IFT

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO IFT–D.004/02

Princípio Variacional de Schwinger e Teoria Quântica - Aplicações à Mecânica Quântica Quaterniônica e ao Estudo de Sistemas Singulares

Cássius Anderson Miquele de Melo

Orientador

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

Fevereiro 2002

Índice

[1]Uma breve descrição de como se dá a análise dos dados de Cauchy de um determinado problema, encontra-se no apêndice C.

Agradecimentos

À minha família. Em especial às minhas filhas, Linda e Lílian, à minha mãe, Auxiliadora, à vovó Reneé e ao padrinho Raimundo; pela vida que sempre me deram.

Aos meus amigos Rodrigo, Léo e Pejé, que nunca faltaram nos momentos em que mais precisei deles.

Ao professor Bruto Max Pimentel, pelos longos anos de amizade e por ter sido o meu pai na rua.

Aos funcionários do IFT, pelo auxílio que sempre me prestaram. Em especial à saudosa bibliotecária Marina.

À FAPESP, pelo apoio financeiro (processo 99/09091-0).

Para minhas filhas. Por serem as duas metades da minha verdade.

VERDADE

“A porta da verdade estava aberta,
mas só deixava passar
meia pessoa de cada vez.
Assim não era possível atingir toda a verdade,
porque a meia pessoa que entrava
só trazia o perfil de meia verdade.
E sua segunda metade
voltava igualmente com meio perfil
E os meios perfis não coincidiam.
Arrebentaram a porta. Derrubaram a porta
Chegaram ao lugar luminoso
onde a verdade esplendia seus fogos.
Era dividida em metades
diferentes uma da outra.
Chegou-se a discutir qual a metade mais bela.
Nenhuma das duas era totalmente bela.
E carecia optar. Cada um optou conforme
seu capricho, sua ilusão, sua miopia.”

Carlos Drummond de Andrade

Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo detalhado da abordagem de Schwinger para a Mecânica Quântica, fazendo sua generalização para sistemas com escalares pertencentes ao conjunto dos quatérnions. Analisamos, em especial, a estrutura da Álgebra de Medida e sua relação com as propriedades físicas observáveis.

Estudamos ainda o problema da liberdade de gauge relacionado à quantização do campo eletromagnético livre, e implementamos uma solução alternativa para este problema utilizando o Princípio Variacional de Schwinger, e o campo auxiliar $B(x)$ introduzido por Nakanishi.

Palavras Chave: formulação variacional da Mecânica Quântica, formalismo de B-field, quantização de Sistemas Singulares.
Área de conhecimento: 1.05.03.01-3

Abstract

In this work we have presented a detailed study of the Schwinger´s approach to the Quantum Mechanics, making its generalization for systems with scalars which belong to the quaternion set. In particular, we have analysed the structure of the Algebra of Measurement and its relation with the observable physical properties.

We have also studied the problem of the gauge freedom related to the quantization of the free electromagnetic field and implemented an alternative solution to this one employing the Schwinger´s Variational Principle and the B-field introduced by Nakanishi.

Keywords: variational formulation of Quantum Mechanics, B-field formalism, quantization of Singular Systems.

Introdução

"Fausto (ofuscado):

A noite parece adentrar-se profundamente,

Somente no interior resplandece clara luz..."

Goethe, Fausto.

Este trabalho busca estudar os fundamentos da cinemática e dinâmica quânticas de Schwinger, para sistemas elementares. Por "elementar" deve-se entender aqui o escopo principal da mecânica quântica não-relativística aplicada aos mais simples sistemas físicos. Procuramos ao longo deste trabalho, sempre que possível, fazer um estudo cuidadoso de questões difíceis concernentes à interpretação física da mecânica quântica.

Essas questões de interpretação têm sido fontes de dificuldades desde o estabelecimento da teoria há cerca de oitenta anos, permanecendo em aberto até os dias de hoje. Elas têm sido assunto de numerosas controvérsias e continuam a dar dores de cabeça em estudantes contemporâneos do assunto (como o autor e alguns de seus amigos bem o sabem!).

A despeito dessas dificuldades, a Mecânica Quântica é indispensável para as mais modernas pesquisas em Física. Por esta razão, qualquer um que trabalhe com Física deve saber como usar um mínimo da linguagem quântica. Em muitas formas de trabalho, um uso apropriado da linguagem é mais do que suficiente. Um conhecimento profundo do significado de uma teoria não é, portanto, absolutamente indispensável.

A tendência pragmática da física moderna têm obscurecido a diferença entre *uso apropriado de uma linguagem* e *compreensão do significado de seus conceitos*. Muito daquilo que é ensinado na grade curricular de um curso regular de Mecânica Quântica, aborda somente técnicas particulares de aproximação (tais como teoria de perturbação, diagramas de Feynmann e relações de dispersão), dando uma ênfase tão grande a tais assuntos, que muitos são levados a acreditar que estas técnicas úteis são, de fato, as bases conceituais da teoria. Esta tendência reflete-se, claramente, nos índices de venda de certos livros texto, e é largamente encorajada por alguns proeminentes físicos.

Este texto, ao contrário, não concentra-se sobre aplicações ou aproximações, mas sim sobre os fundamentos conceituais da Mecânica Quântica. Restringiremo-nos a aspectos gerais da teoria não-relativística e a uns poucos exemplos de sistemas relativísticos com infinitos graus de liberdade. Neste trabalho, exceto quando explicitamente citado, utilizaremo-nos do sistema de unidades natural, $\hbar = c = 1$.

A Mecânica Quântica envolve dois conjuntos distintos de hipóteses - o esquema matemático geral de operadores lineares e vetores de estado, junto com a sua interpretação probabilista, e as relações de comutação e equações do movimento para um sistema dinâmico específico. É justamente este último aspecto que pretendemos desenvolver, conforme o espírito original dos trabalhos de Schwinger [**?**, **?**, **?**], substituindo por um único princípio dinâmico quântico, o esquema tradicional de premissas baseadas na dinâmica clássica hamiltoniana e no princípio de correspondência.

O que pretendemos aqui é estabelecer uma teoria fundamental da dinâmica dos mais elementares sistemas físicos, baseando-nos, exclusivamente, nos conceitos de *medida* e num *princípio variacional fundamental*.

Devido ao fato de que a nossa linguagem do dia-a-dia, em geral, peca por uma imprecisão que não temos como evitar, apresentaremos no capítulo **??** um arcabouço da definição de uma linguagem precisa, que obedeça a certos esquemas lógicos (para uma idéia matematicamente mais clara dos conceitos envolvidos nesse capítulo, recomendamos que se leia as primeiras partes do artigo de Birkhoff e von Neumann [**?**]), em plena conformidade com os resultados experimentais. Neste mesmo capítulo, trataremos também das razões heurísticas e epistemológicas para tomar o conceito de *medida* como base dessa teoria, bem como a teoria algébrica que ela fundamenta. Em seguida, no capítulo **??**, discutiremos os conceitos da *geometria de estados* que podem ser derivados, de maneira consistente, dessa formulação. No capítulo **??** tentaremos estabelecer os elementos essenciais que determinam a evolução dinâmica de um sistema. Esses elementos servirão de base para o *Princípio Variacional* que será formulado no capítulo **??**. A passagem para sistemas relativísticos com *infinitos graus de liberdade* será feita no capítulo **??**, enquanto que alguns exemplos de *sistemas singulares* serão tratados no capitulo **??**. A seguir, voltamos a discutir a Álgebra de Medida de Schwinger com o intuito de construir uma teoria quântica que utilize como números *quatérnions.* Por fim, no capítulo 8, apresentaremos algumas observações mais sobre o conteúdo exposto. Ao final deste texto, encontram-se também alguns apêndices que visam torná-lo mais claro e autocontido.

Os textos estudados, basicamente, para as discussões acerca da filosofia da Mecânica Quântica, e de como os trabalhos de Schwinger se encaixam dentro desta, foram [**?**, **?**]. Uma discussão interessante acerca dos fundamentos materiais da filosofia da ciência, em geral, encontra-se na referência [**?**].

Este trabalho foi escrito, originariamente, com o intuito de ser transformado em notas internas que auxiliem a outros estudantes interessados na obra de Schwinger[2]. Isto justifica[3] a extensão do mesmo. Além disso, há de se levar em conta que a ciência

[2]Grande parte dos trabalhos de Schwinger acerca da utilização do Princípio Variacional foi desenvolvida e exposta numa série de cursos de verão entre 1952 e 1964 [**?**, **?**, **?**, **?**, **?**, **?**]. Estas referências incluem a localização desses volumes nas bibliotecas do Institutos de Física da USP, e de Física Teórica da Unesp, às quais o autor teve acesso.

[3]Pelo menos em parte!

é um processo *in fieri*. Newton ressaltou-o de modo apropriado, referindo-se à sua própria obra: *"Se eu consegui ver mais longe do que outros, isso se deve ao fato de me haver colocado sobre ombros de gigantes"*. Num trabalho de estudo, como este, precisamos compreender em cada etapa o que pensavam os gigantes, de Planck até Schwinger, e avaliar a evidência de que dispunham. Se parecer demorada a colimação do nosso objetivo e, em especial, se tardar a apresentação de aspectos sensacionais, isso se deverá ao prazer com que encaramos as partes da Física, clássica ou moderna, e à necessidade de subir uma escada percorrendo todos os seus degraus.

Para resumir o estado de espírito ditado por tudo que foi dito nesta introdução até este ponto, que foi o espírito que procuramos manter ao escrever estas notas, citamos um poema de Brecht[4]:

NADA É IMPOSSÍVEL DE MUDAR (*Bertold Brecht*)

"Desconfiai do mais trivial,
na aparência singelo.
E examinai, sobretudo, o que parece habitual.
Suplicamos expressamente:
não aceiteis o que é de hábito
como coisa natural.
Pois em tempo de desordem sangrenta,
de confusão organizada,
de arbitrariedade consciente,
de humanidade desumanizada,
nada deve parecer natural,
nada deve parecer impossível de mudar."

Só nos resta, desse modo, remeter ao próprio trabalho, repetindo antes, contudo,

[4]Apesar deste poema ter sido escrito com uma contextualização mais sociológica, acreditamos que o seu conceito básico pode ser traduzido para a pesquisa em Física, sem grande esforço.

um pedido que tantos autores já fizeram sem êxito, e que o leitor contemporâneo, em especial, raramente considera:

> "Se conheces algo melhor,
> perdoa minha candura; se não, desfruta comigo."
>
> Horácio, Epístola I, 6.

1. Teoria Algébrica de Medida

"O que é pois a ciência, senão apenas uma força da vida? Vocês não engendram a vida. A vida deve antes dar a vida."

Goethe, Zahme Xenien

De acordo com uma crença muito generalizada, a ciência (ou, pelo menos, a "boa ciência") é necessariamente quantitativa. Segundo um corolário muito difundido, e tão duvidoso quanto difundido, fazendo-se estudos quantitativos faz-se "boa ciência". Se um campo de estudos não se desenvolveu de maneira segura e rápida, afirma-se que isto se prende à falta de métodos quantitativos. A afirmação é familiar aos sociólogos, lingüistas e geólogos. Já foi até mesmo discutida por especialistas em história ou ética. Tão comum é a idéia de que uma ciência necessita de procedimentos quantitativos, que estes foram tomados, às vezes, como panacéia para todos os males de que podiam padecer as mais diversas investigações.

Não obstante, certa cautela se impõe. Ampliando o significado da palavra "medir", aproximamo-la de "observar". Em verdade, qualquer procedimento que conduza a uma classificação, por meio de atributos ou relações, é uma espécie de mensuração. Se medir é entendido nesse sentido amplo, a ciência é, efetivamente, métrica - o que não ocorre se o vocábulo for apreciado no sentido estreito que usualmente se lhe atribui.

De modo genérico, medir é realizar observações - diminuindo a margem de opção entre certo número de alternativas. Assim considerada a noção de medida, cabe, realmente, asseverar que a ciência se vale da mensuração e não pode dispensá-la. Dispensáveis são, em muitos casos, as escalas precisas, as unidades, os sofisticados processos de associação de números a conceitos. Sem embargo, é acerca de tais processos que se discorre, quando se considera a medida e muitos são os ítens de relevo, ao cogitar-se da mensuração, sob esse prisma. Não será possível, aqui, dar atenção a todos os aspectos de interesse, o que nos leva a limitar estes comentários, focalizando apenas alguns pontos importantes da questão.

1.1 Mensuração e Quantificação

Mensuração, em termos amplos, é um processo que permite a utilização de símbolos (em geral números) para a representação de conceitos. Em princípio, os símbolos estariam relacionados entre si da mesma forma pela qual os conceitos se relacionariam. Nesse caso tem-se, efetivamente, a *medida* (ou uma medida particular) do conceito.

A noção de isomorfismo é delicada e podemos imaginar que esta “mesma forma” de relacionamento de símbolos e conceitos não pode ser estabelecida sem árduas pesquisas e demorados ensaios.

Faltando meios para estabelecer o isomorfismo, há que adotar critérios mais frouxos para a associação de símbolos a conceitos. A quantificação é um aspecto essencial da mensuração - a associação de números a conceitos, sem que, obrigatoriamente, as condições rígidas de mensuração se vejam satisfeitas[1]. Esta quantificação, como é fácil perceber, nem sempre é frutífera ou interessante. Associações de valia dependem dos propósitos da investigação, dos conhecimentos existentes, da matemática acessível - e são fruto de longas análises e da integração de amplas áreas de estudo.

De fato, a quantificação é importante porque, entre outras coisas,

[1] Falamos aqui, claro está, do conceito *lógico* de mensuração e, portanto, das restrições que a lógica clássica lhe impõe.

1. Permite melhor caracterização de certos conceitos ("40 graus Celcius" é expressão muito mais precisa que o termo "quente");

2. Leva, com freqüência, a descrições precisas que seriam impraticáveis sem a quantificação (o uso de uma medida fractal sobre o genoma, como método de estabelecer a classificação na escala evolucionária das espécies, é um exemplo moderno disso);

3. Conduz, em geral, a classificações mais acuradas (note-se como, por exemplo, a função de distribuição descreve a maneira pela qual as pessoas reagem a certas drogas - permitindo distribuí-las em "resistente", "normais", "sensíveis" e "hipersensíveis");

4. Contribui, de maneira decisiva, para a formulação de hipóteses, estabelecendo nexo mais preciso entre variáveis e fórmulas, com o auxílio da matemática;

5. Permite, enfim, confronto mais meticuloso de hipóteses ou teorias rivais (o que auxilia, por exemplo, no estabelecimento dos critérios de falseabilidade de Popper).

A quantificação precede a mensuração. Existem, com efeito, várias teorias "quantificadas" em que a mensuração não aparece. Isto se constata, por exemplo, na matemática. Para não aludir a exemplo tão extremado, sublinhe-se que é preciso dispor de conceitos *antes* de associar-lhes números. Os conceitos sofrem, de início, uma espécie de "análise lógica" e esta é que determinará a correção das medidas. A quantificação precede a mensuração, porque medir é atribuir valores concretos a variáveis numéricas associadas a um conceito, com base na observação.

1.2 Símbolos de Medida

"Figuras, descrições, medidas, números e desenhos ainda não expõem um fenômeno."

Goethe, Máximas e Reflexões §157.

A teoria física clássica de medida está baseada no conceito de uma interação entre o sistema de interesse e o aparato de medida, que pode ser feita arbitrariamente pequena ou, pelo menos, precisamente compensada, tal que pode-se falar realmente em uma medida idealizada que não perturba nenhuma propriedade do sistema. Entretanto, a experiência demonstra que a interação entre os sistemas físicos microscópicos e os instrumentos, não pode ser arbitrariamente pequena, e nem o distúrbio produzido pela interação pode ser precisamente compensado uma vez que, em certa extensão, isto é incontrolável e impreditível. O fato dessa interação não poder ser arbitrariamente pequena é expresso de maneira mais clara pelo caráter finito da constante de Planck, enquanto que o caráter incontrolável da interação é expresso pelo princípio de incerteza. Dessa forma, uma medida de uma certa propriedade pode produzir uma mudança significativa no valor previamente medido de uma outra propriedade, de modo que não faz sentido falarmos em um sistema microscópico possuindo valores definidos para todos os seus atributos. Isto contradiz a representação clássica de todas as quantidades físicas por números. As leis de um sistema físico fundamental devem ser expressas, portanto, em uma linguagem matemática não-clássica que constitua uma expressão simbólica das propriedades de uma medida microscópica.

Iremos desenvolver na próximas linhas o arcabouço fundamental desta estrutura matemática discutindo sobre sistemas físicos simplificados, tais que qualquer quantidade física A assume somente um número finito de valores distintos, $a^1, a^2, a^3 \; ... \;$. No tipo mais elementar de medida, um *ensemble* de sistemas similares independentes é dividido pelo aparato em sub-ensembles, distingüidos pelos valores definidos da quantidade física que está sendo medida. Vamos denotar por $\hat{M}_a$ a medida seletiva que aceita os sistemas possuindo o valor a da propriedade A e rejeita todos os outros. Definiremos a adição de tais símbolos como significando uma medida menos específica que produz um sub-ensemble associado com quaisquer dos valores na soma, nenhum destes podendo ser distingüido pela medida.

A multiplicação dos símbolos de medida significa a realização sucessiva de medidas (lida da direita para a esquerda). Segue do sentido físico destas operações que a adição é comutativa e associativa, enquanto que a multiplicação é apenas associativa. Com $\hat{1}$ e $\hat{0}$ simbolizando as medidas que, respectivamente, aceitam e rejeitam todos os sistemas, as propriedades da medida seletiva elementar são expressas como[2]

$$\hat{M}_a\hat{M}_a = \hat{M}_a \tag{1.1a}$$

$$\hat{M}_a\hat{M}_{a'} = \hat{0} \tag{1.1b}$$

$$\sum_a \hat{M}_a = \hat{1} \tag{1.1c}$$

De acordo com o significado das medidas denotadas por $\hat{1}$ e $\hat{0}$, estes símbolos tem as propriedades algébricas

$$\begin{aligned}
\hat{1}\,\hat{1} &= \hat{1}\\
\hat{0}\,\hat{0} &= \hat{0}\\
\hat{1}\,\hat{0} &= \hat{0}\,\hat{1} = \hat{0}\\
\hat{1} + \hat{0} &= \hat{1}\\
\hat{1}\hat{M}_a &= \hat{M}_a\hat{1} = \hat{M}_a\\
\hat{0}\hat{M}_a &= \hat{M}_a\hat{0} = \hat{0}\\
\hat{M}_a + \hat{0} &= \hat{M}_a
\end{aligned}$$

o que justifica a nossa notação. As várias propriedades de $\hat{1}$, $\hat{0}$ e $\hat{M}_a$ serão consistentes

[2]De fato, estas propriedades caracterizam os símbolos de medida como *projetores* dentro do espaço de estados físicos. Exploraremos a geometria projetiva que decorre desse conjunto completo de projetores no capítulo seguinte.

contanto que a multiplicação seja distributiva,

$$\sum_a \hat{M}_a \hat{M}_{a'} = \hat{M}_{a'} = \hat{M}_{a'} \hat{1} = \hat{M}_{a'} \sum_a \hat{M}_a$$

A introdução dos símbolos $\hat{1}$ e $\hat{0}$ como multiplicadores, com definições evidentes, permite que as leis de multiplicação dos símbolos de medida sejam combinadas numa expressão simples,

$$\hat{M}_a \hat{M}_{a'} = \delta^a_{a'} \hat{M}_a$$

onde

$$\delta^a_{a'} = \begin{cases} \hat{1}, & a = a' \\ \hat{0}, & a \neq a' \end{cases}$$

é o conhecido *delta de Kronecker*.

Destas definições, vemos que os símbolos de medida formam um anel não-comutativo[3].

1.3 Propriedades Compatíveis

Duas quantidades A_1 e A_2 são ditas serem compatíveis quando a medida de uma não destrói o conhecimento ganho por uma medida anterior da outra. As medidas seletivas $\hat{M}_{a_1}$ e $\hat{M}_{a_2}$, tomadas nesta ordem, produzem um ensemble de sistemas para os quais pode-se simultaneamente[4] atribuir os valores a_1 a A_1 e a_2 a A_2. O símbolo para esta medida composta é

$$\hat{M}_{a_1 a_2} = \hat{M}_{a_1} \hat{M}_{a_2} = \hat{M}_{a_2} \hat{M}_{a_1}$$

[3]Uma breve introdução aos conceitos algébricos relevantes para a teoria física da medida, é feita no apêndice B.

[4]É importante notar aqui que estamos utilizando a palavra *simultaneamente* sem fazermos qualquer referência a uma *definição* de simultaneidade, e também sem qualquer referência sobre qual o papel do *tempo* na teoria. Neste ponto, estamos admitindo que, de uma maneira intuitiva, fique claro para o leitor o sentido em que esta simultaneidade está sendo tomada. Mais adiante discutiremos o papel especial que o tempo desempenha nesta teoria, definindo daí o conceito de simultaneidade, para então verificarmos a consistência do que foi dito aqui acerca de medidas sucessivas de propriedades compatíveis.

Desta definição, fica fácil ver que a compatibilidade de duas quantidades é uma relação de equivalência.

Por um conjunto completo A, de quantidades físicas compatíveis $A_1, ..., A_r$, deve-se entender que todo par dessas quantidades é compatível, e que nenhuma outra quantidade, além daquelas formadas por funções do conjunto A, é compatível com todos os membros desse conjunto. Com efeito, podemos dizer que A é uma *classe de equivalência.* O símbolo de medida

$$\hat{M}_a = \prod_r \hat{M}_{a_r}$$

descreve então uma medida completa, que é tal que os sistemas escolhidos possuam valores definidos para o maior número possível de atributos; qualquer tentativa de determinar o valor de outra quantidade física independente destas, irá produzir mudanças incontroláveis nos valores previamente medidos. Assim, o estado ótimo de conhecimento concernente a um dado sistema é realizado sujeitando-o a uma medida seletiva completa. Os sistemas admitidos pela medida seletiva completa $\hat{M}_a$ são ditos estarem no estado a. As propriedades simbólicas das medidas completas são as mesmas que discutimos antes para uma medida seletiva simples, ou seja, (**??**), (**??**) e (**??**).

1.4 Medidas que Alteram o Estado do Sistema

Um tipo mais geral de medida incorpora um distúrbio que produz uma mudança do estado do sistema. O símbolo $\hat{M}_a^{a_1}$ indica uma medida seletiva completa na qual os sistemas são aceitos somente no estado a_1 e emergem no estado a. O processo de medida $\hat{M}_a$ é o caso especial para o qual nenhuma mudança de estado ocorre,

$$\hat{M}_a = \hat{M}_a^a$$

As propriedades de medidas sucessivas do tipo $\hat{M}_{a_1}^{a_2}$ são simbolizadas por

$$\hat{M}_{a_1}^{a_2} \hat{M}_{a_3}^{a_4} = \delta_{a_3}^{a_2} M_{a_1}^{a_4} \tag{1.2}$$

pois para $a_3 \neq a_2$ o segundo estágio que compõe o aparato não aceita nenhum sistema que emerge do primeiro estágio, enquanto que se $a_3 = a_2$ todos os sistemas que saem do primeiro estágio são aceitos pelo segundo e a medida composta serve para selecionar sistemas no estado a_4 deixando-os em seguida no estado a_1. Note que se os dois estágios são trocados de ordem, temos

$$\hat{M}_{a_3}^{a_4}\hat{M}_{a_1}^{a_2} = \delta_{a_1}^{a_4} M_{a_3}^{a_2}$$

o que difere em geral de (**??**). Então, fica explícito que a multiplicação dos símbolos de medidas completas não é comutativa.

As quantidades físicas contidas em um conjunto completo não compreendem a totalidade de atributos físicos do sistema. Podemos formar outros conjuntos completos, B, C, ..., que são mutuamente incompatíveis, e para cada escolha de características físicas não interferentes, há um conjunto de medidas seletivas referindo-se aos sistemas nos estados apropriados, $\hat{M}_{b_1}^{b_2}$, $\hat{M}_{c_1}^{c_2}$, ... A medida seletiva mais geral possível, envolve dois conjuntos completos incompatíveis de propriedades. Simbolizemos por $\hat{M}_a^b$ o processo de medida que rejeita todos os sistemas que não estejam no estado b, e permite que somente sistemas no estado a emerjam do aparato. A medida composta $\hat{M}_a^b\hat{M}_c^d$ serve para selecionar sistemas no estado d e produzi-los no estado a, isto é, é uma medida seletiva do tipo $\hat{M}_a^d$.

Os exemplos que temos considerado até aqui envolvem a passagem de todos os sistemas ou de nenhum sistema entre os dois estágios, como representado pelos símbolos $\hat{1}$ e $\hat{0}$. No entanto, de maneira mais geral, podemos admitir apenas que medidas da propriedade B realizadas sobre um sistema no estado c que se refere a uma propriedade incompatível com B, irá nos fornecer uma distribuição estatística dos valores possíveis. Então, somente uma determinada fração dos sistemas emergentes do primeiro estágio será aceita pelo segundo estágio. Podemos expressar isso pela lei de multiplicação geral

$$\hat{M}_a^b\hat{M}_c^d = \langle b|\,|c\rangle\,\hat{M}_a^d \tag{1.3}$$

onde $\langle b|\,|c\rangle$ é um número caracterizando a relação estatística entre os estados b e c. Em particular,

$$\langle a|\,|a\acute{}\rangle = \delta^{a}_{a\acute{}} \qquad a, a\acute{} \sqsubset A$$

onde $\sqsubset$ significa que a e $a\acute{}$ são valores definidos da propriedade A.

O conjunto de símbolos de medida M^b_a, dotados das operações de adição e multiplicação aqui definidas, e acrescido do anel escalar de elementos $\langle b|\,|c\rangle$ forma o que, em matemática, denominamos uma *álgebra*, doravante denominada *Álgebra de Medida*. Observe que, até o momento, nada foi dito acerca da natureza dos números $\langle b|\,|c\rangle$ associados a esta álgebra. De fato, para que a consistência das operações de multiplicação e adição de símblos de medida, com os seus respectivos significados físicos, seja mantida, basta que os $\langle b|\,|c\rangle$ formem entre si um anel escalar.

De fato, a ordem em que os esclares $\langle a|\,|b\rangle$ aparecem na lei de produto (**??**) é importante, pois de acordo com ela e com a lei de multiplicação do anel podemos definir diferentes álgebras de medida. Assim, talvez a maneira mais correta de indicar a lei de produto acima seja $\hat{M}^b_a\hat{M}^d_c = \hat{M}^d_a\left(\langle b|\,|c\rangle\right)$, não obstante, continuaremos a manter os escalares à esquerda dos símbolos de medida, e com isso podemos entender que estamos lidando com um tipo bem definido de álgebra sobre um dado anel. Futuramente, estaremos interessados em verificar se a natureza deste anel impõe algum tipo de restrição sobre a teoria física construída a partir dele.

1.5 Funções de Transformação

Casos especiais de (**??**) são

$$\hat{M}_a\hat{M}^c_b = \langle a|\,|b\rangle\,\hat{M}^c_a$$

e

$$\hat{M}^b_a\hat{M}_c = \langle b|\,|c\rangle\,\hat{M}^c_a$$

Da propriedade (**??**) do símbolo de medida fundamental, inferimos que

$$\sum_a \langle a|\,|b\rangle\, \hat{M}_a^c = \sum_a \hat{M}_a M_b^c = \hat{M}_b^c$$

e similarmente,

$$\sum_c \langle b|\,|c\rangle\, \hat{M}_a^c = \hat{M}_a^b$$

o que nos mostra que os símbolos de medida de um tipo podem ser expressos como combinações lineares dos símbolos de medida de outro tipo. Isto, em outras palavras, expressa a total equivalência entre dois conjuntos completos distintos de medidas de propriedades físicas compatíveis. A relação geral entre estes símbolos é então da forma[5]

$$\hat{M}_c^d = \sum_{a,b} \hat{M}_a \hat{M}_c^d \hat{M}_b = \sum_{a,b} \langle a|\,|c\rangle\, \langle d|\,|b\rangle\, \hat{M}_a^b \tag{1.4}$$

Do seu papel em efetuar tais conexões, o conjunto de números $\langle a|\,|b\rangle$ é chamado a *função de transformação* relacionando as descrições a e b, onde a frase "descrição a" significa a descrição de um sistema em termos dos estados produzidos pelas medidas seletivas de um conjunto completo A de quantidades físicas compatíveis. Uma propriedade fundamental de composição das funções de transformação é obtida comparando-se

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

com

$$\hat{M}_a \left(\sum_b \hat{M}_b \right) \hat{M}_c = \hat{M}_a \hat{M}_c = \langle a|\,|c\rangle\, \hat{M}_a^c$$

isto é,

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

[5]Observe que, em virtude de não sabermos a natureza do anel escalar sobre o qual a álgebra da medida está definida, devemos tomar muito cuidado com a ordem em que se aplicam as relações previamente deduzidas.

Identificando as descrições a e c isto nos dá

$$\sum_b \langle a| \, |b\rangle \, \langle b| \, |a'\rangle = \delta^a_{a'}$$

e similarmente,

$$\sum_a \langle b| \, |a\rangle \, \langle a| \, |b'\rangle = \delta^b_{b'}$$

Como uma conseqüência, observamos que

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

Por outro lado, se o anel escalar formado pelas quantidades $\langle a| \, |b\rangle$ for comutativo, temos que

$$\langle a| \, |b\rangle \, \langle b| \, |a\rangle = \langle b| \, |a\rangle \, \langle a| \, |b\rangle \rightarrow N = N'$$

o que significa que N, o número total de estados obtido numa medida completa, é independente da particular escolha de quantidades físicas compatíveis que são medidas. Isto nos dá, com efeito, uma medida dos *graus de liberdade físicos* que o sistema possui. Portanto, o número de símbolos de medida de qualquer tipo especificado é N^2. Múltiplos numéricos arbitrários dos símbolos de medida numa combinação aditiva formam os elementos de uma álgebra linear de dimensionalidade N^2 - a *álgebra de medida.* Os elementos da álgebra de medida são chamados de operadores.

1.6 O Traço

O número $\langle a| \, |b\rangle$ pode ser interpretado como um funcional numérico linear do operador $\hat{M}^b_a$. Chamamos essa correspondência linear entre operadores e números de *traço.* Há três tipos de traço que podem ser associados a cada operador, denominados traços à *esquerda, direita* e *central*, e dados respectivamente por

$$Tr_A \hat{M}_a^b (q) = q \langle b| |a\rangle \tag{1.5}$$

$$Tr_B \hat{M}_a^b (q) = \langle b| |a\rangle q \tag{1.6}$$

$$Tr_C \hat{M}_a^b (q) = \sum_{\in} \langle e| |a\rangle q \langle b| |e\rangle \tag{1.7}$$

onde[6]

$$\hat{M}_a^b (q) = |a\rangle q \langle b|$$

e q é um escalar qualquer da álgebra de medida. No caso do anel escalar ser comutativo, todas as três definições coincidem, de forma que podemos falar simplesmente do funcional traço

$$tr \hat{M}_a^b = \langle b| |a\rangle \tag{1.8}$$

Neste caso, observe que, da relação linear geral (**??**) temos[7]

$$\begin{aligned} trM_c^d &= \sum_{a,b} tr\left(\langle a| |c\rangle \langle d| |b\rangle M_a^b\right) = \sum_{a,b} tr\left(\langle d| |b\rangle M_a^b \langle a| |c\rangle\right) = \\ &= \sum_{a,b} \langle d| |b\rangle tr\left(M_a^b\right) \langle a| |c\rangle \sum_{a,b} \langle d| |b\rangle \langle b| |a\rangle \langle a| |c\rangle = \langle d| |c\rangle \end{aligned} \tag{1.9}$$

o que verifica a consistência da definição (**??**). Em particular,

$$trM_{a'}^a = \delta_{a'}^a$$

$$trM_a = 1$$

[6]Esta representação para os símbolos de medida ficará mais clara ao estudarmos a geometria dos estados, no capítulo seguinte.

[7]Aqui, utilizamos a propriedade de *ciclicidade*: $tr(ABC) = tr(BCA) = tr(CAB)$ que será provada a seguir.

O traço de um produto de símbolos de medida é

$$tr\left(\hat{M}_c^d\hat{M}_a^b\right) = \langle d|\,|a\rangle\, tr\hat{M}_c^b = \langle d|\,|a\rangle\,\langle b|\,|c\rangle$$

Então, a despeito da não-comutatividade da multiplicação, o traço de um produto de dois fatores é independente da ordem em que é feita a multiplicação. Isto se aplica a quaisquer dois elementos $\hat{X}$, $\hat{Y}$ da álgebra de medida,

$$tr\left(\hat{X}\hat{Y}\right) = tr\left(\hat{Y}\hat{X}\right)$$

Desta última relação podemos ver que, para anéis escalares mais gerais, nenhum dos funcionais traço (**??**), (**??**) ou (**??**) definidos acima são cíclicos.

Um exemplo especial do uso de (**??**) é

$$tr\left(\hat{M}_a\hat{M}_b\right) = \langle b|\,|a\rangle\,\langle a|\,|b\rangle \tag{1.10}$$

1.7 Interpretação Estatística

Podemos ver que a definição de traço e a lei geral de multiplicação se preservam se fizermos a substituição

$$\hat{M}_a^b \rightarrow \lambda_a^{-1}\hat{M}_a^b\lambda_b \tag{1.11a}$$

$$\langle a|\,|b\rangle \rightarrow \lambda_a\,\langle a|\,|b\rangle\,\lambda_b^{-1} \tag{1.11b}$$

onde os números λ_a, λ_b são não nulos. Os símbolos de medida elementares $\hat{M}_a$ e as funções de transformação $\langle a|\,|a'\rangle$, por sua vez, não são alterados. Em vista desta arbitrariedade, uma função de transformação $\langle a|\,|b\rangle$ não pode, em si, possuir uma interpretação física direta, mas pode figurar em alguma combinação que seja invariante sob a substituição (**??**).

A base apropriada para a interpretação estatística da função de transformação pode ser inferida considerando-se a seqüência de medidas seletivas $\hat{M}_b\hat{M}_a\hat{M}_b$, que difere de

$\hat{M}_b$ em virtude do distúrbio causado pela medida intermediária do atributo A. Somente uma fração dos sistemas selecionados pela medida inicial do atributo B é transmitida através do aparato completo. Dessa forma, temos a equação simbólica

$$\hat{M}_b \hat{M}_a \hat{M}_b = p\left(a|b\right) \hat{M}_b$$

onde o número

$$p\left(a|b\right) = \langle b| \, |a\rangle \, \langle a| \, |b\rangle \tag{1.12}$$

é invariante sob a transfomação (**??**). Se tomarmos uma medida do atributo A que não distingue entre dois ou mais estados, teremos expressa a aditividade dos números $p\left(a|b\right)$,

$$\hat{M}_b \left(\hat{M}_a + \hat{M}_{a'}\right) \hat{M}_b = \left(p\left(a|b\right) + p\left(a'|b\right)\right) \hat{M}_b$$

Assim, para uma medida do atributo A que não seja capaz de distinguir entre qualquer dos seus estados, temos

$$\hat{M}_b \left(\sum_a \hat{M}_a\right) \hat{M}_b = \hat{M}_b$$

o que implica em:

$$\sum_a p\left(a|b\right) = 1$$

Estas propriedades qualificam $p\left(a|b\right)$ para o papel de uma *medida de probabilidade*[8] de que se observe o estado a numa medida realizada sobre um sistema reconhecidamente no estado b. Porém, uma medida de probabilidade é um número real definido-positivo. Então, devemos impor uma restrição sobre a classe de números que aparecem sobre a álgebra de medida. Até o momento, nada dissemos a respeito desses números. Com efeito, não havia nada em nossa teoria, até agora, que nos desse um indício sequer sobre qual a natureza de tais quantidades, a nossa única imposição (feita de maneira

[8]Vide apêndice A para maiores detalhes.

implícita) era a de que esse números formassem um anel escalar, de forma a termos realmente a estrutura formal de uma álgebra entre os símbolos de medida. Assim, quaisquer *corpos*, tais como $\mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$, por exemplo, são candidatos naturais ao papel de escalares em nossa teoria, mas também outros anéis escalares que *não* sejam corpos, como os quatérnions e os octônios, não podem ser descartados previamente sem uma análise mais detalhada. A questão da equivalência entre as teorias definidas sobre esses diferentes anéis é sutil, e será objeto de uma discussão um pouco mais precisa no capítulo **??**. Por ora, estaremos supondo que $\langle a|\,|b\rangle$ e $\langle b|\,|a\rangle$ formam um par de números *complexos* conjugados,

$$\begin{aligned} \langle a|\,|b\rangle &= \overline{\langle b|\,|a\rangle} \\ p\,(a|b) &= |\langle a|\,|b\rangle|^2 \geqslant 0 \end{aligned} \tag{1.13}$$

Uma das motivações para esta escolha, além da sua simplicidade, é que com isso a probabilidade $p\,(a|b)$ torna-se simétrica,

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

De forma a preservar a relação entre os complexos conjugados (**??**), os números λ_a e λ_b devem obedecer à relação

$$\bar{\lambda}_a = \lambda_a^{-1}$$

Representando λ_a na forma exponencial, vemos que a condição acima implica em

$$\lambda_a = Ae^{i\varphi(a)} \rightarrow Ae^{-i\varphi(a)} = A^{-1}e^{-i\varphi(a)} \rightarrow A^2 = 1 \rightarrow A = \pm 1$$

A escolha do sinal é arbitrária, e nenhum efeito físico pode ser distinguido pela particular escolha que fizermos aqui. Tomaremos então, por simplicidade, o sinal positivo.

Uma vez que λ_a é um número não-nulo arbitrário, fica claro que a sua fase $\varphi\,(a)$ pode assumir um valor real arbitrário.

1.8 O Adjunto

Outro aspecto importante da interpretação probabilística de (**??**) é a sua propriedade de simetria

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

Relembremos a convenção arbitrária que acompanha a interpretação dos símbolos de medida e seus produtos: a ordem dos eventos é lida da direita para a esquerda (sestramente). Porém, qualquer equação envolvendo os símbolos de medida é igualmente válida se interpretada no sentido oposto (destramente) e nenhum resultado físico poderá depender de qual convenção é adotada. Introduzindo a interpretação destral, $\langle a|\,|b\rangle$ adquire o mesmo significado que $\langle b|\,|a\rangle$ com a convenção sestral. Concluímos, portanto, que a probabilidade conectando os estados a e b, numa dada seqüência, deve ser construída simetricamente a partir de $\langle a|\,|b\rangle$ e $\langle b|\,|a\rangle$. De fato, esta é a razão pela qual $p\,(a|b)$ deve ser simétrica. A introdução da convenção oposta para os símbolos de medida será denominada a operação *adjunta*, e será indicada por †. Assim,

$$\hat{M}_a^{b\dagger} = \hat{M}_b^a$$

e

$$M_{\acute{a}}^{a\dagger} = M_a^{\acute{a}}$$

Em particular,

$$M_a^\dagger = M_a$$

o que caracteriza $\hat{M}_a$ como um operador auto-adjunto. Para o produto entre os símbolos de medida temos

$$\left(\hat{M}_a^b\hat{M}_c^d\right)^\dagger = \hat{M}_d^c\hat{M}_b^a = \hat{M}_c^{d\dagger}\hat{M}_a^{b\dagger}$$

O significado da adição não é alterado pela operação de adjunção, o que nos permite estender essas propriedades para todos os elementos da álgebra de medida:

$$\left(\hat{X}+\hat{Y}\right)^\dagger = \hat{X}^\dagger + \hat{Y}^\dagger \qquad \left(\hat{X}\hat{Y}\right)^\dagger = \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger \qquad \left(\lambda\hat{Y}\right)^\dagger = \hat{Y}^\dagger\bar{\lambda}$$

onde $\lambda \in \mathbb{C}$.

1.9 Álgebra Conjugada

O uso dos números complexos na álgebra de medida implica na existência de uma álgebra dual na qual todos os números são trocados pelos seus conjugados. Nenhum resultado físico pode depender de qual álgebra é explorada. Se os operadores da álgebra dual forem representados como $\hat{X}^*$, a correspondência entre as duas álgebras será governada pelas leis,

$$\overline{\left(\hat{X}+\hat{Y}\right)} = \overline{\hat{X}} + \overline{\hat{Y}} \qquad \overline{\left(\hat{X}\hat{Y}\right)} = \overline{\hat{X}}\overline{\hat{Y}} \qquad \overline{\left(\lambda\hat{Y}\right)} = \bar{\lambda}\overline{\hat{Y}}$$

A formação do adjunto dentro da álgebra conjugada é denominada *transposição*,

$$\hat{X}^T = \overline{\hat{X}}^{\dagger} = \overline{\hat{X}^{\dagger}}$$

e possui as propriedades,

$$\left(\hat{X}+\hat{Y}\right)^T = \hat{X}^T + \hat{Y}^T \qquad \left(\hat{X}\hat{Y}\right)^T = \hat{Y}^T\hat{X}^T \qquad \left(\lambda\hat{Y}\right)^T = \hat{Y}^T\lambda$$

1.10 Matrizes

Os símbolos de medida de uma dada descrição nos fornecem uma base para a representação de um operador arbitrário por N^2 números, e as propridades abstratas do operador são obtidas através de leis combinatoriais desses arranjos de números, que são o que denominamos *matrizes*. Assim,

$$\hat{X} = \sum_{a,a'} \langle a| \, \hat{X} \, |a'\rangle \, \hat{M}_a^{a'}$$

define a matriz de $\hat{X}$ na *descrição* a, ou *representação* a, e o produto

$$\hat{X}\hat{Y} = \sum_{a^1,a^2,a^3,a^4} \left\langle a^1 \right| \hat{X} \left| a^2 \right\rangle \hat{M}_{a^1}^{a^2} \left\langle a^3 \right| \hat{Y} \left| a^4 \right\rangle \hat{M}_{a^3}^{a^4} =$$

$$= \sum_{a^1,a^2,a^4} \left\langle a^1 \right| \hat{X} \left| a^2 \right\rangle \left\langle a^2 \right| \hat{Y} \left| a^4 \right\rangle \hat{M}_{a^1}^{a^4}$$

nos mostra que

$$\left\langle a^1 \right| \hat{X}\hat{Y} \left| a^4 \right\rangle = \sum_{a^2} \left\langle a^1 \right| \hat{X} \left| a^2 \right\rangle \left\langle a^2 \right| \hat{Y} \left| a^4 \right\rangle$$

Os elementos de matriz que representam $\hat{X}$ podem ser expressos como

$$\left\langle a^1 \right| \hat{X} \left| a^2 \right\rangle = tr\left(\hat{X}\hat{M}_{a^2}^{a^1}\right)$$

e em particular,

$$\langle a | \hat{X} | a \rangle = tr\left(\hat{X}\hat{M}_a\right)$$

A soma dos elementos na diagonal de uma matriz é o traço do operador. A base correspondente na álgebra dual é $\hat{M}_{a^1}^{a^2 *}$, e as matrizes que representam $\hat{X}^*$ e $\hat{X}^T$ são as conjugadas complexas e transpostas, respectivamente, da matriz que representa $\hat{X}$. O operador $\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{T*}$, que pertence à mesma álgebra que $\hat{X}$, é representado pela matriz transposta e complexo-conjugada, ou matriz adjunta.

