável  $A$  por um número  $\alpha$ , obteremos que

$$\begin{aligned}
\alpha A &= \sum_{b'b''} \langle b'| \alpha A |b''\rangle \hat{M}_{b'b''} \\
&= \alpha \sum_{b'b''} \langle b'| A |b''\rangle \hat{M}_{b'b''},
\end{aligned} \tag{1.28}$$

conseqüentemente

$$\langle b'| \alpha A |b''\rangle = \alpha \langle b'| A |b''\rangle.$$

Considerando um operador não auto-adjunto  $\hat{X}$ , tal que

$$\hat{X} = \sum_{b'b''} \langle b'|\hat{X}|b''\rangle \hat{M}_{b'b''},$$

calculando o adjunto do  $\hat{X}$  obtemos que

$$\hat{X}^\dagger = \sum_{b'b''} \langle b'|\hat{X}|b''\rangle^* \hat{M}_{b''b'},$$

do que obtemos a relação

$$\langle b''|\hat{X}^\dagger|b'\rangle = \langle b'|\hat{X}|b''\rangle^*,$$

que diz que a matriz adjunta é igual a matriz transposta conjugada. No caso específico de operadores auto-adjuntos  $A$  se cumpre que

$$\langle b''|A|b'\rangle = \langle b'|A|b''\rangle^*.$$

## Capítulo 2

---

### Princípio Variacional

---

Como as transformações canônicas na Mecânica Clássica são determinantes para o Princípio Variacional Clássico, assim também as transformações unitárias o são na formulação Variacional na Mecânica Quântica. Em função delas definiremos as variações sobre as funções de transformação, que levarão ao Princípio Variacional Quântico proposto por Schwinger em uma serie de artigos desde 1951 [6, 7]. Assim se constroe uma teoria quântica sem a necessidade de um processo de quantização, ou seja, todos os elementos com que se constroe o formalismo têm origem quântica. Uma vantagem desta formulação é que partindo do Princípio de Ação pode-se extrair tanto as equações que governam o movimento quanto as relações de comutação (anti-comutação) entre operadores correspondentes a observáveis incompatíveis [16]. Ressalta-se o fato de não se ter uma escolha de representação particular no momento de fazer as variações. Ainda que tanto os estados quanto os operadores sejam dependentes do tempo, pode-se fazer uma escolha conveniente de representação para eliminar assim esta dependência.

#### 2.1 Operadores Unitários

Temos duas propriedades: a propriedade  $A$  com os valores possíveis  $a_1, a_2, \dots, a_n$  e a propriedade  $B$  com os mesmos valores possíveis, tal que  $b_1 = a_1, \dots, b_n = a_n$ . Consideremos o operador composto por

$$\hat{U}_{ab} = \sum_{k=1}^n |a_k\rangle \langle b_k| \quad \hat{U}_{ba} = \sum_{k=1}^n |b_k\rangle \langle a_k|, \quad (2.1)$$

do qual inferimos que

$$\hat{U}_{ab} = \hat{U}_{ba}^\dagger, \quad (2.2)$$

sendo um operador unitário

$$\hat{U}_{ab}\hat{U}_{ba} = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n |a_k\rangle \langle b_k| b_l\rangle \langle a_l| = 1, \quad (2.3)$$

portanto

$$\hat{U}_{ab}^\dagger = \hat{U}_{ba} = \hat{U}_{ab}^{-1}. \quad (2.4)$$

Estes operadores relacionam os estados ortogonais, levando um estado ao outro da forma

$$\begin{aligned} \langle a_k| \hat{U}_{ab} &= \langle b_k| & |b_k\rangle &= \hat{U}_{ba} |a_k\rangle, \\ \langle b_k| \hat{U}_{ba} &= \langle a_k| & |a_k\rangle &= \hat{U}_{ab} |b_k\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

mantendo assim as relações métricas da geometria unitária

$$\langle b_k| b_l\rangle = \langle a_k| \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ba} |a_l\rangle = \langle a_k| a_l\rangle = \delta_{kl}. \quad (2.6)$$

Tomando dois operadores Hermitianos:

$$\begin{aligned} \hat{A} |a'\rangle &= a' |a'\rangle \\ \hat{B} |b'\rangle &= b' |b'\rangle, \end{aligned}$$

cujos autoestados estão relacionados por meio dos operadores unitários  $\hat{U}_{ab}$ , compartilhando o mesmo espectro de autovalores. Portanto, esta transformação unitária relaciona os dois operadores da forma

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_{k=1}^n |a_k\rangle a_k \langle a_k| \\ &= \sum_{k=1}^n \hat{U}_{ab} |b_k\rangle b_k \langle b_k| \hat{U}_{ba} \\ &= \hat{U}_{ba}^{-1} \hat{B} \hat{U}_{ba}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

estabelecendo como o operador  $\hat{U}_{ab}$  atua sobre  $\hat{B}$  para produzir o operador  $\hat{A}$ .

## 2.2 Transformações Unitárias Infinitesimais

O operador Unitário

$$\hat{U} = \hat{1} - i\hat{G}, \quad (2.8)$$

onde  $\hat{G}$  é um operador infinitesimal de ordem  $\epsilon$  tal que

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = (\hat{1} + i\hat{G}^\dagger) (\hat{1} - i\hat{G}) = \hat{1} + i(\hat{G}^\dagger - \hat{G}) + \hat{G}^\dagger \hat{G}, \quad (2.9)$$

pode ser uma transformação unitária; para isso o gerador  $\hat{G}$  tem que ser hermitiano

$$\hat{G} = \hat{G}^\dagger. \quad (2.10)$$

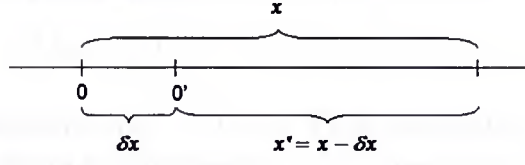


Figura 2.1:

Pensemos nas transformações de coordenadas unidimensionais, como a mostrada na figura 2.1, em que se produz um deslocamento da origem dado por  $\delta x$ , mudando assim a coordenada de  $x \rightarrow x' = x - \delta x$ .

Assumimos esta notação para as pequenas mudanças nos estados e escrevemos:

$$|a'\rangle = |a\rangle - \delta |a\rangle. \quad (2.11)$$

Porém, a transformação do estado vem gerada por:

$$|a'\rangle = \hat{U}^{-1} |a\rangle = \left( \hat{1} + i\hat{G} \right) |a\rangle. \quad (2.12)$$

analogamente

$$\begin{aligned} \langle a'| &= \langle a| - \delta \langle a| \\ &= \langle a| \hat{U} = \langle a| \left( 1 - i\hat{G} \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Conseqüentemente, as mudanças nos operadores são geradas por:

$$\begin{aligned} \hat{X} - \delta \hat{X} &= \hat{X}' = \hat{U}^{-1} \hat{X} \hat{U} = \left( 1 + i\hat{G} \right) \hat{X} \left( 1 - i\hat{G} \right) \\ &= \hat{X} + i \left( \hat{G} \hat{X} - \hat{X} \hat{G} \right), \end{aligned} \quad (2.14)$$

e assim obtemos as variações dos estados e dos operadores em função dos geradores da transformação

$$\begin{aligned} \delta |a\rangle &= -i\hat{G} |a\rangle, \\ \delta \langle a| &= \langle a| i\hat{G}, \\ \delta \hat{X} &= -i \left[ \hat{X}, \hat{G} \right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

## 2.3 Variação da Função de Transformação

A função de transformação que relaciona quaisquer dois estados  $\langle a|c\rangle$  pode ser escrita como:

$$\langle a|c\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle \langle b|c\rangle, \quad (2.16)$$



e sobre esta função de transformação fazemos uma variação completamente geral

$$\delta \langle a|c \rangle = \sum_b [\delta \langle a|b \rangle \langle b|c \rangle + \langle a|b \rangle \delta \langle b|c \rangle], \quad (2.17)$$

cumprindo com a simetria  $\delta \langle a|c \rangle^* = \delta \langle c|a \rangle$ . Podemos interpretar os números  $\delta \langle a|c \rangle$  como a matriz de um operador infinitesimal na representação  $ac$ , reescrevendo assim a variação da função de transformação como:

$$\delta \langle a|c \rangle = i \langle a|\delta \hat{W}_{ac}|c \rangle, \quad (2.18)$$

e de forma análoga, definimos as variações  $\delta \langle a|b \rangle$  e  $\delta \langle b|c \rangle$ . Assim, a propriedade diferencial (2.17) implica na equação matricial

$$\langle a|\delta \hat{W}_{ac}|c \rangle = \sum_b [\langle a|\delta \hat{W}_{ab}|b \rangle \langle b|c \rangle + \langle a|b \rangle \langle b|\delta \hat{W}_{bc}|c \rangle],$$

da qual se depreende a relação

$$\delta \hat{W}_{ac} = \delta \hat{W}_{ab} + \delta \hat{W}_{bc}. \quad (2.19)$$

Por conseguinte, a lei (2.17) está expressa na adição dos operadores infinitesimais (2.19). Se fazemos  $a = b$ , observamos que:

$$\delta \hat{W}_{aa} = 0,$$

ou equivalentemente

$$\delta \langle a|a' \rangle = 0,$$

mostrando que o valor da função de transformação é fixo. Se fazemos  $a = c$  em (2.19), vemos que

$$\delta \hat{W}_{ba} = -\delta \hat{W}_{ab}.$$

Calculando o complexo conjugado da variação  $\delta \langle a|b \rangle$

$$\begin{aligned} \delta \langle a|b \rangle^* &= -i \langle a|\delta \hat{W}_{ab}|b \rangle^* \\ &= -i \langle b|\delta \hat{W}_{ab}^\dagger|a \rangle, \end{aligned} \quad (2.20)$$

já que esta deve ser igual a

$$\delta \langle b|a \rangle = i \langle b|\delta \hat{W}_{ba}|a \rangle,$$

conseguimos que

$$\delta \hat{W}_{ab}^\dagger = -\delta \hat{W}_{ba} = \delta \hat{W}_{ab},$$

e desta maneira a conjugação complexa das funções de transformação é expressa pela condição de hermiticidade dos operadores infinitesimais  $\delta \hat{W}$ .

Por outro lado, da relação (2.15) temos que a variação da função de transformação pode ser expressa em função dos geradores das variações dos estados como:

$$\begin{aligned} \delta \langle a|b \rangle &= \delta (\langle a|) |b \rangle + \langle a| \delta (|b \rangle) \\ &= i \langle a| (\hat{G}_a - \hat{G}_b) |b \rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

## 2.4 Princípio da Ação Estacionária

De particular importância são as transformações que fazem

$$|b, t_1\rangle \rightarrow |a, t_2\rangle,$$

onde  $|a, t_2\rangle$  é o estado caracterizado pelos valores  $a = \{a_i\}$  associados a um conjunto completo de variáveis comutantes  $\{A(t_2)\}$  enquanto  $|b, t_1\rangle$  é caracterizado pelos valores  $b = \{b_i\}$  associados a um conjunto completo de variáveis  $\{B(t_1)\}$ , diferentes das anteriores.

