



**Universidade Federal da Bahia**  
**Instituto de Física**  
Programa de Pós-Graduação .

Tese de Doutorado

**MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA**  
**SUPERSIMÉTRICA**

Miralvo Bispo de Menezes

Salvador  
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO

**MECÂNICA QUÂNTICA  
SIMPLÉTICA SUPERSIMÉTRICA**

Miralvo Bispo de Menezes

**Orientador:** Prof. Dr. José David Manguiera Vianna

Tese apresentada ao Instituto de Física da  
Universidade Federal da Bahia como par-  
tes dos requisitos para a obtenção do título  
de Doutor em Física

Salvador

2015

Maria Rosa Bispo de Menezes (mãe)  
Eduardo José Carneiro de Menezes (pai)  
Fernanda Gomes Cruz (noiva)

# Agradecimentos

Ao orientador, professor e amigo José David Manguiera Vianna, aquele que me ensinou muito mais que apenas um método, mas o verdadeiro sentimento de participar do processo da descoberta científica. Pela liderança, perseverança e jovialidade contagiante com que descortina os horizontes do desconhecido novo mundo.

Aos professores: Maria das Graças Reis Martins, André Luiz Batista Ribeiro, Alexandre Leite Gadelha, Edisom de Souza Moreira Jr. e Marco Antônio Silva Trindade pelo incentivo e apoio difícil durante minha jornada acadêmica.

Aos meus familiares: Maria Rosa Bispo de Menezes, Eduardo José Carneiro de Menezes, Mônica Bispo de Menezes, Ermogenes Bispo de Menezes, Maria de Fátima Bispo de Menezes, Andressa Menezes e Anderson Menezes, cuja expectativa de minha vitória sempre me valeu de grande incentivo.

Aos companheiros de classe: Vinicius (Pernambuco), Caio Guimarães, Alessandro Barros, Caio Porto, Edward Ferraz, Eduardo Reis, Elenilson Nery, Erick Santana, Helder Tanaka, Leandro Cerqueira, João Cláudio, Marivaldo M. de Jesus, Mariana, Eric Pinto, Carla Sena, Iuri, Vinicius (mestre), Kim Veiga e Tenilson pelo companheirismo ao longo destes anos que convivemos sob o teto do IF-UFBa.

Aos amigos e colegas especiais: Andreia Simões, Marcos Dessa, Rafael Oliveira, Antônio Lafayette, Wallas Nascimento e Sérgio Floquet. Sem essas pessoas, este trabalho teria sido diferente.

A todo pessoal da pós-graduação, em especial, a secretaria Marli, Marcos Paulo, Geraldo, Conceição e Nelson.

À FAPESB e à CAPES pelo apoio financeiro concedido neste período.

É fundamental diminuir a distância entre o que se diz e o que se faz, de tal forma que, num dado momento, a tua fala seja a tua prática.

Paulo Coelho

# Resumo

Dentre as diversas formulações da Mecânica Quântica há a formulação Simplética. Essa formulação considera uma geometria não-comutativa e determina um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_\Gamma$  sobre o espaço de fase  $\Gamma$ . Usando  $\mathcal{H}_\Gamma$  são construídas representações unitárias do grupo de Galilei e reescreve-se a equação de Schrödinger no espaço de fase. Esse procedimento possibilita determinar a função de Wigner sem o uso da equação de Liouville-von Neumann. No presente trabalho mostramos que é possível estender as idéias da teoria quântica supersimétrica à Mecânica Quântica Simplética. Neste contexto, mostramos que tal extensão possibilita generalizar o método de Fatoração e construir uma hierarquia de Hamiltonianos. Em consequência mostramos como obter a função de Wigner usando nossa formulação e aplicamos nosso desenvolvimento para determinar os estados e os espectros de alguns sistemas físicos.

# Abstract

Among the formulations of Quantum Mechanics there is the Symplectic Quantum Mechanics; this approach considers a non-commutative geometry and determines a Hilbert space  $\mathcal{H}_\Gamma$  on the phase space  $\Gamma$ ; using  $\mathcal{H}_\Gamma$ , unitary representations for the Galilei group are constructed, the Schrödinger equation is rewritten in phase space and the Wigner function is derived without the use of the Liouville-von Neumann equation. In the present work we show that the ideas of the Supersymmetric Quantum Mechanics can be extended to Symplectic Quantum Mechanics. With our approach the Factorization Method is generalized and a Hamiltonian hierarchy is constructed. We show that our formulation gives rise to a new procedure to derive Wigner function. Applications are presented by deriving the states and spectra of some physical systems.

# Sumário

Agradecimentos . . . . .	iv
Sumário . . . . .	viii
Lista de Figuras . . . . .	xi
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Formulações da Mecânica Quântica</b>	<b>7</b>
2.1 Formulação Hamiltoniano da Mecânica Clássica . . . . .	7
2.2 Formulação Abstrato . . . . .	11
2.3 Formulação da Matriz Densidade . . . . .	14
2.4 Formulação de Schrödinger . . . . .	16
2.5 Formulação de Wigner . . . . .	18
<b>3 Mecânica Quântica Simplética</b>	<b>25</b>
3.1 Espaço de Hilbert $\mathcal{H}_\Gamma$ sobre o Espaço de Fase $\Gamma$ . . . . .	25
3.2 Representação do Grupo de Galilei sobre $\mathcal{H}_\Gamma$ . . . . .	26
3.3 Evolução Temporal em $\mathcal{H}_\Gamma$ . . . . .	29
3.3.1 Introdução . . . . .	29
3.3.2 A Equação de Schrödinger em $\mathcal{H}_\Gamma$ . . . . .	30
3.4 Conexão com a formulação de Wigner . . . . .	31
<b>4 Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica</b>	<b>33</b>
4.1 Álgebra Supersimétrica . . . . .	33
4.1.1 Introdução . . . . .	33
4.1.2 Super-Espaço, Supersimetria e Equação de Schrödinger . . . . .	34



4.1.3	Quebra de Supersimetria . . . . .	36
4.1.4	Supersimetria com $N = 2$ . . . . .	37
4.2	Os Operadores $\hat{B}^\pm$ . . . . .	43
4.2.1	O Oscilador Harmônico Supersimétrico . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Fatoração e hierarquia de Hamiltonianos</b>	<b>47</b>
5.1	Método de Fatoração . . . . .	47
5.1.1	Introdução . . . . .	47
5.1.2	Método Fatoracional em $\mathcal{H}_\Gamma$ . . . . .	50
5.1.3	Método Fatoracional Supersimétrico em $\mathcal{H}_\Gamma$ . . . . .	51
5.2	Hierarquia de Hamiltonianos . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Aplicações</b>	<b>61</b>
6.1	Calculo da função de Wigner usando a hierarquia de Hamiltonianos . . . . .	61
6.1.1	Introdução . . . . .	61
6.1.2	Função de Wigner . . . . .	62
6.2	Oscilador Harmônico Simples . . . . .	63
6.2.1	Introdução . . . . .	63
6.2.2	Resolução . . . . .	64
6.3	Partícula Carregada em um Campo Magnético Constante . . . . .	68
6.3.1	Introdução . . . . .	68
6.3.2	Resolução . . . . .	68
6.4	Átomo de Hidrogênio Unidimensional . . . . .	73
6.4.1	Introdução . . . . .	73
6.4.2	Resolução . . . . .	73
6.5	Átomo de Hélio . . . . .	82
6.5.1	Introdução . . . . .	82
6.5.2	Resolução . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>89</b>
<b>A</b>	<b>Propriedades do Produto Estrela</b>	<b>91</b>

<b>B</b>	<b>Representação do Grupo de Galilei sobre o espaço de Hilbert</b>	<b>96</b>
<b>C</b>	<b>Forma Alternativa da Equação de Schrödinger no Espaço de Fase</b>	<b>105</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>110</b>

# Lista de Figuras

2.1	Evolução temporal do sistema físico no espaço de fase a partir do instante $t_0$ . . .	10
4.1	Possíveis alinhamentos dos autovalores dos operadores $\hat{H}^\pm$ . . . . .	41
5.1	Diagrama do autovalores dos Hamiltonianos na hierarquia $\hat{H}_n$ [92]. . . . .	49
5.2	Método Fatoracional Algébrico. . . . .	51
5.3	Representação esquemática das relações (5.16) e (5.17). . . . .	53
5.4	Representação gráfica da hierarquia de Hamiltonianos e da relação entre suas autofunções e seus autovalores de energias. . . . .	59
6.1	Densidade de probabilidade de encontrar a partícula no estado fundamental com coordenada $q$ . . . . .	66
6.2	Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental do átomo de Hidrogênio. . . . .	81
6.3	Representação esquemática do átomo de Hélio unidimensional. . . . .	82
6.4	Densidade de probabilidade, no espaço das coordenadas, de encontrar o elétron no estado fundamental, no átomo de Hélio de Hooke. . . . .	88

# Capítulo 1

## Introdução

Observando o comprimento das sombras de varetas devido à luz do sol, em diferentes lugares entre Alexandria e Cirene por volta do século II a.C, Eratóstenes foi capaz de medir a circunferência da Terra usando apenas varetas, medidas de comprimentos e observação. Este fato, ocorrido num período em que se pensava que os fenômenos naturais eram regidos por deuses, nos mostra claramente que é possível entender o mundo a nossa volta usando a observação e a engenhosidade do pesquisador e evidencia aspectos do método que será a base do que chamamos Ciência.

De uma maneira rigorosa podemos dizer que as bases do que chamamos de Ciência nasceram com os trabalhos de Galileu Galilei [1], através do *método científico*, por volta do século XVII. Entre suas descobertas Galilei [2], usando um telescópio importado da Holanda, observou algumas luas de Júpiter e notou que “as leis de projeção de sombras são as mesmas tanto na Terra como na Lua”. Essa observação é conhecida nos dias de hoje como *Princípio Galileano*. Galilei, no entanto, foi mais longe contradizendo a idéia de Aristóteles de que corpos pesados em queda, sob a influência da gravidade, chegam ao solo primeiro do que corpos leves. A afirmação de Galilei conduziu quatro séculos mais tarde, ao Princípio de Equivalência no qual Einstein [3] afirmou que “As leis da física devem ter uma estrutura tal que a sua validade permaneçam em sistemas de referência animados de qualquer movimento”. Esse Princípio foi a chave para o desenvolvimento da Relatividade Geral.

É notório que o maior mérito de Galilei foi considerar que “a natureza está escrita em caracteres matemáticos”. Baseado nesta afirmação e nas observações acerca de planos inclinados,

juntamente com os trabalhos de Johannes Kepler acerca dos movimentos dos planetas, Isaac Newton [4,5] formulou, por volta de 1680, o que nós conhecemos como Mecânica Newtoniana, tendo como linguagem principal o cálculo diferencial e integral.

A Mecânica Newtoniana foi reformulada posteriormente por Lagrange e Hamilton. Segundo o formalismo lagrangiano [6], as leis de Newton podem ser consideradas como derivadas de um princípio maior: *o princípio de ação mínima*, e toda a dinâmica se resume em resolver a equação de Euler-Lagrange. No formalismo hamiltoniano [6] tem-se dois conjuntos de equações: um nos diz como os momenta das várias partículas se modificam com o tempo; o outro nos diz como as posições mudam com o tempo. Essas equações são deduzidas de apenas uma quantidade importante: a função hamiltoniano  $H$ , que é a expressão geral da energia total do sistema. A forma das equações de Hamilton permite-nos “visualizar” a evolução de um sistema clássico de maneira elegante em um espaço chamado de fase. Nesse espaço todo sistema físico é representado por um ponto e a dinâmica é regida pelas equações de Hamilton.

O conceito de espaço de fase “abriu as portas” para uma nova formulação da mecânica, conhecida como Mecânica Estatística. Sua idéia foi inicialmente proposta por Boltzmann, nos anos 70 do século XIX, quando foi associada uma variável macroscópica - a entropia - a conceitos microscópicos [7]. Por volta de 1902 Gibbs [8], com a idéia de pontos no espaço de fase representando o sistema, introduziu a Teoria dos Ensembles, isto é, uma coleção de pontos ou réplicas de um dado sistema físico no espaço de fase. A maneira como estes pontos evoluem é determinada por uma função distribuição  $\rho$ , que possui características probabilísticas, e sua dinâmica é dada pelo Teorema de Liouville [7].

O sucesso da Mecânica Newtoniana foi tão grande que o físico Lorde Kelvin [9] chegou a afirmar “No céu azul da física clássica existem apenas duas nuvens a serem dirimidas ...”. Certamente, Kelvin se referia ao experimento negativo de Michelson e Morley [10] e à inaplicabilidade da Mecânica Clássica, observada por Maxwell [11] por volta de 1869, acerca da dinâmica molecular dos calores específicos. Essas nuvens eram, no entanto, indícios de que coisas novas estavam prestes a acontecer na Física. O experimento de Michelson e Morley juntamente com assimetrias [3] na explicação dos fenômenos eletro-magnéticos, quando analisados em diferentes referenciais inerciais, levou Einstein em 1905 a formular a Teoria da Relatividade Especial. A outra novidade veio um pouco antes, mais precisamente em 14 de dezembro de 1900 [12] quando Max Planck formulou a hipótese dos quanta, uma hipótese que se solidificou

nos trabalhos de Heisenberg e Schrödinger por volta de 1925, e transformou-se no que veio a ser conhecido como Mecânica Quântica.