A matriz de $\hat{X}$ na representação mista ab é definida por

$$\hat{X} = \sum_{a,b} \langle a | \hat{X} | b \rangle \hat{M}_a^b$$

onde

$$\langle a | \hat{X} | b \rangle = tr\left(\hat{X}\hat{M}_a^b\right)$$

A regra para a multiplicação de matrizes na representação mista é

$$\langle a | \hat{X}\hat{Y} | c \rangle = \sum_b \langle a | \hat{X} | b \rangle \langle b | \hat{Y} | c \rangle$$

Tomando $\hat{X} = \hat{Y} = \hat{1}$ encontramos a propriedade de composição das funções de transformação, uma vez que

$$\langle b|\,\hat{1}\,|a\rangle = tr\hat{M}_a^b = \langle b|\,|a\rangle$$

Se um dos conjuntos, X ou Y, for igual à 1, temos exemplos da conexão entre as matrizes de um dado operador na várias representações. O resultado geral pode ser derivado de relações lineares entre os símbolos de medida. Assim,

$$\langle d|\,\hat{X}\,|a\rangle = tr\left(\hat{X}\hat{M}_a^d\right) = tr\left(\sum_{c,b}\langle b|\,|a\rangle\,\hat{X}\hat{M}_b^c\,\langle d|\,|c\rangle\right) = \sum_{c,b}\langle d|\,|c\rangle\,\langle c|\,\hat{X}\,|b\rangle\,\langle b|\,|a\rangle$$

O adjunto de um operador $\hat{X}$, na base mista, aparece na base ba como representado pela matriz

$$\langle b|\,\hat{X}^{\dagger}\,|a\rangle = \overline{\langle a|\,\hat{X}\,|b\rangle}$$

1.11 Variações Infinitesimais das Funções de Transformação

Como uma aplicação das representações mistas, apresentamos um operador equivalente às propriedades fundamentais das funções de transformação:

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

$$\overline{\langle a|\,|b\rangle} = \langle b|\,|a\rangle$$

que será dado por uma caracterização diferencial das funções de transformação. Tomando variações infinitesimais das duas propriedades acima, temos

$$\sum_b \left[\delta\,\langle a|\,|b\rangle\,(\langle b|\,|c\rangle) + \langle a|\,|b\rangle\,\delta\,\langle b|\,|c\rangle\right] = \delta\,\langle a|\,|c\rangle \tag{1.14}$$

$$\delta\overline{\langle a|\,|b\rangle} = \delta\,\langle b|\,|a\rangle$$

Podemos interpretar o arranjo de números $\delta\,\langle a|\,|b\rangle$ como a matriz de um operador na representação ab. Assim,

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

que será a nossa *definição* de um *operador infinitesimal* $\delta\hat{W}_{ab}$. Se definirmos similarmente os operadores infinitesimais $\delta\hat{W}_{bc}$ e $\delta\hat{W}_{ac}$, a propriedade diferencial (**??**) implica na seguinte equação matricial,

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

da qual inferimos a equação operacional

$$\delta\hat{W}_{ac} = \delta\hat{W}_{ab} + \delta\hat{W}_{bc} \tag{1.15}$$

Assim, a lei de composição multiplicativa das funções de transformação é expressa pela lei de composição aditiva dos operadores infinitesimais.

Identificando as descrições a e b na equação (**??**), vemos que

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

ou ainda,

$$\delta \langle a|\, |\acute{a}\rangle = 0$$

o que nos mostra a natureza fixa dos valores numéricos da função de transfomação:

$$\langle a|\, |\acute{a}\rangle = \delta^{a}_{\acute{a}}$$

De fato, esta última equação não é uma condição independente sobre as funções de transformação, mas sim uma conseqüência da propriedade de composição e do requerimento de que as funções de transformação, enquanto matrizes, não sejam singulares.

Se identificarmos as descrições a e c, vemos que

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

Por outro lado,

$$\delta\overline{\langle a|\, |b\rangle} = -i \langle b|\, \delta\hat{W}^{\dagger}_{ab}\, |a\rangle = i \langle b|\, \delta\hat{W}^{\dagger}_{ba}\, |a\rangle$$

que deve ser igual a

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

e portanto,

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

A propriedade de conjugação complexa das funções de transformação é, portanto, expressa pelo fato de os operadores infinitesimais serem auto-adjuntos.

1.12 Valor Esperado

O valor esperado da propriedade A para um dado ensemble de sistemas no estado b é a média dos possíveis valores de A, pesada pelas probabilidades de ocorrência que são características do estado b. Usando (**??**) para escrever essa probabilidade como

$$p\left(a|b\right) = tr\left(\hat{M}_b\hat{M}_a\hat{M}_b\right)$$

o valor esperado se torna

$$\langle A\rangle_b = \sum_a p\left(a|b\right)a = tr\left(\hat{A}\hat{M}_b\right) = \langle b| \hat{A} |b\rangle$$

$$\sum_a p\left(a|b\right)a = \sum_a tr\left(\hat{M}_b\hat{M}_a\hat{M}_b\right)a = tr\left(\hat{M}_b\left(\sum_a a\hat{M}_a\right)\hat{M}_b\right) =$$
$$= tr\left(\left(\sum_a a\hat{M}_a\right)\hat{M}_b\right)$$

podemos então representar o operador $\hat{A}$ por

$$\hat{A} = \sum_a a\hat{M}_a$$

A correspondência assim obtida entre operadores e quantidades físicas é tal que uma função $f\left(A\right)$ da propriedade A é representada pelo operador $\hat{f}\left(\hat{A}\right)$, e os operadores associados com um conjunto completo de quantidades físicas compatíveis formam um conjunto completo de operadores auto-adjuntos comutantes. Em particular, a função de A que exibe o valor unitário no estado a, e zero caso contrário, é caracterizada pelo operador $\hat{M}_a$.

1.13 A Essência da Teoria Algébrica de Medida

> "Nunca se reflete suficientemente sobre o fato de que a linguagem é propriamente apenas simbólica, figurada, e de que jamais exprime diretamente os objetos, mas somente por reflexos. Tal é especialmente o caso quando se trata de seres que apenas se aproximam da experiência e que podem ser chamados antes de atividades do que objetos, estando no reino da doutrina da natureza em contínuo movimento. Não podem ser fixados, embora devam ser descritos; é por isso que se tentam todos os tipos de fórmulas, para se aproximar deles ao menos alegoricamente."
>
> Goethe, A Doutrina das Cores §751.

Cabe agora fazermos algumas observações sobre a teoria desenvolvida até aqui.

Até o momento falamos sobre o que se poderia denominar a *cinemática quântica*, porém, dentro em pouco, estaremos também interessados na *dinâmica*. Além disso, uma vez que toda a nossa cinemática está fudamentada no conceito físico de medida, devemos falar também acerca do papel do tempo nessas medidas. Toda medida é um processo dinâmico, e portanto o único conceito de tempo que pode ser utilizado é aquele primitivo, ligado ao sentido de ordenamento. Uma formulação detalhada da dinâmica quântica deve satisfazer a condição de consistência de que essa descrição das interações que constituem o processo de medida, reproduza a caracterização simbólica que emergiu neste estágio elementar. O processo de medição possui, em uma teoria geral de processos elementares, uma particularidade muito especial - ele sempre exerce uma ação no sistema submetido à medição, e esta ação, com dada precisão, não pode ser feita pequena o quanto se queira. Esta propriedade das medições está naturalmente ligada ao fato de que as características dinâmicas do sistema surgem apenas como resultado da própria medição. Claro está que se a ação do processo de medição sobre o objeto pudesse ser feita tão fraca quanto desejável, isto significaria que a grandeza medida tem um valor determinado por si mesma, independentemente da medição. Assim, em uma teoria fundamental de interações elementares as medidas de observáveis físicos devem ser interpretadas como *relações* que o *sistema* guarda com o *processo de medida* efetuado sobre ele.

Uma vez que a experiência demonstra também que a ação é um observável *quantizado* possuindo uma unidade fundamental $\hbar$, torna-se evidente que $\hbar$ é a quantidade *mínima* de ação que o aparelho de medida pode exercer sobre o sistema medido. Este é, de fato, o *significado* do quantum de ação tendo em vista uma análise dos fenômenos físicos que toma por base os processos de medida.

Uma análise mais detalhada da álgebra de medida nos leva a uma geometria associada com os estados do sistema, na qual o isomorfismo entre diferentes descrições de um mesmo sistema físico, é estabelecido através de transformações unitárias, como veremos no próximo capítulo. Antes, no entanto, vamos ver como o desenvolvimento lógico-abstrato da Teoria Algébrica de Medida se encaixa nas duas interpretações mais difundidas da Mecânica Quântica.

Os seguidores da escola de Copenhague consideram a experiência comum como sendo a realidade fundamental, não analisável, em cujos termos eles explicam os domínios dos quanta. Para eles, a teoria quântica não é uma representação da realidade em si, mas sim da relação entre a realidade que nos é familiar e o totalmente "inumano" domínio dos quanta.

De acordo com a interpretação de Copenhague, a teoria quântica não descreve o sistema quântico nem a aparelhagem de medição. Ela se aplica ao *relacionamento* existente entre esses dois tipos de "seres" conceitualmente opacos. Como o aparelho de medição não pode, em princípio, ser analisado, ele constitui o lugar perfeito para ali se colocar a solução do problema da medição. Assim, dentro da interpretação de

Copenhagen, o reflexo dos símbolos de medida são os *aparelhos de medida.*

Por outro lado, de acordo com von Neumann, um sistema quântico obedece, não a uma, mas a duas leis do movimento. Em todo o universo as funções de onda estão se expandindo através de uma evolução unitária (processo do tipo II). Contudo, no ato da medição, e em nenhum outro momento, as funções de onda se contraem em um resultado definido (processo do tipo I). Após a contração, essas entidades ainda são funções de onda; elas nunca se tornam objetos clássicos.

É comum se denominar o processo do tipo I de von Neumann de *colapso da função de onda*, também conhecido como *salto quântico.* Assim, dentro da descrição todo-quântica de von Neumann, o colapso da função de onda faz o papel do nosso símbolo de medida.

Cada uma dessas abordagens da medição quântica tem as suas desvantagens; nenhuma fornece uma imagem completamente satisfatória do ato de medir. A interpretação de Copenhague confere ao instrumento de medida propriedades peculiares - por exemplo, a capacidade de reduzir uma possibilidade a uma realidade - ao mesmo tempo em que, em princípio, retira esses instrumentos da análise lógica. von Neumann restitui ao instrumento de medida um *status* igual ao do resto do mundo, mas transfere suas propriedades peculiares para um misterioso e evasivo evento: o colapso da função de onda. Vemos aqui uma das características mais marcantes da teoria quântica: a relação descontínua entre a representação de um sistema físico e os valores experimentais medidos, relação esta que se encontra no âmago do que poderíamos chamar um *ato de medição* ou, talvez de maneira mais apropriada, um "ato de Métis"[9].

[9]Métis é a representação da inteligência prática. De seu nome deriva a raiz verbal que significa *medir.* A deusa é a representação da prudência e do conhecimento exato. Nossa língua herdou, do nome da deusa, as palavras medir e medida. Métis é filha de Oceano e Tétis, e é da primeira geração das entidades olímpicas, sendo a primeira amante de Zeus.

Crono, pai de Zeus, engoliu os seus filhos por temer ser destronado por um deles. Foi Métis que ofereceu ao titã uma droga que o faria devolver todos os seus filhos engolidos.

Portanto, podemos ver que a proposta de tomar como base para uma teoria dinâmica fundamental um sistema proposicional lógico baseado univocamente nos resultados experimentais, abarca os procedimentos adotados por von Neumann e pelos membros da escola de Copenhagen.

A razão pela qual o nosso procedimento abarca o de von Neumann e o de Copenhagen, é que a natureza descontínua do ato de Métis foi incorporada na forma dos símbolos de medida. De fato, pensando em termos de espaços vetoriais, os símbolos de medidas seletivas completas constituem *projetores* entre as diferentes representações. Essa característica dos símbolos de medida ficará mais evidente no capítulo seguinte, e será de importância fundamental no estabelecimento da Mecância Quântica Quaterniônica.

Métis, grávida de Zeus, foi por ele engolida e, mais tarde, nasceu Atena, saída das meninges de seu pai.

2. A Geometria dos Estados

> "Pode se exigir do físico, que procura tratar de toda a doutrina da natureza, que seja matemático. Durante a Idade Média, a matemática foi o órgão principal pelo qual se esperava apoderar dos segredos da natureza e, até hoje, a geometria prevalece com razão em certos domínios da doutrina da natureza."
>
> Goethe, A Doutrina das Cores, §722.

Os símbolos de medida podem ser decompostos em bases duais de vetores e covetores, o que nos permite identificá-los então com projetores que atuam sobre esses espaços vetoriais. A partir dessa característica, é possível construir uma geometria projetiva entre as diferentes descrições de um mesmo estado, ou de diferentes estados, de um sistema.

2.1 O Estado Nulo

O incontrolável distúrbio que comparece a toda medida implica que o ato de medida é indivisível. Isso é o mesmo que dizer: toda tentativa de seguir a história de um sistema durante um processo da medida muda geralmente a natureza da medida que está sendo realizada. Então, o conceito de uma dada medida seletiva $\hat{M}_a^b$ como uma medida composta, é desprovido de significado físico. O único significado que podemos atribuir a isso, ainda que apenas operacional, é que o primeiro estágio seleciona sistemas no estado b, e que o último os produz no estado a; os estados intermediários são sem significado para a medida como um todo. Além disso, podemos sempre inventar um estado não-físico para servir como intermediário. Iremos chamar a este construto mental de estado nulo 0, e escrever

$$\hat{M}_a^b = \hat{M}_a^0 \hat{M}_0^b \tag{2.1}$$

O processo de medida que seleciona um sistema num estado b e o produz no estado nulo,

$$\hat{M}_0^b = \hat{\Phi}^b$$

pode ser descrito como a aniquilação de um sistema no estado b; e a produção de um sistema no estado a seguindo esta seleção do estado nulo,

$$\hat{M}_a^0 = \hat{\Psi}_a$$

pode ser caracterizado como a criação de um sistema no estado a. Assim, (**??**) expressa a indiscernibilidade de $\hat{M}_a^b$ do processo composto de aniquilação de um sistema no estado b seguido pela criação de um sistema no estado a,

$$\hat{M}_a^b = \hat{\Psi}_a \hat{\Phi}^b \tag{2.2}$$

Doravante, os símbolos de medida $\hat{\Psi}$ e $\hat{\Phi}$ serão denominados *operadores de criação e aniquilação*[1], respectivamente.

A extensão da álgebra de medida para incluir o estado nulo exige certas propriedades dos símbolos $\hat{\Psi}$ e $\hat{\Phi}$. Assim,

$$\hat{\Psi}_a^\dagger = \hat{\Phi}^a \qquad \hat{\Phi}^{a\dagger} = \hat{\Psi}_a$$

$$\hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_b = \hat{\Phi}^a \hat{\Phi}^b = 0 \tag{2.3a}$$

$$\hat{M}_a^b \hat{\Phi}^c = \hat{\Psi}_a \hat{M}_b^c = 0 \tag{2.3b}$$

[1]Esta terminologia foi introduzida por Schwinger [**?**], e adquire um significado de semiótica mais relevante dentro do contexto da Teoria Quântica de Campos.

entretanto,

$$M_a^b \hat{\Psi}_c = \hat{\Psi}_a \langle b| \, |c\rangle$$
$$\hat{\Phi}^a M_b^c = \langle a| \, |b\rangle \, \hat{\Phi}^c$$
$$\hat{\Phi}^a \hat{\Psi}_b = \langle a| \, |b\rangle \, \hat{M}_0$$

Algumas propriedades de $\hat{M}_0$ são

$$\hat{\Psi}_a \hat{M}_0 = \hat{\Psi}_a$$
$$\hat{M}_0 \hat{\Phi}^a = \hat{\Phi}^a$$
$$\hat{M}_0 \hat{\Psi}_a = \hat{\Phi}^a \hat{M}_0 = \hat{0}$$

além disso, na álgebra de medida extendida,

$$\hat{1} = \sum_a \hat{M}_a + \hat{M}_0$$

Deste ponto em diante, portanto, sempre que escrevermos uma soma sobre todos os estados possíveis, tal como $\sum_a \hat{M}_a$, fica implícito que esta soma é extendida também ao estado nulo.

A arbitrariedade fundamental dos símbolos de medida expressa pela equação,

$$\overline{\hat{M}}_a^b = e^{-i\varphi(a)} \hat{M}_a^b e^{i\varphi(b)} \tag{2.4}$$

implica a substituição

$$\overline{\hat{\Psi}}_a = e^{-i\varphi(a)} \hat{\Psi}_a$$
$$\overline{\hat{\Phi}^b} = \hat{\Phi}^b e^{i\varphi(b)}$$

na qual nós efetivamente eliminamos $\varphi(0)$ expressando todas as outras fases com relação a esta.

Vamos tentar analisar qual o significado físico dessa liberdade. Observe que esta arbitrariedade muda tão somente a *direção* de um dado vetor de estado, mas não a sua *norma*, que podemos entender aqui como sendo proporcional à forma traço[2]. Assim, podemos interpretar o último par de equações como constituindo tão somente uma mudança na *escala* em que é medida a norma desses vetores, e a equação (**??**) pode ser lida como sendo o símbolo de medida M_a^b avaliado nas novas escalas de medida para as propriedades $B\ \left(e^{i\varphi(b)}\right)$ e $A\ \left(e^{-i\varphi(a)}\right)$. Isso nos mostra então que a liberdade de escolha de uma escala para as diferentes propriedades físicas mensuráveis implica que necessariamente só podemos fazer uma descrição estatística de tal sistema, se admitirmos que tudo que podemos supor sobre esse sistema é que ele possui uma estrutura lógica proposicional baseada unicamente nas *medidas* realizadas sobre esse sistema.

2.2 A Reconstrução da Álgebra de Medida

As características dos operadores de medida $\hat{M}_a^b$ podem agora ser derivadas daquelas que atribuímos aos símbolos $\hat{\Psi}_a$ e $\hat{\Phi}^b$. Assim,

$$\hat{M}_a^{b\dagger} = \hat{\Phi}^{b\dagger}\hat{\Psi}_a^{\dagger} = \hat{\Psi}_b\hat{\Phi}^a = \hat{M}_b^a$$

$$tr\hat{M}_b^a = tr\left(\hat{\Psi}_b\hat{\Phi}^a\right) = tr\left(\hat{\Phi}^a\hat{\Psi}_b\right) = \langle a|\,|b\rangle\, tr\hat{M}_0 = \langle a|\,|b\rangle$$

$$\hat{M}_a^b\hat{M}_c^d = \hat{\Psi}_a\hat{\Phi}^b\hat{\Psi}_c\hat{\Phi}^d = \langle b|\,|c\rangle\,\hat{\Psi}_a\hat{\Phi}^d = \langle b|\,|c\rangle\,\hat{M}_a^d$$

As várias identidades equivalentes contidas nas equações (**??**) nos mostram que somente os produtos da forma $\hat{\Psi}\hat{\Phi}$, $\hat{\Phi}\hat{\Psi}$, $\hat{X}\hat{\Psi}$, $\hat{X}\hat{\Phi}$, além dos $\hat{X}\hat{Y}$, que não são identicamente nulos podem figurar entre os elementos de uma álgebra de medida física. De acordo com a construção dos operadores de medida expressa pela equação (**??**), todos os operadores são combinações lineares de produtos $\hat{\Psi}\hat{\Phi}$,

$$\hat{X} = \sum_{a,b} \hat{\Psi}_a\,\langle a|\,\hat{X}\,|b\rangle\,\hat{\Phi}^b$$

[2] Isso vem do fato de a forma traço, para álgebras definidas sobre anéis escalares comutativos, possuir em si todas as propriedades relevantes de uma norma.

Assim, em qualquer manipulação algébrica, os produtos da forma $\hat{\Phi}\hat{\Psi}$ são efetivamente iguais a um número,

$$\hat{\Phi}^a\hat{\Psi}_b = \langle a| \, |b\rangle$$

em particular,

$$\hat{\Phi}^a\hat{\Psi}_{\acute{a}} = \delta^a_{\acute{a}} \tag{2.5}$$

Podemos observar ainda que, em qualquer aplicação do operador identidade, temos

$$\hat{1} = \sum_a \hat{M}_a = \sum_a \hat{\Psi}_a\hat{\Phi}^a$$

Portanto,

$$\hat{X} = \sum_{a,b} \hat{\Psi}_a\hat{\Phi}^a\hat{X}\hat{\Psi}_b\hat{\Phi}^b$$

o que nos mostra que

$$\hat{\Phi}^a\hat{X}\hat{\Psi}_b = \langle a| \, \hat{X} \, |b\rangle$$

Os símbolos *bra* e *ket*, respectivamente,

$$\langle a| = \hat{\Phi}^a \qquad |b\rangle = \hat{\Psi}_b$$

são designados de forma a tornar isso uma consequência direta da notação. As vantagens em se utilizar uma linguagem semioticamente ativa são evidentes. Em particular, o operador unitário pode ser expresso como

$$\hat{1} = \sum_a |a\rangle \, \langle a|$$

2.3 Álgebra Vetorial

Nós associamos até o momento um símbolo $\hat{\Psi}$ e um $\hat{\Phi}$ a cada um dos N estados físicos de uma dada descrição. Agora, os símbolos de uma descrição são linearmente relacionados aos de uma outra descrição qualquer,

$$\hat{\Psi}_b = \sum_a \hat{\Psi}_a \hat{\Phi}^a \hat{\Psi}_b = \sum_a \hat{\Psi}_a \langle a| \, |b\rangle$$
$$\hat{\Phi}^a = \sum_b \langle a| \, |b\rangle \, \hat{\Phi}^b$$

o que é uma decorrência direta da relação linear existente entre os operadores de medida de vários tipos. Múltiplos numéricos arbitrários dos símbolos $\hat{\Psi}$ ou $\hat{\Phi}$ formam assim os elementos de duas álgebras mutuamente adjuntas com dimensão N. Estas álgebras devem ser álgebras vetoriais lineares, uma vez que não há nenhuma operação de multiplicação significativa dentro de cada álgebra, ou seja, qualquer produto entre elementos de uma mesma álgebra resulta no vetor nulo. Somos levados assim, a uma geometria N-dimensional, denominada *geometria dos estados*, da qual a álgebra de medida pode ser derivada expressando-se as suas propriedades características em uma linguagem geométrica.

Esta geometria é métrica, uma vez que o número $\hat{\Phi}\hat{\Psi}$ define um produto interno. De acordo com (**??**) os vetores $\hat{\Phi}^a$ e $\hat{\Psi}_a$ de uma descrição a nos fornecem uma base de vetores ortonormais, de forma que podemos entender as transformações lineares expressas acima como mudanças de base. O produto de um operador por um vetor expressa o mapeamento de um vetor em outro, dentro de um mesmo espaço,

$$\hat{X}\hat{\Psi}_b = \sum_a \hat{\Psi}_a \hat{\Phi}^a \hat{X} \hat{\Psi}_b = \sum_a \hat{\Psi}_a \langle a| \, \hat{X} \, |b\rangle$$
$$\hat{\Phi}^a \hat{X} = \sum_b \langle a| \, \hat{X} \, |b\rangle \, \hat{\Phi}^b$$

O efeito do operador que simboliza a propriedade A,

$$\hat{A} = \sum_a \hat{\Psi}_a a \hat{\Phi}^a$$

sobre vetores no sistema de coordenadas a, é dado por

$$\hat{A}\hat{\Psi}_a = \hat{\Psi}_a a$$
$$\hat{\Phi}^a \hat{A} = a\hat{\Phi}^a$$

o que caracteriza $\hat{\Psi}_a$ e $\hat{\Phi}^a$ como autovetores à direita e à esquerda, respectivamente, do conjunto completo de operadores comutantes A, com autovalores a. Associada a cada álgebra vetorial linear há uma álgebra dual na qual todos os números são trocados pelos seu conjugados.

2.4 Funções de Onda

Os autovetores de uma dada descrição fornecem uma base para a representação de um vetor arbitrário por N números. As propriedades abstratas destes vetores são expressas por esses conjuntos de números, que são conhecidos como *funções de onda*. De maneira mais explícita,

$$\hat{\Psi} = \sum_a |a\rangle \langle a| \hat{\Psi} = \sum_a |a\rangle \psi(a)$$
$$\hat{\Phi} = \sum_a \hat{\Phi} |a\rangle \langle a| = \sum_a \phi(a) \langle a|$$

Se $\hat{\Psi}$ e $\hat{\Phi}$ estão na relação adjunta entre si, $\hat{\Psi}^\dagger = \hat{\Phi}$, as funções de onda correspondentes são relacionadas por

$$\phi(a) = \psi^*(a)$$

O produto interno de dois vetores é[3]

$$\hat{\Phi}\hat{\Psi} = \sum_a \hat{\Phi} |a\rangle \langle a| \hat{\Psi} = \sum_a \phi(a) \psi(a)$$

[3] As somas expressas aqui devem ser tomadas no sentido dado pela *medida característica* desses espaços vetoriais, de forma que se estivermos tratando de espaços de dimensão infinita isso se extende a uma integral funcional.

e em particular,

$$\hat{\Psi}^{\dagger}\hat{\Psi} = \sum_{a} \psi^{*}(a)\,\psi(a) \geqslant 0$$

o que caracteriza a geometria dos estados como uma geometria unitária.

O operador $\hat{\Psi}\hat{\Phi}$ é representado pelos elementos de matriz

$$\langle a|\,\hat{\Psi}\hat{\Phi}\,|b\rangle = \psi(a)\,\phi(b)$$

e as funções de onda que representam $\hat{X}\hat{\Psi}$ e $\hat{\Phi}\hat{X}$ são

$$\langle a|\,\hat{X}\hat{\Psi} = \sum_{b} \langle a|\,\hat{X}\,|b\rangle\,\psi(b)$$

$$\hat{\Phi}\hat{X}\,|b\rangle = \sum_{a} \phi(a)\,\langle a|\,\hat{X}\,|b\rangle$$

Tomando $\hat{X} = \hat{1}$ encontramos a relação entre funções de onda de um mesmo vetor em duas representações diferentes,

$$\psi(a) = \sum_{b} \langle a|\,|b\rangle\,\psi(b)$$

$$\phi(b) = \sum_{a} \phi(a)\,\langle a|\,|b\rangle$$

Esta notação conveniente nos assegura, em princípio, que todo operador auto-adjunto simboliza uma quantidade física, e que todo vetor unitário simboliza um estado. Então, o valor esperado da propriedade X no estado $\hat{\Psi}$ é dado por

$$\langle X\rangle_{\hat{\Psi}} = \hat{\Psi}^{\dagger}\hat{X}\hat{\Psi} = \sum_{a,a'} \psi(a)\,\langle a|\,\hat{X}\,|a'\rangle\,\psi(a')$$

Em particular, a probabilidade de se observar o valor a numa medida da propriedade A realizada sobre o sistema no estado $\hat{\Psi}$ é

$$p\left(a|\hat{\Psi}\right) = \left\langle \hat{M}_{a}\right\rangle_{\hat{\Psi}} = \hat{\Psi}^{\dagger}\,|a\rangle\,\langle a|\,\hat{\Psi} = |\psi(a)|^{2}$$

2.5 Transformações Unitárias

O automorfismo da geometria dos estados é produzido por transformações unitárias

$$\widehat{\hat{\Phi}} = \hat{\Phi}\hat{U} \quad \widehat{\hat{\Psi}} = \hat{U}^{-1}\hat{\Psi} \quad \widehat{\hat{X}} = \hat{U}^{-1}\hat{X}\hat{U}$$

aplicadas a todos os vetores e operadores, onde o operador unitário $\hat{U}$ obedece à relação

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

Todas as relações algébricas e conexões adjuntas entre vetores e operadores são preservadas por esta transformação. Duas tranformações unitárias sucessivas formam uma outra transformação também unitária, e a inversa de uma transformação unitária é unitária, ou seja, transfomações unitárias formam um grupo. A aplicação de uma transformação unitária a uma base de vetores ortonormais na descrição a, os quais são caracterizados pela equação

$$\langle a| \left(\hat{A} - a\right) = 0$$

leva aos vetores ortonormais

$$\langle \bar{a}| = \langle a| \hat{U}$$

que a seguinte equação de autovalores,

$$\langle \bar{a}| \left(\widehat{\hat{A}} - a\right) = 0$$

Portanto, os $\langle \bar{a}|$ são os estados de uma nova descrição associada com as quantidades $\bar{A}$ que possuem o mesmo espectro de autovalores que as propriedades A. Uma vez que todas as relações entre operadores e autovetores são preservadas pela transformação, temos

$$\langle \bar{a}| \widehat{\hat{X}} |\bar{a}'\rangle = \langle a| \hat{X} |a'\rangle$$

$$\langle \bar{a}| \widehat{\hat{\Psi}} = \langle a| \hat{\Psi} \qquad \widehat{\hat{\Phi}} |\bar{a}\rangle = \hat{\Phi} |a\rangle$$

As formas equivalentes

$$\langle\bar{a}|\,\hat{X}\,|\bar{a}\rangle = \langle a|\,\hat{U}\hat{X}\hat{U}^{-1}\,|a\rangle \tag{2.6a}$$

$$\langle\bar{a}|\,\hat{\Psi} = \langle a|\,\hat{U}\hat{\Psi} \qquad \hat{\Phi}\,|\bar{a}\rangle = \hat{\Phi}\hat{U}^{-1}\,|a\rangle \tag{2.6b}$$

nos dão as representações, na descrição $\bar{a}$, de operadores e vetores em função dos operadores e vetores associados na descrição a.

Os vetores de base de duas descrições quaisquer, cada qual tomado num ordenamento definido, estão conectados por transformações unitárias. Assim,

$$\left.\begin{array}{l} \left|a^k\right\rangle = \hat{U}_{ab}\left|b^k\right\rangle \\ \left\langle b^k\right| = \left\langle a^k\right|\hat{U}_{ab} \end{array}\right\} k \in \{1, ..., N\}$$

$$\hat{U}_{ab} = \sum_k \left|a^k\right\rangle\left\langle b^k\right|$$

Dessa última expressão é fácil ver que

$$\hat{U}^{\dagger}_{ab} = \sum_k \left(\left|a^k\right\rangle\left\langle b^k\right|\right)^{\dagger} = \sum_k \left(\left\langle b^k\right|\right)^{\dagger}\left(\left|a^k\right\rangle\right)^{\dagger} = \sum_k \left|b^k\right\rangle\left\langle a^k\right| = \hat{U}_{ba} = \hat{U}^{-1}_{ab}$$

A função de transformação relacionando as descrições a e b pode portanto figurar como uma matriz que se refere totalmente à representação a ou b,

$$\left\langle a^k\right|\left|b^{a'}\right\rangle = \left\langle a^k\right|\hat{U}_{ba}\left|a^{a'}\right\rangle = \left\langle b^k\right|\hat{U}_{ab}\left|b^{a'}\right\rangle$$

Uma vez que os conjuntos $\left|a^k\right\rangle$ e $\left|b^k\right\rangle$ formam bases distintas do mesmo espaço vetorial, todas as quantidades representadas numa base possuem seu equivalente na outra, e temos portanto que os equivalentes de operadores e vetores são obtidos fazendo-se simplesmente uma mudança de base, o que equivale à uma transformação de semelhança na linguagem de matrizes.

Se dois conjuntos completos de propriedades compatíveis A e B possuem o mesmo espectro de autovalores $\left(a^k = b^k\right)$, os seus operadores associados $\hat{A}$ e $\hat{B}$ também estarão ligados por uma transformação unitária. Com o ordenamento dos vetores de base estabelecido pelos autovalores correspondentes, vemos que

$$\begin{aligned}\hat{B} &= \sum_k \left|b^k\right\rangle b^k \left\langle b^k\right| = \sum_k \hat{U}_{ba} \left|a^k\right\rangle b^k \left\langle a^k\right| U_{ab} = \\ &= \hat{U}_{ba} \left(\sum_k \left|a^k\right\rangle a^k \left\langle a^k\right| \right) \hat{U}_{ab} = \hat{U}_{ba} \hat{A} \hat{U}_{ab}\end{aligned}$$

Temos portanto que, dentro da geometria dos estados, as transformações unitárias desempenham um papel fundamental, uma vez que são elas que relacionam as diferentes bases equivalentes desse espaço vetorial ou, equivalentemente, os diferentes conjuntos completos de propriedades compatíveis.

2.5.1 Transformações Unitárias Infinitesimais

A definição de um operador unitário pode ser expressa como

$$\left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger \left(\hat{U} - \hat{1}\right) + \left(\hat{U} - \hat{1}\right) + \left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger = 0 \tag{2.7}$$

Veja:

$$\begin{aligned}\left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger \left(\hat{U} - \hat{1}\right) &= \left(\hat{U}^\dagger - \hat{1}^\dagger\right) \left(\hat{U} - \hat{1}\right) = \hat{U}^\dagger \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{1} - \hat{1}^\dagger \hat{U} + \hat{1}^\dagger \hat{1} = \\ &= \hat{U}^\dagger \hat{U} - U^\dagger - \hat{U} + \hat{1} = -\left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger - \left(\hat{U} - \hat{1}\right)\end{aligned}$$

a última identidade é verdadeira se, e somente se, $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$, portanto a identidade (**??**) serve como definição alternativa de operador unitário.

Por outro lado, a expressão (**??**) se assemelha muito a uma identidade entre operadores infinitesimais onde são desprezados termos de ordem superior. Assim, se impormos que $\hat{U} - \hat{1} = i\hat{G}$ onde $\hat{G}$ é um operador infinitesimal, temos que

$$\left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger \left(\hat{U} - \hat{1}\right) + \left(\hat{U} - \hat{1}\right) + \left(\hat{U} - \hat{1}\right)^\dagger =$$

$$= -i\hat{G}^\dagger i\hat{G} + i\hat{G} - i\hat{G}^\dagger$$

usando ainda que, por construção, todo operador infinitesimal é auto-adjunto, temos

$$\hat{G}\hat{G} + i\hat{G} - i\hat{G} = \hat{G}^2 \simeq 0$$

Portanto, isto nos mostra que todo operador unitário difere infinitesimalmente do operador identidade, o que pode ser expresso como

$$\hat{U} = \hat{1} + i\hat{G} \qquad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} = \hat{1} - i\hat{G}$$

A transformação de coordenadas[4] descritas por um operador deste tipo é indicada por

$$\delta_a \langle a| = \langle \bar{a}| - \langle a| = \langle a| i\hat{G}$$
$$\delta_a |a\rangle = |\bar{a}\rangle - |a\rangle = -i\hat{G}|a\rangle$$

Agora, de acordo com (**??**), uma mudança no sistema de descrição é equivalente, no seu efeito sobre operadores e vetores de uma dada representação, a uma mudança correspondente de vetores e operadores pelos seus análogos no sistema de coordenadas original. Portanto,

$$\delta_a \langle a| \hat{X} \left|a'\right\rangle = \langle \bar{a}| \hat{X} \left|\bar{a}'\right\rangle - \langle a| \hat{X} \left|a'\right\rangle = i \langle a| \delta\hat{X} \left|a'\right\rangle$$

$$\delta_a \langle a| \hat{\Psi} = \langle a| \delta\hat{\Psi} \qquad \delta_a\hat{\Phi}|a\rangle = \delta\hat{\Phi}|a\rangle$$

onde

$$\delta\hat{\Psi} = \left(\hat{U} - \hat{1}\right)\hat{\Psi} = i\hat{G}\hat{\Psi}$$
$$\delta\hat{\Phi} = \hat{\Phi}\left(\hat{U}^{-\hat{1}} - \hat{1}\right) = -\hat{\Phi}i\hat{G}$$

[4]Por coordenadas devemos entender aqui o conceito generalizado de um conjunto completo qualquer de observáveis que serve para descrever o sistema físico de interesse.

e

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

Desprezando o termo de segunda ordem $\hat{G}\hat{X}\hat{G}$ encontramos

$$
\delta\hat{X} = -i\left[\hat{X}, \hat{G}\right] = i\left[\hat{G}, \hat{X}\right] \tag{2.8}
$$

onde os colchetes representam o *comutador* entre os operadores,

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

A expressão (**??**) é análoga à expressão clássica da variação induzida numa variável mecânica por uma transformação canônica infinitesimal. Isto é um indício de que, dentro do contexto variacional que pretendemos explorar mais adiante, as tranformações unitárias terão um papel fundamental para o estabelecimento da lei dinâmica que deve reger as interações fundamentais da teoria, papel este que será, de certa forma, análogo àquele desempenhado pelas transformações canônicas na Mecânica Clássica.

Uma vez que todas as relações algébricas são preservadas, as variações de operadores e vetores serão governadas por regras do tipo

$$
\begin{aligned}
\delta\left(\hat{X}\hat{Y}\right) &= \delta\hat{X}\left(\hat{Y}\right) + \hat{X}\left(\delta\hat{Y}\right) \\
\delta\left(\hat{X}\hat{\Psi}\right) &= \delta\hat{X}\left(\hat{\Psi}\right) + \hat{X}\left(\delta\hat{\Psi}\right)
\end{aligned}
$$

ou seja, o operador de variação δ construído acima preserva características de linearidade, tais como a da regra de Leibniz.

Deve-se fazer distinção entre o operador $\hat{X} + \delta\hat{X} = \hat{U}\hat{X}\hat{U}^{-1}$ e

$$
\widehat{\hat{X}} = \hat{X} - \delta\hat{X} = \hat{U}^{-1}\hat{X}\hat{U}
$$

Este último é o operador que exibe as mesmas propriedades relativas à descrição $\bar{a}$ que o operador $\hat{X}$ possui na descrição a. Assim, podemos interpretar os vetores de base $\langle \bar{a}|$ como sendo os auto-vetores de $\hat{A} - \delta\hat{A}$ com autovalores a.

3. A Estrutura Dinâmica

> "O mundo objetivo simplesmente é, ele não acontece. É somente o olhar da minha consciência, rastejando acima e ao longo da linha da vida do meu corpo, que traz uma seção deste mundo à vida como uma imagem flutuante no espaço que muda continuamente no tempo."
>
> Hermann Weyl

A estrutura dinâmica de um sistema físico contém a lei que governa a evolução no tempo dos estados. Para sistemas conservativos, veremos que esta lei é um homomorfismo de um grupo abeliano de números reais sobre automorfismos de um sistema de proposições. A aplicação dos resultados obtidos nos capítulos precedentes nos permitirá derivar, com a ajuda de algumas premissas físicas bastante razoáveis, a equação de Schrödinger que é apresentada num contexto diferente, ainda que equivalente, àqueles correspondentes às abordagens de Schrödinger, Heisenberg e Dirac.

3.1 Evolução dos Estados e Causalidade

Para compreender a relação entre os estados de um sistema, em diferentes instantes de tempo, será útil que consideremos as possíveis propriedades que essa relação possa exibir. O caso mais simples possível seria o de uma mera sucessão temporal, sem nenhuma conexão com o que quer que seja e onde não houvesse a probabilidade, por menor que fosse, de que o estado inicial especificável, tivesse por seqüência, no correr do tempo, um estado futuro também especificável. David Hume, filósofo do século

XVII, oferece-nos razões para crer que a relação entre estados de fenômenos naturais imediatamente percebidos pelos sentidos seja desse tipo. Isso dirige a nossa atenção para o fato de que, nesse caso, não se sente qualquer relação de conexão necessária e nem, tampouco, se sente diretamente a probabilidade da sucessão. Tudo que a sensação nos traz, no que diz respeito aos sucessivos estados de qualquer fenômeno, é a mera relação de sucessão temporal.

Esse é um ponto de importância fundamental. Ele significa que se pode chegar a uma teoria causal da relação entre estados sucessivos de qualquer sistema, tão-somente por meios especulativos, através de um teoria científica e filosófica, axiomaticamente construída e formulada dedutivamente, a qual é testada, não diretamente em face aos dados sensoriais e experimentais, mas só de maneira indireta, via as conseqüências que dela se deduzem.

Uma segunda possibilidade que diz respeito ao caráter da relação entre os estados de qualquer sistema físico, em diferentes instantes de tempo, é a de que a relação é necessária, mas só se poderá saber qual conexão seja essa pelo conhecimento do estado futuro. O conhecimento do estado futuro, ou final, poderá ser obtido, seja esperando que ele ocorra, seja por já ter sido ele observado em sistemas do mesmo tipo. Quando esse é o caso, a causalidade é teleológica. As mudanças do sistema, com o correr do tempo, são determinadas pelo estado final do sistema.

Outra possibilidade é que a relação entre os estados de um sistema, em diferentes instantes de tempo, seja uma relação de conexão necessária, tal que se possa deduzir o estado futuro do sistema, suposto isolado, do conhecimento do seu estado inicial. Em linguagem matemática mais técnica, isso pressupõe a existência de uma teoria, axiomaticamente construída e verificada indiretamente, cujos postulados propiciem uma função de estado, cujas variáveis independentes especifiquem por completo o estado do sistema, a qualquer instante de tempo, e forneçam uma equação temporal, que relacione os valores numéricos empíricos dessas variáveis independentes, em um instante

t_1 inicial qualquer, aos seus valores numéricos empíricos, em qualquer instante t_2 ulterior, e isso de tal maneira que, introduzindo-se o conjunto de valores operacionalmente determinados, no instante t_1, na equação temporal, os seus valores no instante futuro possam ser obtidos por mera resolução da equação. Quando esse for o caso, diremos que a relação temporal exemplifica a causa mecânica.

Deve-se notar que essa definição de causalidade mecânica deixa em aberto a questão de quais variáveis independentes são requeridas para se definir o estado do sistema em um instante de tempo qualquer. Isso confere à teoria assim descrita, a possibilidade de possuir o que costumamos denominar *liberdade de gauge* ou de *calibre*.

Não podemos, contudo, concluir que, devido ao fato de a causalidade mecânica, ainda que em uma forma mais fraca, persistir na mecânica quântica, tudo está no mesmo na física moderna, no que diz respeito à sua causalidade e ontologia, como ocorria antes do advento da mecânica quântica. O que ocorreu foi que, com a teoria quântica conseguimos combinar, consistentemente, algumas das pressuposições básicas, de natureza causal e ontológica, que os pensadores medievais e modernos nos legaram. É bom ressaltar que usamos aqui o termo "ontológico" para denotar qualquer conceito de teoria científica, experimentalmente verificado, que se refira ao objeto do conhecimento científico em si, ao invés da relação epistemológica entre o cientista, como conhecedor, e o objeto que ele investiga. Uma tal síntese filosófica experimentalmente verificada, da potencialidade ontológica com a causalidade mecânica ontológica, no sentido mais fraco desse último conceito, ocorre quando estendemos o conceito de probabilidade de seu papel meramente epistemológico da teoria de erros que especifica quando a teoria é ou não confirmada experimentalmente, ao seu papel ontológico (especificado, em princípio, nos postulados da teoria, ou deles decorrente, como no caso da teoria física de medida aqui apresentada) de caracterizar o próprio objeto do conhecimento científico.

Resta-nos chamar atenção para uma conclusão deveras importante que podemos tirar acerca da relação entre o objeto, o evento de observação, e o resto do universo.

Podemos relembrar que, em algumas definições de causalidade mecânica, foi acrescentada a expressão limitativa "para um sistema isolado", enquanto em outras instâncias ficou ela implícita. Essa condição limitativa pode ser satisfeita, em princípio, na física clássica e, também, na prática, fazendo-se observações cada vez mais cuidadosas e novos refinamentos nos equipamentos experimentais utilizados. Todavia, a introdução do objeto científico em uma teoria física de medida, elimina, em certo sentido, *em princípio* (e não meramente na prática, devido às imperfeições que provêm da observação humana e de seus instrumentos) a possibilidade de se satisfazer a condição de que o objeto do conhecimento do cientista seja um sistema isolado. Em conseqüência, somente se todo o universo for incluído no objeto do conhecimento científico, poder-se-á satisfazer a condição limitativa expressa na palavras "para um sistema isolado", mesmo na acepção mais fraca da causação mecânica.