Considere-se a função de transformação que relaciona estes estados

$$\langle a, t_2 | b, t_1 \rangle, \quad (2.22)$$

lembrando que a variação infinitesimal de um estado é gerada por operadores infinitesimais da forma

$$\begin{aligned} \delta |b, t_1\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \hat{G}_1 |b, t_1\rangle, \\ \delta \langle a, t_2| &= \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2| \hat{G}_2, \end{aligned} \quad (2.23)$$

então a variação da função de transformação (2.22) é:

$$\delta \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2 | (\hat{G}_2 - \hat{G}_1) | b, t_1 \rangle. \quad (2.24)$$

Além disso, pode-se relacionar as variações das funções de transformação com a matriz de um operador infinitesimal hermitiano. Propondo que este seja o operador ação, temos que:

$$\delta \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2 | \delta \hat{S}_{2,1} | b, t_1 \rangle, \quad (2.25)$$

e desta maneira se prescreve o Princípio Dinâmico fundamental, dado por uma equação variacional para as funções de transformação que conectam estados associados a conjuntos de operadores diferentes, a tempos diferentes. Se se compara (2.24) e (2.25), pode-se escrever a variação da ação como a diferença dos geradores  $\hat{G}_i$

$$\delta \hat{S}_{2,1} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1, \quad (2.26)$$

onde os operadores  $\hat{G}_i$  são operadores hermitianos construídos de variáveis físicas nos tempos respectivos.

Assim, formula-se o *Princípio da Ação Estacionária*. Indicando que a variação da ação (que em princípio dependeria das variáveis a todos os tempos  $t$  entre  $t_1$  e  $t_2$ ), de fato só depende das variáveis dinâmicas em seus tempos terminais  $t_1$  e  $t_2$ , sendo estacionária à respeito de variações a qualquer tempo intermediário. Dora-vante, partindo deste princípio, nos dispomos a obter as equações de movimento e as relações de comutação.

Considera-se a variação do operador ação na forma lagrangeana

$$\delta \hat{S}_{2,1} = \delta \left[ \int_{t_1}^{t_2} dt \hat{L}(\hat{q}, \dot{\hat{q}}, t) \right], \quad (2.27)$$

e, já que o tempo é um parâmetro independente, se dois operadores Lagrangeanos diferem por uma derivada no tempo da forma:

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

os operadores ação associados a cada um destes estão relacionados por

$$\hat{S}'_{2,1} = \hat{S}_{2,1} + (\hat{\Lambda}_2 - \hat{\Lambda}_1),$$

e a variação do novo operador ação será dada em função de novos geradores  $\hat{G}'_i$

$$\delta \hat{S}'_{2,1} = \delta \hat{S}_{2,1} + (\delta \hat{\Lambda}_2 - \delta \hat{\Lambda}_1) = \hat{G}'_2 - \hat{G}'_1,$$

onde os novos geradores estão relacionados com os antigos através da forma

$$\begin{aligned} \delta \hat{\Lambda}_1 &= \hat{G}'_1 - \hat{G}_1, \\ \delta \hat{\Lambda}_2 &= \hat{G}'_2 - \hat{G}_2. \end{aligned}$$

Como dissemos, as variações de uma função de transformação são completamente gerais; diante disso, consideremos transformações que variem funcionalmente em  $\hat{q}$  e  $t$ , onde a derivada  $\frac{dt'}{dt} > 0$ , definida positiva é, portanto, inversível e contínua, e desta maneira

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t + \delta t, \\ \hat{q} &\rightarrow \hat{q}'(t') = \hat{q}(t) + \delta \hat{q}(t). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Toda variação total  $\delta$  sobre uma variável dependente do tempo está relacionada com as variações  $\delta_0$ , nas quais  $t$  não é variado ( $\delta_0 t = 0$ ), da forma

$$\delta \hat{q}(t) = \delta_0 \hat{q}(t) + \frac{d\hat{q}(t)}{dt} \delta t, \quad (2.29)$$

analogamente para  $\delta \hat{q}$

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

deve-se ter cuidado, já que se pode notar que  $\delta$  não comuta com o operador derivada a diferença de  $\delta_0$ ,

$$\delta_0 \hat{q}(t) = \frac{d}{dt} (\delta_0 \hat{q}(t)),$$

embora,

$$\delta \hat{q}(t) \neq \frac{d}{dt}(\delta \hat{q}(t)),$$

o que se percebe ao derivar a equação (2.29) com respeito a  $t$

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

e subtraindo esta última equação de (2.30)

$$\frac{d}{dt}\delta \hat{q}(t) - \delta \hat{q}(t) = \hat{q}(t) \frac{d}{dt}\delta t.$$

Se  $\delta$  e a derivada não comutam, necessita-se encontrar a relação entre eles uma vez que a variação do diferencial do tempo na equação (2.27) não é nula. Para determinar a forma desta variação considera-se o diferencial

$$dt' = \frac{dt'}{dt} dt,$$

no qual  $t'$  vem dado pela transformação (2.28), então

$$dt' = \left(1 + \frac{d\delta t}{dt}\right) dt,$$

dando assim que a variação do diferencial do tempo é dada por

$$\delta(dt) = dt' - dt = \frac{d\delta t}{dt} dt.$$

Agora, consideremos uma variação geral sobre a ação tal que

$$\begin{aligned} \delta \hat{S}_{2,1} &= \delta \left[ \int_{t_1}^{t_2} dt \hat{L}(\hat{q}, \dot{\hat{q}}, t) \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left[ \delta(dt) \hat{L} + dt \delta \hat{L} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{d\delta t}{dt} \hat{L} + \delta_0 \hat{L} + \frac{d\hat{L}}{dt} \delta t \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{d}{dt}(\hat{L} \delta t) + \delta_0 \hat{L} \right], \end{aligned} \tag{2.31}$$

calculando a variação  $\delta_0 \hat{L}$

$$\begin{aligned} \delta_0 \hat{L} &= \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \delta_0 \hat{q}^j + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{q}}^j} \frac{d}{dt}(\delta_0 \hat{q}^j) \\ &= \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \delta_0 \hat{q}^j + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{q}}^j} \delta_0 \hat{q}^j \right) - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{q}}^j} \right) \delta_0 \hat{q}^j \end{aligned} \tag{2.32}$$

assim a variação da ação pode ser expressa como:

$$\delta \hat{S}_{2,1} = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[ \frac{d}{dt} \left( \hat{L} \delta t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \delta_0 \hat{q}^j \right) + \frac{\delta_0 \hat{L}}{\delta_0 \hat{q}^j} (\delta \hat{q}^j - \hat{q}^j \delta t) \right], \quad (2.33)$$

onde

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

O primeiro termo em (2.33) é o termo de superfície. Para que o Princípio de Ação Estacionária se cumpra, o segundo termo tem que ser nulo para qualquer variação  $\delta \hat{q}$  e  $\delta t$ , conseqüentemente,

$$\frac{\delta_0 \hat{L}}{\delta_0 \hat{q}^j} = 0.$$

Lembrando (2.26)

$$\delta \hat{S}_{2,1} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1,$$

e em congruência com (2.33), podemos identificar os  $\hat{G}_i$  com os termos de superfície resultantes da variação da ação

$$\begin{aligned} \hat{G} &= \hat{L} \delta t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \delta_0 \hat{q}^j, \\ &= \left( \hat{L} - \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \hat{q}^j \right) \delta t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j} \delta \hat{q}^j. \end{aligned}$$

Definindo-se o operador momento canônico e o operador hamiltoniano a partir do operador Lagrangeano,

$$\hat{p}_j = \frac{\partial \hat{L}}{\partial \hat{q}^j}, \quad \hat{H} = \hat{p}_j \hat{q}^j - \hat{L},$$

pode-se simplificar a expressão obtida para a variação da ação (2.25) e reescrevê-la da forma:

$$\delta \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2 | \left( \hat{p}_j \delta \hat{q}^j - \hat{H} \delta t \right) \Big|_{t_1}^{t_2} | b, t_1 \rangle. \quad (2.34)$$

e assim formular o Princípio de Ação Estacionária em função do operador Hamiltoniano.

## 2.5 Relações de Comutação e Equações de Movimento

Procurando gerar as relações entre os diversos operadores na descrição, fixamos o estado final do sistema, deste modo se pode sondar como o operador  $\hat{A}$  muda sob

uma transformação gerada pelo operador  $\hat{G}$ . Como se observou anteriormente, pode-se escrever a variação de um operador em função do gerador das transformações infinitesimais da maneira

$$\delta\hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{G}, \hat{A}],$$

onde  $\hat{A}$  pode ser qualquer operador. Se tomamos como operador o das coordenadas generalizadas a variação sobre elas resulta da forma\*

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

e usando a identidade

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]_{\mp} \hat{C} \pm \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}]_{\mp},$$

obtemos a relação

$$\delta\hat{q}^i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}^i, \hat{p}_j]_{\mp} \delta\hat{q}^j \mp \frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\hat{q}^i, \delta\hat{q}^j]_{\mp} - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}^i]_{\mp} \delta t. \quad (2.35)$$

Se forem feitas variações só sobre as coordenadas a um tempo fixo ( $\delta t = 0$ ), o último termo em (2.35) é nulo, então

$$\delta\hat{q}^i = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_j, \hat{q}^i]_{\mp} \delta\hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\delta\hat{q}^j, \hat{q}^i]_{\mp}$$

e, analogamente para o operador momento

$$\delta\hat{p}_i = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_j, \hat{p}_i]_{\mp} \delta\hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\delta\hat{q}^j, \hat{p}_i]_{\mp}.$$

Como vimos, pode-se escolher um operador adicional de forma que não se altere o Princípio Variacional, sendo um termo de fronteira na integral do operador lagrangeano, desta forma escolhemos

$$\hat{\Lambda} = -\hat{p}_i \hat{q}^i.$$

Sendo o novo gerador das transformações infinitesimais:

$$\hat{G}' = \hat{G} + \delta\hat{\Lambda} = -\delta\hat{p}_i \hat{q}^i - \hat{H}\delta t,$$

consideramos de novo mudanças só a um tempo determinado ( $\delta t = 0$ ), para assim obter o gerador do deslocamento em  $\hat{p}$ ,

$$\hat{G}' = -\delta\hat{p}_j \hat{q}^j.$$

---

\*A ordem dos índices aqui é arbitrária, já que estamos tratando com coordenadas cartesianas.

Voltamos a calcular as variações das coordenadas e momentos, mas desta vez geradas pelo operador  $\hat{G}'$ . Junto com as variações geradas pelo deslocamento de  $\hat{q}$ , obtemos um sistema de quatro equações:

$$\begin{aligned}\delta_q \hat{q}^i &= \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_j, \hat{q}^i]_{\mp} \delta \hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\delta \hat{q}^j, \hat{q}^i]_{\mp}, \\ \delta_q \hat{p}_i &= \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_j, \hat{p}_i]_{\mp} \delta \hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\delta \hat{q}^j, \hat{p}_i]_{\mp}, \\ \delta_p \hat{q}^i &= \frac{i}{\hbar} [\hat{q}^i, \delta \hat{p}_j]_{\mp} \hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \delta \hat{p}_j [\hat{q}^i, \hat{q}^j]_{\mp}, \\ \delta_p \hat{p}_i &= \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \delta \hat{p}_j]_{\mp} \hat{q}^j \pm \frac{i}{\hbar} \delta \hat{p}_j [\hat{p}_i, \hat{q}^j]_{\mp}.\end{aligned}\quad (2.36)$$

Impondo a condição de que os operadores  $\hat{q}^i$  e  $\hat{p}_i$  sejam cinematicamente independentes temos:

$$\delta_p \hat{q}^i = \hat{0} \quad e \quad \delta_q \hat{p}_i = \hat{0},$$

e encontramos que uma solução possível para o sistema de equações (2.36) é:

$$\begin{aligned}[\delta \hat{q}^j, \hat{q}^i]_{\mp} &= [\delta \hat{q}^j, \hat{p}_i]_{\mp} = \hat{0}, \\ [\hat{q}^i, \delta \hat{p}_j]_{\mp} &= [\hat{p}_i, \delta \hat{p}_j]_{\mp} = \hat{0},\end{aligned}$$

ou seja, os operadores infinitesimais comutam (anti-comutam) com qualquer outro operador. Assim, obtemos as relações de comutação (anti-comutação) entre os operador  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j]_{\mp} = [\hat{q}^i, \hat{q}^j]_{\mp} = \hat{0}, \quad (2.37)$$

$$[\hat{q}^i, \hat{p}_j]_{\mp} = i\hbar \delta_j^i, \quad (2.38)$$

podemos ver com estas relações que se definem dois tipos de variáveis dinâmicas, as que obedecem relações de comutação e as que obedecem relações de anti-comutação.