A Física Quântica constitui uma das maiores rupturas das idéias da Física Clássica e sua linguagem [13] apoia-se no arsenal padrão da álgebra linear de espaços vetoriais e teoria de probabilidades. Assim como a Mecânica Newtoniana pode admitir mais que uma formulação sendo exemplos as duas formulações - Lagrangiana e Hamiltoniana - existem diversas formulações da Mecânica Quântica, destacando-se: a formulação de Heisenberg ou formulação matricial, em que o estado é representado por um vetor e os observáveis por operadores matriciais; a formulação de Schrödinger ou formulação ondulatória, em que o estado é representado por uma função e os observáveis por operadores diferenciais lineares; a formulação mais abstrata, com a introdução de Kets e Bras, proposta por Dirac [14]; a formulação de matriz densidade proposta por John von Neumann [15] por volta de 1927; e finalmente, a formulação de integrais de trajetórias desenvolvida por R. P. Feynman [16] na década de 40 do século XX.

As formulações da Mecânica Quântica têm em comum um dos importantes princípios da Física Quântica, o *princípio de incerteza de Heisenberg* o qual afirma que, para alguns pares de observáveis, o conhecimento preciso, em algumas circunstâncias, de um deles leva automaticamente ao total desconhecimento do outro. Neste sentido, o conhecimento preciso da posição de uma partícula conduz à total ignorância acerca de seu momentum. Este princípio vai de encontro à formulação de Hamilton uma vez que a noção de espaço de fase perde o sentido. Afim de “contornar” esse problema, Wigner [17] desenvolveu a formulação da Mecânica Quântica no Espaço de Fase. Nesse trabalho, Wigner apoiou-se na estrutura matemática e analisou o problema por meio da teoria da Transformada de Fourier. Na realidade, Wigner representou o estado de um sistema quântico através de uma função no Espaço de Fase, usando a Transformada de Fourier aplicada aos elementos da matriz densidade. Em consequência tem-se uma função real, e não mais complexa como no formalismo de Schrödinger, o que permite uma “visualização gráfica” muito elegante do sistema. Adiciona-se a isso que agora pode-se lidar de forma similar com estados puro e misto, uma vez que a função de Wigner é derivada da matriz densidade, além de se ter uma analogia [18] entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica.

Uma dificuldade com a formulação de Wigner é que temos uma função representando o estado de um sistema físico, que pode assumir valores negativos invalidando qualquer possibilidade de interpretações probabilísticas. Além disso toda a interpretação da teoria, atribuída dentro do

formalismo de Schrödinger, é mudada; por exemplo, já não podemos postular operadores como representando observáveis, uma vez que não temos mais os operadores convencionais. Esses fatos levaram ao aparecimento de outras propostas [19–26] para estudar a Mecânica Quântica no Espaço de Fase.

Com exceção da não positividade em todos os pontos do espaço de fase, a função de Wigner possui, no entanto, várias propriedades [27] de uma função de probabilidade clássica. Em um esforço para obter uma função distribuição quântica que fosse positiva em todos os pontos do espaço de fase, e assim poder assumir interpretações probabilísticas, outras funções foram propostas [28–32]. Dentre essas, a mais estudada é a função de Husimi [33]; apesar dessa função [34] ser positiva em todos os pontos do espaço de fase, ela está longe de satisfazer todas as propriedades de uma função distribuição clássica, sendo exemplo a propriedade que relaciona os observáveis da teoria com os valores médios.

O trabalho de Moyal [35] possibilitou introduzir o Produto Estrela e estudar sistemas físicos tendo como base uma Álgebra Geométrica [36]. Baseando nestas idéias, Curtright, Uematsu, Zachos e Fairlie [37–45], estudaram a quantização de sistemas físicos através do uso do Produto Estrela. Nesse cenário, o estado do sistema quântico é representado pela função de Wigner, e as variáveis dinâmicas por funções de coordenadas e momenta, nos possibilitando um melhor entendimento do limite clássico [46] da Mecânica Quântica.

Conforme mencionado anteriormente, desde que Galilei notou que a Matemática pode ser usada como linguagem fundamental para descrever a natureza, estudos têm sido desenvolvidos dentro da Física guiados por teorias matemáticas, sendo um exemplo a teoria de grupos.

A teoria de grupos nasceu no século XIX nos trabalhos [47] do matemático francês Évariste Galois, sob o título *Sobre as condições de solubilidade de equações por radicais*. Por volta de 1870, o matemático francês Camille Jordan teve uma notável percepção de que geometria e teoria de grupos estavam relacionados e desenvolveu o que é conhecido nos dias de hoje como a Teoria de Representação; neste mesmo ano, surgiram os trabalhos de Marius Sophus Lie [47] e daí os *Grupos de Lie* com o conceito de simetria associada a um conjunto de transformações. Lie percebeu que a estrutura do grupo pode ser “linearizada”, ou seja, a variedade curva subjacente pode ser substituída por um espaço plano euclidiano; esse espaço é o espaço tangente à variedade. Linearizada dessa maneira, tem-se no espaço tangente uma estrutura de grupo descrevendo como se comportam as transformações próximas do elemento identidade. Esse tipo

de processo conduz à Álgebra de Lie do Grupo de Lie, cuja dimensão depende do número de parâmetros e tem a geometria mais simples por ser plana.

Partindo das idéias de representação de grupo, Oliveira et al. [48, 49] elaboraram uma nova formulação da Mecânica Quântica no Espaço de Fase, sem dispensar os postulados fundamentais, propostos dentro do formalismo de Schrödinger-Heisenberg. Para fazer isso, os autores partiram do conceito de variedade diferenciável e rotularam localmente os pontos dessa variedade por um par de ênuplas de números reais  $(q, p)$ . Em seguida, dotaram essa estrutura de uma 2-forma diferencial bilinear não degenerada chamada de forma Simplética. O conjunto das ênuplas  $(q, p)$ , juntamente com a 2-forma, constitui o espaço de Fase Simplético sendo notado por  $\Gamma$ . A construção do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_\Gamma$  sobre tal espaço de fase é então realizada mediante a definição do Produto Estrela ( $\star$ ). Este produto transforma o espaço de fase em um espaço que é o cenário ideal onde os objetos quânticos são definidos. Em seguida, explorando o fato que as transformações de Galilei formam um grupo, representaram este grupo no espaço  $\mathcal{H}_\Gamma$ , e investigaram a álgebra de Lie que está presente nessa representação; a formulação é completada postulando que os objetos dessa álgebra são os observáveis que são medidas em um sistema físico. A essa estrutura os autores deram o nome de Mecânica Quântica Simplética.

Esta tese, além da introdução compreende seis capítulos, três apêndices e as referências bibliográficas. No segundo capítulo apresentaremos, por completicidade, um resumo das formulações usuais da Mecânica Quântica além de uma pequena introdução ao formalismo Hamiltoniano da Mecânica Clássica. O capítulo 3 contém os aspectos principais da Mecânica Quântica Simplética. Nosso desenvolvimento começará no capítulo 4; neste capítulo desenvolveremos a teoria supersimétrica para a Mecânica Quântica Simplética. A compreensão do conceito de Supersimetria, exige o entendimento de simetria; um objeto tem simetria se admite alguma operação (transformação) que preserva sua estrutura. Um fato que mostra a importância do uso da simetria na física é o resultado obtido em 1915 por uma matemática alemã, Emmy Noether [50], em um brilhante teorema conhecido como Teorema de Noether. Ela demonstrou que, dado um sistema físico, a cada transformação de simetria contínua corresponde uma lei de conservação e vice-versa. Em outro contexto, coube a Wigner em 1939 [51] mostrar pela primeira vez a aplicação da teoria da representação de grupos na Mecânica Quântica, resultados publicados posteriormente em seu famoso livro *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* [52].



Em 1967, os físicos Coleman e Mandula [53] achavam que para sistemas físicos uma simetria estaria necessariamente associada às transformações envolvendo o espaço e tempo. Para surpresa de todos pesquisas intensas, dentro da Teoria Quântica de Campos [54, 55], acabaram por revelar que a natureza admite um novo tipo de simetria adicional, que foi chamada de Supersimetria. A Supersimetria é uma simetria sutil baseada no spin, uma propriedade essencialmente quântica e envolve campos bosônicos e fermiônicos. Tendo surgido no contexto da Teoria Quântica de Campos, deve-se a Nicolai [56] em 1976 a introdução da álgebra supersimétrica na Mecânica Quântica usual. Posteriormente, em 1981, Witten [57] reformulou esse desenvolvimento por meio de postulados tornando-o no que conhecemos como Mecânica Quântica Supersimétrica.

Partindo das idéias de Witten, neste trabalho introduzimos pela primeira vez a álgebra da supersimetria dentro da formulação Simplética da Mecânica Quântica, a qual chamaremos de Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica. Posteriormente notaremos que a álgebra da Supersimetria permite generalizar o Método de Fatoração, introduzido pela primeira vez por Dirac [14] na segunda edição de *The Principles of Quantum Mechanics* com o intuito de resolver algebricamente o problema espectral do oscilador harmônico; esse método possibilita construir a hierarquia de Hamiltonianos, que será apresentada no capítulo 5; com nossa formulação, notaremos que a hierarquia de Hamiltonianos permite encontrar a função de Wigner e resolver determinados problemas espectrais de sistemas físicos, conforme será exposto no capítulo 6; no capítulo 7 encontram as conclusões e perspectivas.

No apêndice A mostramos outras definições do produto estrela e provamos suas principais propriedades; no apêndice B mostramos como construir a álgebra da representação do grupo de Galilei sobre o espaço de Hilbert abstrato  $\mathcal{H}$  com uma extensão central caracterizada por  $M$ ; no apêndice C mostramos como reescrever a equação de Schrödinger no espaço de fase usando uma variável que se mostra útil na formulação supersimétrica. O presente trabalho será finalizado com nossas referências.

# Capítulo 2

## Formulações da Mecânica Quântica

Neste Capítulo faremos uma revisão do formalismo Hamiltoniano do espaço de fase. Apresentaremos as principais dificuldades encontradas pela física clássica no final do século XIX e início do século XX. Neste contexto, mostraremos os principais aspectos das importantes formulações da Mecânica Quântica e finalizaremos fazendo uma revisão do trabalho de Wigner [17].

### 2.1 Formulação Hamiltoniano da Mecânica Clássica

A Mecânica Clássica foi generalizada nas formas quântica e relativística, e constitui o ponto fundamental da física clássica. O enfoque desta seção é a formulação de Hamilton sendo necessário definir o que vem a ser espaço de fase.

Seja  $M$  uma variedade analítica. Em um sistema de coordenadas locais, seus pontos podem ser rotulados pelo produto de  $N$  e  $d$  números inteiros positivos  $(x^1, x^2, \dots, x^{Nd})$ . O espaço de fase [58] é o Fibrado Cotangente  $(T^*M)$  com coordenadas locais:

$$(x^1, x^2, \dots, x^{Nd}; x^{1+Nd}, x^{2+Nd}, \dots, x^{2Nd}).$$

Para uma melhor visualização dos pontos nesse espaço e simplificar os cálculos analíticos, faremos as identificações:

$$x^a \equiv q^a, \quad x^{Nd+a} \equiv p_a, \quad a = 1, 2, \dots, Nd, \quad (2.1)$$

onde  $q^a$  e  $p_a$  são chamados na física de posições e momenta, com  $N$  e  $d$  representando os números de partículas e dimensões, respectivamente.

Uma função sobre o espaço de fase é uma regra que associa um número real a cada ponto de  $(T^*M)$ . Matematicamente, a função pode ser escrita como

$$F : P \mapsto F(P), \quad (2.2)$$

onde  $P$  é um ponto de  $(T^*M)$ .

Em um sistema de coordenadas locais, contendo o ponto  $P \in (T^*M)$ , pode-se definir uma curva com parâmetro  $t$  através de  $d$  funções  $\gamma^a(t) = (q^a(t), p_a(t))$ . Se  $F(q, p)$  é uma função<sup>1</sup> analítica definida sobre  $(T^*M)$ , e  $\gamma$  é uma curva contínua e analítica em  $(T^*M)$ , então a função  $F(t) = F[q(t), p(t)]$  definida sobre  $\gamma$ , será uma função analítica de  $t$ , e

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial q^a} \dot{q}^a + \frac{\partial F}{\partial p_a} \dot{p}_a, \quad (2.3)$$

onde usou-se a regra<sup>2</sup> da cadeia. Como essa relação é válida para qualquer função  $F$ , então

$$\frac{d}{dt} = \dot{q}^a \frac{\partial}{\partial q^a} + \dot{p}_a \frac{\partial}{\partial p_a}, \quad (2.4)$$

que representa um vetor tangente a curva  $\gamma$  no ponto  $P$ . Se permitirmos que  $t$  varie continuamente em (2.4), então estaremos associando um vetor  $\vec{X} \equiv d/dt$  a cada ponto  $P$  da curva  $\gamma$ . Nesse caso, a equação (2.4) torna-se um campo vetorial no espaço de fase.