Assim, vemos que a filosofia da física contemporênea é tão nova em sua epistemologia quanto em sua ontologia. De fato, é da originalidade de sua ontologia que emana a novidade da epistemologia.

3.2 A Evolução no Tempo de Um Sistema

Até o momento consideramos apenas os aspectos cinemáticos do sistema de interações fundamentais. Estes aspectos referem-se a propriedades que podem ser medidas em um particular instante de tempo. Nós até agora temos ignorado completamente a evolução no tempo do estado de um sistema. Esta evolução no tempo contém os *aspectos dinâmicos* do sistema.

Quiçá não seja supérfluo apontar que a referência a propriedades "em um instante de tempo" é uma abstração que não poderá nunca ser satisfeita por observações reais de sistemas físicos reais. Todas medidas *tomam tempo*; algumas medidas podem até levar um tempo bastante longo. Para tais medidas, a noção de "estado em um dado instante", ou noções similares (que se referem a um certo valor definido do tempo), podem vir a ser muito difíceis de se definir. Em tais casos, a distinção prática entre a cinemática e os aspectos dinâmicos de um sistema pode ser obscurecida. No entanto, esta distinção pode ser mantida como uma idealização.

A segunda dificuldade na aplicação da noção de evolução temporal é encontrada em acepção aos conceitos relativísticos, onde não é possível dar um significado absoluto à noção de simultaneidade de eventos espacialmente distantes. Esta é uma das dificuldades de uma teoria de interações fundamentais relativista para sistemas não-triviais, e que somente pode ser tornada consistente dentro do escopo de uma teoria de campos onde o tempo é um parâmetro local e não uma variável global como no caso não-relativístico. Esta é uma das razões porque fomos forçados a restringir nossa discussão, até o momento, a sistemas físicos não-relativísticos.

A evolução dinâmica de um sistema físico deve ser expressa como uma transformação do estado em algum instante $t = 0$ para o estado em algum outro instante de tempo $t \neq 0$. Mas, o que podemos dizer sobre a *natureza* desta transformação?

Na Mecânica Clássica de sistemas conservativos, o estado evolui de acordo com a solução de alguma equação diferencial de primeira ordem nas variáveis canônicas. Para tais sistemas, o estado em um dado instante de tempo determina o estado em qualquer outro instante. Seria, portanto, bastante razoável assumir um aspecto similar para os sistemas quânticos, modificado somente quanto ao siginificado de "estado" num sistema de interações fundamentais, tal como descrito por nós anteriormente.

Esperamos então que, um dado estado qualquer $p = p_0$ em um instante $t = 0$ determine unívocamente o valor esperado[1] de um outro estado p_t em um instante $t \neq 0$,

[1]Perceba que aqui utilizamo-nos da *probabilidade* de se encontrar o sistema num dado estado, de acordo com o que foi discutido nos capítulos precedentes.

e que a transformação $p \to p_t$ seja contínua na topologia induzida pelos estados[2].

Denominaremos um determinado sistema de *conservativo* se a transformação $p \to p_t$ não depender do valor inicial do tempo (que está sendo escolhido, por conveniência como $t = 0$). Para tais sistemas, podemos dizer mais explicitamente: a correspondência $p_t \to p_{t+\tau}$ depende somente de τ, e não de t.

Esta propriedade geral não é, no entanto, suficiente para determinar o caráter da evolução no tempo dos sistemas fundamentais. Assim como uma curva contínua no espaço de fase é um objeto muito mais específico que a solução de uma equação diferencial, o mesmo se dá com a evolução no tempo dos estados de um sistema fundamental: a continuidade sozinha nos dá muito pouca informação a respeito do caráter da transformação $p \to p_t$.

Suplementaremos, conseqüentemente, a continuidade com uma suposição adicional muito importante mas também um tanto distante de se alcançar: *a evolução no tempo de um sistema físico é induzida por uma transformação de simetria do sistema de proposições.* Entendemos por uma transformação de simetria do sistema de proposições aquela transformação do sistema de descrição dessas proposições que preserva as proposições em si. Analisemos isso com um pouco mais de detalhes. Vimos que o máximo de informação física experimental que pode ser coligida a partir de medidas efetuadas sobre um determinado sistema forma um sistema de proposições. Esse sistema de proposições leva-nos a relacionar as proposições umas às outras através do que denominamos um cálculo proposicional [**?**], cuja base de descrição são os símbolos de medida. Assim, todo o conjunto de proposições pode ser escrito como um sistema de equações lineares entre os símbolos de medida. Os diferentes conjuntos completos de observáveis físicos definem diferentes descrições do mesmo sistema físico, e são as transformações unitárias que preservam a estrutura da geometria de estados entre as diferentes de-

[2]De fato, a existência e a definição de uma tal topologia ainda são assuntos de intensa pesquisa e controvérsia [**?**].

scrições. Portanto, a transformação de simetria do sistema de proposições deve ser uma transformação unitária entre as descrições de um dado sistema físico, tomadas em diferentes instantes de tempo, e que preserve ainda o *sistema* de proposições colocado acima. Em outras palavras, essa transformação de simetria deve ser uma transformação unitária entre duas descrições tomadas em instantes distintos de tempo, que preserve *toda a informação física contida nesse sistema.*

Tentaremos agora verificar qual o significado desta suposição do ponto de vista físico. Se a evolução no tempo é uma transformação de simetria, então a *estrutura física* do sistema de proposições *é indistinguível em dois instantes distintos de tempo.* Isso nada mais é, do que outra forma de se expressar a *homogeneidade* do tempo. Para sistemas isolados esta propriedade é equivalente à existência de leis dinâmica imutáveis. Em tais sistemas não deve ser possível, portanto, determinar através de qualquer medida física, um valor absoluto do tempo; somente intervalos finitos de tempo estão acessíveis às medidas. Se existem, ou não, tais sistemas que são, neste sentido, absolutamente homogêneos no tempo, é naturalmente uma matéria a ser investigada pela experiência, e esta é certamente uma das experiências fundamentais sobre o mundo físico.

Estas considerações levam-nos, portanto, à seguinte formulação da lei dinâmica básica para um sistema de interações fundamentais conservativo:

> A evolução $p \rightarrow p_t$ de um estado é induzida por uma transformação contínua de simetria da rede de proposições. Isto significa que existe um automorfismo $a \rightarrow a'$ da rede $\mathcal{L}$ de proposições, tal que
>
> $$p_t\,(a') = p\,(a)$$
>
> Além disso, este automorfismo é uma função contínua do parâmetro t.

Gostaríamos de enfatizar aqui que esta especificação da lei de evolução é certamente correta para uma certa classe de sistemas, os quais correspondem classicamente aos sistemas conservativos; até o momento, *nada* mais podemos dizer acerca de um tipo mais geral de sistema físico. É de se esperar que sistemas que durante a sua evolução estejam sujeitos a influências externas possam se desviar do comportamento dos sistemas conservativos principalmente em dois importantes aspectos: eles podem se envolver com o sistema externo de uma maneira que dependa do *valor absoluto do tempo*, e a sua evolução no tempo pode não ser necessariamente induzida por uma *transformação de simetria* do sistema de proposições, mas sim por algum outro tipo mais geral de transformação. Este último caso deve ser considerado mais seriamente, uma vez que podemos encontrar facilmente exemplos de sistemas físicos bem conhecidos em que ele se aplica (uma partícula sujeita a uma força externa constante, por exemplo). Em sistemas de interações fundamentais, é de se esperar que isto ocorra sempre que a magnitude da ação mínima que o sistema interagente externo exerce sobre o sistema estudado, não possa ser negligenciada.

Começaremos analisando, portanto, os sistemas conservativos, que constituem uma classe bastante grande e certamente muito importante de sistemas físicos. Para tais sistemas, veremos que a descrição da lei dinâmica que demos acima pode ser feita de maneira muito mais clara e específica.

3.3 O Grupo Dinâmico e A Equação de Schrödinger

Iremos assumir nesta seção que estamos tratando apenas com um sistema físico conservativo descrito por um sistema de proposições que podem ser representadas como subespaços de uma espaço de Hilbert. A evolução no tempo de tais sistemas pode ser descrita por um homomorfismo contínuo de um grupo uniparamétrico de números reais sobre automorfismos do sistema de proposições. Como é bem conhecido da teoria de álgebras e representações de grupos, um tal homomorfismo pode ser induzido por uma transformação de um vetor unitário do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ que mapeie a reta real continuamente em um grupo uniparamétrico de operadores unitários $\hat{U}_t$, $t \in \mathbb{R}$:

$$\hat{U}_{t_1}\hat{U}_{t_2} = \hat{U}_{t_1+t_2} \qquad \hat{U}_t^* = \hat{U}_{-t}$$

sendo ainda o produto interno $\langle\varphi| \left|\hat{U}_t\psi\right\rangle$ uma função contínua da variável real t. Sob este grupo, observáveis, e em particular projeções, se transformam de acordo com a lei

$$\hat{A} \to \hat{U}_t\hat{A}\hat{U}_t^{-1} \tag{3.1}$$

O estado transformado é definido por

$$p_t\left(\hat{U}_t\hat{A}\hat{U}_t^{-1}\right) = p\left(\hat{A}\right)$$

Em particular, se o estado é puro e se é representado por um vetor de estado no domínio de A, então a evolução no tempo do estado $\psi \to \psi_t$ é dada pela transformação unitária

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_t\,|\psi\rangle \tag{3.2}$$

Chamamos ao particular homomorfismo $t \to \hat{U}_t$ o *grupo dinâmico* do sistema. O grupo dinâmico é portanto mais que um mero grupo abstrato. Como grupo abstrato ele seria meramente um grupo aditivo de números reais. Como homomorfismo ele é uma particular família de transformações uniparamétricas do espaço de Hilbert. Podemos caracterizar melhor o grupo dinâmico expressando-o na sua forma infinitesimal: a variedade diferencial linear densa de vetores $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ para a qual

$$i\lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\left(\hat{U}_t - \hat{1}\right)|\psi\rangle \equiv \hat{H}\psi \tag{3.3}$$

existe, é o domínio do operador linear auto-adjunto $\hat{H}$ definido pela operação do lado esquerdo de (**??**). O operador $\hat{H}$ é denominado o operador de evolução ou *Hamiltoniano* do sistema. Em termos deste operador podemos escrever

$$\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t}$$

A equação (**??**) pode agora ser posta numa forma infinitesimal usando-se a expansão formal de $\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t}$, de modo a se obter

$$\hat{U}_t = e^{-i\hat{H}t} \simeq \hat{1} - it\hat{H} \qquad \hat{U}_t^{-1} = e^{i\hat{H}t} \simeq \hat{1} + it\hat{H}$$

$$\hat{A}_t = \hat{U}_t\hat{A}\hat{U}_t^{-1} \simeq \left(\hat{1} - it\hat{H}\right)\hat{A}\left(\hat{1} + it\hat{H}\right) \simeq \hat{A} + it\hat{A}\hat{H} - it\hat{H}\hat{A} + t^2\hat{H}\hat{A}\hat{H}$$

$$\frac{i}{t}\left(\hat{A}_t - \hat{A}\right) \simeq \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} = \left[\hat{H}, \hat{A}\right]$$

A expressão do lado esquerdo é rigorosamente válida apenas no limite de pequenas variações do parâmetro t, o que nos leva a concluir que

$$i\frac{d\hat{A}_t}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{A}\right]$$

Similarmente, podemos obter da equação (**??**) que

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_t\,|\psi\rangle \simeq \left(\hat{1} - it\hat{H}\right)|\psi\rangle$$

$$\frac{i}{t}\left(|\psi_t\rangle - |\psi\rangle\right) \simeq \hat{H}\,|\psi\rangle$$

ou ainda,

$$i\frac{d\,|\psi_t\rangle}{dt} = \hat{H}\,|\psi_t\rangle$$

Esta é a denominada *Equação de Schrödinger* do sistema.

As duas descrições são totalmente equivalentes. A ponte entre elas é fornecida pela medida espectral associada ao operador auto-adjunto $\hat{H}$.

4. O Princípio Variacional

"Seria, entretanto, mais desejável que a linguagem com a qual se designam as particularidades de uma dada esfera fosse extraída dessa própria esfera, que o mais simples fenômeno fosse tratado como fórmula básica, daí se derivando e desenvolvendo as mais diversificadas fórmulas."

Goethe, A Doutrina das Cores, §755.

O estudo precedente nos fez perceber que as transformações unitárias devem desempenhar um papel de grande importância na dinâmica de um sistema de interações fundamentais, e também que o processo de evolução temporal de um sistema dinâmico desse tipo pode ser encarado como uma seqüência de transformações auto-adjuntas infinitesimais.

Nós agora propomos reexaminarmos esses conceitos sob a luz de um princípio variacional que deverá ter ensejo a partir da teoria cinemática desenvolvida até aqui. Uma formulação deste tipo, devida a Schwinger [**?**], é logicamente preferível aos hoje tradicionais procedimentos de quantização por diversas razões.

Todos os procedimentos canônicos de quantização de uma teoria possuem, aparte os seus princípios básicos subjacentes, dois postulados distintos: relações de comutação entre operadores correspondentes a observáveis incompatíveis e as equações de movimento. A questão que se coloca então é: seria possível obter a formulação de uma teoria de interações fundamentias que reproduzisse os resultados desses procedimentos de quantização, e mais ainda, que dependesse somente de um *único* princípio básico?

Foi com este intuito que desenvolvemos até aqui toda a teoria baseando-nos simplesmente naquilo que poderia sempre ser tomado como uma sequência lógica de definições extraídas das *medidas* realizadas sobre os sistemas físicos.

4.1 Medidas e Evolução Temporal

Uma medida deve ser vista, dentro do contexto de uma teoria de interações fundamentais, como uma operação física no espaço e no tempo. As propriedades de um sistema são descritas com respeito a medidas feitas em um dado instante de tempo[1], e por sua vez, nenhum valor do tempo é intrínsecamente distingüido de qualquer outro pelos resultados de medidas feitas sobre sistemas físicos isolados. Portanto, os conjuntos de operadores que simbolizam propriedades análogas em diferentes instantes de tempo devem estar relacionados, mas essa relação deve ser tal que preserve a *estrutura lógica* existente entre esses operadores, e as transformações que preservam a estrutura da geometria dos estados são as transformações unitárias. Por outro lado, a propagação no tempo do distúrbio causado por uma medida implica que quantidades físicas que se referem a dois intantes distintos de tempo são, em geral, incompatíveis. Dessa forma, conjuntos completos de propriedades compatíveis devem possuir todos os seus elementos avaliados em um mesmo instante de tempo, e a caracterização de um estado requer a especificação dos valores destas quantidades concomitantemente com a de um referencial. A função de transformação relacionando duas descrições arbitrárias pode portanto ser simbolizada por $\langle a_{t_2}|\,|b_{t_1}\rangle$. Casos especiais disto são $\langle a_t|\,|b_t\rangle$ ligando dois diferentes conjuntos de quantidades em um mesmo instante de tempo e $\langle a_{t_2}|\,|\bar{a}_{t_1}\rangle$, que relaciona propriedades análogas em dois instantes distintos de tempo. A conexão entre estados em dois instantes diversos envolve o conhecimentos de toda a história dinâmica do sistema neste intervalo. Conseqüentemente, as propriedades de sistemas específicos devem

[1] A palavra *instante* toma aqui o sentido discutido no capítulo anterior.

estar completamente contidas em um princípio dinâmico que caracteriza a função de transformação geral.

4.2 Os Operadores Ação e Lagrangeano

Qualquer alteração infinitesimal da função de transformação $\langle a_{t_2} | \, | b_{t_1} \rangle$ pode ser expressa em termos de um operador auto-adjunto infinitesimal que possui a propriedade de ser aditivo sob transformações consecutivas. Iremos então definir o *operador ação* através do seguinte postulado dinâmico fundamental:

> Existe uma classe especial de alterações infinitesimais para a qual os operadores associados $\delta \hat{S}_{t_1,t_2}$ são obtidos por variações apropriadas de um único operador, o operador ação $\hat{S}_{t_1,t_2}$,
>
> $$\delta \langle a_{t_2} | \, | b_{t_1} \rangle = i \langle a_{t_2} | \, \delta \hat{S}_{t_1,t_2} \, | b_{t_1} \rangle$$
>
> onde
>
> $$\delta \hat{S}_{t_1,t_2} = \delta \left[\hat{S}_{t_1,t_2} \right]$$

Se a transformação que liga as descrições a_{t_2} e b_{t_1} for vista como uma sucessão contínua de transformações entre descrições diferindo infinitesimalmente, a propriedade de aditividade do operador ação no assegura que

$$\hat{S}_{t_1,t_2} = \sum_{t_1}^{t_2} \hat{S}_{t,t+dt}$$

onde $\hat{S}_{t,t} = 0$ uma vez que $\langle a_{t_2} | \, | b_{t_1} \rangle$ possui valores numéricos fixos.

Uma vez que a evolução gerada por $\hat{S}_{t_1,t_2}$ é vista como um processo *contínuo* ao longo do tempo[2], o operador ação conectando dois instantes de tempo que diferem entre si apenas infinitesimalmente, deve ser proporcional a um operador auto-adjunto

[2] Como dissemos na seção 3.2, o problema de se especificar qual a *topologia* sobre a qual esta continuidade está definida é ainda um assunto bastante controverso.

calculado em um único instante de tempo vezes a magnitude da variação do parâmetro temporal, ou seja, podemos escrever

$$\hat{S}_{t,t+dt} = dt\hat{L}\left(t\right)$$

e o operador ação adquire a forma geral

$$\hat{S}_{t_1,t_2} = \int_{t_1}^{t_2} dt\hat{L}\left(t\right)$$

na qual o *operador Lagrangeano* $\hat{L}\left(t\right)$ é um operador auto-adjunto que possui dependência funcional nas variáveis dinâmicas $\hat{q}^i\left(t\right)$ nas vizinhanças do tempo t. Não há perda de generalidade em tomarmos os operadores $\hat{q}^i\left(t\right)$ como sendo auto-adjuntos e, por ora, iremos ainda admiti-los em número finito. Os objetos concebíveis de variação no operador ação são: os instantes terminais t_1 e t_2, as variáveis dinâmicas $\hat{q}^i\left(t\right)$, e a *estrutura* do operador Lagrangeano.

É importante notar que o Cálculo Variacional efetuado aqui é de natureza diferente daquele tradicionalmente utilizado em Mecânica Clássica [**?**], pois de acordo com a definição acima, a ação é um funcional a valores de *operadores*.

4.3 O Princípio da Ação Estacionária

Para um dado sistema dinâmico, mudanças na função de tranformação podem ser produzidas somente por uma alteração explícita dos estados aos quais ela se refere. Tais variações dos estado são oriundas de mudanças nas propriedades físicas, ou no instante de tempo, envolvidos na definição do estado, e os autovetores das transformações infinitesimais são gerados por operadores auto-adjuntos que dependem somente das variáveis dinâmicas em um dado instante de tempo,

$$\delta\left\langle a_{t_2}\right| = \left\langle a_{t_2}\right| i\hat{G}_2$$

$$\delta\left|b_{t_1}\right\rangle = -i\hat{G}_1\left|b_{t_1}\right\rangle$$

onde

$$\hat{G}_1 = \hat{G}\left(\hat{q}^j\left(t_1\right), t_1\right)$$
$$\hat{G}_2 = \hat{G}\left(\hat{q}^j\left(t_2\right), t_2\right)$$

Portanto,

$$\delta\left\langle a_{t_2}\right|\left|b_{t_1}\right\rangle = \delta\left(\left\langle a_{t_2}\right|\right)\left|b_{t_1}\right\rangle + \left\langle a_{t_2}\right|\left(\delta\left|b_{t_1}\right\rangle\right) = i\left\langle a_{t_2}\right|\left(\hat{G}_2 - \hat{G}_1\right)\left|b_{t_1}\right\rangle$$

e, conseqüentemente, a variação da ação se escreve

$$\delta\hat{S}_{t_1,t_2} = \delta\left[\int_{t_1}^{t_2} dt\hat{L}\left(t\right)\right] = \hat{G}_2 - \hat{G}_1 \tag{4.1}$$

Denominamos a isso o *Princípio da Ação Estacionária*, ou *Princípio de Schwinger*[3]. Assim, vemos que o Princípio da Ação Estacionária, na forma de operadores, nos assegura de maneira clara que a variação da integral de ação envolve somente as variáveis dinâmicas em seus tempos terminais. Este princípio implica em equações do movimento para as variáveis dinâmicas e também em formas específicas para os geradores de transformações inifinitesimais. No entanto, devemos tomar muito cuidado aqui com a *ordem* em que são feitas essas variações, uma vez que estamos tratando com *operadores* e as derivadas de operadores em relação a outros operadores também devem ser operadores, mas que *não necessariamente pertencem ao conjunto completo de operadores compatíveis tomado como conjunto de coordenadas generalizadas.* Assim, faz-se necessário especificar que *tipo* de derivação está sendo executada na aplicação do princípio variacional. Utilizaremos sempre aqui, para efeito de computarmos alguns resultados heurísticos, derivadas que mantêm os operadores de variação infinitesimal

[3]Este princípio inspira-se nos princípios variacionais clássicos bem conhecidos, tal como o Princípio de Hamilton. Entretanto, observe que aqui a variação da ação se escreve como a diferença de dois termos, que correspondem a termos de superfície, como veremos mais adiante, e portanto esta não é minimal e nem mesmo precisa ser *estacionária*. Assim, o nome "estacionária" mantém-se apenas como uma lembrança dos princípios clássico originais [?].

à direita, e portanto denominadas *derivadas à direita*[4]. Note ainda que o operador Lagrangeano não pode ser especificado completamente pela natureza dinâmica do sistema, uma vez que devemos ser capazes de produzir uma variedade de transformações infinitesimais para um dado sistema. Além disso, uma vez que o tempo opera aqui como parâmetro independente, se dois operadores Lagrangeanos diferirem por uma derivada no tempo,

$$\hat{\bar{L}} = \hat{L} + \frac{\vec{d}\hat{\Lambda}}{\vec{d}t}$$

os operadores ação serão relacionados por

$$\hat{\bar{S}}_{t_1,t_2} = \hat{S}_{t_1,t_2} + \left(\hat{\Lambda}_2 - \hat{\Lambda}_1\right)$$

e as variações diferirão por

$$\delta\hat{\bar{S}}_{t_1,t_2} = \delta\hat{S}_{t_1,t_2} + \left(\delta\hat{\Lambda}_2 - \delta\hat{\Lambda}_1\right) = \hat{\bar{G}}_2 - \hat{\bar{G}}_1$$

que também satisfaz o princípio da ação estacionária mas implica em novos geradores das transformações inifinitesimais nos instantes t_1 e t_2, dados por

$$\delta\hat{\Lambda}_1 = \hat{\bar{G}}_1 - \hat{G}_1 \tag{4.2a}$$

$$\delta\hat{\Lambda}_2 = \hat{\bar{G}}_2 - \hat{G}_2 \tag{4.2b}$$

No sentido estrito da palavra, este princípio não deveria receber a denominação de "variacional", no sentido em que a mesma se aplica às demais áreas clássicas da física (ótica, mecânica, eletromagnetismo, termodinâmica, etc.). Entretanto, veremos que, dentro dos limites em que estas abordagens clássicas prevalecem, esta nova formulação se reduz ao Princípio da Mínima Ação, portanto nós sempre podemos pensar nesta nova

[4] Representaremos esta escolha por uma flecha sobre os operadores diferenciais. Há várias outras notações e denominações de derivadas à direita e à esquerda na literatura, mas para o que pretendemos esta é bastante adequada.

teoria como sendo o análogo do Princípio de Hamilton para um sistema de interações fundamentais.

Vamos agora tentar explorar um pouco mais o Princípio da Ação Estacionária expresso por (**??**) de forma a extrair daí mais algumas informações de relevância para o estudo da dinâmica de um sistema.

4.4 Relações de Comutação e as Equações do Movimento

A definição de uma simetria do sistema de proposições que fundamenta a teoria, conforme exposto anteriormente, nos mostra que, no contexto de um sistema descrito por coordenadas generalizadas $\hat{\mathbf{q}}(t)$, devemos fazer uso da equação

$$\widehat{\bar{L}}\left(\widehat{\bar{\mathbf{q}}},\widehat{\dot{\bar{\mathbf{q}}}},\bar{t}\right)=\frac{\vec{\partial}t}{\vec{\partial}\bar{t}}\hat{L}\left(\hat{\mathbf{q}},\widehat{\dot{\mathbf{q}}},t\right)$$

que é válida seja a transformação uma simetria ou não, e da equação

$$\widehat{\bar{L}}\left(\hat{\mathbf{q}},\widehat{\dot{\mathbf{q}}},t\right)=\hat{L}\left(\hat{\mathbf{q}},\widehat{\dot{\mathbf{q}}},t\right)+\frac{\vec{d}\hat{\Lambda}}{\vec{d}t}$$

que implica necessariamente numa operação de simetria.

Em contraste com a discussão de variação funcional feita tradicionalmente nos textos de Cálculo Variacional, agora consideraremos transformações que mudam funcionalmente não somente a variável dependente $\hat{\mathbf{q}}$, mas também a variável independente t para alguma função $\bar{t}(t)$ dela mesma. Devemos exigir ainda que esta função seja inversível, $\frac{\vec{d}\bar{t}}{\vec{d}t}\neq 0$, e contínua, ou seja, que constitua um difeomorfismo entre t e $\bar{t}$. Convencionalmente, exigiremos ainda que $\frac{\vec{d}\bar{t}}{\vec{d}t}>0$, sendo que esta escolha do sinal positivo significa apenas o incremento monotônico do nosso parâmetro tempo desde um estado inicial até o final através do mapeamento $\bar{t}$.

A forma das equações de Euler-Lagrange é determinada pela forma do funcional ação $\hat{S}[\hat{\mathbf{q}}(t)]$. Denotaremos uma variação funcional infinitesimal de $\hat{\mathbf{q}}(t)$, onde tanto

$\hat{\mathbf{q}}$ quanto t variam, pelo símbolo δ que difere do operador variacional ordinário δ_0 no qual t não é variado ($\delta_0 t = 0$). Assim,

$$t \longrightarrow \bar{t} = t + \delta t$$

$$\hat{\mathbf{q}} \longrightarrow \widehat{\bar{\mathbf{q}}}\left(\bar{t}\right) = \hat{\mathbf{q}}\left(t\right) + \delta\hat{\mathbf{q}}\left(t\right)$$

Estas variações, e todas aquelas oriundas de qualquer quantidade que dependa somente de t, estão relacionadas com δ_0 por

$$\delta\hat{\mathbf{q}}\left(t\right) = \delta_0\hat{\mathbf{q}}\left(t\right) + \frac{\vec{d}\left(\hat{\mathbf{q}}\left(t\right)\right)}{\vec{d}t}\delta t \tag{4.3}$$

e, correspondentemente,

$$\delta\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right) = \delta_0\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right) + \frac{\vec{d}\left(\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right)\right)}{\vec{d}t}\delta t \tag{4.4}$$

das quais podemos notar que, diferentemente da ação de $\delta_0\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right)$,

$$\delta\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right) \neq \frac{d}{dt}\left(\delta\hat{\mathbf{q}}\left(t\right)\right)$$

Na verdade, derivando (**??**) e subtraindo (**??**) encontramos que

$$\frac{\vec{d}}{\vec{d}t}\left(\delta\hat{\mathbf{q}}\left(t\right)\right) - \delta\widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right) = \widehat{\dot{\mathbf{q}}}\left(t\right)\frac{\vec{d}}{\vec{d}t}\left(\delta t\right)$$

A diferencial do tempo dt no integrando da ação $\hat{S}$ não terá mais variação nula, sendo esta última determinada em termos do seu Jacobiano pelo Teorema Fundamental do Cálculo,

$$d\bar{t} = \frac{\vec{d}\bar{t}}{\vec{d}t}dt = \left(1 + \frac{\vec{d}\delta t}{\vec{d}t}\right)dt$$

mostrando que

$$\delta\left(dt\right) = d\bar{t} - dt = \frac{\vec{d}\delta t}{\vec{d}t}dt$$

Podemos resumir a diferença entre os dois tipos de variação, δ_0 e δ, agindo sobre t, $\mathbf{q}$ ou $\dot{\mathbf{q}}$, através da identidade operacional

$$\delta = \delta_0 + \frac{\vec{d}\left(\right)}{\vec{d}t}\delta t$$

Temos, portanto, que uma variação geral numa dada quantidade pode ser construída variando-se tanto a forma δ_0, quanto o ponto $\frac{\vec{d}()}{\vec{d}t}\delta t$.

Podemos agora determinar diretamente a variação de primeira ordem da ação que é induzida pelas variações $\delta\hat{\mathbf{q}}\,(t)$ e δt, para uma Lagrangeana com uma certa forma funcional não especificada, mas *fixa*. Lembrando que agora também o domínio de integração é variável, temos que a variação da ação será dada por

$$\delta\hat{S} = \int_{\bar{t}_1}^{\bar{t}_2} d\bar{t}\hat{L}\left(\widehat{\bar{\mathbf{q}}},\widehat{\dot{\bar{\mathbf{q}}}},\bar{t}\right) - \int_{t_1}^{t_2} dt\hat{L}\left(\hat{\mathbf{q}},\hat{\dot{\mathbf{q}}},t\right)$$

onde a primeira Lagrangeana é ainda $\hat{L}$, e não $\widehat{\bar{L}}$. Desenvolvendo,

$$\begin{aligned}
\delta\hat{S} &= \int_{t_1}^{t_2}\left[(dt+\delta dt)\left(\hat{L}+\delta\hat{L}\right)-dt\hat{L}\right] = \int_{t_1}^{t_2} dt\left[\frac{\vec{d}\left(\hat{L}\delta t\right)}{\vec{d}t}+\delta_0\hat{L}\right] = \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt\left[\frac{\vec{d}}{\vec{d}t}\left(\hat{L}\delta t+\frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\hat{\dot{\mathbf{q}}}}\cdot\delta_0\hat{\mathbf{q}}\right)+\frac{\vec{\delta}\hat{L}}{\vec{\delta}\hat{\mathbf{q}}}\cdot\left(\delta\hat{\mathbf{q}}-\hat{\dot{\mathbf{q}}}\delta t\right)\right] = \\
&= \left[\hat{L}\delta t+\frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\hat{\dot{\mathbf{q}}}}\cdot\delta_0\hat{\mathbf{q}}\right]_{t_1}^{t_2}+\int_{t_1}^{t_2} dt\frac{\vec{\delta}\hat{L}}{\vec{\delta}\hat{\mathbf{q}}}\cdot\left(\delta\hat{\mathbf{q}}-\hat{\dot{\mathbf{q}}}\delta t\right) = \hat{G}_2-\hat{G}_1 \qquad (4.5)
\end{aligned}$$

O primeiro termo na penúltima linha é um termo de contorno, que depende não só dos valores de $\delta\hat{\mathbf{q}}$, mas também dos de δt.

A condição necessária e suficiente para que a última igualdade seja satisfeita, é que o segundo termo da penúltima linha seja identicamente nulo. Agora, isto deve ser satisfeito para *toda* a classe de transformações $\{\delta\hat{\mathbf{q}},\delta t\}$ que correspondam a alterações infinitesimais de um estado *físico* do sistema com uma estrutura funcional fixa. Assim, dentro dessa classe de transformações, podemos tomar as variações $\delta\hat{\mathbf{q}}$ e δt como arbitrárias[5], o que implica que a condição necessária e suficiente referida acima pode ser expressa como

$$\frac{\vec{\delta}L}{\vec{\delta}\hat{\mathbf{q}}} = 0$$

[5]As variações $\delta\hat{\dot{\mathbf{q}}}$ *não* são independentes de $\delta\hat{\mathbf{q}}$ e δt, uma vez que $\delta\hat{\dot{\mathbf{q}}}\,(t) = \frac{\vec{d}}{\vec{d}t}\left(\delta\hat{\mathbf{q}}\,(t)\right) - \hat{\dot{\mathbf{q}}}\,(t)\,\frac{\vec{d}}{\vec{d}t}\left(\delta t\right)$

Vamos tentar interpretar fisicamente este resultado. Em primeiro lugar, supomos que a forma da função $\hat{L}$ contém toda informação física do nosso sistema, e que as equações de movimento podem ser obtidas utilizando o Princípio da Ação Estacionária. Aplicado a uma variação δ_0 que não afeta a variável independente nem a sua região de integração, e para a qual as variáveis dependentes estão fixas nos pontos extremos,

$$\delta_0 t = 0 \qquad \forall t \in [t_1, t_2] \qquad \text{e} \qquad \delta_0 \hat{\mathbf{q}}\,(t_1) = \delta_0 \hat{\mathbf{q}}\,(t_2) = 0$$

os termos de superfície referentes a essa variação δ_0 devem portanto se anular. A exigência de que $\delta_0 \hat{S} = 0$, de acordo com o Princípio de Hamilton, implica então nas equações de Euler-Lagrange.

Em termos de uma variação mais geral, podemos generalizar o Princípio de Hamilton da seguinte maneira:

> *A "trajetória" dinâmica seguida por um sistema Lagrangeano no espaço de configuração é aquela para a qual variações gerais nas variáveis dependentes e independentes levam somente à variação do funcional ação nos pontos extremos.*

Ou seja, o princípio variacional mais geral[6] se escreve

$$\delta \hat{S} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1$$

onde $\hat{G}_i$ é um termo de superfície dado por

$$\hat{G} = \hat{L}\delta t + \frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\hat{\dot{\mathbf{q}}}} \cdot \delta_0 \hat{\mathbf{q}}$$

Em termos de uma variação geral isto se escreve

$$\hat{G} = \frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\widehat{\dot{\mathbf{q}}}} \cdot \delta\hat{\mathbf{q}} - \left(\frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\widehat{\dot{\mathbf{q}}}} \cdot \widehat{\dot{\mathbf{q}}} - \hat{L} \right) \delta t \tag{4.6}$$

[6] É interessante notar que essas observações aplicam-se também à Mecânica Clássica. De fato, diversas aplicações do Princípio de Schwinger têm sido encontradas em sistemas analíticos [?, ?].

Por brevidade, vamos escrever

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\hat{\dot{\mathbf{q}}}}, \quad \hat{H} = \hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\dot{\mathbf{q}}} - \hat{L}$$

Temos então que o Princípio da Ação Estacionária assume a seguinte forma:

$$\delta\left(\langle a_{t_2}|\,|b_{t_1}\rangle\right) = i\,\langle a_{t_2}|\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\delta\hat{\mathbf{q}}-\hat{H}\delta t\right)_{t_1}^{t_2}|b_{t_1}\rangle$$

Alternativamente, o estado final pode ser tomado como fixo, e podemos olhar então como um operador $\hat{A}$ muda sobre a transformação unitária gerada por $\hat{G}$. Vimos anteriormente que a variação desse operador pode sempre ser escrita na forma

$$\vec{\delta}\hat{A} = -i\left[\hat{A},\hat{G}\right]$$

Agora, se tomarmos esse operador como sendo uma das coordenadas generalizadas, temos que

$$\delta\hat{q}^s = -i\left[\hat{q}^s,\hat{p}_j\delta\hat{q}^j-\hat{H}\delta t\right] = -i\left[\hat{q}^s,\hat{p}_j\delta\hat{q}^j\right] + i\left[\hat{q}^s,\hat{H}\delta t\right]$$

Fazendo uso das identidades

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

encontramos

$$= -i\left[\hat{q}^s,\hat{p}_j\right]_{\mp}\delta\hat{q}^j \mp i\hat{p}_j\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^j\right]_{\mp} + i\left[\hat{q}^s,\hat{H}\right]_{\mp}\delta t$$

Se nos retringirmos a alterar somente a coordenada $\hat{q}^r$ num particular instante de tempo,

$$\delta\hat{q}^j = \delta^j_r\delta\hat{q}^r \quad \delta t = 0 \quad \text{(sem soma)} \tag{4.7}$$

isto se reduz a

$$\delta\hat{q}^s = -i\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \quad \text{(sem soma)}$$

Por outro lado, a alteração infinitesimal sofrida pelo operador momento será

$$\delta\hat{p}_s = -i\left[\hat{p}_s, \hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{p}_s, \delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \quad \text{(sem soma)}$$

Estas duas últimas equações nos fornecem, portanto, a variação infinitesimal que os operadores $\hat{q}^s$ e $\hat{p}_s$ sofrem ao se variar infinitesimalmente *apenas um* dos operadores coodenada generalizada.

Podemos ainda utilizar as equações (**??**) escolhendo o operador adicional $\hat{\Lambda} = -\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{q}}$, sem que isto altere o princípio variacional. O novo gerador infinitesimal generalizado será

$$\delta\hat{\Lambda} = -\left(\delta\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{q}} + \hat{\mathbf{p}}\cdot\delta\hat{\mathbf{q}}\right)$$

$$\hat{\bar{G}} = \hat{G} + \delta\hat{\Lambda} = -\delta\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{q}} - \hat{H}\delta t$$

Podemos agora calcular qual é a alteração que $\hat{\bar{G}}$ causa sobre os operadores $\hat{q}^s$ e $\hat{p}_s$. Utilizando uma restrição análoga à (**??**) encontramos que

$$\bar{\delta}\hat{q}^s = i\left[\hat{q}^s, \delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{q}^s, \hat{q}^r\right]_{\mp} \quad \text{(sem soma)}$$

$$\bar{\delta}\hat{p}_s = i\left[\hat{p}_s, \delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{p}_s, \hat{q}^r\right]_{\mp} \quad \text{(sem soma)}$$

Estas são então, variações infinitesimais induzidas pela mudança de um *único* $\hat{p}_r$. Podemos comparar estes resultados escrevendo

$$\begin{aligned}
\delta_q\hat{q}^s &= -i\left[\hat{q}^s, \hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{q}^s, \delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\delta_q\hat{p}_s &= -i\left[\hat{p}_s, \hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{p}_s, \delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\delta_p\hat{q}^s &= i\left[\hat{q}^s, \delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{q}^s, \hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\delta_p\hat{p}_s &= i\left[\hat{p}_s, \delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{p}_s, \hat{q}^r\right]_{\mp}
\end{aligned}$$

Se agora impusermos a condição de que os operadores $\hat{q}^s$ e $\hat{p}_s$ sejam *cinematicamente* *independentes*, temos que

$$\begin{aligned}
\delta\hat{q}^s &= -i\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_\mp \delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^r\right]_\mp \\
\hat{0} &= -i\left[\hat{p}_s,\hat{p}_r\right]_\mp \delta\hat{q}^r \mp i\hat{p}_r\left[\hat{p}_s,\delta\hat{q}^r\right]_\mp \\
\hat{0} &= i\left[\hat{q}^s,\delta\hat{p}_r\right]_\mp \hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{q}^s,\hat{q}^r\right]_\mp \\
\delta\hat{p}_s &= i\left[\hat{p}_s,\delta\hat{p}_r\right]_\mp \hat{q}^r \pm i\delta\hat{p}_r\left[\hat{p}_s,\hat{q}^r\right]_\mp
\end{aligned}$$

Isto corresponde a um sistema de equações entre os operadores de variação infinitesimal, cuja solução formal constitui um problema em aberto. Uma das possíveis soluções, é escolhermos as variações infinitesmais de forma que

$$\begin{aligned}
\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^r\right]_\mp &= \left[\hat{p}_s,\delta\hat{q}^r\right]_\mp = \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\delta\hat{p}_r\right]_\mp &= \left[\hat{p}_s,\delta\hat{p}_r\right]_\mp = \hat{0}
\end{aligned}$$

o que nos leva às relações

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}_s,\hat{p}_r\right]_\mp &= \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\hat{q}^r\right]_\mp &= \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_\mp &= i\delta^s_r
\end{aligned}$$

Vemos então que as relações de comutação e/ou anticomutação podem ser extraídas como uma conseqüência do Princípio de Schwinger.

Da mesma forma, podemos extrair a equação que governa a evolução temporal de um operador escolhendo uma variação na qual somente o tempo t é variado. Tal variação transforma o estado inicial, que é um auto-estado, simultâneamente, do conjunto de operadores $\hat{\mathbf{q}}(t)$, em um auto-estado dos operadores $\hat{\mathbf{q}}(t+\delta t)$, preservando, no entanto, o espectro de autovalores, de forma que podemos tomar $\delta\hat{\mathbf{q}}$ como sendo zero. Desta maneira, a variação do operador poderá ser denotada por

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

$$\frac{\vec{d}\hat{A}}{\vec{d}t} = i\left[\hat{A}, \hat{H}\right] + \frac{\vec{\partial}\hat{A}}{\vec{\partial}t}$$

que é a equação de Heisenberg para a evolução temporal de um operador. Assim, não podemos deixar de perceber como este Princípio Variacional expressa as leis da Mecânica Quântica de uma maneira exemplarmente elegante.

Um aspecto particularmente interessante desses resultados, é que as regras de comutação são automaticamente parte do esquema dinâmico completo. Elas seguem a partir de uma particular variação, assim como as equações de movimento seguem de outra variação. Se as regras de comutação tivessem sido artificialmente incluídas, estritamente falando, nós deveríamos, antes de mais nada, provar que elas seriam compatíveis com as equações de movimento. Com o Princípio de Schwinger isto é desnecessário.

É imporatante destacar ainda que as diferentes variações que podem ser induzidas pelos diferentes geradores, $\hat{G}$, $\hat{\bar{\bar{G}}}$, etc., devem ser interpretadas de maneira apropriada. Em particular, para sistemas com operadores Lagrangeanos de primeira ordem, as variações induzidas devem corresponder a 1/2 daquelas consideradas acima. Com efeito, é fácil construirmos um gerador desse tipo, basta usarmos o termo de superfície $\hat{\Lambda} = -\left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{q}}\right)/2$. A não observância desse uso criterioso do Princípio de Ação pode levar a sérios erros de interpretação quanto aos resultados obtidos pela abordagem de Schwinger, como bem ilustra a controvérsia entre Burton e Touschek e o próprio Schwinger[7] [**?**, **?**, **?**, **?**].

É interessante notar também que em sendo t um mero *parâmetro* da teoria, e não operador, a diferença entre derivadas à direita e à esquerda com respeito a este, desaparecem, de forma que podemos falar simplesmente nas operações $\frac{d()}{dt}$ e $\frac{\partial()}{\partial t}$.

[7] De fato, os comentários ácidos de Schwinger acerca dos artigos de Burton e Touschek ilustram bem algumas características marcantes da sua personalidade!