### 2.5.1 Equações de Movimento

Agora considerando variações somente no tempo, consistente (2.34), temos que o operador gerador das transformações unitárias é,

$$\hat{G}_t = -\hat{H}\delta t,$$

e a variação de um operador qualquer vem dada por:

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



que também é dada por

$$\delta \hat{A} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \delta t.$$

Conseqüentemente, encontramos a equação de Heisenberg

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}, \quad (2.39)$$

que descreve a evolução temporal de um operador qualquer.

Se fazemos uma transformação sobre um estado qualquer  $\langle \dots, t |$ , tal que:

$$\langle \dots, t |' = \langle \dots, t | \left( 1 + \frac{i}{\hbar} \hat{G}_t \right),$$

sendo esta mudança só no tempo, gerada por  $\hat{G}_t$ . Porém,

$$\langle \dots, t |' = \langle \dots, t | - \delta \langle \dots, t |,$$

e relacionando estas expressões encontramos que:

$$\delta \langle \dots, t | = -\frac{i}{\hbar} \langle \dots, t | \hat{G}_t = \frac{i}{\hbar} \langle \dots, t | \hat{H} \delta t. \quad (2.40)$$

Para sermos mais exatos, tomemos o conjunto completo de operadores que comutam  $\hat{A}(t)$ , de maneira que a um tempo  $t$  eles possam atribuir valores  $a$  ao atuar sobre os estados  $\langle a, t |$ ; desta forma

$$\langle a, t | \hat{A}(t) = a \langle a, t |.$$

Se aplicamos um operador da forma (2.8) temos que

$$\begin{aligned} \langle a, t | \hat{U}_t \hat{U}_t^{-1} \hat{A}(t) \hat{U}_t &= a \langle a, t | \hat{U}_t \\ \langle a, t |' \hat{A}'(t) &= a \langle a, t |', \end{aligned}$$

mas,  $\hat{A}'(t) = \hat{A}(t + \delta t)$ . Assim, o estado  $\langle a, t |'$  é o autoestado do operador  $\hat{A}(t + \delta t)$  com autovalor  $a$ . Então podemos escrever este estado como

$$\langle a, t |' = \langle a, t + \delta t | = \langle a, t | + \delta t \frac{\partial \langle a, t |}{\partial t},$$

aliás,

$$\delta t \frac{\partial \langle a, t |}{\partial t} = -\delta \langle a, t |, \quad (2.41)$$

quando comparamos esta última com (2.40) obtemos:

$$\frac{\partial \langle a, t |}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle a, t | \hat{H}. \quad (2.42)$$

Observamos assim que, sem necessidade de um método de “quantização”, baseados no princípio variacional, podemos encontrar as relações de comutação e as equações de movimento para os operadores e os estados.

## 2.6 Aplicações

### 2.6.1 Partícula Livre

O operador Hamiltoniano que descreve o movimento de uma partícula livre vem dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

e podemos expressar o Princípio Variacional de Schwinger como

$$\begin{aligned}\delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left[ \hat{p} \delta \hat{q} - \delta t' \hat{H} \right]_{t_0}^t \right| q_0, t_0 \right\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left[ \hat{p} \delta \hat{q} - \hat{p}_0 \delta \hat{q}_0 - (\delta t - \delta t_0) \hat{H} \right] \right| q_0, t_0 \right\rangle\end{aligned}$$

onde definimos

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

usando as equações de Heisenberg

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{p}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = 0 \\ \frac{d\hat{q}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{q}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] \\ &= -\frac{i}{2\hbar m} [\hat{q}, \hat{p}^2] = -\frac{i}{2\hbar m} (\hat{p} [\hat{q}, \hat{p}] + [\hat{q}, \hat{p}] \hat{p}) \\ &= \frac{\hat{p}}{m}\end{aligned}$$

das quais obtemos

$$\begin{aligned}\hat{p}(t) &= \hat{p}_0 \\ \hat{q}(t) &= \hat{q}_0 + \frac{\hat{p}_0}{m}(t - t_0)\end{aligned}$$

e desta forma

$$\begin{aligned}\hat{p}_0 &= m \frac{(\hat{q} - \hat{q}_0)}{(t - t_0)} \\ \hat{p}_0^2 &= m^2 \frac{(\hat{q} - \hat{q}_0)^2}{(t - t_0)^2} = m^2 \frac{(\hat{q}^2 - \hat{q}\hat{q}_0 - \hat{q}_0\hat{q} + \hat{q}_0^2)}{\Delta t^2}\end{aligned}$$

temos a relação de comutação

$$\begin{aligned}[\hat{q}, \hat{q}_0] &= \left[ \hat{q}_0 + \frac{\hat{p}_0}{m}(t - t_0), \hat{q}_0 \right] = -\frac{\Delta t}{m} i\hbar \\ \hat{q}_0 \hat{q} &= \hat{q} \hat{q}_0 + \frac{\Delta t}{m} i\hbar\end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned}\hat{p}_0^2 &= m^2 \frac{(\hat{q}^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 + \hat{q}_0^2 - \frac{\Delta t}{m}i\hbar)}{\Delta t^2} \\ &= m^2 \frac{(\hat{q}^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 + \hat{q}_0^2)}{\Delta t^2} - \frac{m}{\Delta t}i\hbar\end{aligned}$$

reescrevendo

$$\begin{aligned}\delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle q, t | [\hat{p}\delta\hat{q} - \hat{p}_0\delta\hat{q}_0 - (\delta t - \delta t_0)\hat{H}] | q_0, t_0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \left[ m \frac{(\hat{q} - \hat{q}_0)}{\Delta t} (\delta\hat{q} - \delta\hat{q}_0) - \right. \\ &\quad \left. - (\delta t - \delta t_0) \frac{m}{2} \frac{(\hat{q}^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 + \hat{q}_0^2)}{\Delta t^2} + \frac{i\hbar}{2\Delta t} \delta\Delta t \right] | q_0, t_0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ m \frac{\Delta q}{\Delta t} \delta\Delta q - \delta\Delta t \frac{m}{2} \frac{(\Delta q)^2}{\Delta t^2} - \frac{i\hbar}{2\Delta t} \delta\Delta t \right] \langle q, t | q_0, t_0 \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle}{\langle q, t | q_0, t_0 \rangle} &= \delta \left[ \frac{im}{2\hbar} \frac{(\Delta q)^2}{\Delta t} + \ln \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \right] \\ \ln \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{im}{2\hbar} \frac{(\Delta q)^2}{\Delta t} + \ln \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \\ \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= A \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar} \frac{(\Delta q)^2}{\Delta t} \right]\end{aligned}$$

para encontrar a constante de integração  $A$  temos a condição de normalização

$$\langle q, t_0 | q_0, t_0 \rangle = \delta(q - q_0)$$

de nossa solução

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{A}{\sqrt{\Delta t}} \exp \left[ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{(\Delta q)^2}{\Delta t} \right]$$

da definição de delta de Dirac

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

se tomamos como

$$n^2 = \frac{m}{2i\hbar\Delta t}$$

vemos que se cumpre que

$$t \rightarrow t_0 \implies n \rightarrow \infty$$

assim para que se cumpra a relação de ortogonalidade temos que

$$A = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar}}$$

e a amplitude de transição é dada por

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

### 2.6.2 Oscilador Harmônico Livre

Dado o operador Hamiltoniano para um Oscilador Harmônico Livre

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \quad (2.43)$$

e cumprindo com o princípio variacional de Schwinger

$$\begin{aligned} \delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left[ \hat{p} \delta \hat{q} - \delta t' \hat{H} \right]_{t_0} \right| q_0, t_0 \right\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left[ \hat{p} \delta \hat{q} - \hat{p}_0 \delta \hat{q}_0 - (\delta t - \delta t_0) \hat{H} \right] \right| q_0, t_0 \right\rangle \end{aligned}$$

onde definimos

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

calculamos as equação de movimento tanto para o operador momento quanto para o operador posição

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{p}, \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \right] \\ &= -\frac{im\omega^2}{2\hbar} (\hat{q} [\hat{p}, \hat{q}] + [\hat{p}, \hat{q}] \hat{q}) \\ &= -m\omega^2\hat{q} \end{aligned} \quad (2.44)$$

analogamente

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{q}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{q}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] \\ &= -\frac{i}{2m\hbar} (\hat{p} [\hat{q}, \hat{p}] + [\hat{q}, \hat{p}] \hat{p}) \\ &= \frac{\hat{p}}{m} \end{aligned}$$

desta maneira conseguimos o sistema de equações:

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -m\omega^2\hat{q} \quad (2.45)$$

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (2.46)$$

derivando (2.45) no tempo

$$\frac{d^2\hat{p}}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{q}}{dt}$$

e substituindo (2.46)

$$\frac{d^2\hat{p}}{dt^2} = -\omega^2\hat{p}$$

temos que:

$$\hat{p}(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t).$$

Fazendo uso das condições iniciais, (consideraremos  $t_0 = 0$ )

$$\hat{p}(0) = \hat{p}_0$$

$$A = \hat{p}_0$$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}(0)}{dt} &= B\omega \\ &= -m\omega^2 \hat{q}_0 \end{aligned}$$

conseguimos que  $B$  vem dada por:

$$B = -m\omega \hat{q}_0$$

assim, a equação do momento em função do tempo é

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

substituindo a solução de  $\hat{p}$  em (2.46) temos que:

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}_0 \cos(\omega t) - \omega \hat{q}_0 \sin(\omega t)$$

e portanto

$$\hat{q}(t) = \frac{1}{m\omega} \hat{p}_0 \sin(\omega t) + \hat{q}_0 \cos(\omega t) + C$$

usando as condições iniciais para o operador  $\hat{q}$

$$\hat{q}(0) = \hat{q}_0$$

$$\hat{q}_0 = \hat{q}_0 + C$$

$$C = 0$$

conseguimos nossas equações de movimento:

$$\begin{aligned} \hat{p}(t) &= \hat{p}_0 \cos(\omega t) - m\omega \hat{q}_0 \sin(\omega t) \\ \hat{q}(t) &= \frac{1}{m\omega} \hat{p}_0 \sin(\omega t) + \hat{q}_0 \cos(\omega t). \end{aligned}$$