Uma estrutura simplética em  $(T^*M)$  é introduzida considerando uma 2-forma  $\omega$  não-degenerada e fechada, isto é,  $d\omega = 0$ . Então, o par  $(T^*M, \omega)$  é chamado de Espaço de Fase Simplético e será denotado por  $\Gamma \equiv (T^*M, \omega)$ . Podemos definir uma 2-forma simplética sobre  $\Gamma$ , através da derivada exterior da 1-forma de Poincaré [59],  $\lambda := p_a dq^a$ , isto é:

$$\omega := -d\lambda = dq^a \wedge dp_a. \quad (2.5)$$

Nota-se que esta forma é fechada, desde que  $d\omega = -d(d\lambda) = 0$  pelo Lema de Poincaré, e que é não-degenerada uma vez que, para quaisquer campos vetoriais  $\vec{X}$  e  $\vec{Y} \in \Gamma$ , temos

$$\begin{aligned} \omega(\vec{X}, \vec{Y}) &= dq^a \wedge dp_a(\vec{X}, \vec{Y}) = dq^a(\vec{X})dp_a(\vec{Y}) - dp_a(\vec{X})dq^a(\vec{Y}) \\ &= X^a Y_{a+d} - X_{a+d} Y^a = \vec{X}^T J \vec{Y} = 0 \\ \Rightarrow \vec{X} &= 0, \quad \forall \vec{Y} \in \Gamma. \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Por questão de simplicidade foi considerada uma função que não possui dependência explícita no parâmetro  $t$ .

<sup>2</sup>Usaremos a regra de soma de Einstein, onde índices repetidos em monômios indicam soma.

Na demonstração acima, utilizamos as definições

$$dq^a \wedge dp_a := dq^a \otimes dp_a - dp_a \otimes dq^a, \quad J := \begin{pmatrix} 0_d & I_d \\ -I_d & 0_d \end{pmatrix}_{2d \times 2d}, \quad (2.6)$$

onde  $0_d$  e  $I_d$  são as matrizes nula e identidade de ordem  $d$ , respectivamente.

Uma das características mais importantes, do ponto de vista geométrico, do espaço de fase simplético é que a 2-forma  $\omega$  definida sobre  $\Gamma$  faz um papel similar a de um tensor métrico definido nas variedades riemanianas:  $\omega$  estabelece um mapeamento inversível 1–1 entre vetores e 1-formas sobre  $\Gamma$ . Se  $\vec{X}$  é um campo vetorial sobre  $\Gamma$ , definimos um campo de 1-forma por

$$\sigma := \omega(\vec{X}). \quad (2.7)$$

Nota-se, no entanto, que existe uma diferença crucial entre  $\omega$  e o tensor métrico, uma vez que a matriz  $J$ , equação (2.6), associada a  $\omega$  é anti-simétrica, diferentemente da matriz simétrica associada ao tensor métrico.

Agora, substituindo (2.4) em (2.7) e usando a primeira definição de (2.6), temos

$$\sigma = \dot{q}^a dp_a - \dot{p}_a dq^a, \quad (2.8)$$

em que, na obtenção da relação acima, faz-se uso da relação fundamental  $dx^i \cdot \partial/\partial x^j = \delta_j^i$  entre base dual e base tangente.

Seja  $H = H(q, p)$  uma função analítica sobre  $\Gamma$ ; então, o gradiente de  $H$  em coordenadas locais, é

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q^a} dq^a + \frac{\partial H}{\partial p_a} dp_a,$$

que, comparando com (2.8), encontramos

$$\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial q^a}, \quad \dot{q}^a = \frac{\partial H}{\partial p_a}. \quad (2.9)$$

Este conjunto de equações é conhecido como equações de Hamilton [6], e a função escalar  $H = H(q, p)$  é chamada Hamiltoniana do sistema; neste caso, o parâmetro  $t$  é interpretado como tempo, e o campo (2.4) é chamado de Campo Vetorial Hamiltoniano, isto é,  $\vec{X}_H = d/dt$ .

Substituindo (2.9) em (2.3), temos

$$\frac{d}{dt}F = \{F, H\}, \quad (2.10)$$

onde definimos o parêntese

$$\{F, H\} := \frac{\partial F}{\partial q^a} \frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial F}{\partial p_a} \frac{\partial H}{\partial q^a}, \quad (2.11)$$

chamado de parêntese de Poisson.

O formalismo de Hamilton nos dá uma belíssima interpretação, do ponto de vista geométrico, de um sistema físico. Nesse caso, o sistema é visualizado por apenas um ponto em um espaço  $2Nd$  dimensional<sup>3</sup>, representado por eixos perpendiculares, como mostrado na figura abaixo:

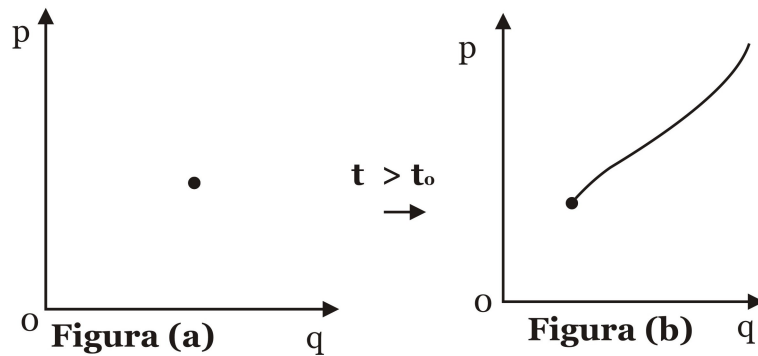


Figura 2.1: Evolução temporal do sistema físico no espaço de fase a partir do instante  $t_0$ .

Na figura (2.1)(a) todo o sistema é representado por apenas uma ponto. À medida que o tempo evolui, o sistema passa a descrever uma trajetória, como pode-se notar na figura (2.1)(b); nesse cenário, as variáveis dinâmicas são representadas por funções desses pontos que denotamos por  $O(q, p)$ . Essa forma de representar a dinâmica clássica do sistema é a chave para se introduzir o método dos ensembles.

A teoria dos ensembles, dentro da física, não se restringe a uma mecânica específica. Seu maior interesse se encontra no estudo de um conjunto de infinitos estados ou réplicas de um dado sistema físico. No caso da Mecânica Clássica esse conjunto de estados não é mais representado por um ponto, e sim por uma função  $\rho(q, p; t)$  com interpretação probabilística. Nesse caso, sua evolução temporal é regida pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p; t) = \{H(q, p), \rho(q, p; t)\}, \quad (2.12)$$

chamada de equação de Liouville.

Uma descrição alternativa para a Mecânica Estatística Clássica foi proposta por Mário Schönberg [60–62] com a noção de amplitude de probabilidade associada ao estado clássico.

<sup>3</sup>Aqui,  $N$  é o número de partículas.

Prescindindo o uso da escala atômica, Schönberg considerou uma amplitude de probabilidade clássica,  $\psi(q, p; t)$ , tal que

$$f_S(q, p, t) = \psi^*(q, p; t)\psi(q, p; t) = |\psi(q, p; t)|^2. \quad (2.13)$$

Segue então que se  $\psi(q, p; t)$  é uma solução da equação (2.12), então  $f_S(q, p; t)$  é uma solução da mesma equação, ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t} f_S(q, p; t) = \{H(q, p), f_S(q, p; t)\}. \quad (2.14)$$

Nesse trabalho, Schönberg mostrou que a noção de amplitude de probabilidade no espaço de fase pode ser utilizada para descrever sistemas clássicos com muitas partículas através do formalismo de Liouville-Poisson; sua formulação foi posteriormente mostrada ser o limite clássico [63] da Dinâmica de Campos Térmicos desenvolvida por Umezawa [64].

Apesar do enorme sucesso em vários domínios, a Teoria Clássica não conseguia explicar a estabilidade do átomo. Mesmo considerando o átomo mais simples como o de Hidrogênio nota-se que, segundo as leis da física clássica [65], este sistema é instável, pois o elétron orbitando o núcleo possui aceleração centrípeta e irradia energia, o que o faria colidir com o núcleo; como isso não ocorre, observa-se que essa formulação é inapropriada. A solução do problema veio com Bohr em 1913 [66], formulando seu modelo atômico, baseado em um conjunto de hipóteses.

Situando-se à frente de fatos experimentais, o físico francês Louis de Broglie em 1923 [67] propôs que a hipótese da dualidade onda-corpúsculo fosse aplicada em geral a objetos microscópicos, ou seja, que tanto a matéria como a radiação exibissem aspectos corpusculares e ondulatórios. Essa hipótese solidificou-se nos trabalhos de Heisenberg e Schrödinger e possibilitou o desenvolvimento de uma nova mecânica, a Mecânica Quântica.

Nesse desenvolvimento Heisenberg apoiou-se no formalismo da Mecânica Matricial [68], enquanto Schrödinger [69] baseou-se nas idéias de “ondas de matéria” para formular a Mecânica Ondulatória. Considerando a equivalência desses dois formalismos [70], Dirac desenvolveu um formalismo que podemos denominar Abstrato, introduzindo na Mecânica Quântica a idéia de Bras e Kets.

## 2.2 Formulação Abstrato

A linguagem da Física Quântica apoia-se na conceito matemático de espaço vetorial. Sabe-

mos [71] que a teoria de espaço vetorial basea-se na definição, entre os seus elementos, de adição e multiplicação por escalar, satisfazendo um conjunto de axiomas. Pode-se mostrar que todos os espaços vetoriais de dimensões finitas são isomorfos uns aos outros, mas deve-se analisar cuidadosamente o caso de espaços vetoriais de dimensões infinitas.

De uma forma geral, usando a notação de bra e ket, seja  $\{|\phi_n\rangle\}$  um conjunto base ortonormal. Considere o espaço vetorial  $\Xi$  formado por todas as combinações lineares do tipo

$$|\chi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n |\phi_n\rangle,$$

onde  $C_n$  pertence ao corpo dos complexos.

Dentre estas combinações, tomemos aquelas

$$|\psi_m\rangle = \sum_{n=1}^m C_n |\phi_n\rangle, \quad (2.15)$$

para os quais:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \left\| \sum_{n=1}^m C_n |\phi_n\rangle - |\Psi\rangle \right\| = 0, \quad (2.16)$$

onde  $|\Psi\rangle \in \Xi$ , com o produto escalar denotado por  $\langle \quad | \quad \rangle$ , satisfazendo

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 < \infty, \quad (2.17)$$

sendo  $\langle \Psi |$  o vetor dual a  $|\Psi\rangle$ .

O conjunto de entes dados por (2.15), satisfazendo as relações (2.16) e (2.17), define o espaço de Hilbert da Mecânica Quântica [72] que denotaremos por  $\mathcal{H}$ ; neste caso,  $\mathcal{H} \subset \Xi$ , a relação (2.16) exprime o caráter de completudeza do espaço de Hilbert e é expressa em muitos livros-texto de Mecânica Quântica [73–75], na forma

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \hat{1}, \quad (2.18)$$

onde  $\hat{1}$  é o operador identidade, isto é,  $\hat{1} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ .

Em  $\mathcal{H}$  postula-se que o estado de qualquer sistema físico é representado por um vetor<sup>4</sup>  $|\Psi\rangle$ , chamado de Ket, com seu dual  $\langle \Psi |$  chamado de vetor Bra; o produto escalar (2.17) é chamado de bracket.

---

<sup>4</sup>Por questão de simplicidade foi omitida a dependência explícita do tempo nestes vetores.

Postula-se que as grandezas físicas medidas em laboratório, aqui chamadas de observáveis, são representadas por operadores  $\hat{O}$  lineares hermitianos, ou seja:  $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ . Com esse postulado, os resultados das medidas são os espectros destes operadores, sendo que a média destas grandezas  $\bar{O}$ , no estado  $|\Psi\rangle$ , é dada por

$$\bar{O} = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle. \quad (2.19)$$

Um dos operadores mais importantes nesse contexto é o Hamiltoniano do sistema, denotado por  $\hat{H}$ , sendo a evolução temporal dos estados dada pela equação dinâmica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle, \quad (2.20)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Essa equação é chamada de equação de Schrödinger e é a equação básica de Mecânica Quântica não relativística.

A exigência do produto escalar (2.17) ser finito deve-se à consistência da teoria com o processo de medida, que é um dos pontos fundamentais da Mecânica Quântica. Para elaborá-lo, iremos nos guiar pelas palavras de Dirac<sup>5</sup> [14]:

“Uma medição sempre faz o sistema pular para um autoestado da variável dinâmica que está sendo medida, sendo que, o autovalor pertencendo ao autoestado é igual ao resultado da medida”.