4.5 Equação de Schrödinger e a Representação das Coordenadas

O Princípio Variacional de Schwinger permite-nos ainda obter de maneira direta a equação para evolução de um estado físico. Segue deste princípio que

$$\delta\left(\langle a_{t_2}|\,|b_{t_1}\rangle\right) = i\,\langle a_{t_2}|\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\delta\hat{\mathbf{q}}-\hat{H}\delta t\right)_{t_1}^{t_2}|b_{t_1}\rangle$$

Variando então apenas o estado final, ou seja,

$$\delta\,|b_{t_1}\rangle = 0 \rightarrow \delta\hat{\mathbf{q}}\,(t_1) = \hat{\mathbf{0}} \quad \delta t_1 = 0$$
$$\delta\,\langle a_{t_2}| \neq 0 \rightarrow \delta\hat{\mathbf{q}}\,(t_2) \neq \hat{\mathbf{0}} \quad \delta t_2 \neq 0$$

teremos

$$\delta\left(\langle a_{t_2}|\,|b_{t_1}\rangle\right) = i\,\langle a_{t_2}|\,\hat{\mathbf{p}}_2\cdot\delta\hat{\mathbf{q}}_2-\hat{H}\delta t_2\,|b_{t_1}\rangle$$

Se agora identificarmos a descrição a como sendo a descrição das coordenadas, i. e., a descrição na qual os operadores $\hat{\mathbf{q}}$ são diagonais, e o estado $|b_{t_1}\rangle$ como sendo um estado arbitrário $|\Psi\rangle$, segue das relações de comutação deduzidas anteriormente que

$$\begin{aligned}\delta\left(\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle\right) &= i\,\langle q_{t_2}|\,\delta\hat{\mathbf{q}}_2\cdot\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle - i\,\langle q_{t_2}|\,\hat{H}\delta t_2\,|\Psi\rangle = \\ &= i\delta\mathbf{q}_2\cdot\langle q_{t_2}|\,\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle - i\delta t_2\,\langle q_{t_2}|\,\hat{H}\,|\Psi\rangle\end{aligned}$$

Entretanto,

$$\delta\left(\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle\right) = \delta\mathbf{q}_2\cdot\frac{\partial\,\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial\mathbf{q}_2} + \delta t_2\frac{\partial\,\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial t_2}$$

de modo que

$$\frac{\partial\,\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial\mathbf{q}_2} = i\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle$$
$$\frac{\partial\,\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial t_2} = -i\,\langle q_{t_2}|\,\hat{H}\,|\Psi\rangle$$

A primeira destas equações estabelece a representação do operador momento na base das coordenadas, enquanto que a segunda tem uma interpretação similar com respeito ao operador Hamiltoniano, entretanto, em decorrência do caráter especial que o parâmetro temporal desempenha na teoria, ela se torna independente da base escolhida para descrever o sistema, e recebe o nome de *equação de Schrödinger.* Vemos então que o princípio variacional pode ser utilizado para obter não só as relações de comutação e equação de evolução temporal para os operadores, mas também os seus equivalentes para as funções de onda na abordagem de Schrödinger.

4.6 Solução Formal do Princípio Variacional

Algumas das principais quantidades que estamos interessados em avaliar numa teoria quântica são os elementos de matriz da forma $\langle b|\,\hat{O}\,|a\rangle$ onde $\hat{O} = \hat{O}\left(\hat{A},\hat{B}\right)$. Estes elementos de matriz podem ser calculados de maneira direta, em conseqüencia das propriedades dos seus símbolos de medida associados, apenas em alguns casos simples, e. g.,

$$\begin{aligned}
\langle b|\,\hat{f}\left(\hat{A}\right)|a\rangle &= \langle b|\,|a\rangle\, f\,(a) \\
\langle b|\,\hat{g}\left(\hat{B}\right)|a\rangle &= g\,(b)\,\langle b|\,|a\rangle \\
\langle b|\,\hat{g}\left(\hat{B}\right)\hat{f}\left(\hat{A}\right)|a\rangle &= g\,(b)\,\langle b|\,|a\rangle\, f\,(a)
\end{aligned}$$

Em casos mais complicados, não há nenhum método geral de como avaliar de maneira direta um elemento de matriz. Entretanto, caso o comutador dos operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ seja suficientemente simples, podemos utilizar essas relações de comutação de forma a reordenar os operadores dentro do elemento de matriz de maneira que este se reduza a uma combinação dos casos simples listados acima.

Utilizaremo-nos deste conceito para encontrar uma solução formal do Princípio de Schwinger para a função de transformação entre dois estados. De acordo com este princípio, temos que

$$\delta \langle 2| |1\rangle = i \langle 2| \delta\hat{S} |1\rangle$$

onde 2 e 1 representam dois conjuntos de números quânticos que descrevem completamente os estados inicial e final. Uma vez que $\delta\hat{S}$ representa um operador infinitesimal obtido a partir da variação infinitesimal do operador ação, esta equação deveria estabelecer, em princípio, uma equação diferencial cuja solução seria a amplitude de transição entre os estados inicial e final. No entanto, como esclarecemos anteriormente, não há nenhuma maneira simples de calcular, em geral, o lado direito dessa equação, a menos que as relações de comutação entre os operadores que descrevem os estados inicial e final sejam suficientemente simples.

Vamos então supor que $\hat{S}$ possa ser colocado numa forma bem ordenada $\widehat{\mathcal{W}}$, que denominaremos *operador principal de Hamilton*, e ao ordenamento chamaremos *ordenamento cronológico*. É importante notar que, ainda que $\hat{S}$ seja auto-adjunto, $\widehat{\mathcal{W}}$ não necessariamente o é, entretanto, devemos ter sempre

$$\delta\hat{S} = \delta\widehat{\mathcal{W}}$$

Com isso, temos que

$$\delta \langle 2| |1\rangle = i \langle 2| \delta\widehat{\mathcal{W}} |1\rangle = i\delta\mathcal{W} \langle 2| |1\rangle$$

$$\delta \ln \langle 2| |1\rangle = i\delta\mathcal{W}$$

$$\langle 2| |1\rangle = \exp(i\mathcal{W})$$

onde a constante de integração foi aditivamente incorporada a $\mathcal{W}$. Este é o resultado originariamente buscado por Dirac [?] e que forneceu a Feynman a inspiração para a sua formulação da mecânica quântica via integração funcional, entretanto, aqui, em lugar de uma soma sobre todas as trajetórias, temos a exponencial do autovalor de um operador ordenado cronologicamente.

Agora que possuimos uma solução explícita para a amplitude de transição entre dois estados, podemos fazer a seguinte pergunta: sabendo que as amplitudes de transição respeitam a equação de Schrödinger, qual a equação correspondente para o operador $\widehat{\mathcal{W}}$? Tentaremos responder a esta pergunta na próxima seção.

4.7 A Equação Operatorial de Hamilton-Jacobi

Sabemos que o Princípio de Schwinger implica na equação de Schrödinger para a evolução temporal das amplitudes de transição. Por outro lado, como vimos na seção anterior, a função de transformação entre dois estados pode ser construída a partir dos autovalores do operador principal de Hamilton, assim,

$$
\begin{aligned}
-i \langle q_t| \hat{H} |\Psi\rangle &= \frac{\partial \langle q_t| |\Psi\rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \exp(i\mathcal{W}) = i\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} \langle q_t| |\Psi\rangle \\
\langle q_t| -\hat{H} |\Psi\rangle &= \langle q_t| \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial t} |\Psi\rangle
\end{aligned}
$$

Similarmente, temos que

$$
\begin{aligned}
i \langle q_t| \hat{\mathbf{p}} |\Psi\rangle &= \frac{\partial \langle q_t| |\Psi\rangle}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \exp(i\mathcal{W}) = i\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbf{q}} \langle q_t| |\Psi\rangle \\
\langle q_t| \hat{\mathbf{p}} |\Psi\rangle &= \langle q_t| \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{\mathbf{q}}} |\Psi\rangle
\end{aligned}
$$

Ou seja,

$$
\hat{\mathbf{p}} = \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{\mathbf{q}}}
$$

$$
\hat{H}\left(\hat{\mathbf{q}}, \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial \hat{\mathbf{q}}}, t\right) + \frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial t} = \hat{0}
$$

Esta última é denominada equação operatorial de Hamilton-Jacobi. Uma vez que esta foi derivada a partir da equação de Schrödinger, poderíamos também tê-la derivado do princípio variacional variando apenas o estado final. Veremos a seguir alguns exemplos simples de como aplicar estes resultados.

4.7.1 Aplicação 1: Partícula Livre

A ação clássica para uma partícula livre é dada por

$$S = \frac{m}{2}\frac{(x - x_0)^2}{t - t_0} = \frac{m}{2}\frac{\left(x^2 + x_0^2 - 2xx_0\right)}{\Delta t} \qquad \Delta t = t - t_0$$

onde aplicamos o ordenamento temporal.

Vamos utilizar como ansatz que o operador principal de Hamilton seja da forma

$$\hat{W}(\hat{x}, \hat{x}_0, t) = \hat{S}(\hat{x}, \hat{x}_0, t) + \hat{\phi}(t)$$

onde

$$\hat{S}(\hat{x}, \hat{x}_0, t) = \frac{m}{2}\frac{\left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0\right)}{\Delta t} \qquad \Delta t = t - t_0$$

O operador momento será então, por definição,

$$\hat{p} = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{x}} = m\frac{\hat{x} - \hat{x}_0}{\Delta t} \tag{4.8}$$

Utilizando então a relação de comutação canônica entre momento e posição podemos derivar a relação de comutação entre os operadores de posição em diferentes instantes de tempo,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = m\frac{[\hat{x}, \hat{x}] - [\hat{x}, \hat{x}_0]}{\Delta t} = m\frac{[\hat{x}_0, \hat{x}]}{\Delta t} = i\hbar$$

$$[\hat{x}_0, \hat{x}] = \frac{i\hbar\Delta t}{m} \rightarrow \hat{x}_0\hat{x} = \hat{x}\hat{x}_0 + \frac{i\hbar\Delta t}{m}$$

O operador Hamiltoniano será dado por

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

Usando a expressão (**??**) para o operador momento, encontramos que

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{m}{2(\Delta t)^2}(\hat{x} - \hat{x}_0)(\hat{x} - \hat{x}_0) = \frac{m}{2(\Delta t)^2}\left(\hat{x}^2 - \hat{x}\hat{x}_0 - \hat{x}_0\hat{x} + \hat{x}_0^2\right)$$

Podemos agora utilizar a relação de comutação deduzida anteriormente para ordenar isto temporalmente, tal que

$$\hat{H} = \frac{m}{2\left(\Delta t\right)^2}\left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 - \frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)$$

Por outro lado, temos que

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \widehat{\dot{\phi}} = -\frac{m}{2}\frac{\left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0\right)}{\left(\Delta t\right)^2} + \widehat{\dot{\phi}}$$

Então, a equação operatorial de Hamilton-Jacobi poderá ser escrita como

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

$$\widehat{\dot{\phi}} = \frac{i\hbar}{2\Delta t} \rightarrow \hat{\phi}\left(t\right) = \frac{i\hbar}{2}\ln\left(A\Delta t\right)$$

onde A é uma contante de integração a ser determinada.

Com isto, temos que a amplitude de transição entre os estados inicial e final será

$$\langle 2|\,|1\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\phi\left(t\right)\right)$$

$$\langle 2|\,|1\rangle = \left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = \left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\left(x - x_0\right)^2\right)$$

A constante de integração A será determinada pela condição de normalização:

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle 2|\,|1\rangle = \delta\left(x - x_0\right)$$

Usando um limite conhecido

$$\lim_{n\to\infty}\frac{n}{\sqrt{\pi}}e^{-n^2y^2} = \delta\left(y\right)$$

e a transformação

$$n^2 = \frac{m}{2i\hbar\Delta t} \quad y = x - x_0$$

encontramos

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle 2|\,|1\rangle = \left(\frac{2i\hbar}{Am}\right)^{1/2}\lim_{n\to\infty}ne^{-n^2y^2} = \left(\frac{2\pi i\hbar}{Am}\right)^{1/2}\delta\left(x - x_0\right)$$

ou seja,

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

Assim, encontramos finalmente que a função de transformação entre os estados inicial e final será dada por

$$\langle 2|\,|1\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\left(x-x_0\right)^2\right)$$

4.7.2 Aplicação 2: Partícula Sujeita a uma Força Constante

A ação clássica para este sistema é dada por

$$S = \frac{m}{2}\frac{\left(x^2+x_0^2-2xx_0\right)}{\Delta t} + \frac{F\Delta t}{2}\left(x+x_0\right) - \frac{F^2\left(\Delta t\right)^3}{24m}$$

Assim, vamos supor que o operador Hamiltoniano do sistema quântico correspondente seja

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

onde F denota a magnitude escalar da força considerada, e que o operador principal de Hamilton, como no exemplo anterior, seja da forma

$$\hat{W}\left(\hat{x},\hat{x}_0,t\right) = \hat{S}\left(\hat{x},\hat{x}_0,t\right) + \hat{\phi}\left(t\right)$$

de modo que o operador momento pode ser escrito como

$$\hat{p} = \frac{\partial\hat{W}}{\partial\hat{x}} = \frac{\partial\hat{S}}{\partial\hat{x}} = m\frac{\hat{x}-\hat{x}_0}{\Delta t} + \frac{F\Delta t}{2}$$

Usando então as relações de comutação canônicas, podemos obter as relações de comutação em instantes de tempo distintos,

$$\left[\hat{x},\hat{p}\right] = \frac{m}{\Delta t}\left[\hat{x}_0,\hat{x}\right] = i\hbar \rightarrow \hat{x}_0\hat{x} = \hat{x}\hat{x}_0 + i\frac{\hbar\Delta t}{m}$$

Temos então que o quadrado do operador momento pode ser escrito como

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{m}{\Delta t}\right)^2\left(\hat{x}^2+\hat{x}_0^2-\hat{x}\hat{x}_0-\hat{x}_0\hat{x}\right) + \frac{\left(F\Delta t\right)^2}{4} + Fm\left(\hat{x}-\hat{x}_0\right)$$

Usando a relação de comutação deduzida anteriormente temos que

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{m}{\Delta t}\right)^2 \left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 - i\frac{\hbar \Delta t}{m}\right) + \frac{(F\Delta t)^2}{4} + Fm\left(\hat{x} - \hat{x}_0\right)$$

portanto o operador Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{m}{2\left(\Delta t\right)^2}\left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 + i\frac{\hbar \Delta t}{m}\right) + \frac{(F\Delta t)^2}{8m} + \frac{F}{2}\left(\hat{x} - \hat{x}_0\right) - F\hat{x}$$

Uma vez que a derivada temporal da ação cronologicamene ordenada é dada por

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \widehat{\dot{\phi}}\left(t\right) =$$

$$= -\frac{m}{2}\frac{\left(\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0\right)}{\left(\Delta t\right)^2} + \frac{F}{2}\left(x + x_0\right) - \frac{(F\Delta t)^2}{8m} + \widehat{\dot{\phi}}\left(t\right)$$

vemos que a equação operatorial de Hamilton-Jacobi implica uma equação diferencial a ser satisfeita pela função $\hat{\phi}\left(t\right)$:

$$\hat{H} + \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow \widehat{\dot{\phi}}\left(t\right) = \frac{i\hbar}{2\Delta t} \rightarrow \hat{\phi}\left(t\right) = \frac{i\hbar}{2}\ln\left(A\Delta t\right)$$

A constante de integração A pode ser determinada pela condição de normalização

$$\lim_{\Delta t \to 0} \langle 2|\,|1\rangle = \delta\left(x - x_0\right)$$

sendo que a amplitude de probabilidade é calculada utilizando o valor esperado para o operador ação cronologicamente ordenado,

$$\langle 2|\,|1\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) = \left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

O argumento da última exponencial é dado por

$$\frac{i}{\hbar}S = -\frac{im}{2\hbar\Delta t}\left[-\left(\left(x - x_0\right) + \frac{F\left(\Delta t\right)^2}{2m}\right)^2 + 2\frac{F\left(\Delta t\right)^2}{m}\left(\frac{F\left(\Delta t\right)^2}{12m^2} - x_0\right)\right] \tag{4.9}$$

de forma que, exceto pela constante de normalização, a amplitude de probabilidade pode ser escrita como

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\left((x-x_0)+\frac{F\,(\Delta t)^2}{2m}\right)^2\right)\exp\left(-\frac{iF\Delta t}{\hbar}\left(\frac{F\,(\Delta t)^2}{12m^2}-x_0\right)\right)$$

Vemos então que, no limite $\Delta t \to 0$, teremos

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle 2|\,|1\rangle = \lim_{\Delta t\to 0}\left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\,(x-x_0)^2\right)$$

utilizando então a mesma transformação do exemplo anterior, encontramos

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle 2|\,|1\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{2i\hbar}{Am}\right)^{1/2} ne^{-n^2y^2} = \left(\frac{2\pi i\hbar}{Am}\right)^{1/2}\delta\,(x-x_0)$$

o que implica que a constante de normalização será

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

e obtemos, finalmente,

$$\langle 2|\,|1\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

onde S é dado por (**??**).

4.7.3 Aplicação 3: Partícula Sujeita a uma Força Dependente do Tempo

Vamos analizar agora, com base na nossa experiência anterior, o caso mais geral de uma partícula sujeita a uma força que depende exclusivamente do tempo. A ação clássica para este sistema pode ser escrita como [**?**]

$$S = \frac{m}{2\Delta t}\left[x^2+x_0^2-2xx_0-2\,(x-x_0)\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt'\frac{F\,(t')}{m}+\left(\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt'\frac{F\,(t')}{m}\right)^2\right]+$$
$$+\,x\int_{t_0}^{t}dt'F\,(t')-\frac{1}{2m}\int_{t_0}^{t}dt'\left(\int_{t_0}^{t'}dt'F\,(t')\right)^2 \qquad (4.10)$$

Supondo, mais uma vez, que o ordenamento cronológico possa ser devidamente compensado por um operador que dependa exclusivamente do tempo, encontramos que o operador momento pode ser escrito como

$$\hat{p} = \frac{m}{\Delta t}\left[\hat{x} - \hat{x}_0 - \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right] + \int_{t_0}^{t} dt' F(t')$$

A relação de comutação da coordenada em dois instantes distintos de tempo será então dada por

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \rightarrow [\hat{x}_0, \hat{x}] = \frac{i\hbar\Delta t}{m} \rightarrow \hat{x}_0\hat{x} = \hat{x}\hat{x}_0 + \frac{i\hbar\Delta t}{m}$$

O quadrado do operador momento é, neste caso,

$$\begin{aligned}
\hat{p}^2 = &\left(\frac{m}{\Delta t}\right)^2 \left[\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 - 2(\hat{x} - \hat{x}_0)\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right] + \\
&+ \left(\frac{m}{\Delta t}\right)^2 \left[\left(\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right)^2 - \frac{i\hbar\Delta t}{m}\right] + \\
&+ \frac{2m}{\Delta t}\left[\hat{x} - \hat{x}_0 - \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right] \int_{t_0}^{t} dt' F(t') + \left(\int_{t_0}^{t} dt' F(t')\right)^2
\end{aligned}$$

de forma que o operador Hamiltoniano será

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hat{x}F(t) =$$

$$\begin{aligned}
= &\frac{m}{2(\Delta t)^2}\left[\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 - 2(\hat{x} - \hat{x}_0)\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right] + \\
&+ \frac{m}{2(\Delta t)^2}\left[\left(\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right)^2 - \frac{i\hbar\Delta t}{m}\right] + \\
&+ \frac{1}{\Delta t}\left[\hat{x} - \hat{x}_0 - \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt' \frac{F(t')}{m}\right] \int_{t_0}^{t} dt' F(t') + \frac{1}{2m}\left(\int_{t_0}^{t} dt' F(t')\right)^2 - \hat{x}F(t)
\end{aligned}$$

Usando um conhecido teorema do Cálculo,

$$F(\alpha, u) = \int_{\alpha_1(u)}^{\alpha_2(u)} f(x, u)\, dx$$

$$\frac{dF}{du} = f(\alpha_2, u)\frac{d\alpha_2}{du} - f(\alpha_1, u)\frac{d\alpha_1}{du} + \int_{\alpha_1(u)}^{\alpha_2(u)} \frac{\partial f}{\partial u} dx$$

podemos calcular a derivada temporal do operador ação cronologicamente ordenado,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{W}}{\partial t} &= -\frac{m}{2(\Delta t)^2}\left[\hat{x}^2 + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}\hat{x}_0 - 2(\hat{x} - \hat{x}_0)\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \frac{F(t'')}{m}\right] + \\ &- \frac{m}{2(\Delta t)^2}\left(\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \frac{F(t'')}{m}\right)^2 + \hat{x}F(t) - \frac{1}{2m}\left(\int_{t_0}^{t} dt' F(t')\right)^2 + \hat{\dot{\phi}}(t) + \\ &+ \frac{1}{\Delta t}\left[\left(\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \frac{F(t'')}{m}\right)\int_{t_0}^{t} dt' F(t') - (\hat{x} - \hat{x}_0)\int_{t_0}^{t} dt' F(t')\right] \end{aligned}$$

Com isso, temos que a equação operatorial de Hamilton-Jacobi implica na seguinte equação a ser satisfeita pela função $\hat{\phi}$,

$$\hat{\dot{\phi}}(t) = \frac{i\hbar}{2\Delta t} \rightarrow \hat{\phi}(t) = \frac{i\hbar}{2}\ln(A\Delta t)$$

Novamente, a constante de integração A será determinada pela condição de normalização

$$\lim_{\Delta t \to 0} \langle 2 | \, | 1 \rangle = \delta(x - x_0)$$

sendo a amplitude de probabilidade calculada uzando-se o valor esperado para o operador ação cronologicamente ordenado,

$$\langle 2 | \, | 1 \rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) = \left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

Calculando explicitamente o limite, encontramos

$$\lim_{\Delta t \to 0} \langle 2 | \, | 1 \rangle =$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{\Delta t \to 0}\left(\frac{1}{A\Delta t}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t}\left[(x - x_0) - \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \frac{F(t'')}{m}\right]^2 + \right. \\ &\left. + x\int_{t_0}^{t} dt' F(t') - \frac{1}{2m}\int_{t_0}^{t} dt' \left(\int_{t_0}^{t} dt' F(t')\right)^2\right) = \end{aligned}$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \left(\frac{1}{A\Delta t} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m}{2i\hbar\Delta t} (x - x_0)^2 \right)$$

obtendo então, exatamente como nos exemplos anteriores,

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

$$\langle 2 | |1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right)$$

com S dado por (**??**).

4.7.4 Aplicação 4: Oscilador Harmônico Livre

Passemos agora ao estudo de um sistema que interage com um potencial não-linear do tipo oscilador harmônico livre. Seguindo o mesmo roteiro utilizado nos exemplos anteriores, obtemos a partir da ação clássica

$$S = \frac{m\omega}{2\sin(\omega\Delta t)} \left[\left(q^2 + q_0^2 \right) \cos(\omega\Delta t) - 2qq_0 \right] \tag{4.11}$$

o operador momento

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

sob a hipótese que

$$\hat{W}(\hat{q}, t) = \hat{S}(\hat{q}, t) + \hat{\phi}(t)$$

As relações de comutação canônicas implicam então que

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

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

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

de forma que o quadrado do momento será

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{m\omega}{\sin(\omega\Delta t)} \right)^2 \left[\hat{q}^2 \cos^2(\omega\Delta t) + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 \cos(\omega\Delta t) - \frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega\Delta t) \cos(\omega\Delta t) \right]$$

A partir daí podemos escrever o operador Hamiltoniano na forma

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

$$= \frac{m}{2}\left(\frac{\omega}{\sin(\omega\Delta t)}\right)^2 \left[\hat{q}^2\cos^2(\omega\Delta t) + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0\cos(\omega\Delta t) + \right.$$
$$\left. - \frac{i\hbar}{m\omega}\sin(\omega\Delta t)\cos(\omega\Delta t)\right] + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$$

Usando

$$\frac{\partial\hat{W}}{\partial t} = -\frac{m}{2}\frac{\omega^2}{\sin^2(\omega\Delta t)}\left[\left(\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2\right)\cos^2(\omega\Delta t) - 2\hat{q}\hat{q}_0\cos(\omega\Delta t)\right] +$$
$$- \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2\right) + \hat{\dot{\phi}}(t)$$

encontramos que a equação operatorial de Hamilton-Jacobi será

$$-\frac{i\hbar\omega}{2}\frac{\cos(\omega\Delta t)}{\sin(\omega\Delta t)} + \hat{\dot{\phi}}(t) = 0$$

Isolando $\hat{\phi}$ e resolvendo a equação diferencial,

$$\hat{\dot{\phi}}(t) = \frac{i\hbar\omega}{2}\cot(\omega\Delta t) \rightarrow \hat{\phi}(t) = \frac{i\hbar}{2}\ln(A\sin(\omega\Delta t))$$

Com isso, temos que a amplitude de probabilidade desejada será dada por

$$\langle 2| |1\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) = \left(\frac{1}{A\sin(\omega\Delta t)}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

onde é o valor esperado (**??**) da ação do sistema. Aplicando a condição de normalização, encontramos

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

Usando a transformação de variáveis

$$n^2 = \frac{m\omega}{2i\hbar\sin(\omega\Delta t)} \quad y = q - q_0 \tag{4.12}$$

obtemos

$$\lim_{\Delta t\to 0}\langle 2|\,|1\rangle = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{2i\hbar}{Am\omega}\right)^{1/2} ne^{-n^2y^2} = \left(\frac{2\pi i\hbar}{Am\omega}\right)^{1/2}\delta\left(q-q_0\right)$$

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

$$\langle 2|\,|1\rangle = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\left(\omega\Delta t\right)}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \tag{4.13}$$

É interessante notar que no limite de baixas freqüências todos os resultados para a partícula livre são recuperados. Por outro lado, olhando para o limite $\Delta t\to 0$ e indo até $O\left(\Delta t^2\right)$, vemos que

$$\begin{aligned}\langle 2|\,|1\rangle \approx{}& \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left(\frac{im}{2\hbar\Delta t}\left(q-q_0\right)^2\right)\times\\ &\times\exp\left(-\frac{im\omega^2}{2\hbar}\left(q^2+q_0^2+qq_0\right)\frac{\Delta t}{3}+O\left(\Delta t^2\right)\right)\end{aligned}$$

A primeira exponencial do resultado acima representa a amplitude de transição para a partícula livre, enquanto que a seguinte nos dá o fator de fase de interação com o potencial do oscilador harmônico. De fato, vemos que esse fator é igual ao potencial integrado ao longo da “trajetória” livre da partícula, $q = q_0 + \left(q-q_0\right)t/\Delta t$,

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^{\Delta t}V\left(q\right)dt\right) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^{\Delta t}\frac{m\omega^2}{2}q^2\left(t\right)dt\right) =\\ &= \exp\left(-\frac{im\omega^2}{2\hbar}\left(q^2+q_0^2+qq_0\right)\frac{\Delta t}{3}\right)\end{aligned}$$

Isto nos mostra que, para intervalos de tempo suficientemente pequenos, a trajetória da partícula pode ser considerada como aproximadamente livre, sendo o potencial externo responsável apenas por uma pequena mudança de fase.

Para finalizar esta aplicação, vamos mostrar como calcular o espectro de energia do oscilador harmônico livre a partira da amplitude de transição (**??**). Isso pode ser feito calculando-se o traço da função de transformação, porém, para isto, vamos evidenciar melhor a referência dos estados inicial e final com respeito aos autovalores da coordenada generalizada,

$$\langle 2| \, |1\rangle = \langle q, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle$$

Temos então que

$$tr \, \langle q, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle = \int_{\Omega_q} dq_0 \, \langle q_0, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle$$

Uma vez que estamos tratando com um sistema conservativo, podemos relacionar os estados final e inicial através de uma transformação unitária dada pelo operador de evolução temporal,

$$\langle q_0, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle = \langle q_0, 0| \, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^{\Delta t} dt \hat{H}(t)} \, |q_0, 0\rangle$$

Introduzindo então um conjunto completo de auto-estados de energia, encontramos

$$tr \, \langle q, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle = \int_{\Omega_q} dq_0 \, \langle q_0, 0| \sum_n |E_n\rangle \, \langle E_n| \, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^{\Delta t} dt \hat{H}(t)} \, |q_0, 0\rangle =$$

$$= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t E_n} \int_{\Omega_q} dq_0 \, \langle E_n| \, |q_0, 0\rangle \, \langle q_0, 0| \, |E_n\rangle =$$
$$= \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}\Delta t} \, \langle E_n| \, |E_n\rangle = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}\Delta t} \tag{4.14}$$

Por outro lado, da expressão (**??**) temos que

$$tr \, \langle q, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle =$$
$$= \int_{\Omega_q} dq_0 \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega\Delta t)}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega\Delta t)} \left[2q_0^2 \cos(\omega\Delta t) - 2q_0^2\right]\right) =$$
$$= \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega\Delta t)}\right)^{1/2} \left(\frac{i\pi\hbar \sin(\omega\Delta t)}{m\omega \left[\cos(\omega\Delta t) - 1\right]}\right)^{1/2} = \left(\frac{1}{2\left[\cos(\omega\Delta t) - 1\right]}\right)^{1/2}$$

Usando a identidade trigonométrica $\cos(2A) - 1 = -2\sin^2 A$, obtemos

$$tr \, \langle q, \Delta t| \, |q_0, 0\rangle = \frac{1}{2i\sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right)} = \frac{1}{e^{i\frac{\omega\Delta t}{2}} - e^{-i\frac{\omega\Delta t}{2}}} = \frac{e^{-i\frac{\omega\Delta t}{2}}}{1 - e^{-i\omega\Delta t}}$$

Uma vez que a exponencial no denominador é limitada, podemos usar a expansão geométrica de modo a reescrever este resultado como

$$tr\,\langle q,\Delta t|\,|q_0,0\rangle = e^{-i\frac{\omega\Delta t}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-in\omega\Delta t} = \sum_{n=0}^{\infty}e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\Delta t}$$

Comparando este resultado com (**??**), encontramos que o espectro de autovalores de energia do oscilador harmônico livre é dado por

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

4.7.5 Aplicação 5: Oscilador Harmônico Forçado

Para finalizar esta gama de exemplos, passaremos ao estudo do oscilador harmônico sujeito a uma força externa dependente do tempo. É interessante ressaltar que o método que temos empregado até aqui para obter a função de transformação, embora bastante trabalhoso, é eficaz. Há na literatura inúmeras outras formas de se obter o mesmo resultado, algumas mais simples, outras mais complexas, dependendo do caso. Para este sistema, em particular, o método que estamos empregando constitui verdadeiro *tour de force*, razão pela qual deduziremos apenas a sua amplitude de transição.

Da ação clássica para o oscilador harmônico forçado [**?**], propomos que seu operador ação seja da forma

$$\hat{S} = \frac{m\omega}{2\sin\omega\Delta t}\left[\left(\hat{q}^2+\hat{q}_0^2\right)\cos\omega\Delta t - 2\hat{q}\hat{q}_0 + \frac{2\hat{q}_0}{m\omega}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right) + \frac{2\hat{q}}{m\omega}\int_{t_0}^{t}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right) + \right.$$

$$\left. -\frac{2}{\left(m\omega\right)^2}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)\right] \qquad (4.15)$$

O operador princiapl de Hamilton será, como nos exemplos anteriores,

$$\hat{W}\left(\hat{q},\hat{q}_0,t\right) = \hat{S}\left(\hat{q},\hat{q}_0,t\right) + \hat{\phi}\left(t\right)$$

O operador momento pode então ser calculado como

$$\hat{p} = \frac{\partial \hat{W}}{\partial \hat{q}} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{q}} =$$

$$= \frac{m\omega}{\sin \omega \Delta t} \left[\hat{q} \cos \omega \Delta t - \hat{q}_0 + \frac{1}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) \right]$$

Da relação de comutação canônica

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

encontramos a relação de comutação entre os operadores coordenada em instantes distintos de tempo,

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

A partir daí, podemos calcular o quadrado do momento generalizado,

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m} = m \left(\frac{\omega}{\sin \omega \Delta t} \right)^2 \Bigg[& \hat{q}^2 \frac{\cos^2 \omega \Delta t}{2} + \hat{q} \frac{\cos \omega \Delta t}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) + \\ & + \frac{\hat{q}_0^2}{2} - \hat{q}_0 \frac{1}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) - \hat{q}\hat{q}_0 \cos \omega \Delta t + \\ & - \frac{i\hbar \sin \omega \Delta t \cos \omega \Delta t}{2m\omega} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) \right)^2 \Bigg] \end{aligned}$$

Temos portanto que o operador Hamiltoniano será dado por

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

$$\begin{aligned} = m \left(\frac{\omega}{\sin \omega \Delta t} \right)^2 \Bigg[& \hat{q}^2 \frac{\cos^2 \omega \Delta t}{2} + \hat{q} \frac{\cos \omega \Delta t}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) + \\ & + \frac{\hat{q}_0^2}{2} - \hat{q}_0 \frac{1}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) - \hat{q}\hat{q}_0 \cos \omega \Delta t + \\ & - \frac{i\hbar \sin \omega \Delta t \cos \omega \Delta t}{2m\omega} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m\omega} \int_{t_0}^{t} d\tilde{t} F\left(\tilde{t}\right) \sin \omega \left(\tilde{t} - t_0\right) \right)^2 \Bigg] + \\ & + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2 - F(t)\,\hat{q} \end{aligned}$$

Por outro lado, a derivada temporal do operador principal de Hamilton pode ser expressa como,

$$\frac{\partial \hat{W}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \widehat{\dot{\phi}} =$$

$$= -m\left(\frac{\omega}{\sin\omega\Delta t}\right)^2\left[\left(\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2\right)\frac{\cos^2\omega\Delta t}{2} - \hat{q}\hat{q}_0\cos\omega\Delta t + \right.$$
$$+ \hat{q}_0\frac{\cos\omega\Delta t}{m\omega}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right) + \hat{q}\frac{\cos\omega\Delta t}{m\omega}\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)$$
$$\left.-\frac{\cos\omega\Delta t}{(m\omega)^2}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)\right] - \frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2\right) +$$

$$+ \hat{q}_0\frac{1}{\sin\omega\Delta t}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\omega\cos\omega\left(t-\bar{t}\right) + \hat{q}\frac{1}{\sin\omega\Delta t}F\left(t\right)\sin\omega\left(t-t_0\right) +$$
$$+ \widehat{\dot{\phi}} - \frac{1}{m\omega\sin\omega\Delta t}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\omega\cos\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)$$

Assim, encontramos que a equação operatorial de Hamilton-Jacobi será

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

$$\widehat{\dot{\phi}} + \hat{q}_0\frac{\omega}{\sin\omega\Delta t}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(t-\bar{t}\right) +$$
$$-\hat{q}_0\frac{\omega}{\sin^2\omega\Delta t}\left[\cos\omega\Delta t\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right) - \int_{t_0}^{t} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t_0-\tilde{t}\right)\right] +$$

$$-\frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\Delta t + \frac{1}{2m\sin^2\omega\Delta t}\left(\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)\right)^2 +$$
$$+\frac{1}{m\sin^2\omega\Delta t}\cos\omega\Delta t\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right) +$$

$$-\frac{1}{m\sin\omega\Delta t}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right) = 0$$

Fazendo uso da identidade,

$$\sin\omega\left(t_0-\tilde{t}\right)=\sin\omega\left(t-\tilde{t}-\Delta t\right)=$$

$$=\left[\cos\omega\Delta t\sin\omega\left(t-\tilde{t}\right)-\sin\omega\Delta t\cos\omega\left(\tilde{t}-t\right)\right] \tag{4.16}$$

podemos reescrever a equação acima como:

$$\widehat{\dot{\phi}}-\frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\Delta t+$$

$$\begin{aligned}
&+\frac{1}{2m\sin^2\omega\Delta t}\left(-\int_{t_0}^{t}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t_0-\tilde{t}\right)\right)^2+\\
&-\frac{1}{m\sin^2\omega\Delta t}\cos\omega\Delta t\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t_0-\tilde{t}\right)+\\
&+\frac{1}{m\sin\omega\Delta t}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t_0-\tilde{t}\right)=0
\end{aligned}$$

Fazendo novamente uso da identidade (**??**) encontramos

$$\widehat{\dot{\phi}}-\frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\Delta t+$$

$$\begin{aligned}
&+\frac{\cot^2\omega\Delta t}{2m}\int_{t_0}^{t}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t-\tilde{t}\right)\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)+\\
&-\frac{\cot^2\omega\Delta t}{m}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t-\tilde{t}\right)+\\
&-\frac{\cot\omega\Delta t}{2m}\int_{t_0}^{t}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t-\tilde{t}\right)\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(\bar{t}-t\right)+\\
&+\frac{\cot\omega\Delta t}{m}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\cos\omega\left(\tilde{t}-t\right)+\\
&-\frac{\cot\omega\Delta t}{2m}\int_{t_0}^{t}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\cos\omega\left(\tilde{t}-t\right)\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)+\\
&+\frac{\cot\omega\Delta t}{m}\int_{t_0}^{t}d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}}d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(t-\tilde{t}\right)+
\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2m}\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\cos\omega\left(\tilde{t}-t\right)\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(\bar{t}-t\right)+$$
$$-\frac{1}{m}\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\cos\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\cos\omega\left(\tilde{t}-t\right)=0$$

Usando então o fato que

$$\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{t} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)=$$
$$=2\int_{t_0}^{t} d\bar{t}F\left(\bar{t}\right)\sin\omega\left(t-\bar{t}\right)\int_{t_0}^{\bar{t}} d\tilde{t}F\left(\tilde{t}\right)\sin\omega\left(\tilde{t}-t_0\right)$$

encontramos finalmente,

$$\widehat{\dot{\phi}}-\frac{i\hbar\omega}{2}\cot\omega\Delta t=0$$

cuja solução é

$$\widehat{\dot{\phi}}\left(t\right)=\frac{i\hbar\omega}{2}\cot\left(\omega\Delta t\right)\rightarrow\hat{\phi}\left(t\right)=\frac{i\hbar}{2}\ln\left(A\sin\left(\omega\Delta t\right)\right)$$

Assim, a amplitude de transição para o oscilador harmônico forçado será

$$\langle 2|\,|1\rangle=\exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right)=\left(\frac{1}{A\sin\left(\omega\Delta t\right)}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

Aplicando a condição de normalização para $\Delta t\rightarrow 0$ encontramos

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

onde S é o valor esperado do operador (**??**) entre os estados $\langle 2|$ e $|1\rangle$.

4.8 Transformações Canônicas

Vimos anteriormente que o gerador das variações infintesimais $\hat{G}$ pode ser escrito numa forma canônica,

$$\hat{G}=\hat{p}_i\delta\hat{q}^i-\hat{H}\delta t$$

que implica nas relações de comutação canônicas entre os operadores que descrevem o sistema, e também em equações de movimento canônicas para os operadores na descrição de Heisenberg, ou na de Dirac.

Por outro lado, vimos também que podemos alterar esse gerador por um termo de superfície, de tal forma que o conteúdo físico do princípio de ação não muda. Agora, seria interessante encontrar qual a forma de alteração do gerador que preserva as relações de comutação,

$$\widehat{\hat{G}} = \widehat{\hat{p}}_i \delta \widehat{\hat{q}}^i - \widehat{\hat{H}} \delta t$$

Quando mudamos da descrição em termos dos operadores $\hat{q}^i$ para $\widehat{\hat{q}}^i$ temos que o operador ação deve se alterar por

$$\delta \hat{S} = \hat{G} - \widehat{\hat{G}} = \hat{p}_i \delta \hat{q}^i - \hat{H} \delta t - \widehat{\hat{p}}_i \delta \widehat{\hat{q}}^i + \widehat{\hat{H}} \delta t$$

Assim, em termos de uma função $\hat{S}\left(\hat{q}^i, \widehat{\hat{q}}^i, t\right)$, obtemos o conjunto de equações

$$\hat{p}_i = \frac{\vec{\partial} \hat{S}}{\vec{\partial} \hat{q}^i}, \quad -\widehat{\hat{p}}_i = \frac{\vec{\partial} \hat{S}}{\vec{\partial} \widehat{\hat{q}}^i}$$
$$\widehat{\hat{H}} = \hat{H} + \frac{\vec{\partial} \hat{S}}{\vec{\partial} t}$$

definindo uma transformação canônica, desde que seja possível resolvê-lo sem excessões para todos os qq e pp.

Um exemplo simples disso é dado por

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \hat{q}^i, \widehat{\hat{q}}^i \right\}$$

cuja variação,

$$\delta \hat{S} = \sum_i \left(\widehat{\hat{q}}^i \delta \hat{q}^i + \hat{q}^i \delta \widehat{\hat{q}}^i \right)$$

é tal que

$$\widehat{\hat{q}}^i = \hat{p}_i, \quad \widehat{\hat{p}}_i = -\hat{q}^i, \quad \widehat{\hat{H}} = \hat{H}$$

é a transformação canônica que troca qq com pp.