Expressando o momento em função das coordenadas

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

e substituindo no Hamiltoniano, este toma a forma:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\left\{ \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} [\cos(\omega t) \hat{q}(t) - \hat{q}_0] \right\}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}(t)^2 \\ &= \frac{m\omega^2}{2 \sin^2(\omega t)} \{ \cos^2(\omega t) \hat{q}^2(t) + \hat{q}_0^2 - \cos(\omega t) [\hat{q}(t) \hat{q}_0 + \hat{q}_0 \hat{q}(t)] \} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}(t)^2 \\ &= \frac{m\omega^2}{2 \sin^2(\omega t)} [\cos^2(\omega t) \hat{q}^2(t) + \hat{q}_0^2 - 2 \cos(\omega t) \hat{q}(t) \hat{q}_0] - \frac{i\hbar\omega \cos(\omega t)}{2 \sin(\omega t)} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}(t)^2\end{aligned}$$

na qual usamos o comutador

$$\begin{aligned}[\hat{q}(t), \hat{q}_0] &= \frac{1}{m\omega} \sin(\omega t) [\hat{p}_0, \hat{q}_0] \\ &= -\frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t)\end{aligned}$$

Agora reescrevemos a equação variacional para a função de transformação (2.44)

$$\begin{aligned}\delta \langle q, t | q_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle q, t | [\hat{p} \delta \hat{q} - \hat{p}_0 \delta \hat{q}_0 - \delta t \hat{H}] | q_0, t_0 = 0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} [\cos(\omega t) \hat{q}(t) - \hat{q}_0] \delta \hat{q} - \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} [\hat{q}(t) - \hat{q}_0 \cos(\omega t)] \delta \hat{q}_0 - \\ &\quad - \delta t \left\{ \frac{m\omega^2}{2 \sin^2(\omega t)} [\cos^2(\omega t) \hat{q}^2(t) + \hat{q}_0^2 - 2 \cos(\omega t) \hat{q}(t) \hat{q}_0] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{i\hbar\omega \cos(\omega t)}{2 \sin(\omega t)} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}(t)^2 \right\} | q_0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} [\cos(\omega t) \hat{q}(t) - \hat{q}_0] \delta \hat{q} - \frac{m\omega}{\sin(\omega t)} [\hat{q}(t) - \hat{q}_0 \cos(\omega t)] \delta \hat{q}_0 - \\ &\quad - \delta t \left\{ \frac{m\omega^2}{2 \sin^2(\omega t)} [\hat{q}^2(t) + \hat{q}_0^2 - 2 \cos(\omega t) \hat{q}(t) \hat{q}_0] - \frac{i\hbar\omega \cos(\omega t)}{2 \sin(\omega t)} \right\} | q_0 \rangle \\ &= \frac{im\omega}{\hbar \sin(\omega t)} \{ [\cos(\omega t) q - q_0] \delta q - [q - q_0 \cos(\omega t)] \delta q_0 \} + \\ &\quad - \delta t [q^2 + q_0^2 - 2 \cos(\omega t) q q_0] \frac{im\omega^2}{2\hbar \sin^2(\omega t)} - \frac{\omega \cos(\omega t)}{2 \sin(\omega t)} \delta t \langle q, t | q_0 \rangle \\ &= \delta \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin(\omega t)} [(q^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2q q_0] + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\omega}{\sin(\omega t)} \right) \right\} \langle q, t | q_0 \rangle\end{aligned}$$

integrando

$$\langle q, t | q_0 \rangle = A \sqrt{\frac{\omega}{\sin(\omega t)}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin(\omega t)} [(q^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2qq_0] \right\}$$

Para fixar o valor da constante  $A$  consideremos  $\omega t \ll 1$ ,

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

além da condição de normalização:

$$\langle q, t_0 | q_0 \rangle = \delta(q - q_0)$$

de nossa solução

$$\lim_{t \rightarrow 0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \lim_{t \rightarrow 0} A \sqrt{\frac{\omega}{\sin(\omega t)}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2i\hbar} \frac{1}{\sin(\omega t)} (q - q_0)^2 \right\}$$

da definição de delta de Dirac

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

então

$$n^2 = \frac{m}{2i\hbar} \frac{\omega}{\sin(\omega t)}$$

e

$$A = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi}}$$

assim temos que a função de transformação é

$$\langle q, t | q_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\hbar\pi \sin(\omega t)}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sin(\omega t)} [(q^2 + q_0^2) \cos(\omega t) - 2qq_0] \right\}. \quad (2.47)$$



## Espectro de Energia e Autofunções

Podemos reescrever (2.47) como:

$$\begin{aligned}\langle q, t|q_0 \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2i\hbar\pi}} \sqrt{\frac{2i}{(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \frac{2i}{(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})} \left[ (q^2 + q_0^2) \frac{(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})}{2} - 2qq_0 \right] \right\}, \\ \langle q, t|q_0 \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{(1 - e^{-2i\omega t})}} \exp \left\{ \frac{m\omega}{\hbar} \frac{[4qq_0 e^{-i\omega t} - (q^2 + q_0^2)(1 + e^{-2i\omega t})]}{2(1 - e^{-2i\omega t})} \right\},\end{aligned}$$

usando a Fórmula de Mehler[17][18]

$$e^{-(x^2+y^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{z}{2}\right)^n H_n(x) H_n(y) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp \left[ \frac{4xyz - (x^2 + y^2)(1 + z^2)}{2(1 - z^2)} \right],$$

identificamos:

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \\ y &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q_0 \\ z &= e^{-i\omega t}\end{aligned}$$

assim, a função de transformação para o Oscilador Harmônico Livre toma a forma:

$$\langle q, t|q_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} e^{-i\omega t/2} \exp \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q_0^2) \right] \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{-i\omega t}}{2n!^2} \right)^n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q_0 \right) \quad (2.48)$$

no qual  $H_n$  são os Polinômios de Hermite.

Se na função de transformação igualamos  $q = q_0$  e integramos sobre as posições  $q$ , encontramos uma relação com o traço do operador evolução temporal:

$$\int dv_q \langle q, t|q, t_0 \rangle = \int dv_q \langle q, t_0 | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | q, t_0 \rangle = \text{tr} \left( e^{-i\hat{H}(t-t_0)} \right), \quad (2.49)$$

sendo nossa função de transformação a função (2.48), expressamos o lado esquerdo de (2.49) da forma:

$$\int dv_q \langle q, t|q, t_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{m\omega}{2^{2n}\hbar\pi n!^2}} e^{-i\omega t(n+1/2)} \int dq \exp \left( -\frac{m\omega}{\hbar} q^2 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right)$$

usando a relação de ortogonalidade dos Polinômios de Hermite

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2/2} H_n(x) H_m(x) = n! 2^n \sqrt{\pi} \delta_{nm}$$

encontramos que:

$$\begin{aligned} \int dv_q \langle q, t | q, t_0 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{m\omega}{2^{2n} \hbar \pi n!^2}} e^{-i\omega t(n+1/2)} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} n! 2^n \sqrt{\pi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega t(n+1/2)} \end{aligned} \quad (2.50)$$

A parte direita de (2.49) é dada por

$$\begin{aligned} \text{tr} \left( e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \right) &= \int dq \left\langle q, t_0 \left| \sum_{n=0}^{\infty} |E_n\rangle \langle E_n| e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}\Delta t} \right| q, t_0 \right\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{iE_n}{\hbar}\Delta t} \int dq \langle q, t_0 | E_n \rangle \langle E_n | q, t_0 \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{iE_n}{\hbar}\Delta t} \langle E_n | E_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{iE_n}{\hbar}\Delta t} \end{aligned} \quad (2.51)$$

comparando (2.50) com (2.51), identificamos o espectro de energia como:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.52)$$

e as auto-funções tomam a forma:

$$\psi_n(q) = \left( \frac{m\omega}{2^{2n} \pi \hbar n!^2} \right)^{1/4} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 \right). \quad (2.53)$$

Desta maneira, podemos escrever (2.47) de maneira mais compacta

$$\langle q, t | q_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-itE_n/\hbar} \psi_n^*(q) \psi_n(q_0). \quad (2.54)$$

## Capítulo 3

---

### Variedades Riemannianas

---

A quantização de uma partícula livre não-relativística em espaços curvos é um dos mais controversos problemas da mecânica quântica. Os principais problemas que se apresentam nesta quantização são o ordenamento dos operadores e a não conservação das relações de comutação.

Estudaremos a formulação da Mecânica Quântica em espaços curvos partindo do Princípio de Ação do Schwinger, porém este problema ainda apresenta muitas dificuldades, originadas principalmente pela não comutatividade do momento com a parte cinética do Hamiltoniano. Propomos definir um operador momento generalizado que leva à invariância das relações de comutação da teoria. Além disso, estudaremos o comportamento do momento sob transformações de ponto de coordenadas que nos levará a uma definição de Hamiltoniano quântico invariante sob transformação de coordenadas, diminuindo a ambigüidade introduzida na teoria pelo problema de ordenamento dos operadores.

#### 3.1 Representação de Coordenadas e Invariância das Relações de Comutação

A descrição dinâmica do sistema mecânico quântico é dada pelo conjunto geral de operadores coordenadas  $\hat{q}^i$  e momentos conjugados  $\hat{p}_i$ , sendo ambos operadores hermitianos. Escolhemos os autovetores das coordenadas como vetores bases, satisfazendo a relação de completeza e ortogonalidade. Consideraremos a representação de Schrödinger, na qual os operadores não variam no tempo, enquanto que os estados do sistema têm dependência temporal. Além disso, vamos supor que as coordenadas  $q$  são coordenadas em uma variedade Riemanniana, com uma métrica associada  $g_{ij}$ . Podemos desta maneira expandir qualquer vetor estado da forma:

$$|\psi, t\rangle = \int dv_{q'} |q'\rangle \langle q'|\psi, t\rangle,$$

onde  $dv_{q'}$  é o volume da variedade e  $\langle q'|\psi, t\rangle = \psi(q', t)$  é a função de onda do sistema. Assim, a probabilidade de encontrar o sistema num volume  $dv_{q'}$  em torno do ponto  $q'$  a um tempo  $t$  é  $|\psi(q', t)|^2 dv_{q'}$ . Esta interpretação depende da condição de normalização dos estados:

$$\langle q|q'\rangle = \Delta(q - q'),$$

com  $\Delta(q - q')$  sendo a distribuição delta de Dirac generalizada. Para manter a propriedade:

$$\int dv_q F(q) \Delta(q - q') = F(q') \quad (3.1)$$

se depreende que:

$$\begin{aligned} [F(q) - F(q')] \Delta(q - q') &= 0 \\ [F(q) - F(q')] \frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q^j} &= -\frac{\partial F(q)}{\partial q^j} \Delta(q - q') \end{aligned} \quad (3.2)$$

pois o elemento de volume é dado por  $dv_{q'} = dq' \sqrt{g(q')}$ . Então a delta de Dirac Generalizada é definida como:

$$\Delta(q - q') = \frac{1}{\sqrt{g(q')}} \delta(q - q') = \frac{1}{\sqrt{g(q)}} \delta(q - q'),$$

Além disso, temos as propriedades:\*

$$\frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q^i} = -\frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q'^i} - \frac{1}{\sqrt{g(q)}} \frac{\partial \sqrt{g(q')}}{\partial q^i} \Delta(q - q'), \quad (3.4)$$

$$(q^i - q'^i) \frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q^j} = -(q^i - q'^i) \frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q'^j} = -\delta_j^i \Delta(q - q'). \quad (3.5)$$

Procurando manter inalteradas as relações de comutação (2.38). Portanto, calculamos o elemento de matriz do comutador entre as coordenadas e os momentos:

$$\langle q | [\hat{q}^i, \hat{p}_j] | q' \rangle = \langle q | i\hbar \delta_j^i \hat{1} | q' \rangle$$

e, conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \langle q | (\hat{q}^i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{q}^i) | q' \rangle &= i\hbar \delta_j^i \Delta(q - q') \\ (q^i - q'^i) \langle q | \hat{p}_j | q' \rangle &= i\hbar \delta_j^i \Delta(q - q') \end{aligned}$$

usando as relações (3.1)-(3.5) encontramos o momento na representação de coordenadas na forma geral:

$$\langle q | \hat{p}_j | q' \rangle = \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^j} + F_j(q) \right) \Delta(q - q'), \quad (3.6)$$