Isso significa que antes de fazer uma medida do observável, o estado do sistema pode ser representado como uma combinação linear (2.15) dos autovetores  $|\phi_n\rangle$  do operador hermitiano  $\hat{O}$ , que representa a variável dinâmica  $O$ , ou seja

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n |\phi_n\rangle. \quad (2.21)$$

Isso sempre é possível devido à completeza (2.16) do conjunto de autovetores do operador. Quando a medida é feita, o estado  $|\Psi\rangle$  do sistema “colapsa” para um dos autovetores  $|\phi_n\rangle$  do observável  $\hat{O}$ , ou seja

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{medição de } O} |\phi_n\rangle.$$

---

<sup>5</sup>“In this way we see that a measurement always causes the system to jump into an eigenstate of the dynamical variable that is being measured, the eigenvalue this eigenstate belongs to being equal to the result of the measurement”.



Nota-se dessa forma que o ato de medir altera o estado. Quando a medida faz  $|\Psi\rangle$  mudar para  $|\phi_n\rangle$ , tem-se que o valor medido de  $O$  é  $o_n$ . É nesse sentido que o resultado de um processo de medida resulta em um dos autovalores do observável  $\hat{O}$  que descreve a grandeza  $O$  que está sendo medida. No entanto, antes da medida ser feita, não se sabe para qual dos autovetores  $|\phi_n\rangle$  de  $\hat{O}$  o estado do sistema colapsará; então postula-se que a probabilidade do estado  $|\Psi\rangle$  do sistema colapsar para um particular autovetor  $|\phi_n\rangle$  e resultar em um valor  $o_n$  da observável  $O$ , que está sendo medida, é dada por

$$\text{Probabilidade de obter } o_n = |\langle\phi_n | \Psi\rangle|^2. \quad (2.22)$$

Embora tenhamos falado até aqui de um único sistema físico, para determinar (2.22) empiricamente deve-se recorrer a métodos estatísticos, e usar o conceito de ensembles. Esse conceito apareceu de forma sistemática na Teoria Quântica com o formalismo da Matriz Densidade e nesse caso, conforme veremos, o estado do sistema passará a ser representado por um operador.

## 2.3 Formulação da Matriz Densidade

Conceitos da Mecânica Estatística Clássica podem ser estendidos para o estudo de fenômenos quânticos. Neste contexto, considera-se um conjunto infinito de réplicas de um dado sistema físico ou seja um ensemble, isto é, réplicas com mesmo Hamiltoniano, que no instante inicial se encontram em diferentes estados  $|\Psi^{(i)}\rangle$  normalizados. Nessas condições, sabe-se que o máximo de informação que se pode ter é uma probabilidade  $\gamma_i$  do sistema se encontrar no estado  $|\Psi^{(i)}\rangle$ . Claramente deve-se ter

$$\gamma_i \geq 0, \quad \sum_i \gamma_i = 1. \quad (2.23)$$

Para se obter uma expressão para o valor médio no *ensemble* de um observável  $O$ , inicialmente notemos que qualquer observável tem seu valor médio no estado  $|\Psi^{(i)}\rangle$  dado de acordo com a equação (2.19). Assim, podemos fazer uma *segunda* média, dessa vez no ensemble, obtendo:

$$\langle O \rangle = \sum_i \gamma_i \bar{O}^{(i)} = \sum_i \gamma_i \langle \Psi^{(i)} | \hat{O} | \Psi^{(i)} \rangle. \quad (2.24)$$

Sabemos por outro lado que os autovetores  $|\phi_n\rangle$  do operador  $\hat{O}$  formam um conjunto completo no espaço de Hilbert e satisfazem a relação (2.18). Portanto, substituindo (2.18) em (2.24) encontramos

$$\langle O \rangle = \sum_n \langle \phi_n | \hat{O} \hat{\rho} | \phi_n \rangle = Tr(\hat{O} \hat{\rho}), \quad (2.25)$$

onde  $Tr$  denota o traço, e definimos o operador:

$$\hat{\rho} := \sum_i \gamma_i |\Psi^{(i)}\rangle \langle \Psi^{(i)}|, \quad (2.26)$$

chamado por Neumann [15] de operador estado ou Matriz Densidade. Interpreta-se  $\gamma_i$  como a probabilidade de encontrar um membro do ensemble no estado  $|\Psi^{(i)}\rangle \langle \Psi^{(i)}|$ . Claramente esse operador satisfaz

$$Tr(\rho) = 1, \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}, \quad \langle \Psi^{(i)} | \hat{\rho} | \Psi^{(i)} \rangle \geq 0.$$

A média (2.25) dos observáveis é que deve ser comparada com o resultado experimental. Assume-se que a mudança de  $\hat{\rho}$  é governada unicamente pela evolução temporal dos Kets relativos aos estados,  $|\Psi^{(i)}\rangle$ ; então, derivando (2.26) com relação ao tempo e usando a relação (2.20), temos uma equação básica da Formulação Estatística Quântica, ou seja

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2.27)$$

conhecida como equação de von Neumann, onde define-se o comutador de operadores abstratos  $\hat{X}$  e  $\hat{Y}$  da seguinte maneira

$$[\hat{X}, \hat{Y}] := \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X}. \quad (2.28)$$

A resolução da equação (2.27) depende das condições impostas sobre sua solução; com efeito, tem-se [7] três tipos diferentes de ensembles: microcanônico, ideal para sistemas fechados; canônico, ideal para sistemas que trocam energia; e gran-canônico, ideal para sistemas que trocam energia e partículas.

O operador de estado (2.26) descreve o que é denominado mistura [76]. O estado puro é caracterizado por um conjunto de réplicas do sistema que no instante inicial encontram-se no mesmo estado  $|\Psi\rangle$ , de tal modo que temos

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi|, \quad (2.29)$$

satisfazendo:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}, \quad \text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1.$$

O desenvolvimento da Mecânica Quântica apresentado nesta seção é conhecido como formulação da Matriz Densidade. Nessa formulação, a todo estado quântico corresponde um operador hermitiano  $\hat{\rho}$ , não-negativo de traço unitário, a partir do qual o valor médio de qualquer observável é obtido através da relação (2.25).

Um outro desenvolvimento de interesse é o formalismo de Schrödinger ou formalismo Ondulatório. Esse formalismo, conforme veremos, é a base para o formalismo de Wigner da Mecânica Quântica no espaço de fase.

## 2.4 Formulação de Schrödinger

Conforme citamos, baseado na hipótese de ondas de matéria do físico de Broglie [67], Schrödinger [77–79] desenvolveu a Mecânica conhecida como Ondulatória para a descrição de fenômenos quânticos, observando uma correspondência entre o movimento clássico de um ponto do sistema e o movimento do pacote de onda no espaço de configuração. Nesta seção apresentaremos um resumo dessa formulação usando o desenvolvimento Abstrato de Dirac. Consideremos o operador posição  $\hat{Q} \equiv (\hat{Q}_1, \dots, \hat{Q}_{Nd})$  de um sistema de  $N$  partículas em um espaço de dimensão  $d$  com espectro contínuo,

$$\hat{Q}_\mu |x\rangle = x_\mu |x\rangle, \quad \mu = 1, \dots, Nd$$

onde  $x \in \mathbb{M}^{Nd}(x)$  e  $\{|x\rangle\}$  é formalmente uma base contínua no espaço de Hilbert. Neste caso,  $\mathbb{M}^{Nd}(x)$  é uma variedade diferenciável  $Nd$ -dimensional, onde seus pontos são rotulados localmente<sup>6</sup> por  $Nd$ -nuplas de números reais  $x = (x_1, \dots, x_{Nd})$ . Os operadores fundamentais nesta representação são:  $\hat{Q}_\mu = x_\mu$  e  $\hat{P}_\mu = -i\hbar\partial/\partial x_\mu$ . Se  $x \neq x'$  então, pela condição do operador ser hermitiano, temos

$$\langle x | x' \rangle = 0,$$

---

<sup>6</sup>Deve-se ter em mente que  $\mathbb{M}^{Nd}$  é localmente semelhante ao espaço vetorial  $\mathbb{R}^{Nd}$ .

e, da mesma forma que temos no caso discreto  $\sum_n \langle \phi_n | \phi_m \rangle = 1$ , também temos no caso contínuo

$$\int \langle x | x' \rangle dx = 1, \quad \text{o que conduz a} \quad \langle x | x' \rangle = \delta(x - x'), \quad (2.30)$$

onde  $\delta(x - x') \equiv \delta(x_1 - x'_1) \dots \delta(x_{Nd} - x'_{Nd})$  é a função delta de Dirac.

Observe-se que, como  $\{|x\rangle\}$  formalmente é um conjunto completo, pode-se escrever qualquer vetor  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  como uma combinação linear desses vetores da base, isto é

$$|\Psi\rangle = \int dx' \Psi(x') |x'\rangle. \quad (2.31)$$

Projetando este vetor na base  $\langle x |$  e usando (2.30) segue que:

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle. \quad (2.32)$$

Assim, o estado do sistema  $|\Psi\rangle$  passará a ser representado por uma função  $\Psi(x) \in \mathcal{H}_x$ , onde  $\mathcal{H}_x$  é o espaço das funções  $\mathcal{L}^2$  complexas de quadrado integrável; essa descrição é denominada representação de coordenadas.

Projetando o vetor da equação (2.20) na base  $\langle x |$ , temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) = \hat{H} \Psi(x). \quad (2.33)$$

A equação acima é conhecida como equação de Schödinger na representação das coordenadas e suas soluções são interpretadas, de acordo com Born [80], como amplitudes de probabilidades.

Substituindo (2.32) em (2.31), obtemos

$$\int dx' |x'\rangle \langle x'| = \hat{1}. \quad (2.34)$$

Esta relação evidencia a completeza do espaço  $\mathcal{H}_x$ . Substituindo (2.18) e (2.34) na relação (2.25), chega-se ao valor médio das variáveis dinâmicas que poderá ser escrito, no formalismo de Schödinger, da seguinte forma

$$\langle O \rangle = \int dx' dx'' O(x', x'') \rho(x', x''), \quad (2.35)$$

onde identifica-se os elementos de matriz do operador  $\hat{O}$ , proposto por von Neumann [15], da seguinte forma

$$O(x', x'') \equiv \langle x' | \hat{O} | x'' \rangle, \quad (2.36)$$

e os elementos da Matriz Densidade na representação das coordenadas, por

$$\rho(x', x'') \equiv \langle x' | \hat{\rho} | x'' \rangle. \quad (2.37)$$

Nessa representação pode-se ter o produto escalar bem definido, isto é

$$(\Psi_m, \Psi_n)_x = \int dx \Psi_m^*(x) \Psi_n(x), \quad m, n = 1, 2, \dots$$

## 2.5 Formulação de Wigner

No final da década de 20 do século XX o estudo da Mecânica Quântica estava voltado para sua aplicação, sobretudo na Física Atômica. Até aquele momento, o primeiro físico a estudar um sistema quântico no espaço de fase tinha sido Dirac [81] com o objetivo de obter uma justificativa teórica do Modelo Atômico de Thomas [82]. Nesse trabalho, Dirac partiu das equações do Campo Auto-Consistente [83] e realizou duas aproximações: a primeira assumiu que coordenadas e momenta comutam, e a segunda foi feita acerca da densidade de elétrons no espaço de fase:

“para cada valor de  $q$ , o espaço de fase está saturado com dois elétrons por volume  $(2\pi\hbar)^3$ , em uma região para qual a magnitude do momentum  $p$  é menor do que um certo valor  $P$ , e vazio fora desta região,” ou seja, em notação:

$$\rho(q, p) = \begin{cases} 2, & \text{se } |p| < P, \\ 0, & \text{se } |p| > P, \end{cases}$$

onde  $P$  é uma função de  $q$ .

Nessas condições, Dirac chegou à seguinte equação diferencial:

$$\frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{d}{dr} \left( \frac{P^2}{2m} - \frac{2e^2}{\pi\hbar} P \right) \right\} = \frac{4e^2}{3\pi\hbar^2} r^2 P^3, \quad (2.38)$$

que difere da equação na teoria de Thomas somente pelo termo linear  $P$  no primeiro membro do lado esquerdo. Percebe-se que o objetivo de Dirac era justificar a teoria do modelo atômico de Thomas.

Na mesma época, motivado pelo estudo da equação de estado do gás de Hélio, Wigner [17] publicou um artigo intitulado - *Correções Quânticas para a Termodinâmica do Equilíbrio* - que

tinha como objetivo efetuar correções quânticas no regime de baixas temperaturas da Mecânica Estatística Clássica.

Nesse trabalho Wigner considera um ensemble relativo ao estado puro e realiza uma transformada de Fourier nos elementos da Matriz Densidade (2.37) obtendo assim uma função

$$P(x; p) = \left( \frac{1}{\pi\hbar} \right)^n \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y}, \quad (2.39)$$

posteriormente chamada função de Wigner; em (2.39), por questão de simplicidade<sup>7</sup> identifica-se:

$$x \equiv (x_1, \dots, x_n), \quad p \equiv (p_1, \dots, p_n), \quad p \cdot y = p_1 y_1 + \dots + p_n y_n.$$

Conforme veremos, a função de Wigner pode assumir valores negativos em algumas regiões do espaço de fase, o que o levou a chamar  $P(x; p)$  de função pseudo-probabilidade. A função (2.39) satisfaz várias propriedades podendo-se destacar as seguintes:

**i) Realidade**

$$\begin{aligned} P^*(x; p) &= \left[ \left( \frac{1}{\pi\hbar} \right)^n \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} \right]^* \\ &= \left( \frac{1}{\pi\hbar} \right)^n \int (-dy) \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} \\ &= P(x; p), \end{aligned}$$

onde foi substituído  $y \rightarrow -y$ , e usou-se,  $-\int_{+\infty}^{-\infty} dy = +\int_{-\infty}^{+\infty} dy$ .