4.8.1 Transformações Lineares

Uma transfromação canônica linear geral é gerada por

$$\hat{S} = \frac{1}{2}\left(\alpha_{ij}\hat{q}^i\hat{q}^j + \beta_{ij}\left\{\hat{q}^i, \widehat{\hat{q}}^j\right\} + \gamma_{ij}\widehat{\hat{q}}^i\widehat{\hat{q}}^j\right) \tag{4.17}$$

onde α, β e γ são matrizes cujos valores pertencem ao anel escalar da teoria. Derivando a expressão acima encontramos

$$\begin{aligned} \hat{p}_i &= \alpha_{ij}\hat{q}^j + \beta_{ij}\widehat{\hat{q}}^j \\ -\widehat{\hat{p}}_i &= \beta_{ji}\hat{q}^j + \gamma_{ij}\widehat{\hat{q}}^j \end{aligned}$$

ou ainda, em notação matricial,

$$\hat{\mathbf{p}} = \alpha\hat{\mathbf{q}} + \beta\widehat{\hat{\mathbf{q}}}, \quad -\widehat{\hat{\mathbf{p}}} = \beta^T\hat{\mathbf{q}} + \gamma\widehat{\hat{\mathbf{q}}}$$

Por outro lado, as equações explícitas da transformação podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \widehat{\hat{\mathbf{q}}} &= a\hat{\mathbf{q}} + b\hat{\mathbf{p}} \\ \widehat{\hat{\mathbf{p}}} &= c\hat{\mathbf{q}} + d\hat{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

de forma que

$$-\beta^{-1}\alpha\hat{\mathbf{q}} + \beta^{-1}\hat{\mathbf{p}} = \widehat{\hat{\mathbf{q}}}$$

$$\begin{aligned} \widehat{\hat{\mathbf{p}}} &= -\beta^T\hat{\mathbf{q}} - \gamma\left(-\beta^{-1}\alpha\hat{\mathbf{q}} + \beta^{-1}\hat{\mathbf{p}}\right) = \\ &= \left(\gamma\beta^{-1}\alpha - \beta^T\right)\hat{\mathbf{q}} - \gamma\beta^{-1}\hat{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} &a = -\beta^{-1}\alpha, \quad b = \beta^{-1} \\ &c = \gamma\beta^{-1}\alpha - \beta, \quad d = -\gamma\beta^{-1} \end{aligned}$$

Em termos da transformação explícita, as matrizes que aparecem em $\hat{S}$ podem portanto ser escritas como

$$\alpha = -b^{-1}a, \quad \beta = b^{-1}, \quad \gamma = -db^{-1}$$

Agora, as relações de comutação restringem o espaço de transformações lineares. Assim, impondo

$$\left[\widehat{\overline{q}}^{k}, \widehat{\overline{p}}_{l}\right] = i\hbar\delta_{l}^{k} \quad \left[\widehat{\overline{q}}^{k}, \widehat{\overline{q}}^{l}\right] = \hat{0} \quad \left[\widehat{\overline{p}}_{k}, \widehat{\overline{p}}_{l}\right] = \hat{0}$$

encontramos

$$a_{i}^{k}c_{jl}\left[\hat{q}^{i}, \hat{q}^{j}\right] + a_{i}^{k}d_{l}^{j}\left[\hat{q}^{i}, \hat{p}_{j}\right] + b^{ki}c_{lj}\left[\hat{p}_{i}, \hat{q}^{j}\right] + b^{ki}d_{l}^{j}\left[\hat{p}_{i}, \hat{p}_{j}\right] = i\hbar\delta_{l}^{k}$$

$$a_{i}^{k}a_{i}^{l}\left[\hat{q}^{i}, \hat{q}^{i}\right] + a_{i}^{k}b^{li}\left[\hat{q}^{i}, \hat{p}_{i}\right] + b^{ki}a_{i}^{l}\left[\hat{p}_{i}, \hat{q}^{i}\right] + b^{ki}b^{li}\left[\hat{p}_{i}, \hat{p}_{i}\right] = \hat{0}$$

$$c_{kj}c_{lj}\left[\hat{q}^{j}, \hat{q}^{j}\right] + c_{kj}d_{l}^{j}\left[\hat{q}^{j}, \hat{p}_{j}\right] + d_{k}^{j}c_{lj}\left[\hat{p}_{j}, \hat{q}^{j}\right] + d_{k}^{j}d_{l}^{j}\left[\hat{p}_{j}, \hat{p}_{j}\right] = \hat{0}$$

usando então as relações de comutação canônicas, vemos que

$$ad^{T} - bc^{T} = 1$$

$$ab^{T} = ba^{T} \quad cd^{T} = dc^{T}$$

Além disso, uma vez que as matrizes α e γ são necessariamente simétricas, temos também

$$b^{-1}a = a^{T}\left(b^{-1}\right)^{T} \rightarrow ab^{T} = ba^{T}$$

$$db^{-1} = \left(b^{-1}\right)^{T}d^{T} \rightarrow b^{T}d = d^{T}b$$

Para uma ação da forma (**??**), temos que o ordenamento temporal torna-se muito simples,

$$\delta\hat{S} = \delta\hat{q}^{i}\left(\alpha_{ij}\hat{q}^{j} + \beta_{ij}\widehat{\overline{q}}^{j}\right) + \left(\beta_{ij}\hat{q}^{i} + \gamma_{ij}\widehat{\overline{q}}^{i}\right)\delta\widehat{\overline{q}}^{j} = \delta\hat{W}$$

$$\hat{W} = \frac{1}{2}\alpha_{ij}\hat{q}^{i}\hat{q}^{j} + \beta_{ij}\hat{q}^{i}\widehat{\overline{q}}^{j} + \frac{1}{2}\gamma_{ij}\widehat{\overline{q}}^{i}\widehat{\overline{q}}^{j} + const.$$

Assim,

$$\langle q|\,|\bar{q}\rangle = C\left(\alpha,\beta,\gamma\right)\exp\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\alpha_{ij}q^iq^j+\beta_{ij}q^i\bar{q}^j+\frac{1}{2}\gamma_{ij}\bar{q}^i\bar{q}^j\right)$$

A condição de normalização desta função de transformação implica que

$$\int\langle q\text{'}|\,|\bar{q}\rangle\,d\bar{q}\,\langle\bar{q}|\,|q\text{"}\rangle =$$

$$=\left|C\left(\alpha,\beta,\gamma\right)\right|^2\exp\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\alpha_{ij}\left[q\text{'}^iq\text{'}^j-q\text{"}^iq\text{"}^j\right]\right)\int d\bar{q}\exp\frac{i}{\hbar}\left(\beta_{ij}\left(q\text{'}^i-q\text{"}^i\right)\bar{q}^j\right)=$$

$$=\left|C\left(\alpha,\beta,\gamma\right)\right|^2\frac{\left(2\pi\hbar\right)^n}{\left|\det\beta\right|}\delta\left(\mathbf{q}\text{'}-\mathbf{q}\text{"}\right)\equiv\delta\left(\mathbf{q}\text{'}-\mathbf{q}\text{"}\right)$$

Temos então que

$$C\left(\beta\right)=e^{i\varphi}\left[\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^n}\det\beta\right]^{\frac{1}{2}}$$

onde a fase φ pode ser determinada impondo que essa função de transformação possa representar também a transformação identidade. Neste limite, vemos que

$$\alpha\to-\beta\,,\;\gamma\to-\beta\,,\;\beta^{-1}\to0$$

$$\langle q|\,|\bar{q}\rangle\to e^{i\varphi}\left[\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^n}\det\beta\right]^{\frac{1}{2}}\exp\frac{i}{2\hbar}\left(\beta_{ij}\left(q\text{'}^i-\bar{q}\text{'}^i\right)\left(q\text{'}^j-\bar{q}\text{'}^j\right)\right)$$

Para que esta última expressão se aproxime do limite $\delta\left(\mathbf{q}\text{'}-\mathbf{q}\text{"}\right)$ desejado, devemos ter $\varphi=\frac{n\pi}{2}$, o que implica que

$$\langle q|\,|\bar{q}\rangle=\left[\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^n\det\beta\right]^{\frac{1}{2}}\exp\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2}\alpha_{ij}q^iq^j+\beta_{ij}q^i\bar{q}^j+\frac{1}{2}\gamma_{ij}\bar{q}^i\bar{q}^j\right)$$

4.8.2 Aplicação 1: Trocando Coordenadas por Momentos

Para o caso especial de uma transformação do tipo

$$\widehat{\bar{q}}^i=\hat{p}_i\quad\widehat{\bar{p}}_j=-\hat{q}^j$$

nós temos $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = 1$, de tal forma que

$$\langle q|\,|p\rangle = \left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\frac{i}{\hbar}\left(q^i p_i\right)$$

Dada a lei de composição das funções de transformação, vemos que uma expressão deste tipo é muito útil quando desejarmos fazer a passagem de uma descrição em termos de auto-estados de coordenadas, para a descrição em termos dos auto-estados dos momentos. Veremos a seguir como obter este mesmo resultado utilizando o operador ação e o processo de ordenamento cronológico.

4.8.3 Aplicação 2: Descrevendo o Estado Inicial

Em diversos casos de importância prática, o estado inicial do sistema é melhor descrito em termos do seu espectro de momentos, e. g., feixes incidentes em problemas de espalhamento. Assim, seria interessante saber como podemos escrever a amplitude de transição em termos de um estado inicial cujo espectro de momentos é conhecido.

Isto pode ser implementado utilizando o operador ação que conecta as descrições dos estados em termos de coordenadas e em termos de momentos,

$$\hat{S}_{\hat{q}_0\hat{p}_0} = \frac{1}{2}\left\{\hat{q}^k\left(t_0\right), \hat{p}_k\left(t_0\right)\right\}$$

a propriedade de aditividade do operador ação,

$$\hat{S}_{\hat{q}\hat{p}_0} = \hat{S}_{\hat{q}\hat{q}_0} + \hat{S}_{\hat{q}_0\hat{p}_0}$$

e uma transformação canônica.

Por exemplo, para o caso de uma partícula livre unidimensional estudado anteriormente, temos que

$$\hat{S}_{\hat{q}\hat{p}_0} = \frac{m}{2}\frac{\left(\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0\right)}{\Delta t} + \frac{1}{2}\left\{\hat{q}_0, \hat{p}_0\right\}$$

Usando a equação de movimento

$$\hat{q}\left(t\right) = \hat{q}_0 + \frac{\Delta t}{m}\hat{p}_0$$

encontramos,

$$\hat{S}_{\hat{q}\hat{p}_0} = \frac{1}{2}\{\hat{q}, \hat{p}_0\} - \frac{\hat{p}_0^2}{2m}\Delta t$$

Uma vez que o operador momento é conservado, $\hat{p}(t) = \hat{p}_0$, encontramos para o operador principal de Hamilton a seguinte expressão:

$$\hat{W}_{\hat{q}\hat{p}_0} = \hat{q}\hat{p}_0 - \frac{\hat{p}_0^2}{2m}\Delta t + \frac{\hbar}{2i}\ln\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)$$

onde reconhecemos a forma (**??**) com $\alpha = 0$, $\beta = 1$ e $\gamma = -\frac{\Delta t}{2m}$.

Desta forma, temos que a amplitude de transição será dada por

$$\langle q, t| \, |p, 0\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}W_{\hat{q}\hat{p}_0}} = \left(\frac{i}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\frac{i}{\hbar}\left(qp - \frac{p^2}{2m}\Delta t\right)$$

4.9 Limite de Correspondência e o Caráter não-Hermitiano da Ação Cronologicamente Ordenada

Uma vez que o operador principal de Hamilton é obtido a partir de um ordenamento cronológico do operador ação, é de se esperar que o seu significado físico esteja intimamente ligado ao limite de correspondência entre as Mecânicas Clássica e Quântica, e portanto aos valores relativos da ação do sistema de interesse e do aparato de medida usado para estudá-lo. Lembrando que a menor ação que o aparato de medida pode exercer sobre o sistema é $\hbar$, podemos estudar o limite clássico variando o valor desta relativamente à ação S do sistema. Assim, a caracterização diferencial da função de tranformação dada pelo Princípio de Schwinger nos diz que

$$\delta\langle 2| \, |1\rangle = i\langle 2|\, \delta\left(\frac{\hat{S}}{\hbar}\right)|1\rangle = i\langle 2|\, \hat{S}\,|1\rangle\, \delta\left(\frac{1}{\hbar}\right)$$

$$\frac{\partial\langle 2| \, |1\rangle}{\partial(1/\hbar)} = i\langle 2|\, \hat{S}\,|1\rangle$$

contanto que $\hat{S}$ não envolva $\hbar$ explícitamente.

Entretanto, o processo de ordenamento temporal introduz $\hbar$ na estrutura do operador ação, pois é equivalente à uma mudança no processo de medida, mas também define que

$$\delta\left(\frac{\hat{W}}{\hbar}\right)=\delta\left(\frac{\hat{S}}{\hbar}\right)=\hat{S}\delta\left(\frac{1}{\hbar}\right)$$

$$\frac{\partial\left(\hat{W}/\hbar\right)}{\partial\left(1/\hbar\right)}=\hat{W}-\hbar\frac{\partial\hat{W}}{\partial\hbar}=\hat{S}$$

Isto nos indica que no limite $\hbar\to 0$ os valores esperados da ação e do operador principal de Hamilton devem coincidir,

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{\left\langle\hat{W}\right\rangle-\left\langle\hat{S}\right\rangle}{\hbar}=\lim_{\hbar\to 0}\left\langle\frac{\partial\hat{W}}{\partial\hbar}\right\rangle<\infty$$

ou seja, nos processos clássicos ordinários o ordenamento entre os operadores não é importante, de forma que os observáveis podem ser considerados como números comuns. Assim, apesar de $\hat{W}$ não ser auto-adjunto, o termo $\hbar\frac{\partial\hat{W}}{\partial\hbar}$ o corrige.

4.10 Simetrias, Invariâncias e o Teorema de Noether

Quantidades conservadas são um dos aspectos mais importantes envolvendo sistemas dinâmicos. Como sabemos, o seu uso permite-nos resolver diversos problemas sem um conhecimento detalhado da dinâmica e podem ainda ser de grande ajuda na procura pela solução geral do conjunto completo de equações de movimento.

As dez quantidades externas básicas que se conservam num sistema isolado estão intimamente ligadas à forma invariante das leis físicas com respeito a transformações de simetria. Na busca por uma teoria unificada de todas as interações da física, um dos principais motivos para se pesquisar o "alargamento" dessas simetrias é a compatibilização de todos os subsistemas a serem incorporados. Nem sempre tais extensões das simetrias permanecem válidas sob circunstâncias gerais, o que nos obriga então a incluir a propriedade de que essas simetrias são quebradas num estágio posterior. Isto pode ocorrer *dinâmicamente* através de um termo explícito nas equações de campo ou na Lagrangeana, ou *espontâneamente* como um fenômeno afetando as propriedades de um estado.

Por esta razão, é muito importante saber em que *constitui* uma simetria de um sistema, seja ela geométrica ou dinâmica, e quais são as quantidades conservadas associadas a elas. Para uma grande classe de simetrias, as quantidades conservadas podem ser determinadas por um processo bem automático que analisaremos nas próximas linhas.

Uma *simetria* de um sistema de equações (sejam elas estáticas ou não) é uma transformação das suas variáveis dependentes e independentes que mapeia soluções em outras soluções dessas mesmas equações. As simetrias de sistemas Newtonianos estáticos, como as teorias da eletrostática, magnetostática e gravidade Newtoniana, por exemplo, estão relacionadas a simetrias geométricas da distribuição de cargas, correntes ou massas no espaço Euclideano $\mathbb{E}^3$.

Se um sistema não é estático, mas dinâmico, como por exemplo uma função de onda governada pela equação de Schrödinger, então tais transformações estão intimamente relacionadas com quantidades que são *conservadas* durante a evolução do sistema, e seu uso pode facilitar muito a resolução das equações dinâmicas do movimento. As simetrias estarão, neste caso, fortemente ligadas com as propriedades geométricas do espaço definido pelas variáveis dinâmicas. A incorporação do princípio de relatividade Galileano na *forma* das nossas leis dinâmicas, nos garante que as transformações Galileanas (que afetam tanto as variáveis dependentes quanto as independentes de um determinado sistema) são simetrias de um certo sistema isolado. Tais sistemas podem, contudo, ter ainda muitas outras simetrias de interesse físico.

Se o sistema é descrito por um operador Lagrangeano, ao qual a aplicação do Princípio de Schwinger leva às equações de evolução do sistema, nós podemos determinar as condições que esse operador Lagrangeano deve satisfazer de forma que tais operações sejam transformações de simetria para as equações de Euler-Lagrange. Entre essas transformações do espaço de configuração, devemos escolher todas aquelas que mantém a forma das equações de Euler-Lagrange inalterada, de modo a nos conduzir a soluções que são também soluções das equações não transformadas.

As transformações de simetria estão, portanto, intimamente ligadas com as mudanças na forma funcional do operador Lagrangeano de $\hat{L}\left(\hat{\mathbf{q}},\widehat{\dot{\mathbf{q}}},t\right)$ para $\hat{L}'\left(\hat{\mathbf{q}}',\widehat{\dot{\mathbf{q}}}',t\right)$. Para assegurar que esses dois conjuntos de equações são inalterados na sua forma, devemos também impor que o Lagrangeano seja invariante (ou covariante, como preferem alguns) com respeito a essa transformação. A covariância implica simplesmente que o novo e o antigo Lagrangeano devem diferir apenas pela derivada total com respeito ao tempo de algum operador que é função exclusivamente do tempo e das coordenadas generalizadas. Para efeito de clareza na escrita, no que segue todas as quantidades, exceto o parâmetro temporal, serão consideradas como operadores, mesmo que o símbolo$\widehat{\ }$não seja explicitamente indicado. Além disso estamos sempre nos utilizando da convenção de derivadas que mantém as variações dos operadores à direita.

A invariância de $S[q]$ sob $t'= t'(t)$, $q'_i(t') = q'_i\left(q^i,t\right)$ equivale a

$$\frac{dt'}{dt}L'\left(q'^i,\dot{q}'^i,t'\right) = L\left(q^i,\dot{q}^i,t\right) + \frac{d\Lambda\left(q^i,t\right)}{dt}. \tag{4.18}$$

Quando $d\Lambda\left(q^i,t\right)/dt = 0$ diz-se que L é invariante, do contrário é dito ser quasi-invariante.

Um dos mais importantes teoremas da Física, formulado por Amélia Emile Noether, nos diz que, *sob transformações infinitesimais*

$$t' = t + \delta t; \qquad q'^i(t') = q^i(t) + \delta q^i(t); \qquad \Lambda \Longrightarrow \delta\Lambda \tag{4.19}$$

a expressão (**??**) *reduz-se, até primeira ordem em* δ, *a*

$$\sum_i \frac{\delta L}{\delta q^i}\left[\delta q^i - \delta t\dot{q}^i\right] + \frac{d}{dt}J = 0$$

onde $\frac{\delta L}{\delta q^i}$ *é a derivada funcional e*

$$J=\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i-\left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i-L\right)\delta t-\delta\Lambda$$

Passemos à demonstração deste teorema.

Do enunciado, temos que:

$$q\text{'}_i\left(t\text{'}\right)=q^i\left(t\right)+\delta q^i\left(t\right) \tag{4.20}$$

O mapeamento $t\rightarrow t$' da transformação em (**??**) tem como jacobiano

$$J_1=\frac{\partial\left(t\text{'}\right)}{\partial\left(t\right)}=\frac{dt\text{'}}{dt}=1+\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} \tag{4.21}$$

O jacobiano inverso será

$$J_2=\frac{\partial\left(t\right)}{\partial\left(t\text{'}\right)}=\frac{dt}{dt\text{'}}=1-\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} \tag{4.22}$$

Facilmente vemos que estes jacobianos respeitam a propriedade

$$J_1J_2=J_2J_1=1 \tag{4.23}$$

Portanto, a derivada dq^i/dt' será

$$\frac{dq^i}{dt\text{'}}=\frac{dq^i}{dt}\frac{dt}{dt\text{'}}=\frac{dq^i}{dt}J_2$$

$$\frac{dq^i}{dt\text{'}}=\dot{q}^i-\dot{q}^i\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} \tag{4.24}$$

Da mesma forma, para a derivada de δq^i teremos

$$\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt\text{'}}=\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt}\frac{dt}{dt\text{'}}=\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt}J_2$$

$$\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt\text{'}}=\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt}-\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt}\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} \tag{4.25}$$

O segundo termo em (**??**) não contribui, pois é de segunda ordem em δ. Logo,

$$\frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt\text{'}} = \frac{d\left[\delta q^i\right]}{dt} \tag{4.26}$$

Derivando (**??**) em relação a t'

$$\frac{dq\text{'}_i}{dt\text{'}} = \frac{dq^i\left(t\right)}{dt\text{'}} + \frac{d\left[\delta q^i\left(t\right)\right]}{dt\text{'}} \tag{4.27}$$

Substituindo (**??**) e (**??**) em (**??**) obtém-se:

$$\frac{dq\text{'}_i}{dt\text{'}} = \dot{q}^i - \dot{q}^i\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} + \frac{d\left[\delta q^i\left(t\right)\right]}{dt} \tag{4.28}$$

Quando variamos $\dot{q}$ sob a transformação (**??**) temos

$$\delta\dot{q}^i = \frac{dq\text{'}_i}{dt\text{'}} - \frac{dq^i}{dt} \tag{4.29}$$

Substituindo (**??**) em (**??**)

$$\delta\dot{q}^i = \dot{q}^i - \dot{q}^i\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} + \frac{d\left[\delta q^i\left(t\right)\right]}{dt} - \dot{q}^i$$

$$\delta\dot{q}^i = \frac{d\left[\delta q^i\left(t\right)\right]}{dt} - \dot{q}^i\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} \tag{4.30}$$

Lembremos agora da expressão (**??**),

$$\frac{dt\text{'}}{dt}L\acute{}(q\text{'}_i, \dot{q}\text{'}_i) = L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \frac{d\Lambda\left(q^i\right)}{dt}$$

Sob a transformação (**??**) ela pode ser reescrita como

$$J_1 L\acute{}(q\text{'}_i, \dot{q}\text{'}_i) = L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt} \tag{4.31}$$

Multiplicando por J_2 obtém-se:

$$J_2 J_1 L\acute{}(q\text{'}_i, \dot{q}\text{'}_i) = J_2 L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + J_2\frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt} \tag{4.32}$$

Aplicando a propriedade (**??**) em (**??**) e substituindo J_2 pela sua expressão em (**??**) vemos que

$$L\acute{}(q\text{'}_i, \dot{q}\text{'}_i) = L\left(q^i, \dot{q}^i\right) - \frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \\ + \frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt} - \frac{d\left(\delta t\right)}{dt}\frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt} \tag{4.33}$$

Na equação (**??**) o último termo pode ser desconsiderado, pois é de ordem δ^2. Portanto

$$\delta L = L\acute{}(q\text{'}_i, \dot{q}\text{'}_i) - L\left(q^i, \dot{q}^i\right) = -\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt}$$

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L\left(q^i, \dot{q}^i\right) + \delta L = \frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt} \tag{4.34}$$

Porém

$$\delta L = \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t}\delta t\right] \tag{4.35}$$

$$\frac{dL}{dt} = \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t}\right] \tag{4.36}$$

Temos então que:

$$\frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} = \frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L + \delta t\frac{dL}{dt}$$

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L = \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} - \delta t\frac{dL}{dt} \tag{4.37}$$

Substituindo (**??**) em (**??**)

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L = \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} - \sum_i \delta t\left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i + \frac{\partial L}{\partial t}\right]$$

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt} L = \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} - \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i\delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i\delta t + \frac{\partial L}{\partial t}\delta t\right] \tag{4.38}$$

Assim, de (**??**) e (**??**) $\frac{d(\delta t)}{dt}L + \delta L$ pode ser escrito como

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt}L + \delta L =$$

$$= \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} + \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\delta q^i - \frac{\partial L}{\partial q^i}\dot{q}^i \delta t - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\ddot{q}^i \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta \dot{q}^i\right] \tag{4.39}$$

Substituindo (**??**) no último termo da somatória em (**??**) teremos

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt}L + \delta L =$$

$$= \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\left(\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right)\right] + \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} + \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\left(\frac{d\left(\delta q^i - \dot{q}^i \delta t\right)}{dt}\right)\right] \tag{4.40}$$

Se observarmos a última somatória em (**??**) vemos que temos $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ multiplicado por uma derivada temporal total. Desta forma, podemos escrever

$$\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\left[\frac{d\left(\delta q^i - \dot{q}^i \delta t\right)}{dt}\right] = \frac{d}{dt}\left[\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\left(\delta q^i - \delta t\;\dot{q}^i\right)\right] +$$

$$- \sum_i \left\{\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)\right]\left[\delta q^i - \delta t\;\dot{q}^i\right]\right\} \tag{4.41}$$

Substituindo (**??**) em (**??**) teremos

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt}L + \delta L = \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q^i}\left(\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right)\right] + \frac{d\left(\delta t L\right)}{dt} +$$

$$+ \frac{d}{dt}\left[\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\left(\delta q^i - \delta t\;\dot{q}^i\right)\right] - \sum_i \left\{\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)\right]\left[\delta q^i - \delta t\;\dot{q}^i\right]\right\}$$

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt}L + \delta L = \sum_i \left\{\left[\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)\right]\left[\delta q^i - \delta t \dot{q}^i\right]\right\} +$$

$$+ \frac{d}{dt}\left[\delta t L + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\left(\delta q^i - \delta t \dot{q}^i\right)\right] \tag{4.42}$$

Mas lembremos da definição da derivada funcional para um funcional de primeira ordem, ou seja,

$$\frac{\delta L}{\delta q^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\right)$$

Portanto (**??**) torna-se

$$\frac{d\left(\delta t\right)}{dt}L + \delta L =$$

$$= \sum_i \frac{\delta L}{\delta q^i}\left[\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right] + \frac{d}{dt}\left[\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i - \delta t\left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right)\right] \tag{4.43}$$

Substituindo (**??**) em (**??**) obtemos

$$\sum_i \frac{\delta L}{\delta q^i}\left[\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right] + \frac{d}{dt}\left[\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i - \left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right)\delta t\right] = \frac{d\left[\delta\Lambda\left(q^i\right)\right]}{dt}$$

$$\sum_i \frac{\delta L}{\delta q^i}\left[\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right] +$$

$$+\frac{d}{dt}\left[\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i - \left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right)\delta t - \delta\Lambda\left(q^i\right)\right] = 0 \tag{4.44}$$

Chamando o objeto dentro da derivada temporal de carga de Noether J obtemos

$$J = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\delta q^i - \left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}\dot{q}^i - L\right)\delta t - \delta\Lambda\left(q^i\right)$$

E assim, (**??**) pode ser reescrita como

$$\sum_i \frac{\delta L}{\delta q^i}\left[\delta q^i - \dot{q}^i\,\delta t\right] + \frac{dJ}{dt} = 0$$

que é o Teorema de Noether para um sistema quântico com um número finito de graus de liberdade. Desta dedução, vemos que este teorema é independente do princípio variacional, e portanto independente do fato de a transformação infinitesimal preservar ou não as equações de Euler-Lagrange.

Se, por outro lado, tomarmos transformações infinitesimais dos operadores coordenadas generalizadas que preservem o Princípio de Schwinger, ou seja, variações que pertençam à classe descrita no enunciado do princípio variacional, ($\frac{\delta L}{\delta q^i} = 0$), teremos que

$$\frac{dJ}{dt} = 0$$

Assim, vemos que *a cada transformação infinitesimal que preserve o Princípio de Schwinger, está associada uma lei de conservação*, ou ainda, *a cada tranformação infinitesimal de uma variável dinâmica que mantém o operador Lagrangeano de um sistema invariante variacionalmente, corresponde uma lei de conservação da sua carga de Noether associada.*

4.11 A Essência da Formulação Variacional

Desta breve análise da formulação variacional de Schwinger para a dinâmica quântica, podemos notar que este trabalho representa um avanço do nosso conhecimento e compreensão dos princípios subjacentes ao assunto em questão. Além disso, como bem sabemos, qualquer formulação variacional de uma teoria é automaticamente covariante desde que adotemos um operador Lagrangeano que seja invariante sob as transformações entre diferentes referenciais. Assim, o Princípio de Schwinger abre-nos as portas para uma teoria quântica que seja manifestamente covariante. As tradicionais prescrições de quantização não estão postas numa forma manifestamente covariante, e deve ser verificado para cada caso, separadamente, que a teoria satisfaz os requerimentos de invariância impostos pelos princípios relativísticos. Isto raramente apresenta grandes dificuldades para o desenvolvimento da teoria, mas seria de grande vantagem construir uma teoria na qual fosse imediatamente conspícuo o fato de que os postulados da relatividade são satisfeitos. Numa teoria variacional, a covariância da teoria depende somente da invariância relativística do operador Lagrangeano. Isso será explorado um pouco mais adiante.

O princípio variacional é o postulado básico que nos permite construir equações diferenciais cuja solução nos fornece a amplitude de transição para o sistema de interesse. Há diversas formas de se aplicar o princípio variacional com este intuito. Neste capítulo, vimos apenas um desses métodos, baseado no uso do operador principal de Hamilton e do princípio de correspondência. De fato, uma vez que as variações infinitesimais dos operadores ação e principal de Hamilton coincidem, e o valor esperado desses operadores no limite clássico, deve ser igual ao valor da variação inifinitesimal da ação clássica, podemos dizer que um dos aspectos do Princípio de Schwinger é estabelecer uma correspondência entre o gerador de uma transformação canônica clássica e o gerador de uma transformação unitária do sistema quantizado equivalente. Em termos práticos, podemos considerar isto quase como uma nova prescrição de quantização para sistemas clássicos, conforme os exemplos dados demonstram.

5. Sistemas com Infinitos Graus de Liberdade

"Por mais que pensem de modo diferente, observadores da natureza dignos de crédito concordam que tudo o que aparece, tudo o que se manifesta como fenômeno, deve indicar ou expor uma cisão originária, que pode ser unificada, ou uma unidade primordial que pode ser cindida. Cindir o que está unido, unificar o que está cindido é a vida da natureza, eterna sístole e diástole, eterna síncrese e diácrise, inspiração e expiração do mundo, no qual vivemos, criamos e somos."

Goethe, A Doutrina das Cores, §739.

Discutiremos agora como podemos fazer a transição de um sistema não-relativístico com um número finito de graus de liberdade, para um sistema relativístico com um número infinito de graus de liberdade.

Sistemas com infinitos graus de liberdade são de interesse, principalmente, quando lidamos com situação mais energéticas do que aquelas que consideramos até aqui. À medida que o nível de energia do sistema cresce, cresce também, ainda que de uma quantidade finita, o número de partículas envolvidas no processo de interesse e, portanto, faz-se necessário um número finito, porém alterável, de variáveis para descrever este sistema. O problema da obtenção de um limite contínuo a partir de um espectro discreto, na abordagem de Schwinger para a Mecânica Quântica, encontra-se tratado de maneira mais cuidadosa na referência [**?**].

De acordo com os princípios relativísticos, não é possível nenhum interferência entre duas regiões espacialmente distintas em um dado instante de tempo. Isto significa que os vários graus de liberdade que caracterizam o sistema de partículas proposto acima, são exatamente os diversos elementos de volume no espaço tridimensional. Isto nos leva à conclusão de que em lugar do operador Lagrangeano devemos nos utilizar de uma *densidade* $\mathcal{L}$ que represente uma medida intrínseca das propriedades físicas do sistema e dependa somente das condições locais, ou seja, $\mathcal{L}$ descreve as circunstâncias físicas nas vizinhanças de um ponto do espaço-tempo. Seguindo o programa de descrição analítica do sistema, temos que o operador densidade Lagrangeano deve ser construído a partir de quantidades dinâmicas fundamentais. Podemos então nos perguntar: qual a natureza destas variáveis dinâmicas? Elas devem descrever a evolução temporal[1] do sistema, e portanto são funções do tempo. Por outro lado, como foi observado acima, os elementos espaciais correspondem aos vários graus de liberdade físicos, portanto as variáveis dinâmicas fundamentais devem também ser funções das três coordenadas espaciais, como forma de rotular os vários graus de liberdade. Assim, somos levados à conclusão de que as variáveis dinâmicas fundamentais são funções do espaço-tempo, i. e., *campos*. Este argumentos nos mostram que a noção de campo é inescapável a uma generalização natural da Mecânica Quântica que incorpore as idéias da teoria da relatividade.

Denotando as variáveis fundamentais por $\chi_a(x)$ onde o índice a representa outros graus de liberdade além daqueles devidos ao espaço quadridimensional, podemos representar o operador ação por

$$S = \int_{\Omega} d\Omega \mathcal{L}\left(\chi_a(x), x\right)$$

sendo $d\Omega$ o elemento de quadrivolume invariante.

Em geral, as equações de movimento e demais condições suplementares, tais como vínculos e quantidades conservadas, que são derivadas a partir do operador densidade Lagrangeano, usando, ou não, o princípio variacional, são manifestamente covariantes,

[1]Em um sentido relativístico.

desde que esse operador seja invariante sob as transformações requeridas.

Por outro lado, as relações de comutação usuais (ou seja, para o caso não-relativístico) são, essencialmente, uma expressão da independência cinemática das quantidades dinâmicas fundamentais, mesmo que incompatíveis, em diferentes pontos do espaço num dado instante de tempo. É evidente que a descrição covariante apropriada desta propriedade geral deve envolver os campos em dois pontos do espaço-tempo que não possam ser conectados por sinais luminosos, i. e., dois pontos sobre uma superfície do gênero espaço.

O estado de um sistema físico é definido em termos do número máximo de medidas compatíveis que podem ser feitas sobre um sistema. Se o estado for definido sobre uma superfície do gênero espaço, então uma medida feita sobre um dado ponto desta superfície é compatível com outra medida realizada sobre um outro ponto qualquer da mesma superfície, uma vez que o distúrbio introduzido pelo ato de medição não pode se propagar mais rápido que a velocidade da luz, e portanto as duas medidas não podem se interferir mutuamente. Assim, um estado pode ser especificado como um autovetor $|a,\sigma\rangle$ de um conjunto completo de operadores $\hat{A}$ (que representam observáveis compatíveis), associados com uma dada superfície σ do gênero espaço. Sempre há, ao menos localmente, um sistema de coordenadas no qual esta superfície do gênero espaço pode ser descrita por três coordenadas espaciais ortogonais a um quadrivetor do gênero tempo que define o tempo local. Neste referencial particular, o vetor de estado pode ser escrito como $|a,t\rangle$.Temos então que o problema da dinâmica quântica relativista é determinar a função de transformação $\left\langle a^2,\sigma^2\right| \left|a^1,\sigma^1\right\rangle$, onde σ^1 e σ^2 são duas superfícies distintas e a^1 e a^2 são os autovalores do conjunto completo $\hat{A}$, associados a cada uma destas superfícies.

Com isto, temos que o princípio variacional de Schwinger pode ser escrito na forma

$$\delta\left\langle a^2,\sigma^2\right| \left|a^1,\sigma^1\right\rangle = i\left\langle a^2,\sigma^2\right| \delta S \left|a^1,\sigma^1\right\rangle =$$
$$= i\left\langle a^2,\sigma^2\right| \delta\left[\int_\Omega d\Omega\mathcal{L}\left(\chi_a\left(x\right),x\right)\right]\left|a^1,\sigma^1\right\rangle = \left(\int_{\sigma^2} - \int_{\sigma^1}\right) d\sigma_\mu G^\mu\left(\sigma\right)$$

Em implementações práticas da expressão acima pode ser necessário a utilização de condições de contorno para os campos na borda das superfícies do gênero espaço ou, equivalentemente, sobre uma superfície do gênero tempo ligando as duas superfícies σ, de forma a delimitar o volume de espaço-tempo de interesse.

Extensões dos resultados obtidos anteriormente na Mecânica Quântica pontual, seguem de maneira natural, embora a demonstração de algumas das propriedades gerais da teoria seja trabalhosa. Particularmente, pode-se mostrar que as relações de comutação canônicas obtidas através do Princípio Variacional são covariantes, além de fornecerem também os geradores infinitesimais das transformações de Lorentz [**?**, **?**]. Em lugar de repetir aqui estas demonstrações, partiremos para a exemplificação do uso dos métodos variacionais através de exemplos simples, porém de grande importância. Uma vez que nos exemplos a seguir o que figura sempre é o operador densidade Lagrangeano, denotaremos este simplesmente por L, em lugar do caligráfico $\mathcal{L}$.

5.1 Aplicação 1: Campo Eletromagnético Livre

Nos exemplos que seguem todas as quantidades envolvidas são operadores, não obstante, omitiremos o símbolo $\widehat{}$ com o intuito de não sobrecarregarmos a notação e permitir uma leitura mais clara dos resultados.

Suponha então que o campo eletromagnético livre seja descrito pelo seguinte operador densidade Lagrangeana

$$\begin{aligned} L &= A_\nu \circ \partial_\mu F^{\mu\nu} - F^{\mu\nu} \circ \partial_\mu A_\nu + \frac{1}{2} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \\ &= \frac{1}{2} \left(A_\nu \partial_\mu F^{\mu\nu} - \partial_\nu F^{\mu\nu} A_\mu - F^{\mu\nu} \partial_\mu A_\nu + \partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu} + F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right) \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde encontra-se implícita a hipótese de que os campos A_μ e $F^{\mu\nu}$ são independentes entre si. A operação $\circ$ deve ser entendida como a melhor simetrização possível entre os operadores em questão, tanto na ordem quanto nos índices.

De acordo com o Princípio de Schwinger, as equações de Euler-Lagrange para os A_β são dadas por

$$\pi^{\alpha\beta} = \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_\alpha A_\beta\right)} = \frac{1}{2}\left(F^{\beta\alpha} - F^{\alpha\beta}\right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial A_\beta} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu F^{\mu\beta} - \partial_\nu F^{\beta\nu}\right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial A_\beta} - \partial_\alpha \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_\alpha A_\beta\right)} = 0$$

$$\frac{1}{2}\left(\partial_\mu F^{\mu\beta} - \partial_\nu F^{\beta\nu}\right) - \frac{1}{2}\left(\partial_\alpha F^{\beta\alpha} - \partial_\alpha F^{\alpha\beta}\right) = \partial_\mu F^{\mu\beta} - \partial_\nu F^{\beta\nu} = 0 \tag{5.2}$$

Analogamente, temos que os $F^{\alpha\beta}$ satisfazem

$$\Pi^\lambda{}_{\alpha\beta} = \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_\lambda F^{\alpha\beta}\right)} = \frac{1}{2}\left(A_\beta \delta^\lambda{}_\alpha - \delta^\lambda{}_\beta A_\alpha\right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial F^{\alpha\beta}} = -\frac{1}{2}\partial_\alpha A_\beta + \frac{1}{2}\partial_\beta A_\alpha + F_{\alpha\beta}$$

$$\frac{\partial L}{\partial F^{\alpha\beta}} - \partial_\lambda \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_\lambda F^{\alpha\beta}\right)} = 0 \rightarrow F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha$$

o que nos mostra que o tensor $F_{\alpha\beta}$ é anti-simétrico. Usando este fato, a equação (**??**) pode ser reescrita como

$$\partial_\nu F^{\beta\nu} = 0$$

Por outro lado, o gerador das transformações infinitesimais dos campos pode ser obtido substituindo-se alguns dos resultados acima na expressão geral (**??**), ou realizando explícitamente o processo de variação do operador densidade Lagrangeana (**??**). Adotando-se este último método, encontramos que o termo de superfície na variação de L será dado por

$$\begin{aligned} G = &\int d\sigma_\mu \frac{1}{2}\left(\delta A_\nu F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu}\delta A_\nu + A_\nu \delta F^{\mu\nu} - \delta F^{\nu\mu} A_\nu\right) + \\ &+ \int d\sigma_\alpha \delta x^\alpha \frac{1}{2} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \end{aligned}$$

O gerador das variações funcionais dos campos presentes na teoria pode ser encontrado fixando-se o ponto do espaço-tempo para o qual olhamos,

$$\delta x^{\alpha} = 0$$

Este gerador, por sua vez, deve nos conduzir a relações funcionais entre os comutadores dos campos fundamentais, isto é, à álgebra que os campos fundamentais satisfazem sob a operação de comutação.

Usando então o gerador para as variações funcionais,

$$G_{Campos} = \frac{1}{2}\int d\sigma_{\mu}^{\bar{x}} \left(\delta A_{\nu}\left(\bar{x}\right) F^{\nu\mu}\left(\bar{x}\right) - F^{\mu\nu}\left(\bar{x}\right)\delta A_{\nu}\left(\bar{x}\right) + A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\delta F^{\mu\nu}\left(\bar{x}\right) - \delta F^{\nu\mu}\left(\bar{x}\right) A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\right)$$

encontramos que a variação induzida no operador A_{λ} é dada por,

$$\delta A_{\lambda}\left(x\right) = -i\left[A_{\lambda}\left(x\right), G_{Campos}\right]$$

onde $\left(x-\bar{x}\right)^{2} < 0$. Com isso, temos que

$$\delta A_{\lambda}\left(x\right) = -i\left[A_{\lambda}\left(x\right), \int d\sigma_{\mu}^{\bar{x}}\frac{1}{2}\left(\delta A_{\nu}F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu}\delta A_{\nu} + A_{\nu}\delta F^{\mu\nu} - \delta F^{\nu\mu}A_{\nu}\right)\right] =$$

$$\begin{aligned}
&= -i\frac{1}{2}\int d\sigma_{\mu}^{\bar{x}}\left(\left[A_{\lambda}\left(x\right), \delta A_{\nu}\right]F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu}\left[A_{\lambda}\left(x\right), \delta A_{\nu}\right] + \right.\\
&+ \delta A_{\nu}\left[A_{\lambda}\left(x\right), F^{\nu\mu}\right] - \left[A_{\lambda}\left(x\right), F^{\mu\nu}\right]\delta A_{\nu} + \\
&+ \left[A_{\lambda}\left(x\right), A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\right]\delta F^{\mu\nu}\left(\bar{x}\right) - \delta F^{\nu\mu}\left(\bar{x}\right)\left[A_{\lambda}\left(x\right), A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\right] + \\
&\left. + A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\left[A_{\lambda}\left(x\right), \delta F^{\mu\nu}\left(\bar{x}\right)\right] - \left[A_{\lambda}\left(x\right), \delta F^{\nu\mu}\left(\bar{x}\right)\right]A_{\nu}\left(\bar{x}\right)\right)
\end{aligned}$$

Analogamente para $F^{\alpha\beta}$:

$$\delta F^{\alpha\beta}\left(x\right) = -i\left[F^{\alpha\beta}\left(x\right), G_{Campos}\right] =$$

$$
\begin{aligned}
&= -i\frac{1}{2}\int d\sigma_{\mu}^{\bar{x}}\Big(\Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta A_{\nu}(\bar{x})\Big] F^{\nu\mu}(\bar{x}) - F^{\mu\nu}(\bar{x})\Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta A_{\nu}(\bar{x})\Big] + \\
&+ \delta A_{\nu}(\bar{x})\Big[F^{\alpha\beta}(x), F^{\nu\mu}\Big] - \Big[F^{\alpha\beta}(x), F^{\mu\nu}(\bar{x})\Big]\delta A_{\nu}(\bar{x}) + \\
&+ \Big[F^{\alpha\beta}(x), A_{\nu}(\bar{x})\Big]\delta F^{\mu\nu}(\bar{x}) - \delta F^{\nu\mu}(\bar{x})\Big[F^{\alpha\beta}(x), A_{\nu}(\bar{x})\Big] + \\
&+ A_{\nu}(\bar{x})\Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta F^{\mu\nu}(\bar{x})\Big] - \Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta F^{\nu\mu}(\bar{x})\Big] A_{\nu}(\bar{x})\Big)
\end{aligned}
$$

Usando a hipótese usual de que as variações são proporcionais ao operador identidade,

$$
[A_{\lambda}(x), \delta A_{\nu}] = \Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta A_{\nu}\Big] = [A_{\lambda}(x), \delta F^{\nu\mu}] = \Big[F^{\alpha\beta}(x), \delta F^{\nu\mu}\Big] = 0 \tag{5.3}
$$

temos que as expressões acima se reduzem a

$$
\begin{aligned}
\delta A_{\lambda}(x) = -i\int d\sigma_{\mu}^{\bar{x}}\Big(\Big[A_{\lambda}(x), F^{[\nu\mu]}(\bar{x})\Big]\delta A_{\nu}(\bar{x}) + \\
+ [A_{\lambda}(x), A_{\nu}(\bar{x})]\,\delta F^{[\mu\nu]}(\bar{x})\Big)
\end{aligned} \tag{5.4}
$$

$$
\begin{aligned}
\delta F^{\alpha\beta}(x) = -i\int d\sigma_{\mu}\Big(\Big[F^{\alpha\beta}(x), F^{[\nu\mu]}(\bar{x})\Big]\delta A_{\nu}(\bar{x}) + \\
+ \Big[F^{\alpha\beta}(x), A_{\nu}(\bar{x})\Big]\delta F^{[\mu\nu]}(\bar{x})\Big)
\end{aligned} \tag{5.5}
$$

Uma vez que na expressão (**??**) só a parte antisimétrica do tensor $F^{\mu\nu}$ contribui, em virtude das relações (**??**), vemos que é razoável esperar que as partes simétrica e antisimétrica desse tensor tenham variações induzidas distintas e independentes umas das outras. Separando então o tensor $F^{\alpha\beta}$ em partes simétrica e antisimétrica, encontramos

$$
\begin{aligned}
\delta F^{(\alpha\beta)}(x) = -i\int d\sigma_{\mu}\Big(\Big[F^{(\alpha\beta)}(x), F^{[\nu\mu]}(\bar{x})\Big]\delta A_{\nu}(\bar{x}) + \\
+ \Big[F^{(\alpha\beta)}(x), A_{\nu}(\bar{x})\Big]\delta F^{[\mu\nu]}(\bar{x})\Big)
\end{aligned} \tag{5.6}
$$

$$
\begin{aligned}
\delta F^{[\alpha\beta]}(x) = -i\int d\sigma_{\mu}\Big(\Big[F^{[\alpha\beta]}(x), F^{[\nu\mu]}(\bar{x})\Big]\delta A_{\nu}(\bar{x}) + \\
+ \Big[F^{[\alpha\beta]}(x), A_{\nu}(\bar{x})\Big]\delta F^{[\mu\nu]}(\bar{x})\Big)
\end{aligned} \tag{5.7}
$$

Fazendo então uma escolha de referencial tal que o elemento diferencial da hipersuperfície do tipo espaço possa ser escrito como

$$d\sigma_\mu = n_\mu dxdydz\,,\; n_\mu = (1,0,0,0) \rightarrow d\sigma_0 = dxdydz$$

teremos que $x^0 = \bar{x}^0$. As equações (**??**), (**??**) e (**??**) formam um conjunto de equações funcionais entre os campos e suas variações. Explorando então a hipótese de que os campos A_ν, $F^{[\alpha\beta]}$ e $F^{(\alpha\beta)}$ são cinematicamente independentes entre si, vemos que a única solução possível para a primeira destas equações, é que os campos satisfaçam, sobre a hipersuperfície σ_μ, as identidades:

$$\left[A_\lambda(\mathbf{x})\,, F^{[\nu 0]}(\bar{\mathbf{x}})\right]_0 = i\delta_\lambda^{\ \nu}\delta(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}) \tag{5.8}$$

$$\left[A_\lambda(\mathbf{x})\,, A_\nu(\bar{\mathbf{x}})\right]_0 = 0 \tag{5.9}$$

onde o sufixo 0 no comutador serve para indicar que os operadores envolvidos são ambos avaliados num mesmo instante de tempo fixado pela hipersuperfície do tipo espaço.