---

\*Este termo pode ser avaliado tanto em  $q$  quanto em  $q'$ :

$$\frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q^i} = -\frac{\partial \Delta(q - q')}{\partial q'^i} - \left( \frac{1}{\sqrt{g(q')}} \frac{\partial \sqrt{g(q')}}{\partial q^i} \right) \Delta(q - q') \quad (3.3)$$

na qual  $F_j(q)$  é uma função de variação suave nas coordenadas. Fazendo uso das relações anteriores podemos calcular o comutador entre o momento  $\hat{p}_j$  e qualquer função das coordenadas  $g(x)$

$$\begin{aligned}
 \langle q' | [g(q), \hat{p}_j] | q'' \rangle &= \langle q' | g(q) \hat{p}_j - \hat{p}_j g(q) | q'' \rangle \\
 &= \int dv_q \langle q' | g(q) | q \rangle \langle q | \hat{p}_j | q'' \rangle - \int dv_q \langle q' | \hat{p}_j | q \rangle \langle q | g(q) | q'' \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} \int dv_q \langle q' | g(q) | q \rangle \frac{\partial}{\partial q^i} \Delta(q - q'') + \int dv_q \langle q' | g(q) | q \rangle \times \\
 &\quad \times F_i(q) \Delta(q - q'') - \frac{\hbar}{i} \int dv_q \frac{\partial}{\partial q^i} \Delta(q' - q) \langle q | g(q) | q'' \rangle \\
 &\quad - \int dv_q F_i(q') \Delta(q' - q) \langle q | g(q) | q'' \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{i} [g(q') - g(q'')] \frac{\partial}{\partial q^i} \Delta(q' - q'') + [F_i(q'') - F_i(q')] \langle q' | g(q) | q'' \rangle,
 \end{aligned}$$

pois

$$\langle q' | g(q) | q'' \rangle = g(q') \Delta(q' - q''),$$

e fazendo uso de (3.2) encontramos que:

$$\langle q' | [g(q), \hat{p}_j] | q'' \rangle = i\hbar \frac{\partial g(q')}{\partial q^i} \Delta(q' - q''),$$

assim

$$[g(q), \hat{p}_j] = i\hbar \frac{\partial g(q)}{\partial q^i}.$$

Aliás, o momento tem que manter a relação de comutação (2.37). Então, tomamos o elemento de matriz do comutador  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j]$  e obtemos que:

$$\begin{aligned}
 \langle q | [\hat{p}_i, \hat{p}_j] | q' \rangle &= \int dv_{q''} (\langle q | \hat{p}_i | q'' \rangle \langle q'' | \hat{p}_j | q' \rangle - \langle q | \hat{p}_j | q'' \rangle \langle q'' | \hat{p}_i | q' \rangle) \\
 &= \int dv_{q''} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial \Delta(q - q'')}{\partial q^i} + F_i(q) \Delta(q - q'') \right) \left( -i\hbar \frac{\partial \Delta(q'' - q')}{\partial q''^j} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + F_j(q'') \Delta(q'' - q') \right) - \left( -i\hbar \frac{\partial \Delta(q - q'')}{\partial q^j} + F_j(q) \Delta(q - q'') \right) \right. \\
 &\quad \left. \times \left( -i\hbar \frac{\partial \Delta(q'' - q')}{\partial q''^i} + F_i(q'') \Delta(q'' - q') \right) \right] \\
 &= i\hbar \int dv_{q''} \left[ -\frac{\partial \Delta(q - q'')}{\partial q^i} F_j(q'') \Delta(q'' - q') - F_i(q) \Delta(q - q'') \times \right. \\
 &\quad \times \frac{\partial \Delta(q'' - q')}{\partial q''^j} + \frac{\partial \Delta(q - q'')}{\partial q^j} F_i(q'') \Delta(q'' - q') + \\
 &\quad \left. + F_j(q) \Delta(q - q'') \frac{\partial \Delta(q'' - q')}{\partial q''^i} \right] \\
 \langle q | [\hat{p}_i, \hat{p}_j] | q' \rangle &= i\hbar \left[ \frac{\partial F_i(q)}{\partial q^j} - \frac{\partial F_j(q)}{\partial q^i} \right] \Delta(q - q'), \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

uma vez que este último termo tem que ser nulo inferimos que  $F_i(q)$  é uma primeira deriva de uma outra função dependente só das coordenadas

$$F_i(q) = \frac{\partial f(q)}{\partial q^i}.$$

### 3.2 Operador Momento em Variedades Riemannianas

Podemos reescrever (3.6) na forma

$$\langle q|\hat{p}_i|q'\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial f(q)}{\partial q^i}\right) \Delta(q - q'), \quad (3.8)$$

porém não sabemos nada sobre a função  $f$ . Para sondar um pouco isto, exigimos que o operador momento seja hermitiano, então deve se satisfazer que

$$\langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle = \overline{\langle \psi|\hat{p}_i|\varphi\rangle}, \quad (3.9)$$

introduzindo duas relações de completeza das coordenadas no lado esquerdo da equação (3.9) e usando (3.4) temos:

$$\begin{aligned} \langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle &= \int \int dv_q dv_{q'} \langle \varphi|q\rangle \langle q|\hat{p}_i|q'\rangle \langle q'|\psi\rangle \\ &= \int \int dv_q dv_{q'} \varphi^*(q) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial f(q)}{\partial q^i}\right) \Delta(q - q') \psi(q') \\ &= \int d^n q \sqrt{g(q)} \varphi^*(q) \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial f(q)}{\partial q^i}\right) \psi(q) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d^n q \left[ \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} \varphi^* \psi) - \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} \varphi^* \psi - \sqrt{g} \frac{\partial \varphi^*}{\partial q^i} \psi \right] + \int d^n q \sqrt{g} \varphi^* \frac{\partial f}{\partial q^i} \psi \\ &= i\hbar \int d^n q \sqrt{g} \left[ \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} \varphi^* \psi + \frac{\partial \varphi^*}{\partial q^i} \psi + \frac{1}{i\hbar} \varphi^* \frac{\partial f}{\partial q^i} \psi \right], \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle = \int d^n q \sqrt{g(q)} \psi i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{1}{\sqrt{g(q)}} \frac{\partial \sqrt{g(q)}}{\partial q^i} + \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial f}{\partial q^i} \right] \varphi^*$$

reescrevemos a equação da forma:

$$\langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle = \int d^n q \sqrt{g(q)} \left[ \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{i\hbar}{\sqrt{g(q)}} \frac{\partial \sqrt{g(q)}}{\partial q^i} + \frac{\partial f}{\partial q^i} \right) \varphi \right]^*$$

já que a ultima expressão queremos que seja igual a:

$$\langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle = \int d^n q \sqrt{g} \left[ \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial f}{\partial q^i} \right) \varphi \right]^*,$$

para que (3.9) seja satisfeita, temos que exigir que:

$$\frac{\partial f^*}{\partial q^i} = i\hbar \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} + \frac{\partial f}{\partial q^i},$$

assim a solução é:

$$\frac{\partial f}{\partial q^i} = -\frac{i\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i}$$

escrevendo a última expressão de maneira mais sucinta, definimos

$$\Gamma_i(q) \equiv \frac{1}{\sqrt{g(q)}} \frac{\partial \sqrt{g(q)}}{\partial q^i},$$

portanto, o momento generalizado na representação das coordenadas é:

$$p_i(q) = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{1}{2} \Gamma_i(q) \right). \quad (3.11)$$



### 3.3 Deslocamento Paralelo

O Princípio de Schwinger nos permite uma outra abordagem para encontrarmos a generalização do operador momento na representação de coordenadas. Tomando as variações do operador ação na forma canônica e do Princípio de Ação:

$$\delta\langle q|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle q|\delta\hat{S}|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle q|\hat{p}_i\delta\hat{q}^i - \hat{H}\delta t|\psi\rangle. \quad (3.12)$$

Tomando variações só nas coordenadas e considerando que a função  $\langle q|\psi\rangle$  é uma densidade escalar de peso  $\omega$ , o membro do lado esquerdo de (3.12) pode ser expresso como:

$$\delta\langle q|\psi\rangle = \left( \frac{\partial\langle q|\psi\rangle}{\partial q^i} + w\Gamma_i\langle q|\psi\rangle \right) \delta q^i. \quad (3.13)$$

o segundo termo desta equação é devido ao deslocamento paralelo da densidade escalar  $\langle q|\psi\rangle$  de peso  $w$ .

Agora consideremos o lado direito de (3.12). Tomando  $\delta t = 0$  para termos só variações nas coordenadas<sup>†</sup> e comparando-os com (3.13)

$$\langle q|\hat{p}_i|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + w\Gamma_i \right) \langle q|\psi\rangle. \quad (3.14)$$

Restringindo-nos a uma variedade Riemanniana a conexão vem definida por:

$$\Gamma_{kj}^k \Gamma_j = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial\sqrt{g}}{\partial q^j}.$$

Além disso, exigimos hermiticidade de  $\hat{p}_i$ , ou seja

$$\begin{aligned} \langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle &= \int d^n q \sqrt{g} \langle \varphi|q\rangle \langle q|\hat{p}_i|\psi\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \varphi^* \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + w\Gamma_{ki}^k \right) \psi \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d^n q \left[ \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} \varphi^* \psi) - \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} \varphi^*) \right] + \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} w \Gamma_{ki}^k \varphi^* \psi, \end{aligned}$$

somando e subtraindo o termo

$$\frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi x w \Gamma_{ki}^k \varphi^*,$$

temos que

$$\begin{aligned} \langle \varphi|\hat{p}_i|\psi\rangle &= -\frac{\hbar}{i} \int d^n q \left[ \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{g} \varphi^*) + \sqrt{g} w \Gamma_{ki}^k \varphi^* \psi \right] + \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi x w \Gamma_{ki}^k \varphi^* \\ &\quad - \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi x w \Gamma_{ki}^k \varphi^* \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \left[ \psi \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + x w \Gamma_{ki}^k \right) \varphi^* \right] + \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi (1+x) w \Gamma_{ki}^k \varphi^* \\ &\quad - \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi \Gamma_{ki}^k \varphi^* \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \left[ \psi \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + (1+xw) \Gamma_{ki}^k \right) \varphi^* \right] + \frac{\hbar}{i} \int d^n q \sqrt{g} \psi (1+x) w \Gamma_{ki}^k \varphi^*, \end{aligned}$$

<sup>†</sup> Estamos tomando o operador das variação da posição proporcional ao operador unidade  $\delta\hat{q}^i = \delta q^i \hat{1}$ , caso contrário devemos tomar algum tipo de ordenamento sobre o produto  $\hat{p}_i \delta\hat{q}^i$ .



para satisfazer (3.9) devemos resolver o sistema

$$1 + xw = w \quad (1 + x)w = 0$$

cujas soluções são

$$w = \frac{1}{2} \quad e \quad x = -1.$$

Com este resultado podemos escrever a forma generalizada do operador momento como:

$$\langle q | \hat{p}_i | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{1}{2} \Gamma_i \right) \langle q | \psi \rangle,$$

que é completamente consistente com (3.11). Além de encontrarmos que a função de onda é uma densidade escalar de peso  $w = 1/2$ .