**ii) Densidade de probabilidade para as coordenadas**

Integrando (2.39) com relação a  $p$ , obtém-se

$$\begin{aligned} \int P(x; p) dp &= \int dy \left\{ \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) \left[ \left( \frac{1}{\pi\hbar} \right)^n \int dp e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} \right] \right\} \\ &= \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) \delta^n(y) \\ &= \Psi^*(x) \Psi(x) = |\psi(x)|^2. \end{aligned}$$

**iii) Densidade de probabilidade para os momenta**

---

<sup>7</sup>Aqui fez-se  $n = Nd$ , onde  $N$  é o número de partículas.

Fazendo as substituições:  $u = x + y$ ,  $v = x - y$ ,  $|J| = \frac{1}{2^n}$ , onde  $|J|$  é o determinante da matriz jacobiana da transformação, tem-se que a relação (2.39), com uma integração com relação a  $x$ , resulta em:

$$\begin{aligned} \int dx P(x; p) &= \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dudv \Psi^*(u) \Psi(v) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot (u-v)} \\ &= \left[ \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^{\frac{n}{2}} \int du \Psi^*(u) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot u} \right] \cdot \left[ \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^{\frac{n}{2}} \int dv \Psi(v) e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot v} \right] \\ &= \Phi^*(p) \Phi(p) = |\Phi(p)|^2. \end{aligned}$$

#### iv) Normalização

Devido às interpretações probabilísticas de  $|\Psi(x)|^2$  e  $|\Phi(p)|^2$ , tem-se

$$\int dx dp P(x; p) = \int dx \Psi^*(x) \Psi(x) = \int dp \Phi^*(p) \Phi(p) = 1.$$

#### v) Valores médios

Se a função que representa as variáveis dinâmicas é tal que  $O(x; p) = f(p) + g(x)$ , então a relação (2.39) nos permite calcular seu valor médio, uma vez que

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \int dx dp [f(p) + g(x)] P(x; p) = \int dx dp f(p) P(x; p) + \int dx dp g(x) P(x; p) \\ &= \int f \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dp e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot p} \\ &+ \int g(x) \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^n \int dp e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot p} \\ &= \int dx \left[ f \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) + g(x) \right] \int dy \Psi^*(x+y) \Psi(x-y) \delta(y) \\ &= \int dx \Psi^*(x) \left[ f \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) + g(x) \right] \Psi(x), \end{aligned}$$

onde, como as variáveis dinâmicas são representadas por operadores e estamos na representação das coordenadas, substituímos na relação anterior  $p$  pela expressão  $-i\hbar \partial_x$ .

#### vi) Não positividade definida

Se o sistema está no estado  $\Psi(x)$ , a probabilidade de, por um processo de medida, obter um estado  $\Phi(x)$  é dada por  $|(\Psi, \Phi)_x|^2$ , que representa o quadrado do valor absoluto do

produto escalar entre os dois vetores. Em termos da função de Wigner, a probabilidade de transição poderá ser escrita como

$$|(\Psi, \Phi)_x|^2 = (\pi\hbar)^n \int dx dp P_\Psi(x; p) P_\Phi(x; p).$$

Esta relação evidencia o fato de Wigner chamar a função  $P(x; p)$  de pseudo-probabilidade, uma vez que ela não é positiva em todo o espaço de fase. Para comprovar isso, basta notar que o primeiro membro da relação acima é nulo quando  $\Psi$  e  $\Phi$  forem ortogonais, e isto não pode acontecer se as duas funções de Wigner forem positivas em todo o espaço de fase. Esta relação, no entanto não impede de usar a função (2.39) para fazer cálculos auxiliares satisfazendo propriedades de probabilidade [84].

**vii)** Equação de evolução temporal

Sabe-se que  $\Psi(x)$  e  $\Psi^*(x)$  evoluem no tempo de acordo com as equações:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x) &= - \sum_{k=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \Psi(x) + V(x) \Psi(x); \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x) &= \sum_{k=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \Psi^*(x) - V(x) \Psi^*(x). \end{cases} \quad (2.40)$$

Derivando a função (2.39) com relação ao tempo e usando as equações anterior, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x; p) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \sum_k^n \frac{i\hbar}{2m_k} \int dy e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} \left[ - \frac{\partial^2 \Psi^*(x+y)}{\partial x_k^2} \Psi(x-y) + \Psi^*(x+y) \frac{\partial^2 \Psi(x-y)}{\partial x_k^2} \right] \\ &+ \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \frac{i}{\hbar} \int dy e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} [V(x+y) - V(x-y)] \Psi^*(x+y) \Psi(x-y). \end{aligned}$$

Nosso objetivo é colocar a expressão acima na forma de uma equação diferencial para  $P(x; p)$ ; para isso, a equação é dividida em duas partes. Seja a primeira parte designada por

$$I \equiv \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \sum_k^n \frac{i\hbar}{2m_k} \int dy e^{\frac{i}{\hbar} 2p \cdot y} \left[ - \frac{\partial^2 \Psi^*(x+y)}{\partial x_k^2} \Psi(x-y) + \Psi^*(x+y) \frac{\partial^2 \Psi(x-y)}{\partial x_k^2} \right],$$

em que podemos trocar a diferencial relativa a  $\partial/\partial x_k$  por uma diferencial relativa a  $\partial/\partial y_k$ , e depois de uma integração por partes, encontrar

$$I = - \sum_k^n \frac{p_k}{m_k} \frac{\partial}{\partial x_k} P(x; p).$$



A segunda parte designemos por  $II$ , ou seja

$$II \equiv \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \frac{i}{\hbar} \int dy e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} [V(x+y) - V(x-y)] \Psi^*(x+y)\Psi(x-y).$$

Para desenvolvê-la, vamos usar a expansão de Taylor multidimensional [85]

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n = 0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_1^{\lambda_1} \dots \partial x_n^{\lambda_n}} \Big|_{x_1 = \dots = x_n = 0} x_1^{\lambda_1} \dots x_n^{\lambda_n},$$

e reescrevê-la na forma

$$II = \frac{i}{(\pi\hbar)^n \hbar} \int dy e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} \Psi^* \Psi \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n = 0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} V}{\partial x_1^{\lambda_1} \dots \partial x_n^{\lambda_n}} [y_1^{\lambda_1} \dots y_n^{\lambda_n} - (-y_1)^{\lambda_1} \dots (-y_n)^{\lambda_n}].$$

Nesse somatório só sobreviverão os termos de potências ímpares em  $y$ . Portanto,

$$II = \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \frac{i}{\hbar} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n = 1}^{\infty} \frac{2}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} V(x)}{\partial x_1^{\lambda_1} \dots \partial x_n^{\lambda_n}} \int dy (y_1^{\lambda_1} \dots y_n^{\lambda_n}) e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} \Psi^*(x+y)\Psi(x-y),$$

onde  $\lambda_1 + \dots + \lambda_n = \text{ímpar}$ . Usando a relação

$$\left( \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^\lambda \int dy e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} \Psi^*(x+y)\Psi(x-y) = \int dy e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} y^\lambda \Psi^*(x+y)\Psi(x-y),$$

tem-se:

$$II = \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n = 1}^{\infty} \frac{2i}{\hbar} \left( \frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} \frac{1}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} V}{\partial x_1^{\lambda_1} \dots \partial x_n^{\lambda_n}} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n}}{\partial p_1^{\lambda_1} \dots \partial p_n^{\lambda_n}} \frac{1}{(\pi\hbar)^n} \int dy e^{\frac{i}{\hbar}2p \cdot y} \Psi^* \Psi,$$

onde a última integral é igual à função (2.39). Na equação original, comendo as duas relações  $I$  e  $II$ , tem-se a equação diferencial procurada, isto é

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \sum_k^n \frac{p_k}{m_k} \frac{\partial P}{\partial x_k} + \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n = 1}^{\infty} \left( \frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n - 1} \frac{1}{\lambda_1! \dots \lambda_n!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} V(x)}{\partial x_1^{\lambda_1} \dots \partial x_n^{\lambda_n}} \frac{\partial^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} P}{\partial p_1^{\lambda_1} \dots \partial p_n^{\lambda_n}}. \quad (2.41)$$

Nota-se que duas observações são necessárias:

- i) A obtenção da equação acima foi possível com o desenvolvimento da energia potencial em série de Taylor;
- ii) A equação (2.41), se reduz a uma equação clássica para o problema de uma partícula livre.

Há uma analogia entre a função de Wigner e a função distribuição de probabilidade da Mecânica Clássica que obedece a equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho(x; p)}{\partial t} = - \sum_k \frac{p_k}{m_k} \frac{\partial \rho(x; p)}{\partial x_k} + \sum_k \frac{\partial V(x)}{\partial x_k} \frac{\partial \rho(x; p)}{\partial p_k}. \quad (2.42)$$

De fato, nota-se que a equação acima diferirá de (2.41) em derivadas de  $\mathbb{V}$  maiores ou iguais a 3 ou em potências de  $\hbar$  superiores à 2ª ordem como pode-se observar, tomando  $d = N = 1$  em (2.41), ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= - \frac{p}{m} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{2i}{\hbar} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left( \frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda} \frac{1}{\lambda!} \frac{\partial^{\lambda} V(x)}{\partial x^{\lambda}} \frac{\partial^{\lambda} P}{\partial p^{\lambda}} \\ &= - \frac{p}{m} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial V(x)}{\partial x} \frac{\partial P}{\partial p} + \frac{1}{3} \left( \frac{\hbar}{2i} \right)^2 \frac{\partial^3 V(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 P}{\partial p^3} + \dots \end{aligned} \quad (2.43)$$

Explorando essa analogia clara, considere um sistema físico descrito por uma função Hamiltoniana da forma

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{onde,} \quad V(x) = a + bx + cx^2.$$

Neste caso, tem-se:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{dV(x)}{dx}, \quad \text{onde,} \quad \frac{d^k}{dx^k} V(x) = 0, \quad k \geq 3,$$

e a equação (2.43), torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x; p) = \frac{\partial V(x)}{\partial x} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{p}{m} \frac{\partial P}{\partial x} = \{H(x, p), P(x; p)\}.$$

Portanto, em um sistema tipo oscilador harmônico simples, a função de Wigner satisfaz a equação de Liouville clássica embora, conforme mencionado na propriedade (vi), não podemos interpretar  $P(x; p)$  como uma verdadeira função distribuição de probabilidade.

Embora Wigner tenha iniciado seu trabalho considerando o ensemble relativo a estado puro, ele também considerou uma mistura. Nesse caso, pode-se reescrever (2.39) na forma

$$P(x; p) := \sum_i \gamma_i P^{(i)}(x; p), \quad \text{com,} \quad \sum_i \gamma_i = 1, \quad (2.44)$$

onde  $P^{(i)}$  é dada por (2.39). Nessas condições, conforme citado na seção (2.3), interpreta-se  $P^{(i)}(x; p)$  como a função probabilidade de encontrar um membro do ensemble no estado  $\Psi^{(i)}(x)$ .

Para finalizar este capítulo notemos que, embora o trabalho de Wigner possa ser considerado como uma formulação alternativa da Mecânica Quântica, há uma forte dependência dessa formulação com aquela de Schrödinger uma vez que, para encontrar (2.39), é preciso primeiro obter  $\Psi(x)$  via equação (2.40). Com efeito, no caso do oscilador harmônico, por exemplo, ao substituir o potencial  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  em (2.40), tem-se

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}2^n n! b)^{\frac{1}{2}}} \mathbb{H}_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}, \quad n = 0, 1, \dots,$$

onde<sup>8</sup>  $\mathbb{H}_n$  é o polinômio de Hermite de ordem  $n$ , e o parâmetro  $b$  é identificado como  $b^2 \equiv \hbar/m\omega$ . Substituindo então a relação acima em (2.39), obtém-se

$$P_n(x; p) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}2^n n! b} e^{-\frac{2}{\hbar\omega}H(x,p)} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-q^2} \mathbb{H}_n^*(q + z^*) \mathbb{H}_n(q + z). \quad (2.45)$$

onde:

$$z \equiv \frac{x}{b} + \frac{ibp}{\hbar}, \quad q \equiv \frac{y}{2b} - \frac{ibp}{\hbar}, \quad H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

e usando a identidade [86]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-q^2} \mathbb{H}_n^*(q + z^*) \mathbb{H}_n(q + z) = \sqrt{\pi} 2^n n! \mathbb{L}_n(2|z|^2),$$

em (2.45), tem-se para a função de Wigner

$$P_n(x; p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^n \mathbb{L}_n\left(\frac{4H}{\hbar\omega}\right) e^{-\frac{2}{\hbar\omega}H(x,p)}, \quad (2.46)$$

onde  $\mathbb{L}_n$  são os polinômios de Laguerre.