Além disso, das relações (**??**) encontramos

$$\begin{aligned}\delta F^{[\alpha 0]}(x) = -i\int d\sigma_0 \Big(&\left[F^{[\alpha 0]}(x)\,, F^{[\nu 0]}(\bar{x})\right]_0 \delta A_\nu(\bar{x}) + \\ &+ i\delta(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\,\delta F^{[\alpha 0]}(\bar{x})\Big)\end{aligned}$$

Assim, vemos que para estas componentes do tensor $F^{[\alpha\beta]}$, uma das possíveis soluções para as relações funcionais é

$$\left[F^{[\alpha 0]}(x)\,, F^{[\nu 0]}(\bar{x})\right]_0 = 0 \tag{5.10}$$

Por outro lado, da equação (**??**) vemos que a única solução possível para as relações funcionais entre os operadores de campo é

$$\left[F^{(\alpha\beta)}(x)\,, F^{[\nu 0]}(\bar{x})\right]_0 = \left[F^{(\alpha\beta)}(x)\,, A_\nu(\bar{x})\right]_0 = 0 \tag{5.11}$$

O conjunto de equações (**??**,**??**,**??**) constitui as relações de comutação *canônicas* para o campo eletromagnético. De fato, estas relações habilitam-nos a interpretar $F^{[\nu 0]} = \pi^\nu$ como o momento canônicamente conjugado ao operador A_ν, o que caracteriza o par (A_ν, π^ν) como as quantidades dinâmicas fundamentais para a descrição da interação eletromagnética. Com esta interpretação, vemos que, pelo lema de Schurr, as relações (**??**) implicam que a parte simétrica do tensor $F^{\alpha\beta}$ deve ser proporcional ao operador identidade. O uso das equações de movimento, permite-nos então fixar o valor da constante de proporcionalidade como sendo zero.

5.2 Aplicação 2: Campo Livre de Dirac

O campo de Dirac, como bem conhecido da literatura, pode ser descrito, no sentido do estabelecimento de suas equações do movimento, por duas densidades Lagrangeanas, rotuladas pelos nomes de *simetrizada* e *não-simetrizada*, consistindo esta denominação uma referência à forma da Lagrangeana com respeito ao campo de Dirac ψ e seu conjugado $\bar{\psi}$.

Estamos agora interessados em estudar qual a dependência das *relações de comutação*, obtidas via Princípio de Schwiger, com respeito à *forma funcional* da densidade Lagrangeana que descreve os campos de interesse. Para tanto, concentraremo-nos na Lagrangeana

$$L = i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi - m\bar{\psi}\psi \tag{5.12}$$

onde λ é tomado como um parâmetro livre a ser determinado posteriormente. Salientamos que para $\lambda = 0$ temos a densidade Lagrangeana de Dirac simetrizada, enquanto que para $\lambda = 1$ obtemos a densidade Lagrangeana não-simetrizada. Dessa forma, o estudo da Lagrangeana acima, com parâmetro livre λ, pode ser considerado como um estudo mais completo dos campos fermiônicos, dentro do escopo de nosso interesse aqui.

Seguindo o formalismo geral desenvolvido previamente, podemos calcular as quantidades,

$$\pi_{\psi}^{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_{\alpha}\psi\right)} = i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta_{\mu}^{\alpha}$$

utilizamos aqui os símbolos π_{ψ}^{α} apenas por brevidade de notação, não implicando necessariamente que estes sejam canonicamente conjugados ao campo de Dirac. Prosseguindo, podemos ver ainda que

$$\frac{\partial L}{\partial\psi} = i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu} - m\bar{\psi}$$

de modo que a equação de movimento assim obtida se escreve

$$\frac{\partial L}{\partial\psi} - \partial_{\alpha}\frac{\partial L}{\partial\left(\partial_{\alpha}\psi\right)} = -i\partial_{\alpha}\bar{\psi}\gamma^{\alpha} - m\bar{\psi} = 0$$

Demaneira análoga para o campo $\bar{\psi}$ obtemos,

$$\pi_{\bar{\psi}}^{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial\left(\partial_{\alpha}\bar{\psi}\right)} = i\frac{\lambda-1}{2}\delta_{\mu}^{\alpha}\gamma^{\mu}\psi$$

$$\frac{\partial L}{\partial\bar{\psi}} = i\frac{\lambda+1}{2}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - m\psi$$

$$\frac{\partial L}{\partial\psi} - \partial_{\alpha}\frac{\partial L}{\partial\left(\partial_{\alpha}\psi\right)} = i\gamma^{\alpha}\partial_{\alpha}\psi - m\psi = 0$$

Aqui, duas caracteríscas nos chamam a atenção. Em primeiro lugar, vemos que as equações de movimento são completamente independentes do valor assumido pelo parâmetro λ e, por outro lado, vemos qua as variações relativas a um campo acabam por determinar a equação de movimento do seu campo conjugado. Assim, vemos que, em termos da evolução dinâmica, a densidade Lagrangeana (**??**) de fato descreve o campo de Dirac, como esperado. Não obstante, sabemos que a natureza de um sistema quântico não pode ser completamente especificada apenas pelas suas equações de movimento, é necessário ainda conhecer como os campos conjugados relacionam-se entre si sobre a hipersuperfície do tipo espaço que caracteriza o fenômeno em si. Em outras palavras, faz-se necesário conhecer as relações de comutação entre as componentes dos campos.

Com este intuito, calculamos a variação geral do operador densidade Lagrangeana, que pode ser expressa por

$$\begin{aligned}\delta L = & \, i\frac{\lambda+1}{2}\delta\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi + i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta\left(\partial_{\mu}\psi\right) + \\ & + i\frac{\lambda-1}{2}\delta\left(\partial_{\mu}\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta\psi - m\delta\bar{\psi}\psi - m\bar{\psi}\delta\psi\end{aligned}$$

Explicitando a variação em termos de uma variação funcional e da variação devida à mudaça de ponto de observação, encontramos

$$\begin{aligned}\delta L = & \, i\frac{\lambda+1}{2}\delta_0\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi + i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\delta_0\psi + \\ & + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\left(\delta_0\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta_0\psi - m\delta_0\bar{\psi}\psi - m\bar{\psi}\delta_0\psi + \\ & + \delta x^{\alpha}\partial_{\alpha}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi - m\bar{\psi}\psi\right)\end{aligned}$$

Utilizando a identidade de Leibniz, essa variação do operador densidade Lagrangeana pode ainda ser escrita na forma,

$$\begin{aligned}\delta L = & \, \delta_0\bar{\psi}\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - m\psi\right) + \left(-i\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu} - m\bar{\psi}\right)\delta_0\psi + \\ & + \partial_{\mu}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta_0\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\delta_0\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right) + \\ & + \delta x^{\alpha}\partial_{\alpha}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi - m\bar{\psi}\psi\right)\end{aligned}$$

Reescrevendo o termo de superfície em termos da variação geral,

$$\begin{aligned}\delta L = & \, \delta_0\bar{\psi}\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi - m\psi\right) + \left(-i\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu} - m\bar{\psi}\right)\delta_0\psi + \\ & + \partial_{\mu}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\delta\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right) + \\ & - \delta x^{\alpha}\partial_{\mu}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\alpha}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\alpha}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right) + \\ & + \delta x^{\alpha}\partial_{\alpha}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\partial_{\mu}\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi - m\bar{\psi}\psi\right)\end{aligned}$$

Assim, variando-se a forma dos campos a ponto fixo, encontramos que, de acordo com o Princípio de Schwinger, o gerador infinitesimal associado a esta variação tem a forma

$$G = \int d\sigma_\mu \left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}\gamma^\mu\delta\psi + i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \right)$$

O que desejamos agora é saber se este gerador pode, de fato, fornecer-nos as relações de comutação adequadas para a descrição de campo fermiônicos. Escrito em termos das componentes dos campos em questão, o gerador acima será dado por

$$G = \int d\sigma_\mu \left(i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}^B \left(\gamma^\mu\right)_{BC} \delta\psi^C + i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}^B \left(\gamma^\mu\right)_{BC} \psi^C \right)$$

A variação infinitesimal gerada por este em uma das componentes do campo de Dirac é então[2]

$$\frac{1}{2}\delta\psi^A = -i\left[\psi^A, G\right] =$$

$$= -i\int d\sigma_\mu \left(i\frac{\lambda+1}{2}\left\{\psi^A, \bar{\psi}_B \left(\gamma^\mu\right)^B_C\right\}\delta\psi^C - i\frac{\lambda+1}{2}\bar{\psi}_B\left(\gamma^\mu\right)^B_C\left\{\psi^A,\delta\psi^C\right\} + \right.$$
$$\left. + i\frac{\lambda-1}{2}\left\{\psi^A,\delta\bar{\psi}_B\right\}\left(\gamma^\mu\right)^B_C\psi^C - i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}_B\left\{\psi^A, \left(\gamma^\mu\right)^B_C\psi^C\right\}\right)$$

onde lançamos mão da identidade

$$[A, BC] = \{A, B\}\, C - B\,\{A, C\}$$

Agora, impondo, como usual, que as variações dos operadores de campo sejam proporcionais ao operador identidade,

$$\left\{\psi^A, \delta\psi^C\right\} = \left\{\psi^A, \delta\bar{\psi}_B\right\} = 0$$

encontramos,

$$\frac{1}{2}\delta\psi^A = -i\int d\sigma_\mu \left(i\frac{\lambda+1}{2}\left\{\psi^A, \bar{\psi}_B\left(\gamma^\mu\right)^B_C\right\}\delta\psi^C - i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}_B\left\{\psi^A, \left(\gamma^\mu\right)^B_C\psi^C\right\}\right)$$

[2] Vide final da seção 4.4.

Uma das possíveis soluções desse sistema de equações é

$$(\lambda+1)\left\{\psi^{A}(\mathbf{x}),\bar{\psi}_{B}(\mathbf{x}')\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\right\}=\delta_{C}^{A}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\left\{\psi^{A}(\mathbf{x}),\bar{\psi}_{B}(\mathbf{x}')\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\right\}=\frac{1}{\lambda+1}\delta_{C}^{A}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\left\{\psi^{A}(\mathbf{x}),\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')\right\}=0$$

Explicitando esses resultados em termos do campo adjunto,

$$\bar{\psi}_{B}(\mathbf{x}')=\psi_{D}^{\dagger}(\mathbf{x}')\left(\gamma^{0}\right)_{B}^{D}$$

$$\left\{\psi^{A}(\mathbf{x}),\psi_{C}^{\dagger}(\mathbf{x}')\right\}=\frac{1}{\lambda+1}\delta_{C}^{A}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \tag{5.13}$$

De maneira análoga, obtemos para o campo conjugado,

$$\frac{1}{2}\delta\bar{\psi}_{A}=-i\left[\bar{\psi}_{A},G\right]=$$

$$\frac{1}{2}\delta\bar{\psi}_{A}=-i\int d\sigma_{\mu}\left(i\frac{\lambda+1}{2}\left\{\bar{\psi}_{A},\bar{\psi}_{B}\left(\gamma^{\mu}\right)_{C}^{B}\right\}\delta\psi^{C}-i\frac{\lambda-1}{2}\delta\bar{\psi}_{B}\left\{\bar{\psi}_{A},\left(\gamma^{\mu}\right)_{C}^{B}\psi^{C}\right\}\right)$$

e temos mais uma vez que uma das possíveis soluções desse sistema é dada por

$$-(\lambda-1)\left\{\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x}),\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')\right\}=\delta_{A}^{B}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\left\{\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x}),\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')\right\}=-\frac{1}{\lambda-1}\delta_{A}^{B}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\left\{\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x}),\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')\right\}=\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x})\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')+\left(\gamma^{0}\right)_{C}^{B}\psi^{C}(\mathbf{x}')\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x})$$

$$\left\{\bar{\psi}_{A},\bar{\psi}_{B}\left(\gamma^{\mu}\right)_{C}^{B}\right\}=0$$

Podemos ainda colocar isto em termos do campo adjunto,

$$\bar{\psi}_{A}(\mathbf{x})=\psi_{D}^{\dagger}(\mathbf{x})\left(\gamma^{0}\right)_{A}^{D}$$

$$\left\{\psi^{B}(\mathbf{x}'),\psi_{A}^{\dagger}(\mathbf{x})\right\}=-\frac{1}{\lambda-1}\delta_{A}^{B}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \tag{5.14}$$

$$\left\{\bar{\psi}_A\left(\mathbf{x}\right),\bar{\psi}_B\left(\mathbf{x}'\right)\left(\gamma^0\right)^B_C\right\}=\left\{\psi^\dagger_D\left(\mathbf{x}\right)\left(\gamma^0\right)^D_A,\psi^\dagger_C\left(\mathbf{x}'\right)\right\}=0$$

Agora, para que os resultados (**??**) e (**??**) sejam compatíveis entre si, faz-se necessário que

$$-\frac{1}{\lambda-1}=\frac{1}{\lambda+1}\to 1-\lambda=\lambda+1\to\lambda=0$$

Este resultado nos mostra, de maneira bastante direta, que a Lagrangeana mais simétrica possível é, em certos casos, a mais adequada para a descrição do sistema.

6. Sistemas Singulares e Simetria de Gauge

"Que experiências sejam apresentadas sem nenhum vínculo teórico e que se deixe o leitor ou estudante tirar como quiser suas conclusões, eis uma exigência estranha, que jamais pode ser cumprida mesmo por aqueles que a fazem. Pois apenas olhar para as coisas não pode ser um estímulo para nós. Cada olhar envolve uma observação, cada observação uma reflexão, cada reflexão uma síntese: ao olharmos atentamente para o mundo já estamos teorizando. Devemos, porém, teorizar e proceder com consciência, autoconhecimento, liberdade e - se for preciso usar uma palavra audaciosa - com ironia: tal destreza é indispensável para que a abstração, que receiamos, e o resultado empírico, que desejamos, nos seja útil e vital."

Goethe, A Doutrina das Cores, Prefácio.

Neste capítulo pretendemos analizar em mais detalhes o problema dos sistemas com vínculos entre os seus graus de liberdade e a relação destes com a simetria gauge. Em particular, vimos no capítulo anterior que o Princípio de Schwinger foi capaz de nos fornecer relações de comutação para os campos fundamentais, aparentemente, "a gauge livre". Não obstante, dado a existência de problemas com outras quantizações a gauge livre [**?**], certa cautela se impõe.

De fato, uma forma mais geral de se colocar este problema, é nos indagarmos se há uma equivalência completa entre a formulação variacional de Schwinger e outros procedimentos de quantização de sistemas singulares. Apesar de podermos encontrar na literatura algumas "provas" dessa equivalência [**?**, **?**], nossa opinião é de que o assunto ainda não foi estudado com o devido cuidado para que uma conclusão definitiva possa ser estabelecida. A motivação para esta opinião pode ser encontrada num estudo mais atento do campo eletromagnético livre, como faremos a seguir.

6.1 Um Estudo de Caso: O Campo Eletromagnético Livre

No capítulo anterior deduzimos as equações de movimento e as relações de comutação para o campo eletromagnético livre. Não obstante, a equação de movimento,

$$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha$$

implica que o tensor $F_{\alpha\beta}$ é puramente anti-simétrico, de forma que podemos escrever o gerador das variações funcionais nos campos como

$$G = \int_\sigma d\sigma_0^{\acute{x}} \frac{1}{2} \left(\delta A_k \left(\acute{x} \right) F^{[k0]} \left(\acute{x} \right) - \delta F^{[k0]} \left(\acute{x} \right) A_k \left(\acute{x} \right) \right) \tag{6.1}$$

e isto implica que somente seis componentes dos campos A_β e $F_{\alpha\beta}$ podem ser variadas independentemente.

As equações de movimento para estas componentes são

$$\begin{aligned} \partial_0 A_k &= \partial_k A_0 - F_{k0} \\ \partial_0 F^{k0} &= -\partial_l F^{kl} \end{aligned} \tag{6.2}$$

Agora, nós devemos examinar o restante das equações de campo para ver se as componentes dependentes estão, ou não, determinadas:

$$\begin{aligned} F_{kl} &= \partial_k A_l - \partial_l A_k \\ \partial_k F^{k0} &= 0 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Assim, vemos que F_{kl} está determinado, uma vez que pela equação (**??**) podemos determinar os A_k. Entretanto, A_0 não está determinado, e temos em consequência um vínculo (**??**) sobre as componentes do campo elétrico.

Por outro lado, há uma liberdade na escolha das componentes de A_β em virtude da transformação de gauge

$$A_\beta \rightarrow A_\beta + \partial_\beta \Phi$$

Podemos agora empregar um conhecido teorema do cálculo vetorial, devido a von Helmholtz [**?**], que diz que qualquer vetor pode ser decomposto em uma parte longitudinal (que é o gradiente de um escalar) e uma transversal (que é o rotacional de um pseudo-vetor),

$$A_k = A_k^L + A_k^T$$

$$\partial^k A_k^T = 0 \quad \partial_k A_l^L - \partial_l A_k^L = 0$$

Se fizermos então uma transformação de gauge, encontramos

$$\begin{aligned} A\'_0 &= A_0 + \partial_0 \Phi \\ A_k^L &= A_k^L + \partial_k \Phi \\ A_k^T &= A_k^T \end{aligned}$$

Assim, vemos que a transformação de gauge afeta somente a parte longitudinal de A_k, enquanto que F^{k0} é puramente transversal, uma vez que tem divergência nula.

Com isto, as equações de movimento para as componentes independentes também podem ser decompostas em suas partes longitudinais e transversais,

$$\partial_0 A_k = \partial_0 A_k^L + \partial_0 A_k^T = \partial_k A_0 - F_{k0}$$

$$\begin{aligned} \partial_0 A_k^L &= \partial_k A_0 \\ \partial_0 A_k^T &= -F_{k0} \end{aligned} \tag{6.4}$$

Utilizando uma escolha de gauge apropriada, podemos fazer

$$\begin{aligned} A_k^L &= \partial_k \Phi \\ A_0 &= \partial_0 \Phi \end{aligned} \tag{6.5}$$

de forma que (**??**) pode ser interpretada como uma condição de integrabilidade sobre a função de gauge Φ.

Com esta escolha, temos que o gerador das variações funcionais pode ser escrito como

$$A_k = \partial_k \Phi + A_k^T$$

$$G = \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \frac{1}{2} \Big(\delta \left[\partial_k \Phi \left(x' \right) \right] F^{[k0]} \left(x' \right) - \delta F^{[k0]} \left(x' \right) \partial_k \Phi \left(x' \right) \Big) + \\ + \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \frac{1}{2} \Big(\delta A_k^T \left(x' \right) F^{[k0]} \left(x' \right) - \delta F^{[k0]} \left(x' \right) A_k^T \left(x' \right) \Big)$$

Se somarmos o termo de superfície

$$\partial_\nu \Lambda^\nu = \frac{1}{2} \partial_\nu \left(F^{[\mu\nu]} \partial_\mu \Phi \right)$$

ao operador densidade Lagrangeano (**??**) original, temos que o novo gerador será

$$\bar{G} = -\int_\sigma d\sigma_0^{x'} F^{[k0]} \left(x' \right) \delta \left[\partial_k \Phi \left(x' \right) \right] + \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \frac{1}{2} \Big(\delta A_k^T \left(x' \right) F^{[k0]} \left(x' \right) - \delta F^{[k0]} \left(x' \right) A_k^T \left(x' \right) \Big) = \\ = -\int_\sigma d\sigma_0^{x'} \partial_k \Big[F^{[k0]} \left(x' \right) \delta \Phi \left(x' \right) \Big] + \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \partial_k F^{[k0]} \left(x' \right) \delta \Phi \left(x' \right) + \\ + \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \frac{1}{2} \Big(\delta A_k^T \left(x' \right) F^{[k0]} \left(x' \right) - \delta F^{[k0]} \left(x' \right) A_k^T \left(x' \right) \Big)$$

Na penúltima linha acima, a primeira integral se anula em virtude das condições de contorno sobre o campo elétrico no infinito espacial, enquanto que a segunda se anula devido à lei de Gauss (**??**).

Obtemos assim, um gerador que é puramente transversal:

$$\bar{G} = \int_\sigma d\sigma_0^{x'} \frac{1}{2} \Big(\delta A_k^T \left(x' \right) F^{[k0]} \left(x' \right) - \delta F^{[k0]} \left(x' \right) A_k^T \left(x' \right) \Big)$$

Este gerador nos leva então a relações de comutação canônica para as componentes transversais dos campos,

$$\left[A_k^T \left(\mathbf{x} \right), A_l^T \left(\mathbf{x}' \right) \right]_0 = \Big[F^{[k0]} \left(\mathbf{x} \right), F^{[l0]} \left(\mathbf{x}' \right) \Big]_0 = 0$$

$$\left[A_k^T(\mathbf{x}), F^{[l0]}(\mathbf{x}')\right]_0 = \delta_k^l \delta^T(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

onde $\delta^T(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ indica a componente transversal do funcional delta.

De acordo com o teorema de von Helmholtz, temos

$$\delta_k^l \delta^T(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \delta_k^l \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') - \partial^l E_k(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

onde E_k é um vetor puramente longitudinal, ou seja,

$$E_k(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \partial'_k \mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

Assim,

$$\delta_k^l \delta^T(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \delta_k^l \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') - \partial^l \partial'_k \mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

Porém, o lado esquerdo dessa identidade tem divergência nula, portanto,

$$\partial_l\left(\delta_k^l \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right) - \partial_l \partial^l \partial'_k \mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = 0$$

$$-\partial'_k \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \partial'_k \partial_l \partial^l \mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

$$\partial_l \partial^l \mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = -\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

Usando uma representação integral para o funcional delta, encontramos a solução dessa equação,

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

o que nos mostra que a parte logitudinal de A_k está intimanente ligada ao potencial de Coulomb.

Essa ligação foi evidenciada pela escolha de gauge[1] que fizemos ao tomar a equação (**??**) como uma condição de ingrabilidade sobre a função de gauge.

De fato, a decomposição de von Helmholtz mostrou-nos que há uma escolha de gauge implícita ao derivarmos as relações de comutação. Uma vez que apenas seis das

[1]Esse gauge é conhecido na literatura como gauge da radiação, pela sua utilidade na resolução de problemas envolvendo a propagação de ondas eletromagnéticas.

vinte componentes originais dos campos A_μ e $F_{\mu\nu}$ são independentes entre si, como nos mostra o gerador (**??**), foi necessário esclarecer em que etapa foram estabelecidos os vínculos entre esses graus de liberdade. O que a análise dos graus de liberdade físicos nos mostrou é que ao tomarmos (**??**) como uma condição de integrabilidade, ou seja, ao fazermos a escolha de gauge (**??**), realizamos, *de fato*, a fixação de gauge do sistema.

6.2 O Formalismo de B-Field

Vimos na seção anterior que é possível, através de uma escolha de gauge apropriada, fixar o gauge do campo eletromagnético livre[2], na formulação de Schwinger, para o caso do gauge da radiação. Entretanto, ainda não está claro se as relações de comutação[3] (**??**, **??**, **??**) são, de fato, relações de comutação a gauge livre. Não obstante, sabemos que o gauge da radiação pertence a uma classe muito particular de gauges, a dos gauges *lineares*[4]. Desta monta, podemos imaginar se não seria possível *flexibilizar* a escolha de gauge (**??**), de maneira a incluir os demais gauges lineares como outras possibilidades. Entretanto, sabemos que uma dada escolha de gauge afeta não somente as relações de comutação, mas também as equações de movimento para os campos, e dado que o formalismo de Schwinger nos fornece, em todas as suas etapas, expressões covariantes, seria muito interessante que esta implementação da classe de gauges lineares se desse também de maneira covariante.

Para implementar a fixação de gauge do campo eletromagnético livre covariantemente, introduzimos um campo escalar hermiteano $B(x)$, denominado *B-field*, seguindo um formalismo originalmente introduzido por Nakanishi [**?**]. Em termos desse campo, a densidade Lagrangeana proposta por Nakanishi [**?**] para descrever o campo eletro-

[2]E, portanto, também a forma explícita das relações de comutação.

[3]Antes de fazermos a escolha de gauge (**??**).

[4]Outros exemplos de gauges lineares são o gauge de Lorentz e o de Fermi.

magnético é

$$L = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} + B\partial^{\mu}A_{\mu} + \frac{1}{2}\alpha B^2$$

Esta densidade Lagrangeana e o método de variação de Palatini [**?**] podem ser utilizados para propor um operador densidade lagrangeano que serve de ponto de partida para a abordagem de Schwinger.

Analizaremos em primeiro lugar o caso do campo vetorial de massa nula, para em seguida ver se o modelo de Proca constitui de fato a sua generalização natural, ou seja, fornecendo-nos um bom limite de massa nula. As linhas gerais do que pretendemos expor a seguir podem ser encontradas nas referências [**?**, **?**].

6.2.1 Campo Eletromagnético Livre

Suponha o seguinte operador densidade Lagrangeana para o campo eletromagnético com um campo escalar hermitiano auxiliar, $B\left(x\right)$:

$$L = -\frac{1}{2}\left\{F^{\mu\nu}, \frac{1}{2}\left(\partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu}\right)\right\} + \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} + \frac{1}{2}\left\{B, \partial^{\mu}A_{\mu}\right\} + \frac{1}{2}\alpha B^2$$

onde $\{a, b\}$ expressa o anticomutador dos operadores de campo a e b, α é um parâmetro escalar fixo, e encontra-se implícita a hipótese de que os operadores de campo hermiteanos A_{μ} , $F^{\mu\nu}$ e B são independentes entre si, como proposto pelo método de Palatini [**?**].

Considerando apenas variações a ponto fixo temos

$$\begin{aligned}
\delta L = &-\frac{1}{4}\left\{\delta F^{\mu\nu}, \left(\partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu}\right)\right\} - \frac{1}{4}\left\{F^{\mu\nu}, \left(\partial_{\mu}\delta A_{\nu} - \partial_{\nu}\delta A_{\mu}\right)\right\} + \\
&+ \frac{1}{4}\left(\delta F^{\mu\nu}\right)\eta_{\mu\gamma}\eta_{\varepsilon\nu}F^{\gamma\varepsilon} + \frac{1}{4}F^{\mu\nu}\eta_{\mu\gamma}\eta_{\varepsilon\nu}\left(\delta F^{\gamma\varepsilon}\right) + \\
&+ \frac{1}{2}\left\{\delta B\eta^{\mu\nu}, \partial_{\nu}A_{\mu}\right\} + \frac{1}{2}\left\{B\eta^{\mu\nu}, \partial_{\nu}\left(\delta A_{\mu}\right)\right\} + \frac{1}{2}\alpha\left(\delta B\right)B + \frac{1}{2}\alpha B\left(\delta B\right)
\end{aligned}$$

Realizando as contrações com a métrica de Minkowski, e renomeando índices mudos temos:

$$\delta L = \frac{1}{4}\partial_\mu \left\{F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu} + 2B\eta^{\nu\mu}, \delta A_\nu\right\} - \frac{1}{4}\left\{\delta F^{\mu\nu}, \left(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\right) - F_{\mu\nu}\right\} +$$
$$+ \frac{1}{4}\left\{\partial_\mu \left(F^{\mu\nu} - F^{\nu\mu}\right), \delta A_\nu\right\} + \frac{1}{2}\left\{\delta B, \eta^{\mu\nu}\partial_\nu A_\mu + \alpha B\right\} - \frac{1}{2}\left\{\partial_\nu B\eta^{\mu\nu}, \delta A_\mu\right\}$$

Integrando a variação de δL num volume vemos que o primeiro termo do segundo membro pode ser transformado em uma integral de superfície com o uso do teorema de Gauss.

$$\begin{aligned}\int \delta L d^4x = & \oint d\sigma_\mu \left[\frac{1}{4}\left\{F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu} + 2B\eta^{\nu\mu}, \delta A_\nu\right\}\right] + \\ & - \int \frac{1}{4}\left\{\delta F^{\mu\nu}, \left(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\right) - F_{\mu\nu}\right\} d^4x + \\ & + \int \frac{1}{4}\left\{\partial_\mu \left(F^{\mu\nu} - F^{\nu\mu}\right), \delta A_\nu\right\} d^4x + \\ & + \int \frac{1}{2}\left\{\delta B, \eta^{\mu\nu}\partial_\nu A_\mu + \alpha B\right\} - \frac{1}{2}\left\{\partial_\nu B\eta^{\mu\nu}, \delta A_\mu\right\} d^4x\end{aligned}$$

Os termos restantes nos fornecem as equações de movimento para os campos,

$$\partial_\mu F^{[\mu\nu]} - \partial^\nu B = 0 \tag{6.6}$$

$$\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu} \tag{6.7}$$

$$\partial^\mu A_\mu + \alpha B = 0 \tag{6.8}$$

Sabemos que é exatamente o termo de superfície que nos fornece o gerador das transformações infinitesimais dos campos, G. Usando uma notação mais compacta, temos:

$$G_2 - G_1 = \left(\int_{\sigma_1} - \int_{\sigma_2}\right) d\sigma_\mu \left[\frac{1}{2}\left\{F^{[\nu\mu]} + B\eta^{\nu\mu}, \delta A_\nu\right\}\right]$$

onde usamos a condição de contorno de anulamento dos campos no infinito espacial. Usando então o gerador para as variações funcionais sobre uma das superfícies, encontramos que a variação induzida no operador A_λ é dada por,

$$\delta A_\lambda\left(x\right) = -i\left[A_\lambda\left(x\right), G\right]$$

onde $(x - x')^2 < 0$.

Supondo que δA_ν é proporcional à identidade, o que implica que δA_ν comuta com todos os outros operadores temos

$$\delta A_\lambda (x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[A_\lambda (x) , \pi^{\nu\mu} (x')\right] \delta A_\nu (x')$$

onde $\pi^{\nu\mu} (x') = F^{[\nu\mu]} (x') + B (x') \eta^{\nu\mu}$.

Fazendo então uma escolha de referencial tal que o elemento diferencial da hipersuperfície do tipo espaço possa ser escrito como

$$d\sigma_\mu = n_\mu dxdydz \quad , \quad n_\mu = (1, 0, 0, 0) \rightarrow d\sigma_0 = dxdydz$$

teremos que $x^0 = x'^0$. Vemos que a única solução possível para a primeira destas equações, é que os campos satisfaçam, sobre a hipersuperfície σ_0, as identidades:

$$\left[A_\lambda (\mathbf{x}) , \left(F^{[\nu 0]} (\mathbf{x}') + \eta^{\nu 0} B (\mathbf{x}')\right)\right]_0 = i\delta_\lambda^\nu \delta (\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

onde o sufixo 0 no comutador serve para indicar que os operadores envolvidos são ambos avaliados num mesmo instante de tempo fixado pela hipersuperfície do tipo espaço. Esta expressão nos indica que o momento canonicamente conjugado a A_λ deve ser $F^{[\nu 0]} + \eta^{\nu 0} B$.

Usando então o gerador para as variações funcionais encontramos que a variação induzida no operador $F^{\alpha\beta}$ é dada por,

$$\delta F^{\alpha\beta} (x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{\alpha\beta} (x) , \pi^{\nu\mu} (x')\right] \delta A_\nu (x')$$

Podemos ainda escrever a expressão acima considerando a independência das partes simétrica e anti-simétrica de $F^{\alpha\beta}$:

$$\delta F^{(\alpha\beta)} (x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{(\alpha\beta)} (x) , \pi^{\nu\mu} (x')\right] \delta A_\nu (x') \tag{6.9}$$

$$\delta F^{[\alpha\beta]} (x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{[\alpha\beta]} (x) , \pi^{\nu\mu} (x')\right] \delta A_\nu (x') \tag{6.10}$$

Usando o gerador para as variações funcionais encontramos que a variação induzida no operador B é dada por

$$\delta B(x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[B(x), \pi^{\nu\mu}(x') \right] \delta A_\nu(x') \tag{6.11}$$

Multiplicando (**??**) pela métrica de Minkowski e somando a (**??**) obtemos

$$\delta \pi^{\alpha\beta}(x) = -i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[\pi^{\alpha\beta}(x), \pi^{\nu\mu}(x') \right] \delta A_\nu(x')$$

Esta expressão nos mostra que as variações no momento canonicamente conjugado a A_ν são induzidas pelas variações δA_ν.

Por outro lado, somando-se o termo de superfície

$$\Lambda = -\oint d\sigma_\mu \frac{1}{2} \delta \left\{ F^{[\nu\mu]} + B\eta^{\nu\mu}, A_\nu \right\}$$

temos que o gerador das variações funcionais se torna

$$\bar{G} = -\int_\sigma d\sigma_\mu \frac{1}{2} \left\{ \delta F^{[\nu\mu]} + \delta B \eta^{\nu\mu}, A_\nu \right\} = -\int_\sigma d\sigma_\mu \frac{1}{2} \left\{ \delta \pi^{\nu\mu}, A_\nu \right\}$$

de forma que as variações induzidas nos campos serão

$$\bar{\delta} A_\lambda(x) = i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[A_\lambda(x), A_\nu(x') \right] \delta \pi^{\nu\mu}(x')$$

$$\bar{\delta} F^{\alpha\beta}(x) = i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{\alpha\beta}(x), A_\nu(x') \right] \delta \pi^{\nu\mu}(x')$$

$$\bar{\delta} B(x) = i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[B(x), A_\nu(x') \right] \delta \pi^{\nu\mu}(x') \tag{6.12}$$

Separando o tensor F em suas partes simétrica e anti-simétrica, e supondo as variações destas independentes entre si,

$$\bar{\delta} F^{(\alpha\beta)}(x) = i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{(\alpha\beta)}(x), A_\nu(x') \right] \delta \pi^{\nu\mu}(x')$$

$$\bar{\delta} F^{[\alpha\beta]}(x) = i \int_\sigma d\sigma_\mu^{x'} \left[F^{[\alpha\beta]}(x), A_\nu(x') \right] \delta \pi^{\nu\mu}(x')$$

Somando-se esta última com (**??**) multiplicada por $\eta^{\alpha\beta}$, obtemos

$$\bar{\delta}\pi^{\alpha\beta}(x) = i\int_{\sigma} d\sigma_{\mu}^{x'}\left[\pi^{\alpha\beta}(x), A_{\nu}(x')\right]\delta\pi^{\nu\mu}(x')$$

Ficamos então com o seguinte sistema de relações funcionais,

$$\delta A_{\lambda}(x) = -i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[A_{\lambda}(x), \pi^{\nu 0}(x')\right]\delta A_{\nu}(x')$$

$$\delta\pi^{\alpha\beta}(x) = -i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[\pi^{\alpha\beta}(x), \pi^{\nu 0}(x')\right]\delta A_{\nu}$$

$$\bar{\delta}A_{\lambda}(x) = i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[A_{\lambda}(x), A_{\nu}(x')\right]\delta\pi^{\nu 0}(x')$$

$$\bar{\delta}\pi^{\alpha\beta}(x) = i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[\pi^{\alpha\beta}(x), A_{\nu}(x')\right]\delta\pi^{\nu 0}(x')$$

Se considerarmos apenas as componentes $\beta = 0$, e impusermos uma independência cinemática entre $\pi^{\nu} \equiv \pi^{\nu 0} = F^{[\nu 0]} + B\eta^{\nu 0}$ e A_{ν},

$$\delta A_{\lambda}(x) = -i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[A_{\lambda}(x), \pi^{\nu}(x')\right]\delta A_{\nu}(x')$$

$$0 = -i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[\pi^{\alpha}(x), \pi^{\nu}(x')\right]\delta A_{\nu}(x')$$

$$0 = i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[A_{\lambda}(x), A_{\nu}(x')\right]\delta\pi^{\nu}(x')$$

$$\bar{\delta}\pi^{\alpha}(x) = i\int_{\sigma} d\sigma_{0}^{x'}\left[\pi^{\alpha}(x), A_{\nu}(x')\right]\delta\pi^{\nu}(x')$$

Uma das possíveis soluções deste sistema de relações funcionais é

$$\left[\pi^{\alpha}(x), \pi^{\nu}(x')\right]_{0} = \left[A_{\lambda}(x), A_{\nu}(x')\right]_{0} = 0 \tag{6.13}$$

$$\left[A_{\lambda}(x), \pi^{\nu}(x')\right]_{0} = i\delta_{\lambda}^{\nu}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tag{6.14}$$

Isto nos fornece então um conjunto covariante de relações de comutação canônicas para qualquer gauge linear covariante, mostrando que a escolha implícita de gauge feita na seção anterior na forma da condição de integrabilidade (**??**) pode ser generalizada através do uso do formalismo de campo auxiliar.

6.2.2 Campo de Proca

O termo massivo do operador Lagrangeano pode ser escrito como

$$L_P = \frac{m^2}{2} A_\mu A^\mu$$

$$\delta L_P = \frac{m^2}{2}\left(\delta A_\mu A^\mu + A_\mu \delta A^\mu\right) = \frac{m^2}{2}\left\{A^\mu, \delta A_\mu\right\}$$

onde m é o parâmetro de massa do campo de Proca.

Somando a isto a variação do operador lagrangeano do campo eletromagnético livre, encontramos[5]

$$\begin{aligned}\delta L_{EM} + \delta L_P = & \frac{1}{4}\partial_\mu\left\{F^{\nu\mu} - F^{\mu\nu} + 2B\eta^{\nu\mu}, \delta A_\nu\right\} \\ & - \frac{1}{4}\left\{\delta F^{\mu\nu}, (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) - F_{\mu\nu}\right\} + \\ & + \frac{1}{2}\left\{\partial_\mu F^{[\mu\nu]} - \eta^{\nu\mu}\partial_\mu B + m^2 A^\nu, \delta A_\nu\right\} + \\ & + \frac{1}{2}\left\{\delta B, \eta^{\mu\nu}\partial_\nu A_\mu + \alpha B\right\}\end{aligned}$$

Assim, temos que as equações de movimento para o campo de Proca são dadas por

$$\partial_\mu F^{[\mu\nu]} - \partial^\nu B + m^2 A^\nu = 0 \tag{6.15}$$

$$\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu} \tag{6.16}$$

$$\partial^\mu A_\mu + \alpha B = 0 \tag{6.17}$$

enquanto que o gerador das variações funcionais nos campos será

$$G = \int_\sigma d\sigma_\mu \left(F^{[\nu\mu]} + B\eta^{\nu\mu}\right)\delta A_\nu$$

uma vez que as variações nos campos são proporcionais ao operador identidade.

Como o gerador acima é o mesmo que no caso do campo eletromagnético livre, as relações de comutação para o campo de Proca são também as mesmas, ou seja, (**??**) e (**??**).

[5]Estes são os mesmos resultados obtidos na referência [**?**] para descrever o campo de Proca no formalismo de B-field.

6.3 Análise de Cauchy[6]

Vamos agora tentar determinar as quantidades dinâmicas para os dois sistemas estudados anteriormente fazendo esta análise dos dados de Cauchy [?]. O problema de Cauchy é uma das mais poderosas ferramentas para se separar os setores dinâmicos e de vínculos de uma teoria, baseando-se tão somente nas equações de movimentos do sistema, e portanto pode ser aplicado mesmo a um sistema de campos de operadores lineares, como neste caso.

6.3.1 Campo de Proca

Retomemos as equações de movimentos para o campo de Proca. Substituindo (??) em (??), temos

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu \partial^\nu A^\mu - \partial^\nu B + m^2 A^\nu = 0 \tag{6.18}$$

Agora, substituindo (??) na equação acima,

$$\Box A^\nu + m^2 A^\nu - (1-\alpha)\, \partial^\nu B = 0 \tag{6.19}$$

onde $\partial_\mu \partial^\mu = \Box$.

Tomando-se a quadridivergência da equação (??) encontramos

$$\Box B - m^2 \partial_\nu A^\nu = 0 \tag{6.20}$$

Se tomarmos o gradiente da equação (??) e substituirmos em (??) multiplicada por α teremos

$$\alpha \left(\Box A^\nu + m^2 A^\nu \right) + (1-\alpha)\, \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = 0 \tag{6.21}$$

[6] Uma breve descrição de como se dá a análise dos dados de Cauchy de um determinado problema, encontra-se no apêndice C.

Multiplicando (**??**) por m^2 e substituindo em (**??**),

$$\Box B + \alpha m^2 B = 0 \tag{6.22}$$

Desta última equação, podemos ver diretamente que o campo auxiliar B é uma quantidade dinâmica. Por outro lado, temos que a componente 0 da equação (**??**) pode ser escrita como

$$\partial^0 \partial_0 A^0 = -\left(1-\alpha\right) \partial^0 \partial_i A^i - \alpha \left(\partial^i \partial_i A^0 + m^2 A^0\right)$$

Uma vez que a equação acima envolve tanto as derivadas temporais de segunda ordem do campo A^0 como as derivadas das componentes A^i, é preciso verificar se estes são ou não quantidades dinâmicas.

Tomando-se então a componente k da equação (**??**), temos:

$$\partial^0 \partial_0 A^k = -\partial^i \partial_i A^k - m^2 A^k - \frac{(1-\alpha)}{\alpha} \partial^k \left(\partial_0 A^0 + \partial_i A^i\right)$$

o que nos mostra que, para $\alpha \neq 0$, podemos determinar os A^k como quantidades dinâmicas.

Uma vez que as componentes A^k estão determinadas, encontramos que também a componente A^0 é uma quantidade dinâmica. Assim, fica explícito o fato de que para o campo de Proca *todas* as componentes de A^μ são dinâmicas, ou seja, trata-se de um sistema sem vínculos. Este resultado poderia também ter sido obtido de uma maneira mais direta (válida inclusive para $\alpha = 0$) utilizando-se as equações (**??**) e (**??**). Uma vez que (**??**) nos diz que o campo auxiliar B é uma quantidade dinâmica, podemos isolar a derivada temporal de ordem dois de A^ν em (**??**):

$$\partial^0 \partial_0 A^\nu = -\partial^i \partial_i A^\nu + \left(1-\alpha\right) \partial^\nu B - m^2 A^\nu$$

e uma vez conhecidos B, A^ν, e suas derivadas temporais de primeira ordem num dado instante, podemos determinar esses campos em qualquer instante futuro.

6.3.2 Campo Eletromagnético

A partir das equações de movimento, vemos que substituindo (**??**) em (**??**),

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu \partial^\nu A^\mu - \partial^\nu B = 0 \tag{6.23}$$

Tomando a quadridivergência desta equação, obtemos

$$\Box B = 0$$

o que nos mostra que o campo auxiliar é uma quantidade dinâmica.