### 3.4 Transformação de Coordenadas

Consideraremos uma transformação de ponto arbitrária:

$$\hat{q} \rightarrow \hat{q}',$$

descrevendo nosso sistema com as variáveis  $\hat{q}'$ . Podemos expressar o Lagrangiano e a Ação em função das novas coordenadas  $\hat{q}'$ :

$$\hat{L}'(\hat{q}', \dot{\hat{q}}') = \hat{L}(\hat{q}, \dot{\hat{q}}),$$

$$\hat{S}'(\hat{q}'_2, t_2; \hat{q}'_1, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt \hat{L}'(\hat{q}', \dot{\hat{q}}').$$

Assim, o princípio variacional é covariante sob transformações de coordenadas arbitrárias

$$\delta \langle q'_2, t_2 | q'_1, t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle q'_2, t_2 | \delta \hat{S}'(\hat{q}'_2, t_2; \hat{q}'_1, t_1) | q'_1, t_1 \rangle, \quad (3.15)$$

ou seja, o princípio (3.15) não é idêntico ao princípio (2.26), embora mantenha a mesma forma. Além disso, se considerarmos variações nas coordenadas e no tempo, e acompanhamos o mesmo procedimento do capítulo anterior, encontraremos as mesmas equações de movimento e relações de comutação que as correspondentes ao sistema  $\{q_i\}$ . Conseqüentemente, estas transformações são transformações “canônicas” [13, 19].

Por outro lado, não conhecemos como o operador momento se transforma diretamente. Para não enfrentar esta dificuldade diretamente, fazemos uma transformação intermediária. Convertendo as coordenadas para momentos e voltando a transformar estes momentos para novas coordenadas, ou seja, fazemos a operação:  $\hat{q} \rightarrow \hat{p} \rightarrow \hat{q}'$ . Nos valendo da analogia com transformações canônicas da mecânica clássica, podemos definir o operador ação correspondente a estas transformações como:

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \{ \hat{q}^i - \hat{q}^i(\hat{q}'), \hat{p}_i \}, \quad (3.16)$$

na qual consideramos simetrização para não termos problemas de ordenamento. Calculando a variação deste operador temos

$$\begin{aligned}\delta\hat{S} &= \frac{1}{2} \{ \delta\hat{q}^i - \delta\hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \hat{p}_i \} + \frac{1}{2} \{ \hat{q}^i - \hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \delta\hat{p}_i \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \delta\hat{q}^i, \hat{p}_i \} - \frac{1}{2} \{ \delta\hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \hat{p}_i \} + \frac{1}{2} \{ \hat{q}^i, \delta\hat{p}_i \} - \frac{1}{2} \{ \hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \delta\hat{p}_i \},\end{aligned}\quad (3.17)$$

como as relações de comutação

$$[\hat{q}^i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_j^i, \quad (3.18)$$

$$[\delta\hat{q}^i, \hat{p}_j] = [\hat{q}^i, \delta\hat{p}_j] = \hat{0}, \quad (3.19)$$

$$[\delta\hat{q}^i, \hat{q}^j] = [\hat{p}_i, \delta\hat{p}_j] = \hat{0}, \quad (3.20)$$

são mantidas, reescrevemos a variação da ação (3.17) da forma:

$$\begin{aligned}\delta\hat{S} &= \delta\hat{q}^i\hat{p}_i + \hat{q}^i\delta\hat{p}_i - \frac{1}{2} (\{ \delta\hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \hat{p}_i \} + \{ \hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \delta\hat{p}_i \}) \\ &= \delta\hat{q}^i\hat{p}_i + \hat{q}^i\delta\hat{p}_i - \frac{1}{2} \left( \left\{ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \delta\hat{q}^{'j}, \hat{p}_i \right\} + \{ \hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \delta\hat{p}_i \} \right) \\ &= \hat{p}_i\delta\hat{q}^i - \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}}, \hat{p}_i \right\} \delta\hat{q}^{'j} + \left[ \hat{q}^i\delta\hat{p}_i - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} [\delta\hat{q}^{'j}, \hat{p}_i] + \{ \hat{q}^i(\hat{\mathbf{q}}'), \delta\hat{p}_i \} \right) \right].\end{aligned}$$

Porém, mantendo-se a forma canônica da variação da ação:

$$\delta\hat{S} = \hat{p}_i\delta\hat{q}^i - \hat{p}_j'\delta\hat{q}^{'j},$$

identificamos o novo momento nas coordenadas linha como um vetor simetrizado:

$$\begin{aligned}\hat{p}_j' &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}}, \hat{p}_i \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \hat{p}_i + \hat{p}_i \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \right) + \frac{1}{2} \left( \hat{p}_i \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} - \hat{p}_i \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \right) \\ &= \hat{p}_i \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}}, \hat{p}_i \right],\end{aligned}\quad (3.21)$$

também tendo o possível arranjo:

$$\begin{aligned}\hat{p}_j' &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}}, \hat{p}_i \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \hat{p}_i + \hat{p}_i \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \hat{p}_i - \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \hat{p}_i \right) \\ &= \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}} \hat{p}_i - \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial\hat{q}^i(q')}{\partial\hat{q}^{'j}}, \hat{p}_i \right].\end{aligned}\quad (3.22)$$

Esta transformação concorda com as propostas em [13, 20], as quais fazem uma abordagem completamente diferente.

### 3.5 Hamiltoniano Quântico para uma Partícula Livre

A construção de um hamiltoniano quântico tem apresentado uma ambigüidade nas distintas aproximações à Mecânica Quântica em espaços curvos. Devido aos problemas de ordenamento o hamiltoniano não é único. Em várias abordagens se tem proposto diferentes tentativas para solucionar essa ambigüidade; inicialmente, Podolsky [21], propôs o uso do operador de Laplace-Beltrami para a formulação Canônica da Mecânica Quântica, também DeWitt trabalhou nessas tentativas, somando um termo a mais ao Hamiltoniano proporcional à curvatura do espaço e usando o formalismo de Integrais de Caminho de Feynman [11]. Esta contribuição proporcional a  $\hbar^2 R^\dagger$  no hamiltoniano não é descartada nem confirmada, já que experimentalmente medimos diferenças de energias e este termo não contribui quando a curvatura do espaço é constante, porém nem sempre a curvatura é constante, mas nestes casos a contribuição do  $R$  resulta muita pequena e não-detectável.

O Princípio Variacional de Schwinger não remove a ambigüidade na escolha do Hamiltoniano, todavia podemos exigir algum tipo de invariância na ação sob algum tipo de transformação e assim reduzir essa ambigüidade.

Sob transformações gerais de coordenadas o operador momento transforma-se como um vetor simetrizado

$$\hat{p}'_j = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \hat{q}^i(q')}{\partial \hat{q}^j}, \hat{p}_i \right\},$$

se consideramos a métrica como uma função só das coordenadas não apresenta problemas de ordenamento ao propor que ela se transforme sob mudanças de coordenadas da forma:

$$\hat{g}'^{ij} = \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^k} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^l} \hat{g}^{kl}.$$

Sem tomar nenhuma representação privilegiada, existem muitos operadores Hamiltonianos quânticos que cumprem no limite clássico

$$H = \frac{1}{2m} p_i g^{ij} p_j,$$

porém nem todos eles são invariantes sob transformações gerais de coordenadas. Superando essa dificuldade e mantendo a coerência com o Princípio Variacional, construímos um hamiltoniano hermitiano e invariante sob transformações de coordenadas da forma<sup>§</sup>:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_k \hat{g}^{kl} \hat{p}_l + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^l} + \frac{1}{2} \hat{\Gamma}_l \right) \hat{g}^{lk} \hat{\Gamma}_k \right], \quad (3.23)$$

ou, numa forma mais compacta,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{g}^{-1/4} \hat{p}_k \hat{g}^{1/2} \hat{g}^{kl} \hat{p}_l \hat{g}^{-1/4} \right).$$

Note-se que o termo extra em (3.23) proporcional a  $\hbar^2$  é diferente de zero quando o espaço é curvo, e também em espaços planos quando são usadas coordenadas curvilíneas.

<sup>†</sup>  $R$  é o Escalar de Ricci, definido como a contração do tensor de Ricci com a métrica  $g^{ab} R_{ab}$ .

<sup>§</sup> Ver Apêndice A

### 3.6 Operador Principal de Hamilton

Partindo do princípio de Schwinger

$$\delta \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2 | \delta \hat{S}_{2,1} | b, t_2 \rangle \quad (3.24)$$

e supondo que a ação  $\hat{S}$  possa ser colocada de uma forma bem ordenada, no operador  $\hat{W}$ , (3.24) pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \delta \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle a, t_2 | \delta \hat{W}_{2,1} | b, t_1 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \delta W_{2,1} \langle a, t_2 | b, t_1 \rangle \end{aligned}$$

e assim, integrando, encontramos a função de transformação diretamente do  $W$

$$\langle a, t_2 | b, t_1 \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} W_{2,1}} \quad (3.25)$$

na qual a constante de integração foi incluída em  $W$ .

#### 3.6.1 Equação Operacional de Hamilton-Jacobi

Agora só precisamos encontrar a forma do Operador Principal de Hamilton  $W$  para conseguirmos obter a respectiva função de transformação. Sabemos que a evolução temporal das amplitudes de transição vem descrita pela equação de Schrödinger e considerando o resultado (3.25)

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{H} | \psi \rangle &= \frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial t} = \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar} W}}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial t} \langle q, t | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Desta forma pode-se expressar o operador Hamiltoniano em função do operador ação ordenado

$$\langle q, t | \hat{H} | \psi \rangle = - \left\langle q, t \left| \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle, \quad (3.27)$$

Por outro lado, sabemos que o operador momento atuando sobre a representação de coordenadas se comporta da forma

$$\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p}_i | \psi \rangle = \nabla_i \langle q, t | \psi \rangle \quad (3.28)$$

na qual expressamos de maneira compacta  $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i}$ , assim

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p}_i | \psi \rangle &= \left( \frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} \right) e^{\frac{i}{\hbar} W} \\ &= \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial q^i} + \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} \right) \langle q, t | \psi \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left( \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}^i} - \frac{i\hbar}{2\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial \hat{q}^i} \right) \right| \psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Conseqüentemente

$$\hat{p}_i = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}^i} - \frac{i\hbar}{2\sqrt{\hat{g}}} \frac{\partial \sqrt{\hat{g}}}{\partial \hat{q}^i} = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}^i} - \frac{i\hbar}{2} \hat{\Gamma}_i \quad (3.29)$$

assim, de (3.27) e (3.29), conseguimos a equação operacional de Hamilton-Jacobi

$$\hat{H} \left( \hat{q}, \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}} - i\hbar \hat{\Gamma}, t \right) + \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = 0 \quad (3.30)$$

Esta abordagem torna-se difícil devido à exigência de propor um operador ordenado  $\hat{W}$ , escolha não trivial para casos em que o operador métrico e o operador momento não comutam.

### 3.7 Aplicação: Partícula Livre sobre um círculo

No caso da partícula livre sobre o círculo o operador Hamiltoniano tem a forma simples:

$$\hat{H} = \frac{1}{2mR^2} \hat{p}_\theta^2. \quad (3.31)$$

Este problema é unidimensional com o raio da circunferência constante. Podemos notar que o segundo termo no hamiltoniano geral (3.23), que está relacionado com curvatura intrínseca da geometria, é nulo e não contribui para o Hamiltoniano.