Veremos no Capítulo 3 que uma forma de contornar algumas dificuldades encontradas no formalismo de Wigner é formular a Mecânica Quântica usando diretamente funções de quadrado integráveis definidas sobre o espaço de fase o que possibilita construir um espaço de Hilbert apoiado nas idéias de grupo de simetria.

---

<sup>8</sup>Em vários momentos usaremos essa notação “dobrada” para entes escalares.

# Capítulo 3

## Mecânica Quântica Simplética

No presente Capítulo será desenvolvida uma formulação da Mecânica Quântica no espaço de fase baseada na representação de grupo de simetria. Conforme explicitado na Introdução, na elaboração deste capítulo, serão usadas as idéias propostas por Oliveira *et al.*, [48, 49]. A redação deste Capítulo seguirá da seguinte forma: primeiro, com a construção do espaço de Hilbert sobre o espaço de fase, será exposta a representação sobre este espaço, da álgebra de Lie do grupo de Galilei; em seguida, identificaremos os geradores do grupo com os observáveis físicos deste estudo; e posteriormente dentro desse formalismo, obteremos a equação de Schrödinger e faremos a conexão com a função de Wigner.

### 3.1 Espaço de Hilbert $\mathcal{H}_\Gamma$ sobre o Espaço de Fase $\Gamma$

Pode-se construir uma estrutura de espaço vetorial com funções definidas sobre  $\Gamma$ , introduzindo as operações de soma (+) e multiplicação por um número complexo  $c$  da função (2.2) através de

$$(F_1 + F_2)(q, p; t) := F_1(q, p; t) + F_2(q, p; t) \quad \text{e} \quad (cF)(q, p; t) := cF(q, p; t). \quad (3.1)$$

É possível mostrar que, com as definições acima, estas funções satisfazem axiomas de espaço vetorial  $\mathcal{V}_\Gamma$ ; além disso, assumiremos que estas funções são de classes  $\mathcal{C}^\infty$ .

Considerando os desenvolvimentos existentes, definamos um produto sobre  $\Gamma$  através do

mapeamento

$$e^{\frac{i\hbar}{2}\left(\overleftarrow{\partial}_q \cdot \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \cdot \overrightarrow{\partial}_q\right)} := \star : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \Gamma, \quad (3.2)$$

chamado Produto Estrela<sup>1</sup> ou Produto de Weyl (veja Apêndice A) tais que, para quaisquer funções  $F \in \mathcal{V}_\Gamma$  tenhamos:

$$F_1(q, p; t) \star F_2(q, p; t) = F_1(q, p; t) e^{\frac{i\hbar}{2}\overleftrightarrow{\Lambda}} F_2(q, p; t), \quad (3.3)$$

onde  $\overleftrightarrow{\Lambda}$  é o operador bidiferencial [48] definido como

$$\overleftrightarrow{\Lambda} := \left( \overleftarrow{\partial}_q \cdot \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \cdot \overrightarrow{\partial}_q \right)$$

Consideremos, dentre todas as funções complexas do tipo  $F$ , aquelas denotadas por  $\Psi(q, p; t)$ , tais que:

$$\int dqdp \Psi^*(q, p; t) \star \Psi(q, p; t) = \int dqdp \Psi^*(q, p; t) \Psi(q, p; t) < \infty. \quad (3.4)$$

Esse conjunto de funções satisfaz os axiomas do espaço de Hilbert com o produto escalar, definido por meio de:

$$(\Psi_m, \Psi_n)_\Gamma := \int dqdp \Psi_m^*(q, p; t) \star \Psi_n(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^*(q, p; t) \Psi_n(q, p; t), \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.5)$$

Adotaremos que as funções  $\Psi(q, p; t)$  satisfazem a condição de normalização

$$\int dqdp \Psi_m^*(q, p; t) \star \Psi_m(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^*(q, p; t) \Psi_m(q, p; t) = 1. \quad (3.6)$$

A relação (3.4), juntamente com a definição do Produto Estrela (3.2), define o espaço de Hilbert sobre o espaço de fase que denotamos por  $\mathcal{H}_\Gamma$ .

## 3.2 Representação do Grupo de Galilei sobre $\mathcal{H}_\Gamma$

Como resumimos no Apêndice B, a álgebra de Lie do grupo de Galilei, com um extensão central caracterizada por  $M$ , é constituída pelos geradores  $\hat{J}_\mu, \hat{P}_\mu, \hat{G}_\mu, \hat{H}$  que satisfazem as relações de comutação mostrada na tabela 3.1.

Esta álgebra pode ser representada em diferentes espaços vetoriais: a primeira, conforme foi explicitado na seção 2.4, corresponde ao espaço de Hilbert formado pelas funções  $\Psi(x)$  de

<sup>1</sup>Aqui o ponto  $(\cdot)$ , nos elementos das derivadas, representa o produto escalar usual no espaço  $Nd$  dimensional.

$[\hat{P}_\mu, \hat{H}] = 0$	$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{J}_\lambda$	$[\hat{J}_\mu, \hat{H}] = 0$
$[\hat{G}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar M\hat{1}\delta_{\mu\nu}$	$[\hat{J}_\mu, \hat{G}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{G}_\lambda$	$[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0$
$[\hat{G}_\mu, \hat{G}_\nu] = 0$	$[\hat{J}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{P}_\lambda$	$[\hat{G}_\mu, \hat{H}] = i\hbar\hat{P}_\mu$

Tabela 3.1: Comutadores dos geradores do Grupo de Galilei.

quadrado integrável em que os geradores  $\hat{P}$  e  $\hat{Q}$  são representados por operadores hermitianos tais que:

$$\hat{P}_\mu\Psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x_\mu} \quad \text{e} \quad \hat{Q}_\mu\Psi(x) = x_\mu\Psi(x), \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Uma segunda é obtida no espaço de Hilbert formado pelas funções  $\Phi(p)$ , também de quadrado integrável, sendo esses geradores representados por operadores hermitianos em que:

$$\hat{P}_\mu\Phi(p) = p_\mu\Phi(p) \quad \text{e} \quad \hat{Q}_\mu\Phi(p) = i\hbar\frac{\partial\Phi(p)}{\partial p_\mu}, \quad \mu = 1, 2, 3.$$

Há, entretanto, outras representações possíveis; em particular, no caso do espaço de Hilbert<sup>2</sup>  $\mathcal{H}_\Gamma$  descrito na seção 3.1, os operadores  $\hat{P}_\mu$  e  $\hat{Q}_\mu$  são tais que:

$$\begin{aligned} \hat{P}_\mu\Psi(q, p; t) &:= p_\mu \star \Psi(q, p; t) = \left(p_\mu\hat{1} - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial q_\mu}\right)\Psi(q, p; t), \\ \hat{Q}_\mu\Psi(q, p; t) &:= q_\mu \star \Psi(q, p; t) = \left(q_\mu\hat{1} + \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p_\mu}\right)\Psi(q, p; t). \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde,  $\mu = 1, 2, 3$ . Segue destas relações que:

$$\hat{G}_\mu\Psi(q, p; t) := g_\mu(q\star, p\star)\Psi(q, p; t) = (Mq_\mu \star -tp_\mu\star)\Psi(q, p; t) \quad (3.8)$$

$$\hat{J}_\mu\Psi(q, p; t) := j_\mu(q\star, p\star)\Psi(q, p; t) = \varepsilon_{\mu\nu\lambda}(q_\nu\star)(p_\lambda\star)\Psi(q, p; t) \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(q, p; t) &:= h(q\star, p\star)\Psi(q, p; t) = \frac{1}{2M} [(p_1\star)^2 + (p_2\star)^2 + (p_3\star)^2] \Psi(q, p; t) \\ &= \frac{1}{2M} \left[ \left(p_1\hat{1} - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial q_1}\right)^2 + \left(p_2\hat{1} - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial q_2}\right)^2 + \left(p_3\hat{1} - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial q_3}\right)^2 \right] \Psi(q, p; t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

ou seja, aos geradores da álgebra de Lie do grupo de Galilei correspondem operadores, definidos pela combinações das variáveis  $p_\mu$ ,  $q_\mu$ , com o produto estrela [49, 87].

De fato, mostra-se que, com essa representação, tem-se em  $\mathcal{H}_\Gamma$

$$[\hat{Q}_\mu, \hat{P}_\nu] = \hat{1}i\hbar\delta_{\mu\nu}, \quad [\hat{Q}_\mu, \hat{Q}_\nu] = 0, \quad [\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0, \quad (3.11)$$

<sup>2</sup>Por questão de simplicidade considera-se uma partícula no espaço tridimensional,  $N = 1$  e  $d = 3$ .

e

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}\hat{Q}_\mu e^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} &= \hat{Q}_\mu + v_\mu t\hat{1} \\ e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}\hat{P}_\mu e^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} &= \hat{P}_\mu + mv_\mu\hat{1}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

o que justifica considerar  $\hat{P}_\mu$  e  $\hat{Q}_\mu$  como os observáveis físicos posição e momentum já que, eles se transformam pelas relações (3.12), como se espera pelo “boost” de Galilei, e satisfazem as relações de comutação de Heisenberg (3.11).

Deve-se observar que nesta representação da álgebra de Lie há dois operadores multiplicativos, ou seja,  $\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_k$ , com

$$\bar{Q}_j\Psi(q, p; t) = q_j\Psi(q, p; t) \quad \bar{P}_k\Psi(q, p; t) = p_k\Psi(q, p; t), \quad j, k = 1, 2, 3, \quad (3.13)$$

tais que pelo “boost” de Galilei transformam-se como posição e momentum, respectivamente, isto é,

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}2\bar{Q}_j e^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} &= 2\bar{Q}_j + v_j t\hat{1} \\ e^{-\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}}2\bar{P}_k e^{\frac{i}{\hbar}v\cdot\hat{G}} &= 2\bar{P}_k + mv_k\hat{1}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde o fator 2 é introduzido por conveniência. Entretanto,  $\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_k$  têm como relação de comutação

$$[\bar{Q}_j, \bar{P}_k] = 0, \quad \text{qualquer par } (j, k), \quad (3.15)$$

o que impede de considerá-los como observáveis físicos, posição e momentum, mas possibilita usá-los como operadores hermitianos para definir uma base de autovetores  $\{|q, p\rangle\}$ , com

$$\bar{Q}_j |q, p\rangle = q_j |q, p\rangle, \quad \bar{P}_k |q, p\rangle = p_k |q, p\rangle. \quad (3.16)$$

Pelo teorema espectral, sendo  $\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_k$  hermitianos, essa base é completa e ortogonal:

$$\int dqdp |q, p\rangle\langle q, p| = \hat{1}, \quad \langle q, p | q', p'\rangle = \delta(q - q')\delta(p - p'), \quad (3.17)$$

e permite, dado um vetor arbitrário  $|\Psi_n(t)\rangle \in \mathcal{H}$ , obter

$$\Psi_n(q, p; t) = \langle q, p | \Psi_n(t)\rangle, \quad \Psi_n^*(q, p; t) = \langle q, p | \Psi_n(t)\rangle^* = \langle \Psi_n(t) | q, p\rangle, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.18)$$

ou ainda, da relação (3.17), se  $\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t)\rangle = \delta_{nm}$ ,

$$\int dqdp \langle \Psi_n(t) | q, p\rangle\langle q, p | \Psi_m(t)\rangle = \int dqdp \Psi_n^*(q, p; t)\Psi_m(q, p; t) = \delta_{nm}, \quad (3.19)$$

que em termos do produto estrela resulta em:

$$\int dqdp \Psi_n^*(q, p; t) \star \Psi_m(q, p; t) = \delta_{nm}, \quad (3.20)$$

e justifica a escolha das funções  $\Psi_n(q, p; t)$  e o produto  $(\star)$  para definir  $\mathcal{H}_\Gamma$ .

Concluindo esta seção devemos notar que, devido às relações (3.11) e (3.12), por uma questão de consistência, os operadores  $\hat{J}_\mu = j_\mu(q\star, p\star)$  e  $\hat{H} = h(q\star, p\star)$  são interpretados como os observáveis momentum angular e Hamiltoniano, respectivamente. Os invariantes de Casimir da álgebra de Lie do grupo de Galilei são assim, nessa representação, dados por:

$$\hat{I}_1 = \hat{H} - \frac{\hat{P}^2}{2M} \quad \text{e} \quad \hat{I}_2 = \left( \hat{J} - \frac{1}{M} \hat{G} \times \hat{P} \right)^2,$$

com  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$  para incluir o grau de liberdade Spin, sendo:

$$[\hat{S}, \hat{P}] = 0, \quad [\hat{S}, \hat{G}] = 0, \quad [\hat{S}, \hat{H}] = 0.$$

A representação acima descrita constitui a base da Mecânica Quântica Simplética, sendo  $\mathcal{H}_\Gamma$  o correspondente espaço de Hilbert.