Se tomarmos agora o gradiente da equação (**??**) e substituirmos em (**??**) multiplicada por α encontramos

$$\alpha \Box A^\nu + (1-\alpha)\, \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = 0 \tag{6.24}$$

Para a componente zero, temos

$$\partial^0 \partial_0 A^0 = \alpha \partial_i \left(\partial^0 A^i - \partial^i A^0 \right) - \partial^0 \partial_i A^i$$

Desta equação vemos que a evolução temporal do A^0 só pode ser determinada se determinarmos também os A^i. Assim, tomando a componente k da equação (**??**):

$$\partial^0 \partial_0 A^k = -\partial^i \partial_i A^k - \frac{(1-\alpha)}{\alpha} \partial^k \left(\partial_0 A^0 + \partial_i A^i \right)$$

Este sistema de equações nos mostra então que a evolução temporal de qualquer uma das componentes de A^μ está acoplada à evolução das suas demais componentes, fruto do vínculo fornecido pelo campo auxiliar B.

A exemplo do que foi feito para o campo de Proca, podemos também obter as derivadas temporais de ordem dois de todas as componentes de A^ν, em função das derivadas de B, diretamente a partir da equação

$$\Box A^\nu - (1-\alpha)\, \partial^\nu B = 0$$

Desses resultados, vemos que o formalismo de Nakanishi nos fornece um bom limite para o campo de massa nula a partir das equações de Proca, tendo-se em vista que todos os resultados para o campo eletromagnético livre podem ser obtidos do caso massivo fazendo $m = 0$.

6.4 Vínculos, Simetrias e o Teorema de Noether

Neste ítem pretendemos determinar a ligação entre a natureza singular de um sistema e as suas *simetrias de gauge*. Faremos a análise para um sistema com um número finito de graus de liberdade, sendo natural a sua generalização para um sistema de campos [**?**]. Para tanto, consideremos inicialmente transformações de gauge cuja forma é dada por

$$\delta t = \epsilon\,(t) \qquad \delta\mathbf{q} = \epsilon\,(t)\,\boldsymbol{\phi}\,(\mathbf{q}, t) + \dot{\epsilon}\,(t)\,\boldsymbol{\psi}\,(\mathbf{q}, t)$$

Devido a essa dependência em t as transformções acima são ditas *locais*, ou *de gauge de segundo tipo*. Em princípio, essas transformações podem conter derivadas de $\epsilon\,(t)$ de ordem arbitrária, entretanto, ateremo-nos aqui ao caso acima.

Com esta transformação, a variação na forma pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\delta_0\mathbf{q} = \delta\mathbf{q} - \delta t\dot{\mathbf{q}} &= \epsilon\,(t)\,\boldsymbol{\phi}\,(\mathbf{q}, t) + \dot{\epsilon}\,(t)\,\boldsymbol{\psi}\,(\mathbf{q}, t) - \epsilon\,(t)\,\dot{\mathbf{q}}\,(t) = \\ &= \epsilon\,(t)\,(\boldsymbol{\phi}\,(\mathbf{q}, t) - \dot{\mathbf{q}}\,(t)) + \dot{\epsilon}\,(t)\,\boldsymbol{\psi}\,(\mathbf{q}, t)\end{aligned}$$

Por outro lado, o Teorema de Noether nos diz que

$$\left[\frac{\delta L}{\delta\mathbf{q}}\right] \cdot [\delta\mathbf{q} - \delta t\;\dot{\mathbf{q}}] + \frac{d}{dt}J = 0 \tag{6.25}$$

onde $\frac{\delta L}{\delta q^i}$ é a derivada funcional e

$$J = L\;\delta t + \frac{\partial L}{\partial\dot{\mathbf{q}}} \cdot (\delta\mathbf{q} - \delta t\;\dot{\mathbf{q}}) - \delta\Lambda\,.$$

Integrando (**??**), usando o fato de que J é um integral primeira e aplicando a expressão acima para $\delta_0 \mathbf{q}$, encontramos

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot \delta_0 \mathbf{q} = \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot [\epsilon (\boldsymbol{\phi} - \dot{\mathbf{q}}) + \dot{\epsilon} \boldsymbol{\psi}] = 0$$

Integrando por partes o segundo termos entre colchetes obtemos

$$\int_{t_1}^{t_2} \epsilon \left[\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot (\boldsymbol{\phi} - \dot{\mathbf{q}}) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\psi} \right) \right] dt + \epsilon \frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\psi} \Big|_{t_1}^{t_2} = 0$$

Como as funções ϵ são arbitrárias, podemos escolhê-las de tal maneira que elas se anulem nos pontos extremos, ou seja, tais que $\epsilon(t_1) = \epsilon(t_2) = 0$. Ora, mas com tais funções arbitrárias, temos necessariamente que

$$\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot (\boldsymbol{\phi} - \dot{\mathbf{q}}) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\psi} \right) = 0 \tag{6.26}$$

Observe que estas identidades devem valer independentemente de o sistema estar numa trajetória estacionária. Estas relações são conhecidas como *relações de Bianchi generalizadas*, e indicam que as equações de Euler-Lagrange não são independentes entre si.

Consideremos agora as derivadas de Lie escritas explícitamente em termos das acelerações generalizadas,

$$\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{q} \partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \ddot{\mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial t \partial \dot{\mathbf{q}}}$$

Substituindo isto na expressão (**??**) temos

$$\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot (\boldsymbol{\phi} - \dot{\mathbf{q}}) - \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{q} \partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial t \partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \ddot{\mathbf{q}} \right) \cdot \boldsymbol{\psi} \right] = 0 \tag{6.27}$$

Na expressão acima, apenas o último termo deve conter derivadas terceiras de $\mathbf{q}$, e essas derivadas aparecem linearmente, conseqüentemente esse termo deve se anular de maneira totalmente independente dos demais. Assim, devemos ter

$$\dddot{\mathbf{q}}^T \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$$

Entretanto, isto deve ser válido para uma "trajetória" $\mathbf{q}$ *qualquer*, de modo que devemos ter então

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$$

Para que esse sistema tenha soluções não-triviais, é necessário que

$$\det \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \right) = 0 \tag{6.28}$$

o que implica que os $\boldsymbol{\psi}$ devem ser os autovetores da matriz Hessiana do nosso sistema físico. Porém, o mais interessante disso tudo é que *mesmo que* $\boldsymbol{\psi} \equiv \mathbf{0}$, ainda assim teremos que a condição (**??**) deve ser satisfeita. Veja, se $\boldsymbol{\psi} \equiv \mathbf{0}$, então a expressão (**??**) se reduz a

$$\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot (\boldsymbol{\phi} - \dot{\mathbf{q}}) = -\frac{\delta L}{\delta \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{q} \partial \dot{\mathbf{q}}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \frac{\partial^2 L}{\partial t \partial \dot{\mathbf{q}}} - \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \ddot{\mathbf{q}} \right) \cdot \boldsymbol{\phi} = 0$$

Apenas o último termo da identidade acima contém derivadas de segunda ordem em $\mathbf{q}$, e novamente a sua dependência nessas derivadas é linear, portanto esse termo deve se anular de maneira independente, e temos que

$$\ddot{\mathbf{q}}^T \cdot \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \boldsymbol{\phi} = 0$$

Como essa expressão deve ser válida para qualquer um dos operadores coordenada generalizada, temos necessariamente que

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\mathbf{q}}^2} \cdot \boldsymbol{\phi} = 0$$

o que implica novamente numa condição da forma (**??**) para que não tenhamos apenas a solução trivial. Observe que, neste último caso, uma solução trivial implica também numa transformação que leva numa variação nula, ou seja, uma transformação de identidade sem nenhum significado físico.

Os resultados acima mostram que o fato de uma ação ser invariante, ou de maneira equivalente, de a Lagrangeana ser quasi-invariante sob transformações de gauge locais, implica na singularidade da matriz Hessiana, ou seja, na existência de vínculos *dinâmicos* no sistema físico. Isso nos diz então que *sistemas invariantes de gauge são necessariamente sistemas singulares.* Contudo, é importante ressaltar que a inversa dessa afirmação não é verdadeira, pois existem sistemas com vínculos cuja Lagrangeana não é quasi-invariante sob transformações de gauge locais.

6.5 Mais Algumas Observações

Vimos acima que há uma escolha implícita de gauge na construção das relações de comutação para o campo eletromagnético livre utilizando-se o método variacional de Schwinger. A implementação da condição de integrabilidade (**??**) e da transformação de gauge (**??**), em conjunto, equivalem à imposição das condições de Coulomb e do Gauge Temporal, ou seja, ao estabelecimento do gauge de radiação [**?**]. Esta fixação implícita visa, em última análise, separar o setor dos estados físicos da teoria, e ocorre também no método de Dirac [**?**].

Por outro lado, pudemos flexibilizar esta escolha particular de gauge através do método de campo auxiliar. A união entre os formalismos de B-field, Schwinger e Palatini, mostrou-se bastante frutífera uma vez que uma forma equivalente à condição de Lorentz da Eletrodinâmica Clássica pode ser encontrada como representando uma identidade entre operadores (**??**), o que implica numa equação de onda para os valores esperados do operador A^{ν} nos estados físicos [**?**]. Vimos também que as equações de movimento, assim como as relações de comutação para os operadores de campo, podem ser obtidas, *covariantemente*, a partir de um único princípio variacional, sendo portanto automaticamente autoconsistentes entre si

Além disso, o campo eletromagnético livre pode ser obtido a partir do limite de massa nula da sua generalização natural, que é o campo vetorial massivo de Proca, e todos os resultados da eletrodinâmica a "gauge livre", podem também ser obtidos a partir do limite $B \to 0$.

Outra vantagem é que este procedimento se generaliza de maneira natural pela inclusão de termos de fonte e/ou campos espinoriais no operador densidade lagrangeana, de forma a se construir a teoria da Eletrodinâmica Quântica num gauge covariante linear geral.

Existem ainda outras formas de se contornar o problema da fixação de gauge fazendo-se análises diferentes dos vínculos de uma teoria. Entre esses outros métodos de análise[7] podemos citar o formalismo de Hamilton-Jacobi [**?**], o de integração funcional [**?**], o de Dirac [**?**], o de Fadeev-Jackiw [**?**, **?**] e o simplético [**?**, **?**], não obstante, como comentado acima, o formalismo de B-field apresenta algumas vantagens.

Por fim, seguindo uma argumentação apresentada por Bergmann [**?**], mostramos de maneira direta a existência de uma relação entre a simetria de gauge de um sistema e a sua natureza singular.

Restam ainda mais algumas observações a serem feitas sobre o formalismo de campo auxiliar e a simetria de gauge de um sistema, mas deixaremos isso para os comentários finais. A seguir, vamos voltar ao estudo da Álgebra de Medida e tentar estabelecer, de maneira mais clara, como podemos construir uma teoria quântica quaterniônica a partir daí.

[7] Podemos encontrar descrições mais ou menos detalhadas de quase todos esses métodos nas referências [**?**, **?**].

7. Mecânica Quântica Quaterniônica

> "Não se pode exigir do físico que seja filósofo, embora dele possamos esperar que tenha suficiente formação filosófica para ser capaz de diferenciar-se radicalmente do mundo e associar-se de novo a ele numa esfera superior. Deve elaborar um método adequado à intuição, evitando transformá-la em conceito e o conceito em palavras, agindo ou procedendo como se tais palavras fossem objetos; deve ainda ter conhecimento dos esforços do filósofo, a fim de elevar os fenômenos até a esfera filosófica."
>
> Goethe, A Doutrina das Cores, §716.

Birkhoff e von Neumann [**?**] mostraram em 1936 a existência de um cálculo proposicional que fundamenta a Mecânica Quântica (MQ) com base nos resultados a serem extraídos de *medidas*. Esse cálculo proposicional não supõe nenhum sistema numérico ou espaço vetorial particular, e contém características fundamentais da MQ, tais como relações de incerteza e propriedades de complementariedade. De fato, esse autores mostraram que são possíveis três diferentes *realizações* desse cálculo proposicional, correspondendo aos sistemas de números reais, complexos e quaterniônicos. Octônios e demais extensões de dimensão superior dos números complexos, forma descartadas em função de não admitirem uma lei de conservação da corrente de probabilidade [**?**].

Podemos então nos perguntar: qual dessas três representações da "mecânica quântica geral", de Birkhoff e von Neumann, é a mais adequada para a descrição do mundo físico real? Nesta pergunta encontra-se então implícita a hipótese de que, assim como o cálculo proposicional (ou no nosso caso a Álgebra de Medida), o sistema numérico de uma determinada teoria reflete parte da informação empírica que temos sobre a Natureza. Enquanto as diferenças entre as mecânicas quânticas nos domínios real e complexos são relativamente simples e bem conhecidas [**?**], a mecânica quântica quaterniônica tem diversas características novas, o que a torna uma teoria muito mais rica e complexa. Pode parecer então supreendente, à primeira vista, que uma possibilidade tão promissora seja tão pouco conhecida da comunidade geral de físicos. Na verdade, exitem fortes razões por trás disso. O problema de como escrever a equação de Schrödinger no caso quaterniônico, por exemplo, não é nada trivial, devido ao aparecimento da unidade imaginária na sua versão complexa. Além disso, a representação de sistemas compostos por um produto direto torna-se mais difícil devido à não-comutatividade das funções de onda no domínio dos quatérnions.

Neste capítulo pretendemos implementar uma formulação quaterniônica da Álgebra de Medida de Schwinger, e a teoria quântica resultante. Exploraremos sempre a analogia com o teoria quântica usual e tentaremos sempre ressaltar quais peculiaridades emergem da não comutatividade intrínseca do anel quaterniônico. As principais referências que nos serviram de base neste assunto foram a série de artigos originais de Finkelstein, Jauch, Schiminovich e Speiser, [**?**, **?**, **?**].

Será de suma importância prática para os cálculos que seguem, o reconhecimento de que os símbolos de medida funcionam como projetores entre diferentes estados possíveis de dois conjuntos completos de observáveis. Assim, adotaremos agora, preferencialmente, uma notação que destaque estas características, ou seja,

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

$$\hat{M}_a^b \hat{M}_c^d = |a\rangle \langle b| \, |c\rangle \langle d| = \hat{M}_a^d \left(\langle b| \, |c\rangle \right)$$

Vemos portanto, que a forma mais geral em que um símbolo de medida pode aparecer é

$$\hat{M}_a^b(q) = |a\rangle\, q\, \langle b|$$

onde $q \in \mathbb{Q}$ é um quatérnion qualquer. *Quatérnions* são definidos por

$$q = q_0 + q_1 e_1 + q_2 e_2 + q_3 e_3\,,\; e_i e_j = -\delta_{ij} + \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} e_k\,,\; q_n \in \mathbb{R} \forall n \in \{0, ..., 3\}$$

No caso de $q = 1$ denotamos simplesmente $\hat{M}_a^b(1) = \hat{M}_a^b$. A notação acima é útil principalmente por manter separados de maneira explícita as partes do símbolo de medida que correspondem ao espaço de Hilbert dos estados físicos e o seu dual, ou, na linguagem de segunda quantização, fazer alusão direta aos processos de aniquilação (direita) e criação (esquerda) de partículas (ou flutuações do campo) envolvidas no ato de medida. É importante ressaltar que, uma vez estando definidos sobre um anel não-comutativo, os produtos *por escalares* nesses espaços vetoriais só têm sentido num ordenamento *bem definido*, que será adotado como sendo à direita para os kets $(|a\rangle\, q,\, \forall\, |a\rangle \in \mathcal{H}(\mathbb{Q})\,,\, \forall q \in \mathbb{Q})$ e à esquerda para os bras $\left(q\,\langle b|\,,\, \forall\, \langle b| \in \mathcal{H}^{\dagger}(\mathbb{Q})\,,\, \forall q \in \mathbb{Q}\right)$, onde $\mathcal{H}(\mathbb{Q})$ é o espaço de Hilbert dos autoestados de um determinado conjunto completo de observáveis.

Quatérnions são uma realização particular de uma Álgebra de Clifford. Uma ótima introdução a este assunto encontra-se na referência [**?**], onde podemos encontrar também diversos teoremas úteis sobre quatérnions. As primeiras idéias sobre a construção da Álgebra de Medida de Schwinger sobre um anel quaterniônico podem ser encontradas em [**?**].

7.1 Funções de Transformação

A lei fundamental de transformação dos símbolos de medida não é, em essência, alterada pelo uso de anel não-comutativo. De fato, com o uso da notação introduzida acima, a equação (**??**) se torna

$$\hat{M}_c^d = |c\rangle\langle d| = \sum_{a,b} \hat{M}_a \hat{M}_c^d \hat{M}_b = \sum_{a,b} |a\rangle\langle a|\,|c\rangle\langle d|\,|b\rangle\langle b| \tag{7.1}$$

De fato, preservando cuidadosamente a composição de produtos, podemos interpretar a relação acima como um duplo mapeamento dos vetores $|c\rangle$ e $\langle d|$ nas combinação lineares $\sum_a |a\rangle\langle a|\,|c\rangle$ e $\sum_b \langle d|\,|b\rangle\langle b|$. Com isto, temos que a lei de composição das funções de transformação também não se altera no anel quaterniônico,

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

de modo que obtemos novamente as relações[1]

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

Entretanto, uma vez que quatérnions, em geral, não comutam, a preservação dos graus de liberdade impõe uma restrição a ser cumprida pela função de transformação,

$$\sum_a^{N'} \sum_b^{N} \langle a|\,|b\rangle\langle b|\,|a\rangle = \sum_b^{N} \sum_a^{N'} \langle b|\,|a\rangle\langle a|\,|b\rangle \tag{7.2}$$

$$\left\langle a^1\right|\left|b^1\right\rangle\left\langle b^1\right|\left|a^1\right\rangle + \left\langle a^1\right|\left|b^2\right\rangle\left\langle b^2\right|\left|a^1\right\rangle + ... + \left\langle a^1\right|\left|b^N\right\rangle\left\langle b^N\right|\left|a^1\right\rangle +$$
$$+ \left\langle a^2\right|\left|b^1\right\rangle\left\langle b^1\right|\left|a^2\right\rangle + \left\langle a^2\right|\left|b^2\right\rangle\left\langle b^2\right|\left|a^2\right\rangle + ... + \left\langle a^2\right|\left|b^N\right\rangle\left\langle b^N\right|\left|a^2\right\rangle + ... + \left\langle a^{N'}\right|\left|b^N\right\rangle\left\langle b^N\right|\left|a^{N'}\right\rangle =$$
$$= \left\langle b^1\right|\left|a^1\right\rangle\left\langle a^1\right|\left|b^1\right\rangle + \left\langle b^1\right|\left|a^2\right\rangle\left\langle a^2\right|\left|b^1\right\rangle + ... + \left\langle b^1\right|\left|a^{N'}\right\rangle\left\langle a^{N'}\right|\left|b^1\right\rangle +$$
$$+ \left\langle b^2\right|\left|a^1\right\rangle\left\langle a^1\right|\left|b^2\right\rangle + \left\langle b^2\right|\left|a^2\right\rangle\left\langle a^2\right|\left|b^2\right\rangle + ... + \left\langle b^2\right|\left|a^{N'}\right\rangle\left\langle a^{N'}\right|\left|b^2\right\rangle + ... + \left\langle b^N\right|\left|a^{N'}\right\rangle\left\langle a^{N'}\right|\left|b^N\right\rangle$$

o que não implica necessariamente que devemos ter $\langle a|\,|b\rangle\langle b|\,|a\rangle = \langle b|\,|a\rangle\langle a|\,|b\rangle$ para dois quatérnions quaisquer. Assim, a relação (**??**) deve representar, de fato, uma restrição, não obstante uma interpretação dessa restrição seja extremamente difícil de se realizar.

[1] Compare com a seção 1.5.

7.2 O Traço e a Interpretação Estatística

Uma das propriedades mais importantes da Álgebra de Medida que é alterada pela não-comutatividade dos escalares, é a definição de traço. Como vimos, há três tipos de traço que podem ser associados a cada operador, denominados traços à *esquerda, direita* e *central*

$$Tr_A \hat{M}_a^b(q) \equiv q \langle b| |a\rangle$$

$$Tr_B \hat{M}_a^b(q) \equiv \langle b| |a\rangle q$$

$$Tr_C \hat{M}_a^b(q) \equiv \sum_{\in} \langle e| |a\rangle q \langle b| |e\rangle$$

Esta indefinição acerca do funcional traço dificulta um pouco a justificação do uso do traço em uma interpretação estatística, uma vez que não possuimos uma lei de invariância para o traço. Não obstante, a invariância da lei de multiplicação de símbolos de medida (**??**, **??**) ainda é preservada, quando devidamente interpretada com respeito à ordenação de seus fatores,

$$\hat{M}_a^b = |a\rangle \langle b| \to |a\rangle \lambda_a^{-1} \lambda_b \langle b| = \hat{M}_a^b \left(\lambda_a^{-1} \lambda_b\right) \tag{7.3a}$$

$$\langle a| |b\rangle \to \lambda_a \langle a| |b\rangle \lambda_b^{-1} \tag{7.3b}$$

onde os quatérnions λ_a, λ_b são não nulos. Os símbolos de medida elementares $\hat{M}_a$ e as funções de transformação $\langle a| |a'\rangle$, por sua vez, não são alterados. Em vista desta arbitrariedade, uma função de transformação $\langle a| |b\rangle$ não pode, em si, possuir uma interpretação física direta, mas pode figurar em alguma combinação que seja invariante sob a substituição (**??**).

A base apropriada para a interpretação estatística da função de transformação deve então ser inferida considerando-se a seqüência de medidas seletivas elementares $\hat{M}_b \hat{M}_a \hat{M}_b$, que difere de $\hat{M}_b$ em virtude do distúrbio causado pela medida intermediária do atributo A. Da mesma forma que no caso complexo, somente uma fração dos sistemas selecionados pela medida inicial do atributo B é transmitida através do aparato completo. Dessa forma, temos a equação simbólica

$$\hat{M}_b \hat{M}_a \hat{M}_b = \hat{M}_b \left(p \left(a|b \right) \right)$$

onde o número

$$p \left(a|b \right) = \langle b| \left|a\right\rangle \langle a| \left|b\right\rangle \tag{7.4}$$

deve ser invariante sob a transfomação (**??**). Isto implica que devemos ter

$$\lambda_b \langle b| \left|a\right\rangle \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1} = \langle b| \left|a\right\rangle \langle a| \left|b\right\rangle$$

Agora, para que $p\left(a|b\right)$ seja adequadamente interpretada como uma medida de probabilidade, devemos ter $p\left(a|b\right) \geqslant 0$. Além disso, a arbitrariedade da convenção de leitura dos símbolos de medida exige que essa probabilidade deva ser *simétrica.* A forma mais simples de cumprir todas essas exigências no caso quaterniônico é se tivermos que $Q = \lambda_b \langle b| \left|a\right\rangle$ e $\bar{Q} = \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1}$ formem um par de quatérnions conjugados. De fato, neste caso temos que

$$Q\bar{Q} = \bar{Q}Q = |Q|^2 \geqslant 0$$

$$\lambda_b \langle b| \left|a\right\rangle \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1} = \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1} \lambda_b \langle b| \left|a\right\rangle = \langle a| \left|b\right\rangle \langle b| \left|a\right\rangle$$

Por outro lado,

$$\bar{Q} = \overline{\left(\lambda_b \langle b| \left|a\right\rangle\right)} = \overline{\langle b| \left|a\right\rangle} \bar{\lambda}_b = \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1}$$

Temos então o seguinte sistema de equações:

$$\langle b| \left|a\right\rangle \langle a| \left|b\right\rangle = \langle a| \left|b\right\rangle \langle b| \left|a\right\rangle \geqslant 0$$

$$\overline{\langle b| \left|a\right\rangle} \bar{\lambda}_b = \langle a| \left|b\right\rangle \lambda_b^{-1}$$

Novamente, a maneira mais simples de resolver esse sistema é tomarmos

$$\bar{\lambda}_b = \lambda_b^{-1}$$

$$\overline{\langle b| \left|a\right\rangle} = \langle a| \left|b\right\rangle$$

Com esta escolha, podemos recuperar todas as boas qualidades de uma medida de probabilidade para $p\,(a|b)^2$.

Representando λ_a na forma exponencial [?], vemos que a primeira das condições acima implica em

$$\lambda_a = Ae^{e_\lambda \varphi(a)} \to Ae^{-e_\lambda \varphi(a)} = A^{-1}e^{-e_\lambda \varphi(a)} \to A^2 = 1 \to A = \pm 1$$

onde

$$\begin{aligned} |A| = |\lambda_a| &= \left[\left(\lambda_a^0\right)^2 + \left(\lambda_a^1\right)^2 + \left(\lambda_a^2\right)^2 + \left(\lambda_a^3\right)^2\right]^{1/2} \\ e_\lambda &= \frac{\lambda_a^1 e_1 + \lambda_a^2 e_2 + \lambda_a^3 e_3}{\left[(\lambda_a^1)^2 + (\lambda_a^2)^2 + (\lambda_a^3)^2\right]^{1/2}} \\ \varphi\,(a) &= \arctan\left(\frac{\lambda_a^0}{|\lambda_a|}\right) \qquad \varphi\,(a) \in [0, \pi] \end{aligned}$$

A escolha do sinal é arbitrária, e nenhum efeito físico pode ser distinguido pela particular escolha que fizermos aqui. Tomaremos então, por simplicidade, o sinal positivo.

Uma vez que λ_a é um número não-nulo arbitrário de norma unitária, fica claro que a sua fase $\varphi\,(a)$ pode assumir um valor real qualquer.

Assim, sendo, vemos que apesar dos problemas relativos à definição de um funcional traço adequado, nada nos impede de construir uma interpretação estatística clara para a Mecânica Quântica Quaterniônica. Com efeito, este resultado parece indicar que as raízes da interpretação estatística estão no cálculo proposicional (Álgebra de Medida) de Birkhoff e von Neumann, e não no particular sistema de números usado para construir a teoria. Falaremos um pouco mais sobre isso nos comentários finais deste capítulo.

Entretanto, vimos que também foi de suma importância para o estabelecimento da interpretação estatística o automorfismo $\langle a|\,|b\rangle \to \lambda_a \langle a|\,|b\rangle\,\lambda_b^{-1}$ do anel escalar $\mathbb{Q}$. Agora, o que significa fisicamente esta identificação? Sabemos que os elementos do

[2] As propriedade de aditividade e normalização dessas probabilidades seguem da mesma forma que no caso complexo.

anel escalar representam relações lógicas entre possíveis estados do sistema físico sob consideração. Evidentemente, é sempre possível dizer quando duas de tais relações são "a mesma coisa", para estados de sistemas físicos distintos, sem ir além dos conceitos de lógica pura[3], ou seja, sem que seja necessário utilizar os conceito de redes estruturadas introduzidos por Birkhoff e von Neumann [?]. Porém, isto nos define esse números somente a menos de automorfismos [?]. Para a Mecânica Quântica real, isto é suficiente para determinar estes números completamente [?]. No caso complexo, permanece uma ambigüidade, que se manifesta sob a existência da álgebra conjugada (vide seção ??). Em Mecância Quântica Quaterniônica, esta ambigüidade é infinitamente maior. Isto requer, então, a introdução de mais elementos de estrutura na teoria[4]. Tentaremos delinear a seguir quais são estas estruturas.

7.3 Variações Infinitesimais das Funções de Transformação

Assim como no caso complexo, podemos definir variações infinitesimais das funções de transformação de tal forma que

$$\sum_b \left[\delta \langle a| |b\rangle \left(\langle b| |c\rangle\right) + \langle a| |b\rangle \, \delta \langle b| |c\rangle\right] = \delta \langle a| |c\rangle \tag{7.5}$$

$$\delta\overline{\langle a| |b\rangle} = \delta \langle b| |a\rangle$$

Naquele caso, definíamos o arranjo de números $\delta \langle a| |b\rangle$ como representando os elementos de matriz de um operador infinitesimal,

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

[3] O papel da lógica matemática abstrata na Física, encontra-se discutido de maneira muito interessante em [?].

[4] De fato, tais observações podem ser de importância crucial para se construir a representação de sistemas de muitas partículas.

onde a constante i foi escolhida de tal forma a assegurar que o operador $\delta\hat{W}_{ab}$ seja auto-adjunto.

No caso quaterniônico temos a questão: qual constante multiplicativa deve ser escolhida? Afinal, temos *três* unidade imaginárias. No caso mais geral, podemos supor que a generalização da unidade imaginária seja então um *operador* $\hat{\imath}$, onde $i\hat{1} = \hat{\imath}$ pode ser considerado um caso particular para o corpo dos complexos, $\mathbb{C}$.

Aplicaremos então o seguinte procedimento, no caso quaterniônico definiremos

$$\delta \langle a| \, |b\rangle = \langle a| \, \hat{\imath}\delta\hat{W}_{ab} \, |b\rangle \tag{7.6}$$

onde $\hat{\imath}$ é um operador quaterniônico que tentaremos fixar posteriormente sob a exigência de que o operador $\delta\hat{W}_{ab}$ seja auto-adjunto. Com esta definição, podemos ver facilmente que a aditividade e a anti-simetria de ordenamento dos operadores infinitesimais se mantém,

$$\delta\hat{W}_{ac} = \delta\hat{W}_{ab} + \delta\hat{W}_{bc}$$

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

Por outro lado, temos que

$$\delta\overline{\langle a| \, |b\rangle} = \langle b| \, \delta\hat{W}^{\dagger}_{ab}\hat{\imath}^{\dagger} \, |a\rangle = \langle b| \, \hat{\imath}\delta\hat{W}_{ba} \, |a\rangle$$

o que nos leva à identidade operatorial,

$$\delta\hat{W}^{\dagger}_{ab}\hat{\imath}^{\dagger} + \hat{\imath}\delta\hat{W}_{ab} = \hat{0}$$

Impondo as condições

$$\delta\hat{W}_{ab} = \delta\hat{W}^{\dagger}_{ab} \tag{7.7}$$

$$\left[\hat{\imath}, \delta\hat{W}_{ab}\right] = \hat{0} \tag{7.8}$$

encontramos:

$$\hat{\imath} = -\hat{\imath}^\dagger$$

Esta última identidade pode ser interpretada como uma generalização da conjugação complexa em $\mathbb{C}$, e nos mostra que , em um certo sentido, o operador $\hat{\imath}$ comporta-se, de fato, como uma "unidade imaginária". A condição (**??**) nos assegura a realidade do espectro associado aos operadores infinitesimais. Quanto à condição (**??**), há diversas formas de satisfazê-la:

1. todo operador infinitesimal comuta com a unidade imaginária;
2. a unidade imaginária comuta com qualquer operador;
3. um operador infinitesimal comuta com qualquer outro operador.

Embora a nossa experiência com o caso complexo sugira a terceira escolha como a mais apropriada, não há porque descartar nenhum das outras duas. No trabalho original de Finkelstein, Jauch Schiminovich e Speiser [**?**], é adotado um caso particular da segunda escolha, que passa então a ser interpretada como uma regra de superseleção[5]. Por ora, iremos apenas exigir que pelo menos uma das três condições acima seja satisfeita, isto é, iremos nos ater ao caso geral da relação (**??**).

Com estas escolhas, temos que os operadores unitários infinitesimais passam a ser expressos como

$$\hat{U} = \hat{1} + \hat{G}, \qquad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} = \hat{1} - \hat{G}, \qquad \hat{G} = -\hat{G}^\dagger = \hat{\imath}\delta\hat{W}$$

As variações infinitesimais dos operadores, induzidas por esses operadores unitários são dadas por

$$\delta\hat{X} = -\left[\hat{X}, \hat{G}\right] = \left[\hat{G}, \hat{X}\right] \tag{7.9}$$

[5]Na referência [**?**], o operador unidade imaginária é denotado por $\hat{\eta}$.

Estes são todos os ingredientes que precisamos para descrever completamente os estados físicos de uma única partícula. Não abordaremos aqui o problema da representação de sistemas compostos, embora julguemos ser possível uma generalização adequada dos símbolos de medida para tal fim. Estamos prontos então para analizar quais caracteríscas *dinâmicas* são alteradas pelo uso de quatérnions.

7.4 O Princípio Variacional

Com estas considerações em mente, podemos passar para a análise da dinâmica de um sistema quântico quaterniônico. Nosso ponto de partida será, como antes, o Princípio Variacional de Schwinger, agora expresso na forma

$$\delta \langle a_{t_2}| \, |b_{t_1}\rangle = \langle a_{t_2}| \, \hat{\imath}\delta\hat{S}_{t_1,t_2} \, |b_{t_1}\rangle$$

$$\delta\hat{S}_{t_1,t_2} = \Big[\hat{\mathbf{p}}\cdot\delta\hat{\mathbf{q}} - \hat{H}\delta t\Big]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\vec{\delta}\hat{L}}{\vec{\delta}\hat{\mathbf{q}}}\cdot\Big(\delta\hat{\mathbf{q}} - \widehat{\dot{\mathbf{q}}}\delta t\Big) = \hat{G}_2 - \hat{G}_1$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\vec{\partial}\hat{L}}{\vec{\partial}\widehat{\dot{\mathbf{q}}}}, \quad \hat{H} = \hat{\mathbf{p}}\cdot\widehat{\dot{\mathbf{q}}} - \hat{L}$$

Os operadores $\hat{H}$ e $\hat{L}$ são auto-adjuntos.

7.5 Relações de Comutação e a Evolução Temporal dos Operadores

As relações de comutação ou anticomutação podem ser obtidas pelo mesmo processo utilizado no caso complexo[6] utilizando-se agora como gerador infitesimal,

$$\hat{G} = \hat{\imath}\hat{p}_r\delta\hat{q}^r$$

[6]Vide seção 4.4.

no entanto o sistema de relações funcionais resultante aqui é

$$\begin{aligned}
\delta\hat{q}^s &= -\left[\hat{q}^s,\hat{\imath}\right]\hat{p}_r\delta\hat{q}^r - \hat{\imath}\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp \hat{\imath}\hat{p}_r\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\hat{0} &= -\left[\hat{p}_s,\hat{\imath}\right]\hat{p}_r\delta\hat{q}^r - \hat{\imath}\left[\hat{p}_s,\hat{p}_r\right]_{\mp}\delta\hat{q}^r \mp \hat{\imath}\hat{p}_r\left[\hat{p}_s,\delta\hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\hat{0} &= \left[\hat{q}^s,\hat{\imath}\right]\delta\hat{p}_r\hat{q}^r + \hat{\imath}\left[\hat{q}^s,\delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm \hat{\imath}\delta\hat{p}_r\left[\hat{q}^s,\hat{q}^r\right]_{\mp} \\
\delta\hat{p}_s &= \left[\hat{p}_s,\hat{\imath}\right]\delta\hat{p}_r\hat{q}^r + \hat{\imath}\left[\hat{p}_s,\delta\hat{p}_r\right]_{\mp}\hat{q}^r \pm \hat{\imath}\delta\hat{p}_r\left[\hat{p}_s,\hat{q}^r\right]_{\mp}
\end{aligned}$$

Isto corresponde a um sistema de equações entre os operadores de variação infinitesimal, cuja solução formal é desconhecida. Uma das possíveis soluções, é escolhermos as variações infinitesmais de forma que

$$\begin{aligned}
\left[\hat{q}^s,\delta\hat{q}^r\right]_{\mp} &= \left[\hat{p}_s,\delta\hat{q}^r\right]_{\mp} = \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\delta\hat{p}_r\right]_{\mp} &= \left[\hat{p}_s,\delta\hat{p}_r\right]_{\mp} = \hat{0}
\end{aligned}$$

Entretanto, vemos que os termos envolvendo o (anti)comutador de $\hat{\imath}$ ainda permanecem, o que nos daria um "desvio" das relações de comutação canônicas. Este é o motivo pelo qual na referência [**?**] adota-se a regra de superseleção

$$\left[\hat{q}^s,\hat{\imath}\right] = \left[\hat{p}_s,\hat{\imath}\right] = \hat{0} \tag{7.10}$$

que nos leva às relações

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}_s,\hat{p}_r\right]_{\mp} &= \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\hat{q}^r\right]_{\mp} &= \hat{0} \\
-\hat{\imath}\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_{\mp} &= \delta^s_r
\end{aligned}$$

De forma a obter uma expressão mais parecida com a do caso complexo, vamos impor a condição de que o operador anti-Hermitiano $\hat{\imath}$ seja também *unitário*. Assim,

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}_s,\hat{p}_r\right]_{\mp} &= \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\hat{q}^r\right]_{\mp} &= \hat{0} \\
\left[\hat{q}^s,\hat{p}_r\right]_{\mp} &= \hat{\imath}\delta^s_r
\end{aligned}$$

Isto nos mostra que, para que possamos obter relações de comutação canônicas entre os operadores $\hat{q}$ e $\hat{p}$, precisamos exigir que *ambas* as condições 2 e 3 da seção **??** sejam satisfeitas *simultâneamente*[7].

A equação de movimento para os operadores da teoria também pode ser obtida a partir do Princípio Variacional realizando-se variações puramente no parâmetro temporal,

$$\frac{\vec{d}\hat{A}}{\vec{d}t} = \hat{\imath}\left[\hat{A}, \hat{H}\right] + \frac{\vec{\partial}\hat{A}}{\vec{\partial}t}$$

7.5.1 Aplicação: O Oscilador Harmônico Quaterniônico

Suponha que o oscilador quaterniônico seja descrito pelo operador Lagrangeano[8]

$$L = \frac{1}{2}\left(\dot{q}^{\dagger}\dot{q} - \omega^2 q^{\dagger}q\right), \quad q = \sum_{\alpha=0}^{3} q^{\alpha}e_{\alpha}$$

Fazendo variações funcionais infintesimais desse operador, encontramos

$$\begin{aligned}
\delta L &= \frac{1}{2}\left(\left(\delta\dot{q}^{\dagger}\right)\dot{q} + \left(\dot{q}^{\dagger}\right)\delta\dot{q} - \omega^2\left[\left(\delta q^{\dagger}\right)q + q^{\dagger}\delta q\right]\right) = \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{d\left(\delta q^{\dagger}\right)}{dt}\dot{q} + \left(\dot{q}^{\dagger}\right)\frac{d\delta q}{dt} - \omega^2\left[\left(\delta q^{\dagger}\right)q + q^{\dagger}\delta q\right]\right) = \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{d\left(\delta q^{\dagger}\dot{q}\right)}{dt} - \delta q^{\dagger}\ddot{q} + \frac{d\left(\dot{q}^{\dagger}\delta q\right)}{dt} - \ddot{q}^{\dagger}\delta q - \omega^2\left[\left(\delta q^{\dagger}\right)q + q^{\dagger}\delta q\right]\right) = \\
&= \left(\frac{d\left(\delta q^{\dagger}\dot{q} + \dot{q}^{\dagger}\delta q\right)}{dt} - \left[\delta q^{\dagger}\left(\ddot{q} + \omega^2 q\right) + \left(\ddot{q}^{\dagger} + \omega^2 q^{\dagger}\right)\delta q\right]\right)
\end{aligned}$$

Temos então que o gerador das variações funcionais nos operadores fundamentais

[7] É interessante notar que essa exigência dupla nos assegura também que condição 1 seja cumprida. Portanto, no que segue, estaremos supondo sempre que todas as três condições são satisfeitas.

[8] Para simplificar a notação, estaremos omitindo o símbolo ^ dos operadores coordenada, momento e velocidade. Conservaremos seu uso na unidade imaginária apenas para destacar o seu caráter *operatorial.*

pode ser escrito como

$$G = \frac{1}{2}\hat{\iota}\left(\delta q^{\dagger}\dot{q} + \dot{q}^{\dagger}\delta q\right)$$
$$\bar{G} = -\frac{1}{2}\hat{\iota}\left(q^{\dagger}\delta\dot{q} + \delta\dot{q}^{\dagger}q\right)$$

cujas variações induzidas são[9]

$$\frac{1}{2}\delta q^{\beta} = \frac{1}{2}\left(\left[q^{\beta}, \hat{\iota}\delta q^{\alpha\dagger}\dot{q}_{\alpha}\right] + \left[q^{\beta}, \hat{\iota}\dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\delta q^{\alpha}\right]\right) =$$
$$= -\frac{1}{2}\left(\hat{\iota}\delta q^{\alpha\dagger}\left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}\right] + \hat{\iota}\left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right]\delta q^{\alpha}\right)$$

$$\delta q^{\beta} = -\hat{\iota}\left(\delta q^{\alpha\dagger}\left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}\right] + \left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right]\delta q^{\alpha}\right)$$
$$\delta q^{\beta\dagger} = -\hat{\iota}\left(\delta q^{\alpha\dagger}\left[q^{\beta\dagger}, \dot{q}_{\alpha}\right] + \left[q^{\beta\dagger}, \dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right]\delta q^{\alpha}\right)$$
$$\delta\dot{q}^{\beta} = \hat{\iota}\left(\delta\dot{q}_{\alpha}\left[\dot{q}^{\beta}, q^{\alpha\dagger}\right] + \left[\dot{q}^{\beta}, q^{\alpha}\right]\delta\dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right)$$
$$\delta\dot{q}^{\beta\dagger} = \hat{\iota}\left(\delta\dot{q}_{\alpha}\left[\dot{q}^{\beta\dagger}, q^{\alpha\dagger}\right] + \left[\dot{q}^{\beta\dagger}, q^{\alpha}\right]\delta\dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right)$$

Impondo a condição de que os operadores q^{β}, $\dot{q}^{\beta}$, $\dot{q}^{\beta\dagger}$ e $q^{\beta\dagger}$ sejam cinematicamente independentes entre si, encontramos diretamente as relações de comutação canônicas

$$\left[q^{\beta\dagger}, \dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right] = \left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}\right] = 0$$
$$\left[q^{\beta\dagger}, \dot{q}_{\alpha}\right] = \left[q^{\beta}, \dot{q}_{\alpha}^{\dagger}\right] = \hat{\iota}\delta_{\alpha}^{\beta}$$

7.6 Equação de Schrödinger e a Representação das Coordenadas

Variando apenas o estado final,

$$\delta\left|b_{t_1}\right\rangle = 0 \rightarrow \delta\hat{\mathbf{q}}\left(t_1\right) = \hat{\mathbf{0}} \quad \delta t_1 = 0$$
$$\delta\left\langle a_{t_2}\right| \neq 0 \rightarrow \delta\hat{\mathbf{q}}\left(t_2\right) \neq \hat{\mathbf{0}} \quad \delta t_2 \neq 0$$

[9]A disposição dos índices acima, ou abaixo de qualquer operador é absolutamente arbitrária aqui, uma vez que estamos lidando com o espaço cartesiano ordinário cuja métrica é trivial.

encontramos

$$\delta\left(\langle a_{t_2}|\,|b_{t_1}\rangle\right) = \langle a_{t_2}|\,\hat{\imath}\left(\hat{\mathbf{p}}_2\cdot\delta\hat{\mathbf{q}}_2 - \hat{H}\delta t_2\right)|b_{t_1}\rangle$$

Se agora identificarmos a descrição a como sendo a descrição das coordenadas, i. e., a descrição na qual os operadores $\hat{\mathbf{q}}$ são diagonais, e o estado $|b_{t_1}\rangle$ como sendo um estado arbitrário $|\Psi\rangle$, segue das relações de comutação deduzidas anteriormente que

$$\begin{aligned}\delta\left(\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle\right) &= \langle q_{t_2}|\,\delta\hat{\mathbf{q}}_2\cdot\hat{\mathbf{p}}_2\hat{\imath}\,|\Psi\rangle - \langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\hat{H}\delta t_2\,|\Psi\rangle = \\ &= \delta\mathbf{q}_2\cdot\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle - \delta t_2\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\hat{H}\,|\Psi\rangle\end{aligned}$$

Entretanto,

$$\delta\left(\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle\right) = \delta\mathbf{q}_2\cdot\frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial\mathbf{q}_2} + \delta t_2\frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial t_2}$$

de modo que

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial\mathbf{q}_2} &= \langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle \\ \frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial t_2} &= -\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\hat{H}\,|\Psi\rangle\end{aligned}$$

Inserindo-se a relação de completeza para os auto-estados das coordenadas nestas duas expressões, encontramos

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial\mathbf{q}_2} &= \langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\,|\bar{q}_{t_2}\rangle\int d\bar{q}\,\langle\bar{q}_{t_2}|\,\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle = \int d\bar{q}\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\,|\bar{q}_{t_2}\rangle\,\langle\bar{q}_{t_2}|\,\hat{\mathbf{p}}_2\,|\Psi\rangle \\ \frac{\partial\langle q_{t_2}|\,|\Psi\rangle}{\partial t_2} &= -\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\,|\bar{q}_{t_2}\rangle\int d\bar{q}\,\langle\bar{q}_{t_2}|\,\hat{H}\,|\Psi\rangle = -\int d\bar{q}\,\langle q_{t_2}|\,\hat{\imath}\,|\bar{q}_{t_2}\rangle\,\langle\bar{q}_{t_2}|\,\hat{H}\,|\Psi\rangle\end{aligned}$$

A primeira destas equações[10] estabelece a representação do operador momento na base das coordenadas, caso o espectro do operador $\hat{\imath}$ seja conhecido nesta base, enquanto que a segunda é a *equação de Schrödinger*.