O princípio variacional de Schwinger nos diz que:

$$\begin{aligned} \delta \langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\langle \theta, t \left| \left[ \hat{p}_\theta \delta \hat{\theta} - \delta t' \hat{H} \right]_{t_0}^t \right| \theta_0, t_0 \right\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\langle q, t \left| \left[ \hat{p}_\theta(t) \delta \hat{\theta}(t) - \hat{p}_\theta(t_0) \delta \hat{\theta}(t_0) - (\delta t - \delta t_0) \hat{H} \right] \right| q_0, t_0 \right\rangle. \end{aligned}$$

As equações de Heisenberg são dadas por

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_\theta}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_\theta, \hat{H}] = 0 \\ \frac{d\hat{\theta}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{\theta}, \hat{H}] = -\frac{i}{2m\hbar R^2} [\hat{\theta}, \hat{p}_\theta^2] \\ &= -\frac{i}{2m\hbar R^2} (\hat{p}_\theta [\hat{\theta}, \hat{p}_\theta] + [\hat{\theta}, \hat{p}_\theta] \hat{p}_\theta) \\ &= \frac{\hat{p}_\theta}{mR^2}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Para calcular o comutador entre os operadores coordenadas e momento, consideramos que possuem o mesmo domínio e este é infinito. Resolvendo a equação diferencial temos que

$$\hat{\theta} = \hat{\theta}_0 + \frac{\hat{p}_\theta}{mR^2} (t - t_0). \quad (3.33)$$

Assim, podemos expressar o operador momento em função das coordenadas

$$\begin{aligned}
\hat{p}_\theta &= \hat{p}_\theta(0) = mR^2 \frac{(\hat{\theta} - \hat{\theta}_0)}{(t - t_0)} \\
&= mR^2 \frac{\Delta \hat{\theta}}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

e conseqüentemente o hamiltoniano também é expresso só como função das coordenadas

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2mR^2} \left( mR^2 \frac{\Delta \hat{\theta}}{\Delta t} \right)^2 \\
&= \frac{mR^2}{2\Delta t^2} (\hat{\theta}^2 + \hat{\theta}_0^2 - 2\hat{\theta}\hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_0\hat{\theta}_n).
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Usando a relação de comutação entre os operadores coordenada e momento, podemos conseguir a relação de comutação entre os operadores coordenadas a tempos diferentes. Assim, obtemos que

$$\begin{aligned}
[\hat{\theta}, \hat{p}_\theta] &= i\hbar \hat{1} \\
&= -\frac{mR^2}{\Delta t} [\hat{\theta}, \hat{\theta}_0];
\end{aligned} \tag{3.36}$$

dessa forma

$$[\hat{\theta}, \hat{\theta}_0] = -\frac{i\hbar\Delta t}{mR^2} \hat{1}. \tag{3.37}$$

O hamiltoniano ordenado toma a forma

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{mR^2}{2\Delta t^2} \left( \hat{\theta}^2 + \hat{\theta}_0^2 - 2\hat{\theta}\hat{\theta}_0 - \frac{i\hbar\Delta t}{mR^2} \right) \\
&= \frac{mR^2}{2\Delta t^2} (\hat{\theta}^2 + \hat{\theta}_0^2 - 2\hat{\theta}\hat{\theta}_0) - \frac{i\hbar}{2\Delta t}.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Substituímos na equação variacional para a função de transformação; o hamiltoniano ordenado e o momento em função das coordenadas

$$\begin{aligned}
\delta \langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle \theta, t | [\hat{p}_\theta(t) \delta \hat{\theta}(t) - \hat{p}_\theta(t_0) \delta \hat{\theta}(t_0) - (\delta t - \delta t_0) \hat{H}] | \theta_0, t_0 \rangle \\
&= \frac{i}{\hbar} \langle \theta, t | \left[ \frac{mR^2}{\Delta t} (\hat{\theta} - \hat{\theta}_0) \delta (\hat{\theta} - \hat{\theta}_0) - \delta(t - t_0) \frac{mR^2}{2\Delta t^2} (\hat{\theta}^2 + \hat{\theta}_0^2 - 2\hat{\theta}\hat{\theta}_0) + \right. \\
&\quad \left. + \delta(t - t_0) \frac{i\hbar}{2\Delta t} \right] | \theta_0, t_0 \rangle \\
&= \left[ \frac{imR^2}{\hbar} \left( \frac{\Delta \theta}{\Delta t} \delta \Delta \theta - \frac{\Delta \theta^2}{2\Delta t^2} \delta \Delta t \right) - \frac{1}{2\Delta t} \delta \Delta t \right] \langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle,
\end{aligned}$$



desta maneira conseguimos uma equação integrável para a função de transformação nas coordenadas

$$\frac{\delta \langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle}{\langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle} = \frac{imR^2}{\hbar} \delta \left( \frac{\Delta \theta^2}{2\Delta t} \right) - \frac{1}{2} \delta \ln \Delta t \quad (3.39)$$

da que obetmos

$$\ln \langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle = \frac{imR^2}{\hbar} \frac{\Delta \theta^2}{2\Delta t} - \frac{1}{2} \ln \Delta t \quad (3.40)$$

$$\langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle = \frac{A}{\sqrt{\Delta t}} \exp \left[ \frac{imR^2}{\hbar} \frac{(\theta - \theta_0)^2}{2\Delta t} \right] \quad (3.41)$$

$A$  é uma constante de integração. Pela periodicidade do movimento temos que  $\theta(t)$  e  $\theta(t) + 2n\pi$  são dois pontos indistinguíveis, desta maneira a função de transformação levará a uma função de onda multivalente e para que a probabilidade se conserve devemos substituir  $\theta(t) \rightarrow \theta(t) + 2n\pi$  e somar sobre todos os números inteiros, restringindo os valores que pode tomar a coordenada  $\theta$  entre  $0 \leq \theta < 2\pi$ , no qual excluimos o ponto  $2\pi$  para evitarmos dupla contribuição dos pontos idênticos  $\theta = 0$  e  $\theta = 2\pi$

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \frac{A}{\sqrt{\Delta t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \frac{imR^2}{2\hbar} \frac{(\theta + 2n\pi - \theta_0)^2}{\Delta t}. \quad (3.42)$$

Podemos encontrar o valor da constante  $A$  usando a condição de normalização

$$\langle q, t_0 | q_0, t_0 \rangle = \Delta (q - q_0) = \frac{1}{R} \delta (\theta - \theta_0). \quad (3.43)$$

Para expressar esta condição de uma maneira mais vantajosa, usamos a fórmula de Poisson

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x + nT) = \frac{1}{T} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{f} \left( \frac{k}{T} \right) e^{2\pi i \frac{k}{T} x}$$

na qual  $\hat{f}$  é a transformada de Fourier da função  $f$ . Tomando como função a distribuição delta de Dirac, cuja transformada de Fourier é

$$\hat{\delta}(x) = \frac{1}{2\pi},$$

e considerando o período  $T = 2\pi$ ,

$$\delta \left( \frac{x}{2\pi} \right) = 2\pi \delta(x) \rightarrow \hat{\delta} \left( \frac{x}{2\pi} \right) = 1,$$

encontramos que a soma de funções delta periódicas é igual à função delta no ponto

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + 2\pi n) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ikx},$$



já que a função delta de Dirac pode ser expressa também como

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ikx}$$

Assim, expressamos o lado direito de (3.43) como uma somatória de funções delta periódicas

$$\langle q, t_0 | q_0, t_0 \rangle = \frac{1}{R} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\theta - \theta_0 + 2\pi n). \quad (3.44)$$

Além disso temos da definição de delta de Dirac

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{l}{\sqrt{\pi}} \exp(-l^2 x^2) = \delta(x);$$

que podemos reescrever a parte direita de (3.44) como um limite

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\theta - \theta_0 + 2\pi n) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(R[\theta - \theta_0 + 2\pi n]) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{l}{\sqrt{\pi}} e^{-l^2 R^2 (\theta - \theta_0 + 2\pi n)^2}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

e comparando com a solução (3.42)

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \lim_{t \rightarrow t_0} \frac{A}{\sqrt{\Delta t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{mR^2 (\theta - \theta_0 + 2\pi n)^2}{2\hbar i \Delta t} \right],$$

temos que

$$l^2 = \frac{m}{2i\hbar\Delta t},$$

quando

$$t \rightarrow t_0 \implies n \rightarrow \infty.$$

Desta forma para que se cumpra a relação de ortogonalidade

$$A = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi}}, \quad (3.46)$$

e a amplitude de transição é dada por

$$\langle \theta, t | \theta_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi\Delta t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{mR^2 (\theta - \theta_0 + 2\pi n)^2}{2i\hbar \Delta t} \right]. \quad (3.47)$$

## Espectro de Energia

Para calcular o espectro de energia, vamos usamos a fórmula de Poisson em (3.47) tal que

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\alpha(\Delta\theta + 2n\pi)^2} = \frac{1}{2\pi} \beta \sqrt{\frac{\pi}{-i\alpha}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp -i \left[ k^2 \frac{\pi^2}{\alpha} - k\Delta\theta \right],$$

na qual usamos a transformada de Fourier

$$f(x) = e^{-ax^2} \rightarrow \hat{f}(k) = \sqrt{\frac{1}{4\pi a}} e^{-\frac{k^2}{4a}},$$

e com definimos as quantidades

$$\begin{aligned} \beta &= \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi\Delta t}} \\ \alpha &= \frac{mR^2}{2\hbar\Delta t}. \end{aligned}$$

Assim, reescrevemos (3.47) de uma maneira mas conveniente

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \frac{1}{2\pi R} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp -i \left[ n^2 \frac{2\pi^2 \hbar \Delta t}{mR^2} - n(\theta - \theta_0) \right]. \quad (3.48)$$

Se na amplitude de transição; igualamos  $q = q_0$  e integramos sobre as posições  $q$  encontramos que este define o traço do operador evolução temporal

$$\int dv_q \langle q, t | q, t_0 \rangle = \int dv_q \langle q, t_0 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | q, t_0 \rangle = \text{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right); \quad (3.49)$$

porém, de (3.48) temos que

$$\begin{aligned} \int dv_q \langle q, t | q, t_0 \rangle &= \int_0^{2\pi} d\theta R \frac{1}{2\pi R} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp i \left[ n^2 \frac{2\pi^2 \hbar \Delta t}{mR^2} \right] \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i \frac{2\pi^2 \hbar n^2}{mR^2} \Delta t}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

A parte direita de (3.49) é dada por

$$\begin{aligned} \text{tr} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right) &= \int dv_q \left\langle q, t_0 \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} |E_n\rangle \langle E_n| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} \right| q, t_0 \right\rangle \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \Delta t} \int dv_q \langle q, t_0 | E_n \rangle \langle E_n | q, t_0 \rangle \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \Delta t} \langle E_n | E_n \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \Delta t}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

e comparando (3.50) com (3.51) encontramos que o espectro de energia é dado por

$$E_n = \frac{2\pi^2\hbar^2 n^2}{mR^2}. \quad (3.52)$$

Mais ainda, a função de transformação (3.48) resulta ser a função clássica Theta de Jacobi, definida como uma função analítica em duas variáveis:

$$\theta_3(z, \tau) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp(\pi i n^2 \tau + 2\pi i n z), \quad (3.53)$$

na qual  $z \in \mathbb{C}$  e  $\tau \in \mathbb{H}$  (o plano superior  $\text{Im}\tau > 0$ ), sendo assim  $\theta_3$  uma função real avaliada em duas variáveis reais [17]. Comparando-a com (3.48), reescrevemos a solução como:

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \frac{1}{2\pi R} \theta_3(z, \tau), \quad (3.54)$$

definindo

$$\begin{aligned} z &\equiv \frac{\Delta\theta}{2\pi} \\ \tau &\equiv -\frac{2\pi\hbar\Delta t}{mR^2}. \end{aligned}$$

O círculo não tem curvatura intrínseca, razão pela qual o termo no hamiltoniano proporcional a  $\hbar^2$  é nulo. Porém, impomos a condição de periodicidade na coordenada  $\theta$  para garantir a curvatura extrínseca do problema.