### 3.3 Evolução Temporal em $\mathcal{H}_\Gamma$

#### 3.3.1 Introdução

Sendo  $\hat{H} = h(q\star, p\star)$  a representação do gerador da translação temporal do grupo de Galilei em  $\mathcal{H}_\Gamma$ , a evolução temporal de um observável aqui denotado por  $\hat{O} := O(q\star, p\star)$ , será dada da seguinte maneira:

$$\hat{O}(t) = e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \hat{O} e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}}, \quad (3.21)$$

o que resulta na equação

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) = \hat{O}(t) \hat{H} - \hat{H} \hat{O}(t) = [\hat{O}(t), \hat{H}]. \quad (3.22)$$

Deve-se observar:

1. Se  $|\alpha\rangle$  for um vetor arbitrário em  $\mathcal{H}$  segue, usando a base  $\{|q, p\rangle\}$ , que

$$\psi_\alpha(q, p) = \langle q, p | \alpha \rangle,$$



é uma função de onda<sup>3</sup> em  $\mathcal{H}_\Gamma$ , mas seu significado físico é diferente do significado dado a  $\Phi(p)$  ou  $\Psi(q)$  da formulação usual da Teoria Quântica;

2. Sendo  $|\alpha\rangle$  e  $|\beta\rangle$  dois vetores em  $\mathcal{H}$ , tem-se que

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int dqdp\psi_\alpha^*(q,p)\psi_\beta(q,p) = \int dqdp\psi_\alpha^*(q,p) \star \psi_\beta(q,p);$$

3. Se  $\hat{O}(t)$  é um observável (operador autoadjunto) ter-se-á na base  $\{|q,p\rangle\}$

$$\begin{aligned} \langle q,p|\hat{O}(t)|\alpha\rangle &= \int dq'dp'\langle q,p|\hat{O}(t)|q',p'\rangle\langle q',p'|\alpha\rangle \\ &= \int dq'dp'\hat{O}(t)\psi_\alpha(q',p')\delta(q-q')\delta(p-p') \\ &= \hat{O}(t)\psi_\alpha(q,p), \end{aligned}$$

onde foi adotado que  $\langle q,p|\hat{O}(t)|q',p'\rangle = \hat{O}(t)\delta(q-q')\delta(p-p')$

4. O valor médio de  $\hat{O}(t)$  no estado  $|\alpha\rangle$  será dado por

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}(t)\rangle_\alpha &:= \langle\alpha|\hat{O}(t)|\alpha\rangle = \int dq'dp'\langle\alpha|q',p'\rangle\langle q',p'|\hat{O}(t)|q'',p''\rangle\langle q'',p''|\alpha\rangle dq''dp'' \\ &= \int dq'dp'\psi_\alpha^*(q',p')\hat{O}(t)\psi_\alpha(q'',p'')\delta(q'-q'')\delta(p'-p'')dq''dp'' \\ &= \int dq'dp'\psi_\alpha^*(q',p')[\hat{O}(t)\psi_\alpha(q',p')] \\ &= \int dq'dp'\hat{O}(t)[\psi_\alpha(q',p') \star \psi_\alpha^*(q',p')], \end{aligned} \tag{3.23}$$

onde se usou uma das propriedades do produto estrela (veja propriedade 5 do Apêndice A); tem-se de (3.23) que o valor médio (esperado) será real se o espectro de  $\hat{O}$  for real.

### 3.3.2 A Equação de Schrödinger em $\mathcal{H}_\Gamma$

Nota-se que, se introduzirmos a relação (3.21) em (3.23), encontraremos uma outra forma de escrever o valor médio de um observável. Com efeito

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}(t)\rangle_\alpha &= \int dq'dp'[\psi_\alpha^*(q',p') \star e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}]\hat{O}[e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi_\alpha(q',p')] \\ &= \int dq'dp'\hat{O}[\Psi_\alpha(q',p';t) \star \Psi_\alpha^*(q',p';t)], \end{aligned} \tag{3.24}$$

onde identificamos:

$$\Psi_\alpha(q,p;t) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi_\alpha(q,p), \quad \Psi_\alpha^*(q,p;t) \equiv \psi_\alpha^*(q,p) \star e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} \tag{3.25}$$

---

<sup>3</sup>Adotamos que as letras Gregas minúsculas  $\psi, \phi, \dots$  irão se referir as funções independentes do tempo, enquanto que as letras Gregas maiúsculas  $\Psi(t), \Phi(t), \dots$  irão se referir as funções dependentes do tempo.

A relação (3.24) nos mostra que o observável é independente do tempo, enquanto que a relação (3.25) nos diz que o estado evolui no tempo; isto corresponde à descrição de Schrödinger. Derivando (3.25) com relação a  $t$ , tem-se

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_\alpha(q, p; t) = \hat{H} \Psi_\alpha(q, p; t), \quad (3.26)$$

que é a equação básica da evolução temporal de  $\Psi_\alpha$  em  $\mathcal{H}_\Gamma$ ; esta equação corresponde à equação de Schrödinger da formulação usual.

Usando o método de separação de variáveis e a propriedade 1 do Apêndice A, ou seja

$$\Psi_\alpha(q, p; t) = \psi_\alpha(q, p) \star \phi(t) = \psi_\alpha(q, p) \phi(t),$$

na equação (3.26), encontra-se

$$\hat{H} \psi_\alpha(q, p) = E \psi_\alpha(q, p), \quad (3.27)$$

com  $E$  representando uma constante e,

$$\Psi_\alpha(q, p; t) = \psi_\alpha(q, p) e^{-\frac{i}{\hbar} t E}.$$

A equação (3.27) representa a equação de Schrödinger independente do tempo em  $\mathcal{H}_\Gamma$ .

Nota-se que, se o sistema físico estiver interagindo com um potencial do tipo  $V(q\star)$ , então o operador Hamiltoniano nas equações (3.26) e (3.27) poderá ser escrito na forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} (p\star)^2 + V(q\star). \quad (3.28)$$

### 3.4 Conexão com a formulação de Wigner

Sendo  $\Psi$  uma solução da equação (3.26), a função  $f$  definida como

$$f(q, p; t) := \Psi(q, p; t) \star \Psi^*(q, p; t), \quad (3.29)$$

apresenta todas as propriedades de uma função de Wigner [17, 84, 88]. Em particular tem-se as seguintes interpretações: se, no instante  $t$ , é feita uma medida da localização da partícula associada à função de Wigner  $f$ , então a densidade de probabilidade  $P(q; t)$  de que a partícula seja encontrada com coordenada  $q$  é igual a

$$P(q; t) := \int dp f(q, p; t). \quad (3.30)$$

Por outro lado, se no instante  $t$ , é feita uma medida do momento da partícula associada à função de Wigner  $f$ , então a densidade de probabilidade  $P(p; t)$  de que a partícula seja encontrada com momento  $p$  é igual a

$$P(p; t) := \int dq f(q, p; t). \quad (3.31)$$

Nota-se que, como a partícula tem que ser encontrada em algum lugar do espaço  $\mathcal{H}_\Gamma$ , então a condição de normalização é satisfeita

$$\int dq P(q; t) = \int dp P(p; t) = \int dq dp f(q, p; t) = 1. \quad (3.32)$$

Um resultado importante com relação a função de Wigner definida por (3.29) é que, se multiplicar ambos os lados da equação (3.27) por  $\star\psi^*(q, p)$ , tem-se

$$\hat{H}f(q, p) = Ef(q, p), \quad (3.33)$$

mostrando que  $\psi$  e  $f$  satisfazem a mesma equação de autovalor. Portanto, a procura por soluções para  $\psi$  leva à função de Wigner em  $\mathcal{H}_\Gamma$ .

Concluindo esta seção observe-se que, substituindo (3.29) em (3.24) segue:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle_\alpha = \int dq dp \hat{O} f_\alpha(q, p; t), \quad (3.34)$$

com  $f_\alpha$  sendo a função de Wigner associada ao estado  $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ .

# Capítulo 4

## Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica

Esta parte do trabalho será constituído por nosso desenvolvimento da álgebra da Supersimetria na formulação Simplética da Mecânica Quântica; para fazer isto, iniciaremos a seção 4.1 com uma pequena revisão dessa álgebra; nas subseções seguintes será desenvolvido o estudo dessa álgebra dentro do contexto da Mecânica Quântica Simplética. Este Capítulo será finalizado na seção 4.2, onde representaremos os operadores bosônicos em termos do produto estrela e faremos um estudo do oscilador harmônico supersimétrico.

### 4.1 Álgebra Supersimétrica

#### 4.1.1 Introdução

A Supersimétrica surgiu na década de 70 do século passado no contexto da Teoria de Campos, nos trabalhos de Wess & Zumino [54]; especificamente os autores consideraram as variações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta A = \bar{\varepsilon}\Psi, \\ \delta B = i\bar{\varepsilon}\gamma^5\Psi, \\ \delta F = i\bar{\varepsilon}\gamma^\rho\partial_\rho\Psi, \\ \delta G = -\bar{\varepsilon}\gamma^5\gamma^\rho\partial_\rho\Psi, \\ \delta\Psi = -i\gamma^\rho\varepsilon(\partial_\rho A) + \gamma^\rho\gamma^5\varepsilon(\partial_\rho B) - \varepsilon F - i\gamma^5\varepsilon G, \\ \delta\bar{\Psi} = i\bar{\varepsilon}\gamma^\rho(\partial_\rho A) - \bar{\varepsilon}\gamma^5\gamma^\rho(\partial_\rho B) - \bar{\varepsilon}F - i\bar{\varepsilon}\gamma^5G, \end{array} \right.$$

onde,  $A, B, F, G$  são campos bosônicos e  $\Psi$  campo fermiônico, e analisaram a ação

$$S = \int \left[ \frac{1}{2}(\partial_\mu A)^2 + \frac{1}{2}(\partial_\mu B)^2 + \frac{i}{4}\bar{\Psi}\gamma^\mu \overleftrightarrow{\partial}_\mu \Psi + \frac{1}{2}(F^2 + G^2) \right] d^4x,$$

satisfazendo a condição,

$$\delta S = \int \delta L d^4x = 0,$$

resultando daí em uma simetria que está relacionada aos Spins dos férmions e bósons.

Dois anos depois, Nicolai [56] introduziu esta álgebra no contexto não-relativístico da Mecânica Quântica. Mais tarde, em 1981, Witten [57] a reformulou através de postulados,<sup>1</sup> os quais são conhecidos nos dias de hoje como base da *Mecânica Quântica Supersimétrica*:

$$[\hat{Q}_\alpha, \hat{H}_{ss}]_- = 0, \quad [\hat{Q}_\alpha, \hat{Q}_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta} \hat{H}_{ss}, \quad \alpha, \beta = 1 \dots N, \quad (4.1)$$

onde, usando a notação de Witten,  $\hat{Q}_\alpha$  e  $\hat{H}_{ss}$  são chamados Geradores e Hamiltoniano Supersimétricos com  $N$  o número destes geradores. Uma revisão desta álgebra encontra-se na monografia [89] de R. L. Rodrigues. A formulação de Witten conduziu a diversos trabalhos, entre os quais podemos citar [90–98].

### 4.1.2 Super-Espaço, Supersimetria e Equação de Schrödinger

A álgebra (4.1) da Supersimetria na representação abstrata postulada por Witten, pode ser escrita na forma

$$[\hat{G}_\alpha, \hat{H}_{ss}]_- = 0, \quad [\hat{G}_\alpha, \hat{G}_\beta]_+ = 2\delta_{\alpha\beta} \hat{H}_{ss}, \quad \alpha, \beta = 1 \dots N, \quad (4.2)$$

onde o fator 2 na segunda relação foi introduzido por conveniência e  $\hat{G}_\mu$  são os geradores<sup>2</sup> da Supersimetria ou operadores cargas, com  $\hat{H}_{ss}$  o operador Hamiltoniano supersimétrico.

Notamos que uma consequência direta desta álgebra, é que

$$\hat{H}_{ss} = \hat{G}_{(\alpha=\beta)}^2 \geq 0, \quad (4.3)$$

mostrando dessa forma que o operador Hamiltoniano supersimétrico é positivo definido.

<sup>1</sup>Os símbolos  $-$  e  $+$  evidenciam que estamos tratando de comutador e anticomutador, respectivamente.

<sup>2</sup>Observe que usamos outros rótulos nos operadores cargas  $\hat{G}_\mu$  afim de distinguir dos operadores posições  $\hat{Q}_\mu$  estudado no Capítulo 3.