[10] Observe que na última das passagens acima fizemos uso explícito do fato de que o espectro das coordenadas deve ser *real*.

Se fizermos então a hipótese simplificadora de que o operador assume sempre o mesmo valor em qualquer ponto do espaço e em qualquer instante de tempo, encontramos

$$\frac{\partial \langle q_{t_2}| |\Psi\rangle}{\partial \mathbf{q}_2} = \iota \langle q_{t_2}| \hat{\mathbf{p}}_2 |\Psi\rangle \tag{7.11a}$$

$$\frac{\partial \langle q_{t_2}| |\Psi\rangle}{\partial t_2} = -\iota \langle q_{t_2}| \hat{H} |\Psi\rangle \tag{7.11b}$$

onde ι representa o valor esperado do operador $\hat{\iota}$. De fato, se analisarmos com mais cuidado, vemos que esta última hipótese leva-nos a concluir que o *operador* $\hat{\iota}$ é, com efeito, um quatérnion imaginário puro, constante, ou seja, que não depende do ponto do espaço-tempo, de norma unitária. E mais ainda, isto significa, em particular, que quatérnions à *direita* de bras ($\langle\Psi| q$), ou à *esquerda* de kets ($q |\Psi\rangle$) podem ser considerados como operadores agindo sobre esses espaços vetoriais. A forma mais simples de se ver isso é empregando a representação simplética dos quatérnions. Nas referências [?, ?] pode-se encontrar uma descrição mais detalhada acerca desta curiosa propriedade do espaço de Hilbert quaterniônico.

7.7 Comentários

A Mecânica Quântica Quaterniônica, tal como construída aqui, assemelha-se muito (ao menos na *forma*) à Mecânica Quântica Complexa, entretanto há diversos aspectos que ainda continuam em aberto. Esperamos que a construção acima tenha deixado claro quais os diferentes tipos de generalização são possíveis e os diferentes preços cobrados por essas generalizações.

Em particular, vale destacar que, apesar das dificuldades associadas com a construção de um funcional linear entre operadores e valores na álgebra dos quatérnions, ainda podemos associar uma interpretação estatística, com um sentido bem definido, à Mecânica Quântica Quaterniônica. Os elementos indispensáveis para esta construção foram: a não-compatibilidade (não-comutatividade) de medidas sucessivas, em geral, que nos forneceu a lei fundamental de multiplicação dos símbolos de medida, e o automorfismo $\langle a| \, |b\rangle \rightarrow \lambda_a \, \langle a| \, |b\rangle \, \lambda_b^{-1}$ do anel escalar da teoria. Assim, a princípio, qualquer teoria com estas características básicas poderia ter também uma interpretação estatística. Não obstante, para que esta interpretação seja satisfatória, algumas outras propriedades, não listadas acima, devem ser satisfeitas pela medida de probabilidade $p\,(a|b)$, tal como a conservação da sua corrente de probabilidade associada para um sistema fechado. De fato, esta é a característica essencial que Adler [**?**] usa para provar a não-extensibilidade da Mecância Quântica para outros hipercomplexos de dimensão superior, tais como os octônios.

Gostaríamos ainda de ressaltar que há diversos problemas que não foram abordados aqui, mas que se encontram presentes nas deduções acima, como o efeito das regras de superseleção (**??**) sobre as representações explícitas dos operadores $\hat{p}$ e $\hat{q}$, ou os efeitos físicos dos novos graus de liberdade quaterniônicos.

8. Comentários Finais

> "Já que uma dedução como a presente tem de ser propriamente legitimada perante a intuição do investigador, pedimos a todos que se familiarizem, não superficialmente, mas a fundo, com o que foi exposto até aqui. Signos arbitrários, letras e o que quer que seja não substituem o fenômeno. Não se trata aqui de transmitir fórmulas retóricas, que podem ser repetidas centenas de vezes sem que se reflita ou sem que levem à reflexão. Ao contrário, aqui se trata propriamente de fenômenos que devem se tornar à visão do corpo e do espírito, a fim de se poder reconstruir com clareza, para si e para outros, sua origem e desenvolvimento."
>
> Goehte, A Doutrina das Cores, §242.

Faremos a seguir alguns comentários finais acerca de tudo que foi discutido até este ponto, com o intuito de destacar pontos importantes e introduzir outros que não foram contemplados no corpo principal.

Começaremos por destacar mais alguns pontos importantes da Mecânica Quântica Quaterniônica. Apesar de não termos tratado aqui, explícitamente, de sistemas compostos (i. e., sistemas de muitas partículas) é possível adiantar algumas de suas características que devem ser decorrentes da não-comutatividade do produto entre quatérnions. Sabemos que na física clássica não existem relações de fase a serem consideradas entre subsistemas de um sistema maior (partículas não interagentes), ao somarmos ou multiplicarmos (através de um produto cartesiano) os seus espaços de fase. Em Mecânica Quantica Complexa há relações de fase entre estados que são importantes quando procuramos somar seus espaços de estado, mas não quando compomos produtos (neste caso, produtos tensoriais, que possuem um sentido mais geral que o produto cartesiano, vide apêndice B). Em Mecânica Quântica Quaterniônica, essas relações de fase são importantes tanto quando somamos, quanto quando tentarmos compor um produto de espaços.

Esta nova característica da Mecânica Quântica Quaterniônica pode ser expressa de outra maneira em termos de complementariedade. Na física clássica, não existem relações de complementariedade, todas as medidas podem ser feitas, em princípio, com precisão infinita. No caso das mecânicas quânticas real e complexa, existem relações de complementariedade entre propriedade físicas de um mesmo sistema, mas não entre propriedades de sistemas diferentes. Em Mecânica Quântica Quaterniônica, existe uma complentariedade entre algumas propriedades de quaisquer sistemas físicos. Isto se deve, em essência, ao fator de fase $e^{\varphi(a)}$ que não se compõe aditivamente quando multiplicamos quatérnions, e também não comuta com outros quatérnions, conforme vimos na seção **??**.. Não há, portanto, nenhum maneira razoável de se formar sistemas compostos, tal que, todos os observáveis associados com um desses sistemas, comute com todos os observáveis associados com os outros sistemas. Este deve ser, com efeito, o maior empecilho para a descrição de sistemas compostos.

É importante destacar ainda que, apesar da noção do espaço de Hilbert quaterniônico ter ficado um tanto vaga aqui, é possível desenvolver os conceitos da Geometria de Estados de Schwinger para o anel dos quatérnions, de onde a idéia e as propriedades desse espaço vetorial emergem de maneira natural. Não implementamos este tipo de estudo aqui apenas por uma questão de espaço e de conveniência, uma vez que nos interessava investigar também os aspectos dinâmicos da teoria quaterniônica, e não apenas aqueles cinemáticos. Para o leitor interessado na teoria espectral do espaço de Hilbert quaterniônico, recomendamos a leitura da referência [**?**], onde as principais idéias e teoremas são introduzidas, com uma explicação bastante didática de como se implementam os cálculos num espaço vetorial de escalares em $\mathbb{Q}$.

Com respeito à Mecânica Quântica Quaterniônica de uma única partícula, podemos observar ainda que os pontos nos quais o operador $\hat{\imath}$ aparece, são essencialmente os mesmos nos quais a constantes de Planck deve aparecer. De fato, não fosse pelo sistema de unidades natural que adotamos, perceberíamos imediatamente que o operador $\hat{\imath}$ deve tomar o lugar da combinação $i/\hbar$, de acordo com a analogia utilizada na nossa construção. Dessa forma, a introdução de operadores que não comutam com $\hat{\imath}$, no caso quaterniônico, pode ser entendida como equivalente a tomar a "constante" de Planck como uma nova variável dinâmica da teoria. seria interessante examinar, em particular, as flutuações quânticas no quantum de ação. Por outro lado, a regra de superseleção expressa pela segunda condição da seção **??**, juntamente com a hipótese feita ao final da seção **??**, dão um sentido mais *clássico* a $\hat{\imath}$, excluindo a interferência entre os seus diferentes valores, o que "congela" o seu valor e suprime essas novas possibilidades. Desse modo, encontramos que uma extensão natural das equações (**??**) é admitirmos que o operador $\hat{\imath}$ seja um *novo campo fundamental*, isto é, uma nova variável dinâmica dependendo do ponto do espaço-tempo no qual é observada. Esta idéia foi desenvolvida na referência [**?**], onde é proposto um princípio geral de covariância quaterniônica, uma teoria para o transporte paralelo de quatérnions sob uma dada variedade, e uma equação de campo para o operador $\hat{\imath}$. Um dos resultados mais interessantes dessa visão da Mecânica Quântica Quaterniônica, é que as as equações de campo resultantes são muito semelhantes às do eletromagnetismo, no entanto são encontrados *três* bósons vetoriais fundamentais, um neutro e sem massa, e outros dois massivos e carregados. Assim, podemos considerar a Mecânica Quântica Quaterniônica como uma das primeiras propostas unificadoras das interações fraca e eletromagnética (1963) e que ainda se encontra como uma possibilidade em aberto.

Com respeito ao estudo de sistemas singulares, discutiu-se o problema de se determinar a fixação de gauge na qual as relações de comutação obtidas pelo método variacional de Schwinger estão determinadas. A proposta de se utilizar o formalismo de B-field para se fazer esta fixação de maneira covariante dentro da classe de gauges lineares covariantes, foi bastante satisfatória, não apenas em resolver o problema acima posto, mas também por fornecer generalizações naturais da teoria do campo eletromagnético livre, tais como o campo de Proca e a interação com o campo espinorial (QED_4). Não obstante o sucesso obtido pelo uso uso conjunto do Princípio de Schwinger e do formalismo de Nakanishi, devemos ressaltar que ainda estamos muito distantes de estabelecer a equivalência completa proposta nas referências [**?**] e [**?**], entre o método variacional de Schwinger e o de Dirac para o tratamento de sistemas singulares. De fato, é importante notar que as refrências acima citadas verificam esta equivalência apenas em um particular gauge, o da radiação, enquanto que a nossa proposta é mais geral, uma vez que se aplica a toda a classe dos gauges lineares covariantes.

Para concluir, gostaríamos de destacar que amplitude e generalidade do Princípio Variacional de Schwinger nos permitem considerar diversas possibilidades mais a serem exploradas, não apenas nos assuntos citados no título desta dissertação e discutidos aqui, mas também em diversas outras teorias. Por exemplo, como perspectivas para futuros trabalhos, estamos desenvolvendo um estudo da Mecânica Quântica Variacional aplicada a espaços de geometria não-comutativa, que encontram aplicações desde sistemas simples como o caso de uma partícula carregada em interação com um campo magnético externo, até teorias mais complexas como o limite de baixas energias de supercordas e anomalias. Outra perspectiva ainda, é a aplicação desse princípio ao estudo do campo gravitacional quantizado, onde acreditamos que, dadas as semelhanças formais com teorias de gauge, o formalismo de B-field possa também ser aplicado com sucesso.

Esperamos, sobretudo, que este trabalho possa servir de inspiração para que outros continuem a explorar as riquezas da formulação variacional de Schwinger, e que tais investigações possam trazer nova luz a assuntos hoje esquecidos ou obscurecidos.

Acreditamos que para onde quer que inclinação, acaso ou oportunidade levem o homem, quaisquer que sejam os fenômenos que lhe despertem a atenção e prendam seu interesse, isso sempre trará vantagens à ciência. Pois qualquer relação nova que vem à luz, qualquer nova técnica, mesmo inadequada, e até mesmo o erro são úteis, estimulantes e indispensáveis para o futuro.

Neste sentido, o autor pode rever o seu trabalho com alguma tranqüilidade e, a partir dessas considerações, criar coragem para, num futuro próximo, fazer o que resta. Com confiança, embora não inteiramente satisfeito, pode recomendar o que já realizou e o que resta por realizar àqueles que, agora ou no futuro, venham a se interessar por isso.

Apêndice A: Probabilidade e Teoria da Medida

Neste apêndice faremos uma breve explanação sobre os conceitos básicos de probabilidades que são necessários para uma compreensão mais clara da *interpretação estatística da Mecânica Quântica*. Como não estamos interessados na teoria geral dos processos aleatórios, não será necessário uma teoria da medida em espaços de funções.

Daremos aqui apenas os conceitos básicos sobre o que é uma teoria da medida, tanto em espaços (enumeráveis) Euclideanos de dimensão finita, quanto em espaços de dimensão infinita, começando por construí-los. Esta teoria é muito simples de extender para espaços mais gerais, no entanto, como já dissemos, pretendemos dar apenas uma introdução, e portanto nos limitaremos aos espaços Euclideanos. As principais referências utilizadas na construção deste apêndice foram [**?**, **?**, **?**, **?**]. Uma discussão muito interessante acerca do papel da matemática, dentro da física, e em particular do conceito de probabilidade, encontra-se na referência [**?**].

Espaços Euclideanos

Um espaço Euclideano n-dimensional, $\mathbb{R}^n$, é definido como consistindo de todos os conjuntos de n números reais $(x_1, ..., x_n)$, os quais denominamos como as *coordenadas* de um ponto X. A *distância*, $d(X,Y)$, entre dois pontos X e $Y = (y_1, ..., y_n)$, é definida como a quantidade não-negativa $d(X,Y)$ que satisfaz

$$[d(X,Y)]^2 = \sum_1^n (x_i - y_i)^2$$

Neste espaço, consideraremos conjuntos de pontos definidos de várias maneiras. Denotamos o conjunto de pontos consistindo de *todos* os pontos do espaço por Ω, e os demais conjuntos por letras capitulares tais como $A, B, ...$ Para *classes*, usaremos a notação $\{A\}$ para expressar a "classe dos conjuntos equivalentes a A".

Dados dois conjuntos A e B nó podemos definir o seu *produto,* AB, como o conjunto que consiste dos pontos presentes em ambos, e a sua *soma,* $A + B$, como o conjunto dos pontos contidos em A, ou em B, ou em ambos. Essas operações são associativas[1],

$$(AB)\,C = A\,(BC) \qquad (A + B) + C = A + (B + C)$$

comutativas,

$$AB = BA \qquad A + B = B + A$$

e distributivas,

$$A\,(B + C) = AB + AC$$

Podemos também extender as definições de somas e produtos à sequências enumeráveis $(A_1, A_2, ...)$ tal que

$$\prod_1^\infty A_i \qquad \sum_1^\infty A_i$$

sejam os conjuntos consistindo, respectivamente, daqueles pontos que estejam contidos em todos os A_i, e em, no mínimo, um dos A_i.

Se B é um conjunto contido em A, denotamos $B \subset A$, ou $A \supset B$, e então definimos $A - B$ como o conjunto de todos os pontos de A que não estão contidos em B. Portanto, $\Omega - A$ está sempre definido, ainda que possa ser vazio (o conjunto vazio será denotado por 0). Iremos denotar $\bar{A}$ para $\Omega - A$ e o chamammos o "complemento de A".

Dada uma sequência infinita de conjuntos $A_1, A_2, ...$ temos então definidos o seu produto infinito e a soma infinita, no entanto há ainda mais dois conjuntos dependentes da classe A_i que são também importantes.

[1]Em alguns livros essas operações são também denominadas *intersecção* e *união* de conjuntos, respectivamente.

O *limite superior* de um sequência de conjuntos $A_1, A_2, ...$ é escrito $\limsup A_i$, e é definido como o conjunto de todos os pontos que estão contidos num número infinito de A_i. Podemos de fato escrever

$$\limsup A_i = \prod_{n=1}^{\infty} \sum_{i=n}^{\infty} A_i$$

uma vez que qualquer um destes pontos deve estar contido em $\sum_{i=n}^{\infty} A_i$ para um n qualquer, e se um dos pontos não estiver contido em nenhum destes A_i, ou pelo menos num número finitos destes, tomamos um valor de n tal que este ponto não esteja contido em $\sum_{i=n}^{\infty} A_i$.

O *limite inferior* de uma sequência A_i é definido como consistindo de todos os pontos que estão contidos em todos os A_i, exceto possivelmente em um número finito destes, e assim podemos escrever

$$\liminf A_i = \sum_{n=1}^{\infty} \prod_{i=n}^{\infty} A_i$$

e portanto

$$\liminf A_i \subset \limsup A_i$$

Campos de Conjuntos

Um *campo* de conjuntos F é uma classe de conjuntos que é fechada sob todas as operações descritas acima. Esta não é uma definição muito precisa, assim podemos definir um *σ-campo* como uma classe de conjuntos que é fechada sob todas as operações de conjuntos enumeráveis.

Os termos "campo" e "σ-campo" não são utilizados em todos os livros. Seguimos aqui a terminologia das referências [**?**] e [**?**].

Funções de Medida

Uma função de conjunto é uma função a valores numéricos que é definida para todo conjunto em uma classe de conjuntos, isto é, ela associa a cada conjunto um número. Tais funções são usualmente (mas nem sempre) definidas para todos os conjuntos em um σ-campo. Uma função de conjunto, $\phi(A)$, é dita ser σ-aditiva sobre um σ-campo.se, e somente se,

$$\phi\left(\sum_i A_i\right) = \sum_i \phi(A_i)$$

para todo conjunto finito ou enumerável de conjuntos A_i não repetidos tal que $\phi\left(\sum_i A_i\right)$ é limitada.

Se além disso $\phi(A)$ é sempre não-negativa, ela é dita ser uma *medida*. Isto pode ser tomado intuitivamente como a "massa" do conjunto A. Se um conjunto B está contido em A, então $\phi(A) = \phi(B) + \phi(A - B) \geqslant \phi(B)$. Então, se $\phi(\Omega)$ é finito, todo conjunto no σ-campo.possui uma medida finita. Se $\phi(\Omega) \neq 1$ podemos dividir todos os valores por $\phi(\Omega)$ e obter uma nova medida

$$P(A) = \frac{\phi(A)}{\phi(\Omega)}$$

para a qual $P(\Omega) = 1$, e $0 \leqslant P(A) \leqslant 1$ para todo A no σ-campo. $P(A)$ é então denominada uma *medida de probabilidade*, e constitui uma generalização da definição axiomática clássica de probabilidade dada por Kolmogorov [**?**]:

Iremos supor em todo o texto que isto está sempre definido sobre um σ-campo, exceto quando citado explícitamente o contrário. O σ-campo e sua medida correspondente são conhecidos como um *espaço de probabilidades*, e os conjuntos $\{A_i\}$ são chamados de *eventos*.

Figura: Fragmento do livro original de Kolmogorov, onde encontramos a definição de probabilidade. O leitor interessado pode consultar a referência [7].

Apêndice B: Teoria Agébrica

Enunciaremos a seguir alguns conceitos importantes para o embasamento da teoria física de medida.

Admitiremos a noção de par ordenado como conceito primitivo[2]. A cada elemento a e a cada elemento b está associado um terceiro elemento indicado por

$$(a, b)$$

e denominado *par ordenado*, de modo que

$$(a, b) = (c, d) \Longleftrightarrow a = c \quad \wedge \quad b = d$$

Diremos ainda que a é o primeiro elemento e b o segundo do par ordenado (a, b). Note que:

$$\begin{aligned} a &\neq b \Longrightarrow \{a, b\} = \{b, a\}\,, \quad (a, b) \neq (b, a) \\ a &= b \Longrightarrow \{a, b\} = \{a\}\,, \quad (a, b) = (b, a) \end{aligned}$$

portanto, os conceitos de conjunto e par ordenado são distintos.

Produto Cartesiano: Chama-se *produto cartesiano* de um conjunto $A \neq \emptyset$ por outro $B \neq \emptyset$ ao conjunto de todos os pares ordenados $(a, b) : a \in A \quad \wedge \quad b \in B$.

[2]Em lugar disso poderíamos ainda *defini-lo* utilizando-nos da composição de três conjuntos, mas tal grau de sofisticação analítica não é necessário aqui.

Indicaremos o produto cartesiano pela notação $A \times B$ (lê-se: "A cartesiano B"); portanto,

$$A \times B = \{(a, b) \ / \ a \in A \quad \wedge \quad b \in B\}$$

Exemplo: $A = \{1, 3\}$ $B = \{1, 2, 3\}$

$$\left.\begin{array}{l} A \times B = \{(1,1),(1,2),(1,3),(3,1),(3,2),(3,3)\} \\ B \times A = \{(1,1),(1,3),(2,1),(2,3),(3,1),(3,3)\} \end{array}\right\} \longrightarrow A \times B \neq B \times A$$

Relação: Sejam E e F dois conjuntos. Todo subconjunto R de $E \times F$ é denominado *relação* de E em F (ou relação entre elementos de E e elementos de F). No caso de $E = F$ diz-se, simplesmente, que R é uma relação sobre E.

Se R é uma relação de E em F usaremos a notação aRb (leia-se: "a está na relação R com b"). para indicar que $(a, b) \in R$. A negação será indicada $a \not R b$.

As primeiras estruturas da Álgebra que comparecem de maneira destacada nas teorias físicas, são as chamadas *classes de equivalência*. Classes de equivalência são conjuntos caracterizados por um tipo especial de relação denominada de *relação de equivalência*.

Relação de Equivalência: Diz-se que uma relação R sobre um conjunto E é uma *relação de equivalência* se, e somente se, são válidas as seguintes condições:

E1 Propriedade Reflexiva: $\forall a \in E \quad aRa$

E2 Propriedade Simétrica: $\forall a, b \in E \quad aRb \Longrightarrow bRa$

E3 Propriedade Transitiva: $a, b, c \in E \quad aRb \wedge bRc \Longrightarrow aRc$

Veremos a seguir alguns exemplos de realações de equivalência e ao mesmo tempo mostraremos que, em geral, as condições E1, E2 e E3 são independentes.

Exemplo 1: Considere o conjunto E de todas as retas de um plano α e seja R a relação

$$XRY \Longleftrightarrow X = Y \vee X \cap Y = \emptyset$$

A relação R é, simplesmente, a relação de paralelismo da Geometria Plana, e sabemos ser uma relação de equivalência sobre E.

Exemplo 2: Com as notações do exemplo anterior, considere R definida por

$$XRY \Longleftrightarrow X \perp Y$$

Esta é a relação de perpendicularismo da Geometria Plana, e sabemos que R só satisfaz E2, logo, R não é relação de equivalência sobre E.

Classe de Equivalência: Seja R uma relação de equivalência sobre $E \neq \emptyset$. $\forall a \in E$ o conjunto

$$\bar{a} = \{x \in E \ / \ xRa\}$$

é denominado *classe de equivalência* de a sob R, e a é chamado *representante* da classe de equivalência $\bar{a}$.

Exemplo1: Em sua breve, porém eloqüente, discussão acerca do sincronismo de dois relógios posicionados em pontos distantes A e B feita no "Sobre a Eletrodinâmica dos Corpos em Movimento" de 1905, Einstein conclui que:

1. "Se o relógio em B é síncrono com o relógio em A, também o relógio em A é síncrono com o relógio em B."

2. "Se o relógio em A é síncrono com o relógio em B e também com o relógio em C, então os relógios em B e C são síncronos entre si."

Uma vez que o sincronismo de um relógio consigo mesmo é um fato fisicamente óbvio, vemos que o conjunto dos relógios relacionados pela operação de sincronismo formam uma classe de equivalência, ou, o que dá no mesmo, que *o conjunto dos relógios síncronos forma uma classe de equivalência.*

Exemplo 2: A Lei Zero da Termodinâmica assegura que, *se um sistema termodinâmico A está em equilíbrio térmico com outros dois sistemas B e C, então os sistemas B e C estão em equilíbrio térmico entre si.* Isso, juntamente com outras propriedades fisicamente evidentes do equilíbrio térmico, nos assegura que *o conjunto dos sistemas termodinâmicos relacionados pelo equilíbrio térmico formam uma classe de equivalência.* Com efeito, podemos trocar a expressão da Lei Zero, destacada no início deste exemplo, por esta última frase enfatizada, que nenhuma alteração se verifica em nossa teoria.

Exemplo 3: A relação de movimento relativo uniforme é claramente simétrica e reflexiva. Além disso, a experiência demonstra que essa relação também é transitiva, ao menos enquanto admitirmos uma lei linear de adição de velocidades. Assim, temos que o conjunto dos referênciais inerciais, mais a relação de movimento relativo uniforme, formam outra classe de equivalência, de suma importância em teorias relativísticas, *a classe dos referenciais inerciais.*

Anéis: Um *anel* é um conjunto A junto com duas leis de composição chamadas de adição e multiplicação, e escritas como uma soma $\oplus$ e um produto $\circ$ respectivamente, satizfazendo as seguintes condições:

A1 Com respeito à adição, A é um grupo abeliano.

A2 A multiplicação é associativa e possui elemento identidade.

A3 A multiplicação é distributiva, ou seja,

$$\forall x, y, z \in A \qquad (x \oplus y) \circ z = x \circ z \oplus y \circ z \quad \wedge \quad z \circ (x \oplus y) = z \circ x \oplus z \circ y$$

Observe que, em geral, a multiplicação não é comutativa. Assim, é comum fixarmos a nossa atenção em um elemento da multiplicação de nosso particular interesse, e falarmos em *produto à direita* e *produto à esquerda*. Por exemplo, $x \circ z$ é o "produto à direita de x por z", ou ainda o "produto à esquerda de z por x".

Um anel cuja operação de multiplicação é comutativa, ou seja, tal que

$$\forall x, y \in A \qquad x \circ y = y \circ x$$

é dito um *anel comutativo*.

Um anel cujos elementos não-nulos formam um grupo sob a multiplicação, é chamado de *anel-quociente*. Um anel quociente comutativo é chamado de *campo*, ou *corpo*.

Como é usual, nós denotaremos o elemento identidade da adição por 0 e o da multiplicação por 1, e a partir daqui já podemos notar o aparecimento das regras de operação básicas a que estamos acostumados. Os teoremas a seguir ilustram bem isso.

Teorema 1: $\forall x \in A \quad 0 \circ x = 0$. Prova: $0 \circ x \oplus x = (0 \oplus 1) \circ x = 1 \circ x = x = 0 \oplus x \longrightarrow 0 \circ x = 0$

Teorema 2: Sejam $x, y \in A$, $(-x) \circ y = -(x \circ y)$. Prova: $x \circ y \oplus (-x) \circ y = (x \oplus (-x)) \circ y = 0 \circ y = 0 \longrightarrow (-x) \circ y = -(x \circ y)$

Outras regras de operação usuais tais como $(-x) \circ (-y) = x \circ y$ são também facilmente provadas.

Módulo: Seja K um anel. Um *módulo sob K* ou *K-módulo*, é um tripleto ordenado $(E, +, \cdot)$ tal que $(E, +)$ é um grupo abeliano e "$\cdot$" é uma função $K \times E \longrightarrow E$ satisfazendo as condições:

M1 $\lambda \cdot (x + y) = \lambda \cdot x + \lambda \cdot y$

M2 $(\lambda \oplus \mu) \cdot x = \lambda \cdot x + \mu \cdot x$

M3 $\lambda\mu \cdot x = \lambda \cdot (\mu \cdot x)$

M4 $\exists 1 \in K \ / \ 1 \cdot x = x$

$\forall x, y \in E \ \wedge \ \forall \lambda, \mu \in K.$

Os elementos de K são chamados de *escalares*, e K em si é chamado de *anel escalar*. Observe que aqui tivemos o cuidado de explicitar todas as diferentes operações envolvidas, representando de maneira diferenciada a adição em K ($\oplus$) e a adição em E ($+$), bem como os produtos (denotado em K pela justaposição e em E por "$\cdot$"). Esse cuidado justifica-se para que tenhamos uma noção muito clara da natureza de todas as operações envolvidas. Entretanto, uma vez que tenhamos os conceitos claros em mente, torna-se desnecessário sobrecarregar a notação utilizando-se de tantos símbolos. Uma vez que todas as operações de adição tem as mesmas propriedades básicas (formam grupos abelianos nos conjuntos que as definem), e todas as operações de multiplicação são associativas e distributivas, onde não houver risco de confusão, denotaremos todas as adições pelo mesmo símbolo, $+$, e também as multiplicações *entre* escalares e *por* escalares simplesmente pela justaposição.

Agora estamos prontos para definir a mais rica das estruturas algébricas que nos interessam, a *álgebra:*

Álgebra: Seja K um anel comutativo. Uma K-*álgebra*, ou uma *álgebra sobre* K é uma K-estrutura algébrica $(A, +, \cdot, \circ)$ com três composições tais que

A1 $(A, +, \cdot)$ é um K-módulo.

A2 $(A, +, \circ)$ é um anel.

A3 $\alpha \cdot (x \circ y) = (\alpha \cdot x) \circ y = x \circ (\alpha \cdot y) \qquad \forall x, y \in A \ \wedge \ \forall \alpha \in K$

Observe que, apesar da álgebra ser definida em termos de um anel *comutativo* isso *não* implica que estamos tratando apenas com álgebras comutativas. As únicas operações assumidas comutativas aqui, são as somas e a operação de produto *dentro* do anel *escalar*, ou seja, somente a operação de produto entre os escalares é admitida ser comutativa, e esta nada tem a ver com a operação de produto da *álgebra*.

Alguns K-módulos são também muitas vezes denominados *espaços vetoriais lineares*. Esta é, talvez, a estrutura mais largamente utilizada pela Física, entretanto, é importante enfatizar que *nem todos K-módulos são espaços vetorais lineares*, e também, *nem todos os espaços vetoriais são K-módulos*. Para compreender bem essa diferença, vejamos a definição de espaço vetorial linear:

Espaço Vetorial Linear: Seja F um campo e V um grupo abeliano (sob $+$) tal que $\forall s \in F \ \wedge \ \forall x \in V \ \exists$ um único elemento $y \in V : sx = y$. Então, V é chamado de espaço vetorial sobre F se, e somente se,

V1 $s\,(x+y) = sx + sy$

V2 $(s+t)\,x = sx + tx$

V3 $s\,(tx) = (st)\,x \qquad \forall s,t \in F \ \wedge \ \forall x,y \in V$

V4 $\exists 1 \in F : 1x = x$

Observe que aqui já nos utilizamos extensivamente do abuso de linguagem que denomina as estruturas matemáticas pelos conjuntos sob as quais elas estão definidas. Portanto, apenas como observação, é sempre bom lembrar que *espaço vetorial linear* **não** é o grupo V, mas sim o tripleto $(V, ., F)$ onde o ponto está denotando o produto entre os elementos de V e os de F, ou seja, o produto *por* um escalar, tal como definido acima.

No caso mais geral de um espaço vetorial não-linear, as propriedades V1, V2 e V3 que garantem que a operação de produto por um escalar é uma aplicação linear, são suprimidas. Assim, para formar um espaço vetorial, bastam um campo, um grupo abeliano e uma aplicação injetora $f : F \times V \longrightarrow V$ que possua um elemento identidade associado em F. Atente ao fato de que, uma vez que esta aplicação define o produto *por* um escalar, basta que ela seja *injetora*, entretanto, muitas vezes é mais útil trabalharmos com produtos por escalares que sejam também *sobrejetores*, ou seja, definidos como aplicações *bijetoras*. No caso desses produtos serem definidos como funções, estaremos pensando neles como homeomorfismos.

Assim, caso a aplicação f seja não-linear, não poderemos identificar o espaço vetorial com um K-módulo. Da mesma forma, caso o anel K, na definição de módulo, seja não-comutativo, não poderemos idenficar o K-módulo como um espaço vetorial linear.

Apêndice C: Dados de Cauchy

Consideremos uma equação diferencial de segunda ordem da forma:

$$\ddot{x} = F\left(x, \dot{x}, t\right)$$

onde F é uma função das quantidades dentro do parênteses. Por $\dot{x}$ entenda-se primeira derivada de x com relação à variável t (que no contexto será chamada de tempo), e por $\ddot{x}$ entenda-se a segunda derivada temporal. Se conhecidos os valores de x e $\dot{x}$ num instante fixo t_0, ou seja, de posse das informações:

$$\begin{aligned} x\left(t_0\right) &= x_0 \\ \dot{x}\left(t_0\right) &= v_0 \end{aligned}$$

o que pode ser dito sobre a evolução temporal de x? Este é conhecido como o *Problema de Cauchy* [**?**].

De posse de tais informações podemos saber os valores das funções x e $\dot{x}$ num instante infinitesimalmente posterior, $t_0 + \delta t$, usando expansão de Taylor e tomando termos de primeira ordem:

$$x\left(t_0 + \delta t\right) = x\left(t_0\right) + \dot{x}\left(t_0\right)\delta t + O\left(\delta t^2\right)$$

$$\begin{aligned} \dot{x}\left(t_0 + \delta t\right) &= \dot{x}\left(t_0\right) + \ddot{x}\left(t_0\right)\delta t + O\left(\delta t^2\right) = \\ &= \dot{x}\left(t_0\right) + F\left(x\left(t_0\right), \dot{x}\left(t_0\right), t_0\right)\delta t + O\left(\delta t^2\right) \end{aligned}$$

O mesmo procedimento pode ser usado para deteminar os valores de x e $\dot{x}$ no instante $t_0 + 2\delta t$, e novamente para o instante $t_0 + 3\delta t$, e assim sucessivamente, de forma a se construir a evolução temporal de x para qualquer instante t, o que nos mostra que o conhecimento de $x\,(t_0)$ e $\dot{x}\,(t_0)$ nos determina univocamente, para o caso de uma função F *linear*, a evolução temporal de x. Em casos como estes podemos dizer que a função, no caso x, é uma quantidade dinâmica.

Bibliografia

[1] Schwinger, Julian Seymour - *Quantum Kinematics and Dynamics*, Addison Wesley, New York, (1991).

[2] Jammer, Max - *The Philosophy of Quantum Mechanics*, New York, Wiley, (1974).

[3] Jauch, Josef Maria - *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Pub. Co., New York, (c1968).

[4] Hegenberg, Leônidas - *Etapas da Investigação Científica*, Edusp, São Paulo, (1976).

[5] Moran, P. A. - *An introduction to Probability Theory,* Claredon Press, Oxford, (1968).

[6] Loéve, M, - *Probability Theory,* 3rd ed.,van Nostrand, New York, (1963).

[7] Kolmogorov, A. N. - *Foundations of the Theory of Probability,* Chelsea Publishing Company, New York, (1950).

[8] Gnedenko, B. V. - *The Theory of Probability,* Chelsea Publishing Company, New York, (1937).

[9] Uspensky, J. V. - *Introduction to Mathematical Probability,* McGraw-Hill, New York, (1937).

[10] Manin, Yu. I. - *Mathematics and Physics*, Birkhäuser, Boston, (1981).

[11] Dittrich,.W. & Reuter, M. - *Classical and Quantum Dynamics: from Classical Paths to Path Integrals,* 2nd ed., Springer-Verlag, New York, (c1994).

[12] Finkelstein, David Ritz, - *Quantum Relativity: A Synthesis of the Ideas of Einstein and Heisenberg*, Springer, Berlim, (1996).

[13] Adler, Stephen L., - *Quaternionic Quantum Mechanics and Quantum Fields*, Oxford University Press, Oxford, (1995).

[14] Felsager, Bjørn, - *Geometry, Particles, and Fields / Based upon Lectures Given by Bjørn Felsager*, Odense University Press, Odense, (1981).

[15] Yourgrau, Wolfgang & Mandelstam, Stanley - *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory*, 3rd ed., Pitman & Sons, London, (1968).

[16] Schwinger, Julian Seymour - *Differential Equations of Quantum Field Theory* - Stanford University Summer´s School, (1956). [PXIX SC7/IFT]

[17] Schwinger, Julian Seymour - *Quantum Dynamics Part I* - National Bureau of Standards Report 2188, (1952). [PXVIII SC5/IFT]

[18] Schwinger, Julian Seymour - *Field Theoretic Methods,* in: Brandeis Summer Institute in Theoretical Physics, (1959). [S BR3/IFT]

[19] Schwinger, Julian Seymour - *Field Theory Methods in Non-Field-Theory contexts,* in: Brandeis Summer Institute in Theoretical Physics p. 123, (1960). [S BR7/IFT]

[20] Schwinger, Julian Seymour - *Field Theory of Particles,* in: Brandeis Summer Institute in Theoretical Physics V.2 - Lectures on Particles and Field Theory p. 145, (1964). (S BR18/IFT - 530.06 B817L/USP]

[21] Schwinger, Julian Seymour - *Quantum Theory of Gauge Fields,* Cargèse summer School of Theoretical Physics - Elementary Particles and High Energy Physics p. 189, (1963). [530.06 C276e/USP]

[22] Sudarshan, E. C. G. & Mukunda, N. - *Classical Dynamics: A Modern Perspective* (Wiley, 1974).

[23] Birkhoff, G. & von Neumann, J. - *Ann. Math.* **37**, 823 (1936).

[24] Dirac, P. A. M. - *Physik. Zeits. Sowjetunion* **3**, 64 (1933); *The Principles of Quantum Mechanics*, Claredon Press, Oxford, (1967) 4th ed. rev., § 32.

[25] Schwinger, Julian Seymour - *Phys. Rev.* **74**, 1439 (1948).

[26] Schwinger, Julian Seymour - *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951); *Phys. Rev.* **91**, 713 (1953); *Phys. Rev.* **91**, 728 (1953); *Phys. Rev.* **92**, 1283 (1953); *Phys. Rev.* **93**, 615 (1954); *Phys. Rev.* **94**, 1362 (1954).

[27] Palatini, A. - *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo* **43**, 203 (1919); Misner, C.W., Thorne, K.S. & Wheeler, J.A. - *Gravitation*, W.H. Freeman And Company, New York, (1995) - chap. 21.

[28] P. G. Bergmann - *Phys. Rev.* **75**, 680 (1949).

[29] Nakanishi, N. - *Prog. Theor. Phys.* **35**, 1111 (1966);*Prog. Theor. Phys.* **38**, 881 (1967).

[30] Milton, K. ed. - *A Quantum Legacy - Seminal Papers of Julian Schwinger*, World Scientific, Singapore, (2000) - p. 8.

[31] Nakanishi, N. & Ojima, I. - *Covariant Operator Formalism of Gauge Theories and Quantum Gravity*, World Scientific, Lecture Notes in Physics, Vol.27 (1991).

[32] Nakanishi, N. - *Suppl. of the Prog. Theor. Phys.* **51**, 1 (1972); Ghose & Das, A. - *Nucl. Phys.* **84**, 299 (1972).

[33] Stückelberg, E. C. G. - *Helv. Phys. Acta* **33**, 727 (1960).

[34] Finkelstein, D. R., Jauch, J. M., Schiminovich, S. & Speiser, D. - *J. Math. Phys.* **3**, 207 (1962).

[35] Finkelstein, D. R., Jauch, J. M. & Speiser, D. - *J. Math. Phys.* **4**, 136 (1963).

[36] Finkelstein, D. R., Jauch, J. M., Schiminovich, S. & Speiser, D. - *J. Math. Phys.* **4**, 788 (1963).

[37] Burton, W. K. & Touschek, B. F. - *Phil. Mag.* **44**, 161 (1953).

[38] Schwinger Julian Seymour, - *Phil. Mag.* **44**, 1171 (1953).

[39] Burton, W. K. & Touschek, B. F. - *Phil. Mag.* **44**, 1180 (1953).

[40] Schwinger Julian Seymour, - *Phil. Mag.* **44**, 1181 (1953).

[41] Ruzzi, M. - *e-print arXiv:quant-ph/0108031*, no prelo em *J. Phys. A: Math and Gen.*

[42] Teixeira, R. G. - *Quantização de Sistemas Singulares via Formalismo de Hamilton-Jacobi*, tese de doutorado, IFT-T.006/00 (2000).

[43] Fleming, H. - *Rev. Bras. Ens. Fís.* **23**, 155 (2001).

[44] Lounesto, Pertti - *Clifford Algebras and Spinors*, Cambridge, London, (1999).

[45] 't Hooft, G. - *Nucl. Phys.* **B79**, 276 (1974); Polyakov, A. M. - *JETP Lett.* **20**, 194 (1974).

[46] Das, A. & Scherer, W. - *Z. Phys.* **C35**, 527 (1987).

[47] Ogawa, N., Fujii, K., Miyazaki, H., Chepilko, N. & Okazaki, T. - *Prog. Th. Phys.* **96**, 437 (1996).

[48] Sundermeyer, K. - *Lectures Notes in Physics* 169: *Constrained Dynamics* (Springer - Verlag, 1982).

[49] Dirac, P. A. M. - *Canadian Journal of Mathematics* **2** (1950) 129; *Canadian Journal of Mathematics* **3** (1951) 1; *Lectures on Quantum Mechanics,* Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, (1964).

[50] Gitman, D. M. & Tyutin, I. V. - *Quantization of Fields with Constraints,* Springer - Verlag, (1990).

[51] Barcelos-Neto, J. & Wotzasek, C. - *Mod. Phys. Lett.* **A7**, 1737 (1992).

[52] Barcelos-Neto, J. & Wotzasek, C. - *Int. J. Mod. Phys.* **A7**, 4981 (1992).

[53] Faddeev, L. & Jackiw, R. - *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1692 (1988).

[54] Jackiw, R. - e-print hep-th/9306075. Publicado em *Constraint Theory and Quantization Methods: From Relativistic Particles to Field Theory and General Relativity,* Proceedings do 2nd "Workshop on Constraint Theory and Quantization Methods", Montepulciano, Italia, 1993; página 163, F. Colomo, L. Lusanna & G. Marmo, editores. World Scientific, (1994).

[55] Henneaux, M. & Teitelboin, C. - *Quantization of Gauge Systems,* Princeton University Press, New Jersey, (1992).

[56] Melo, C. A. M. & Pimentel, B. M. - *Mecânica Quântica Quaterniônica a la Schwinger*, Anais do XXI Encontro Nacional de Física de Partículas e Campos, disponível em http://www.sbf1.if.usp.br/eventos/xxienfpc/procs/res158/, São Lourenço, (2000).

[57] Melo, C. A. M., Pimentel, B. M. & Pompéia, P. J. - *Schwinger's Principle and the B-Field Formalism for the Free Electromagnetic Field*, Anais do XXII Encontro Nacional de Física de Partículas e Campos, São Lourenço, (2001).

[58] Melo, C. A. M., Pimentel, B. M. & Pompéia, P. J. - *Schwinger's Principle and Gauge Fixing in the Free Electromagnetic Field*, em preparo.