A amplitude de transição em função da função theta; têm periodicidade em  $z \rightarrow z+1$ , o que garante uma periodicidade na coordenada  $\theta$  com  $\theta \rightarrow \theta+2\pi$ . Alias, satisfaz a equação de dispersão de calor, a qual em nossas variáveis torna-se a equação de Schrödinger.

---

## Conclusão

Nessa dissertação fizemos um estudo do Princípio Variacional de Schwinger e seus fundamentos com o objetivo de estendê-lo a aplicações em espaços curvos. Nos primeiros dois capítulos fizemos a descrição da cinemática do formalismo, seguida da dinâmica pela teoria derivada de um só princípio fundamental: o Princípio Variacional de Schwinger!

Vimos como o Princípio Variacional é facilmente aplicável em espaços planos, ilustrando isso com duas aplicações simples: a partícula livre e o Oscilador Harmônico. Na primeira aplicação conseguimos encontrar a função de transformação que descreve a dinâmica do sistema. No segundo, além de conseguir a função de transformação, encontramos o espectro de energia do sistema e as autofunções expressas em Polinômios de Hermite

Obtivemos que em espaços curvos o operador momento torna-se uma derivada covariante sob a exigência de hermiticidade do operador, um resultado concordante com outras propostas na literatura [20]. Vimos também que no estudo do momento sob transformação de coordenadas ele se transforma como um vetor sob simetrização. Além disso, concluímos que a função de onda não é um escalar sob transformação de coordenadas, mas uma densidade escalar.

Embora a formulação não permita eliminar os problemas de ambigüidade na escolha do hamiltoniano quântico, propusemos um Hamiltoniano consistente com o formalismo somando um termo a mais na contribuição cinética, termo que é dependente da geometria do espaço, que contribuirá tanto em espaços curvos quanto no uso de coordenadas curvilíneas em espaços planos. Este Hamiltoniano é consistente com outros trabalhos, como o apresentado em [22].

O problema da partícula sobre o círculo não apresenta problemas de ordenamento, e a contribuição extra do termo cinético é nula, por ser a métrica do espaço constante. A função de transformação que descreve o movimento de uma partícula sobre um círculo é expressa como uma função especial Theta de Jacobi, sendo quase-periódica.

Faz-se necessário o desenvolvimento de outras técnicas mais eficientes para a resolução de problemas via o Princípio Variacional, pois as principais dificuldades se apresentam quando tentamos resolver as equações de movimento para os operadores canônicos e elas ocorrem pela não comutatividade entre o momento e a métrica. Tentando facilitar estes cálculos poderíamos usar a equação quântica de

Hamilton-Jacobi, porém tem-se que postular um “operador ação”ordenado e esta escolha já apresenta grande dificuldade e ambigüidade no caso da partícula sobre a esfera.

Entre as possíveis extensões deste trabalho está a resolução da partícula livre sobre uma esfera bi-dimensional e sua generalização a qualquer dimensão.

Sendo mais ambiciosos, tem-se principal interesse no estudo do átomo de hidrogênio, que sendo o análogo quântico ao problema clássico de Kepler, e aproveitando suas simetrias pode-se considerar as transformações de Kustaanheimo-Stiefel, as quais nos levam de um espaço plano tridimensional a um espaço quadri -dimensional com curvatura e torção [23], tornando assim possível a aplicação do Princípio Variacional em espaços curvos.

## Apêndice A

---

### Transformação de Coordenadas para o hamiltoniano

---

Numerosos Hamiltonianos quânticos livres podem ser reduzidos ao limite clássico:

$$H = \frac{1}{2m} g^{ij} p_i p_j,$$

porém nem todos eles são invariantes sob transformações gerais de coordenadas. Consideramos o Hamiltoniano de uma partícula livre sobre um espaço curvo como sendo o Hamiltoniano quântico mais simples:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_i g^{ij} \hat{p}_j. \quad (\text{A.1})$$

Conhecendo como o operador momento e a métrica se comportam sob transformação de coordenadas

$$\hat{p}'_i = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^i} \hat{p}_n + \hat{p}_n \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^i} \right) \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{g}'^{ij} = \frac{\partial \hat{q}'^i}{\partial \hat{q}^k} \frac{\partial \hat{q}'^j}{\partial \hat{q}^l} \hat{g}^{kl}, \quad (\text{A.3})$$

nos dispomos a exigir a invariância do operador (A.1). Faremos frequente uso da relação de comutação entre qualquer função das coordenadas e o operador momento:

$$[f(\hat{q}), \hat{p}_k] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{q}^k} f(\hat{q}). \quad (\text{A.4})$$

Tomando (A.1) nas coordenadas transformadas

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}'_i g'^{ij} \hat{p}'_j,$$

e substituindo (A.2) e (A.3) observamos que o Hamiltoniano transforma-se como:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^i} \hat{p}_n + \hat{p}_n \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^i} \right) \frac{\partial \hat{q}'^i}{\partial \hat{q}^k} \frac{\partial \hat{q}'^j}{\partial \hat{q}^l} \hat{g}^{kl} \left( \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}'^j} \hat{p}_m + \hat{p}_m \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}'^j} \right) \right]$$

[illegible]

Notamos assim que o Hamiltoniano (A.1) não é invariante. Porém, observando os termos extras na transformação e sabendo que a conexão se transforma como:

$$\Gamma'_j = \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^j} \Gamma_n + \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}'^j} \right),$$

construímos um termo da forma:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \hat{g}^i} + \frac{1}{2}\Gamma_i\right)g^{ij}\Gamma_j, \quad (\text{A.5})$$

o qual é hermitiano e se transforma sob mudança de coordenadas como:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^i} + \frac{1}{2} \Gamma'_i \right) g'^{ij} \Gamma'_j &= \left[ \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} + \frac{1}{2} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \Gamma_n + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \right] \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \Gamma_m + \\ &+ \left[ \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} + \frac{1}{2} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \Gamma_n + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \right] \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \\ \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^i} + \frac{1}{2} \Gamma'_i \right) g'^{ij} \Gamma'_j &= \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \left( \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \Gamma_k \right) + \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \left[ \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \Gamma_l g^{lk} \Gamma_k + \frac{1}{2} \Gamma_l g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \Gamma_k \\ &+ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}^i} + \frac{1}{2}\Gamma'_i\right) g'^{ij} \Gamma'_j &= \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \left[ \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \left( \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \Gamma_k \right) \right] - \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \Gamma_k \\
&+ \frac{\partial}{\partial \hat{q}^l} \left[ g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \right] - \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \Gamma_l g^{lk} \Gamma_k + \frac{1}{2} \Gamma_l g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \Gamma_k \\
&+ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}^i} + \frac{1}{2}\Gamma'_i\right) g'^{ij} \Gamma'_j &= \left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}^l} + \frac{1}{2}\Gamma_l\right) g^{lk} \Gamma_k + \frac{\partial}{\partial \hat{q}^l} \left[ g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right) \right] \\
&- \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^n} \frac{\partial \hat{q}^n}{\partial \hat{q}^i} \right) \frac{\partial \hat{q}^i}{\partial \hat{q}^l} g^{lk} \frac{\partial \hat{q}^j}{\partial \hat{q}^k} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{q}^m}{\partial \hat{q}^j} \right). \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

Assim, construímos um Hamiltoniano hermitiano e invariante sob transformação geral de coordenadas da forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_k g^{kl} \hat{p}_l + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{q}^k} + \frac{1}{2}\Gamma_k \right) g^{kl} \Gamma_l \right]. \quad (\text{A.7})$$

---

## Referências Bibliográficas

---

- [1] P. A. M. Dirac, "*The Principles of Quantum Mechanics*," (Oxford: Clarendon Press, 1958)
- [2] de Melo, Cássius Anderson Miquele, *Princípio Variacional de Schwinger e Teoria Quântica: Aplicações à Mecânica Quântica Quaterniônica e ao Estudo de Sistemas Singulares*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física Teórica - UNESP, (2002).
- [3] Ramirez Bedoya, John Alexander, *Formalismo de Schwinger para Trajetórias Temporalmente Fechadas*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física Teórica - UNESP, (2009).
- [4] P. A. M. Dirac, "The Lagrangian in Quantum Mechanics," *Phys. Z. Sowjetunion* **3**, 64 (1933).
- [5] Feynman P. Richard., Brown M. Laurie (Editor), Feynman Thesis "*A new approach to quantum mechanics*", (World Scientific Publishing Co. Pre.Ldt, 2005)
- [6] J. S. Schwinger, "The theory of quantized fields. I," *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951).
- [7] J. S. Schwinger, "The theory of quantized fields. II," *Phys. Rev.* **91**, 713 (1953).
- [8] S. S. Schweber, "*QED and the men who made it: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga*," (Princeton University Press, 1994).
- [9] J. S. Schwinger, "The Algebra of Microscopic Measurement," *Proc. Nat. Acad. Sci.* **45**, 1542 (1959).
- [10] J. S. Schwinger, "Unitary Transformations and The Action Principle," *Proc. Nat. Acad. Sci.* **46**, 883 (1960).
- [11] B. S. DeWitt, "Dynamical theory in curved spaces. 1. A Review of the classical and quantum action principles," *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957).
- [12] T. Kawai, "Schwinger's variational principle in quantum mechanics with velocity dependent potential. 1. one dimensional case," *Prog. Theor. Phys.* **48**, 2082 (1972).

- [13] H. Kamo and T. Kawai, "Schwingers's variational principle in quantum mechanics with velocity dependent potential. 3," *Prog. Theor. Phys.* **50**, 680 (1973).
- [14] S. S. Schweber, "The sources of Schwinger's Green's functions," *Proc. Nat. Acad. Sci.* **102**, 7783 (2005).
- [15] J.J. Sakurai, "*Modern Quantum Mechanics*," (Addison-Wesley Publishing Company, 1994)
- [16] Julian S. Schwinger, "*Quantum Mechanics. Symbolism of Atomic Measurements*", (Springer , 2001)
- [17] Earl D. Rainvillee, "*Special Functions*" (The Macmillan Company, 1960)
- [18] A. Erdelyi, "*Higher Transcendental Functions Vol.III*" (Robert E. Krieger Publishing Company, 1987)
- [19] B. S. DeWitt, "Point Transformations in Quantum Mechanics," *Phys. Rev.* **85**, 653 (1952).
- [20] N. M. Chepilko and A. V. Romanenko, "Quantum mechanics on Riemannian manifold in Schwinger's quantization approach. I," *Eur. Phys. J. C* **21**, 369 (2001) [arXiv:hep-th/0102139].
- [21] B. Podolsky, "Quantum-Mechanically Correct Form of Hamiltonian Function for Conservative Systems," *Phys. Rev.* **32**, 812 (1928).
- [22] M. S. Marinov, "Path Integrals in Quantum Theory: An Outlook of Basic Concepts," *Phys. Rept.* **60**, 1 (1980).
- [23] H. Kleinert "*Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, And Financial Markets*", (World Scientific Publishing Co. Pre.Ldt)