A álgebra (4.2) poderá ser representada, a partir do produto direto  $\otimes$ , envolvendo diferentes espaços de Hilbert

$$\mathcal{M}_{\mathbb{C}}^N \otimes \mathcal{H}, \quad \mathcal{M}_{\mathbb{C}}^N \otimes \mathcal{H}_q, \quad \mathcal{M}_{\mathbb{C}}^N \otimes \mathcal{H}_p, \quad \text{etc}, \quad (4.4)$$

onde  $\mathcal{M}_{\mathbb{C}}^N$  é o espaço das matrizes quadradas de ordem  $N$  com coeficientes complexos e,  $\mathcal{H}, \mathcal{H}_q, \mathcal{H}_p$  são os espaços de Hilbert nas representações abstrata, coordenada e momenta. Em particular, estamos interessados em representar a álgebra (4.2) na formulação Simplética da Mecânica Quântica; para fazer isso, devemos construir o Super-Espaço de Hilbert, aqui denotado por  $\mathbb{H}_{\Gamma}$ , a partir do produto direto envolvendo  $\mathcal{H}_{\Gamma}$ :

$$\mathbb{H}_{\Gamma} := \mathcal{M}_{\mathbb{C}}^N \otimes \mathcal{H}_{\Gamma},$$

onde  $\mathcal{H}_{\Gamma}$  é o espaço de Hilbert sobre o espaço de fase,  $\Gamma^3$  visto no Capítulo 3.

Um elemento do espaço  $\mathbb{H}_{\Gamma}$  será chamado de espinor e é representado por:

$$\Psi^{(ss)}(q, p; t) = \begin{pmatrix} \Psi^{(1)}(q, p; t) \\ \Psi^{(2)}(q, p; t) \\ \vdots \\ \Psi^{(N)}(q, p; t) \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Notamos que com esta construção, o produto escalar estará bem definido

$$\begin{aligned} (\Psi^{(ss)}, \Psi^{(ss)})_{\Gamma} &:= \int dqdp \Psi^{(ss)\dagger}(q, p; t) \Psi^{(ss)}(q, p; t) \\ &= \int dqdp \sum_{n=1}^N [\Psi^{(n)*}(q, p; t) \star \Psi^{(n)}(q, p; t)] < \infty, \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde usamos a propriedade da integral (veja Apêndice A) e definimos o vetor linha

$$\Psi^{(ss)\dagger}(q, p; t) := (\Psi^{(1)*}(q, p; t), \Psi^{(2)*}(q, p; t), \dots, \Psi^{(N)*}(q, p; t)).$$

Seja  $\hat{T}$ , um operador que representa uma operação do grupo de supersimetria

$$\hat{T}(\xi) = e^{i \sum_{\alpha}^N \xi_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}}, \quad (4.7)$$

onde  $\xi_{\mu}$  são variáveis de Grassmann. É possível mostrar que se este operador for unitário  $\hat{T}^{\dagger} = \hat{T}^{-1}$ , então o produto escalar (4.6) será preservado e, em consequência disto, os geradores supersimétricos são hermitianos, isto é

$$\hat{G}_{\alpha} = \hat{G}_{\alpha}^{\dagger}, \quad (4.8)$$

---

<sup>3</sup>Aqui, assumiremos um espaço de fase bidimensional.

e, devido a estrutura supersimétrica, são funções dos operadores bosônico  $\hat{B}$  e fermiônico  $\hat{F}$

$$\hat{G}_\alpha = G_\alpha \left( \hat{B}, \hat{F} \right). \quad (4.9)$$

Nessa construção, a equação de Schrödinger poderá ser escrita na forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(ss)}(q, p; t) = \hat{H}_{ss} \Psi^{(ss)}(q, p; t). \quad (4.10)$$

Usando o método de separação de variáveis podemos escrever o espinor (4.5) na forma

$$\Psi^{(ss)}(q, p; t) = \psi^{(ss)}(q, p) \phi(t), \quad (4.11)$$

que substituindo na equação (4.10) resulta na equação de Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}_{ss} \psi^{(ss)}(q, p) = E^{(ss)} \psi^{(ss)}(q, p), \quad (4.12)$$

com

$$\psi^{(ss)} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}(q, p) \\ \psi^{(2)}(q, p) \\ \vdots \\ \psi^{(N)}(q, p) \end{pmatrix}, \quad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t E^{(ss)}},$$

onde  $E^{(ss)}$  é uma constante.

### 4.1.3 Quebra de Supersimetria

Na teoria quântica usual com uma simetria exata, o estado fundamental pertence ao espaço de representação expandido por função invariante por todas as operações de simetria do grupo; em particular, no caso da teoria de campos esse estado é o vácuo, ou seja, o estado sem partículas. Como consequência da invariância do estado fundamental tem-se que o estado deve ser aniquilado pelos geradores do grupo de simetria. Em nosso caso, considerando que o Hamiltoniano supersimétrico obedece a relação (4.3) a Supersimetria, caracterizada pelas relações (4.2), é dita não quebrada ou exata se a energia do estado fundamental de  $\hat{H}_{ss}$  for nula; no caso em que não se tem esse resultado diz-se que a Supersimetria é quebrada.

Matematicamente dizemos que a Supersimetria é uma simetria exata sempre que a auto-função  $\psi^{(ss)}$  satisfizer a seguinte relação:

$$\hat{T}(\xi) \psi^{(ss)}(q, p) = \psi^{(ss)}(q, p) \quad \Rightarrow \quad \hat{G}_\alpha \psi^{(ss)}(q, p) = 0, \quad (4.13)$$

e que isto ocorre se e somente se

$$\hat{H}_{ss}\psi^{(ss)}(q, p) = 0. \quad (4.14)$$

De fato, multiplicando ambos os lados da última relação em (4.13) por  $\hat{G}_\mu$  temos a relação (4.14); por outro lado, multiplicando ambos os lados na relação (4.14) por  $\psi^{(ss)\dagger}$  e, em seguida, integrando sobre o espaço de fase, temos a relação (4.13), ou seja

$$\begin{aligned} \int dqdp\psi^{(ss)\dagger}(q, p)\hat{H}_{ss}\psi^{(ss)}(q, p) &= \int dqdp[\hat{G}_\mu\psi^{(ss)}(q, p)]^\dagger[\hat{G}_\mu\psi^{(ss)}(q, p)] \\ &= \|\hat{G}_\mu\psi^{(ss)}(q, p)\|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{G}_\mu\psi^{(ss)}(q, p) = 0. \end{aligned}$$

Notamos que isto ocorre precisamente quando  $E^{(ss)} = 0$ .

Dizemos que existe uma quebra de Supersimetria sempre que a autofunção  $\psi^{(ss)}$  satisfizer a relação:

$$\hat{T}(\xi)\psi^{(ss)}(q, p) \neq \psi^{(ss)}(q, p) \quad \Rightarrow \quad \hat{G}_\alpha\psi^{(ss)}(q, p) \neq 0, \quad (4.15)$$

ou seja, se e somente se

$$\hat{H}_{ss}\psi^{(ss)}(q, p) \neq 0, \quad (4.16)$$

e isto ocorre quando  $E^{(ss)} \neq 0$ . A demonstração é análoga ao caso de Supersimetria exata.

#### 4.1.4 Supersimetria com $N = 2$

O caso de interesse, conforme veremos no Capítulo 5, que será útil na construção da hierarquia de Hamiltonianos diz respeito a Supersimetria com  $N = 2$ . Nesse caso, o sistema envolve uma partícula de spin  $1/2$  movendo em uma dimensão<sup>4</sup> e, é constituído por dois geradores  $\hat{G}_+$  e  $\hat{G}_-$  que podem ser escritos em termos dos geradores  $\hat{G}_1$  e  $\hat{G}_2$  da álgebra (4.2) na seguinte forma:

$$\hat{G}_+ := \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{G}_1 - i\hat{G}_2], \quad \hat{G}_- := \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{G}_1 + i\hat{G}_2]. \quad (4.17)$$

Observe que os geradores acima definidos são mutuamente adjuntos, ou seja

$$\hat{G}_+ = \hat{G}_-^\dagger, \quad \hat{G}_- = \hat{G}_+^\dagger. \quad (4.18)$$

Dessa maneira, as relações (4.2) se transformarão

$$[\hat{G}_\pm, \hat{H}_{ss}]_\pm = 0, \quad [\hat{G}_-, \hat{G}_+]_+ = \hat{H}_{ss}. \quad (4.19)$$

---

<sup>4</sup>Este sistema corresponde ao exemplo de Witten [57] na formulação supersimétrica da Mecânica Quântica usual.



Podemos mostrar que os geradores acima são nilpotentes, ou seja,  $\hat{G}_+^2 = \hat{G}_-^2 = 0$ .

Conforme vimos (4.9), devido à estrutura supersimétrica os geradores  $\hat{G}_\pm$  admitem uma representação com o uso de operadores bosônicos  $B^\pm$  e fermiônicos  $F^\pm$ :

$$\hat{G}_- := \hat{F}^+ \otimes \hat{B}^-, \quad \hat{G}_+ = \hat{G}_-^\dagger. \quad (4.20)$$

Notamos que em decorrência da relação (4.18), os operadores  $\hat{F}^\pm$  e  $\hat{B}^\pm$ , também são mutuamente adjuntos

$$\hat{B}^+ = (\hat{B}^-)^\dagger, \quad \hat{F}^+ = (\hat{F}^-)^\dagger. \quad (4.21)$$

Os operadores  $\hat{B}^\pm$  são lineares e satisfazem relações de comutação

$$[\hat{B}^-, \hat{B}^+]_- = \hat{B}^- \hat{B}^+ - \hat{B}^+ \hat{B}^-, \quad (4.22)$$

enquanto que os operadores  $\hat{F}^\pm$  são fermiônicos e portanto satisfazem relações de anticomutação

$$[\hat{F}^-, \hat{F}^+]_+ = I, \quad [\hat{F}^-, \hat{F}^-]_+ = 0, \quad [\hat{F}^+, \hat{F}^+]_+ = 0, \quad (4.23)$$

onde  $I$  é a matriz identidade de ordem 2. Esta álgebra pode ser representada por meio das matrizes quadradas de ordem 2

$$\hat{F}^+ := \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2), \quad \hat{F}^- := \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2), \quad (4.24)$$

onde  $\sigma_\alpha$  são as matrizes de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Simplificando os operadores (4.24), encontramos

$$\hat{F}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Substituindo (4.26) em (4.20) temos que os geradores da Supersimetria podem ser escritos na seguinte maneira

$$\hat{G}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hat{B}^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{G}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{B}^- & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Usando as relações (4.27), podemos escrever o operador Hamiltoniano supersimétrico (4.19) na seguinte forma

$$\hat{H}_{ss} = \begin{pmatrix} \hat{B}^+ \hat{B}^- & 0 \\ 0 & \hat{B}^- \hat{B}^+ \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \hat{H}_- & 0 \\ 0 & \hat{H}_+ \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

onde definimos os operadores

$$\hat{H}_- := \hat{B}^+ \hat{B}^-, \quad \hat{H}_+ := \hat{B}^- \hat{B}^+, \quad (4.29)$$

chamados de Hamiltonianos Parceiros Supersimétricos.

Nessa representação, podemos escrever a equação de Schrödinger (4.12) na forma

$$\hat{H}_{ss} \psi^{(ss)}(q, p) = E^{(ss)} \psi^{(ss)}(q, p), \quad \text{com } \psi^{(ss)}(q, p) = \begin{pmatrix} \psi^{(-)}(q, p) \\ \psi^{(+)}(q, p) \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

onde as autofunções  $\psi^{(-)}$  e  $\psi^{(+)}$  são denominadas de setores bosônicos e fermiônicos, respectivamente. Essa denominação é justificada pelo fato que o operador número fermiônico  $\hat{N}_f := \hat{F}^+ \hat{F}^-$  possui  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  como autoespinor associado ao autovalor  $n_f = 0$  (nenhum férmion), e  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  como autoespinor associado ao autovalor  $n_f = 1$  (um férmion).

Afim de implementar a normalização das autofunções  $\psi_0^{(\pm)}$  em termos dos operadores  $\hat{B}^\pm$  devemos analisar os casos de Supersimetrias exata e quebrada. Para fazer isso, notamos que podemos reescrever a relação (4.7) na forma

$$\hat{T}(\xi_-, \xi_+) = e^{i(\xi_- \hat{G}_- + \xi_+ \hat{G}_+)}, \quad \xi_+ := \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1 + i\xi_2), \quad \xi_- := \xi_+^*, \quad (4.31)$$

onde  $\xi_\pm$  serão grandezas grassmannianas. Neste caso, a relação (4.13) fica

$$\hat{T}(\xi_-, \xi_+) \psi^{(ss)}(q, p) = \psi^{(ss)}(q, p) \Rightarrow \hat{G}_- \psi^{(ss)}(q, p) = 0 \quad \text{e} \quad \hat{G}_+ \psi^{(ss)}(q, p) = 0. \quad (4.32)$$

A equação acima possibilita-nos estudar dois casos:

$$\text{Caso 1} \quad \hat{B}^- \psi_0^{(-)}(q, p) = 0. \quad (4.33)$$

$$\text{Caso 2} \quad \hat{B}^+ \psi_0^{(+)}(q, p) = 0. \quad (4.34)$$

## Caso 1

Multiplicando ambos os lados da equação do primeiro caso por  $\hat{B}^+$ , temos a equação

$$\hat{H}_- \psi_0^{(-)}(q, p) = 0 \Leftrightarrow E_0^{(-)} = 0, \quad (4.35)$$

que corresponde ao estado fundamental de  $\hat{H}_-$ . Seja

$$E_n^{(-)} \neq E_0^{(-)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.36)$$

um autovalor de  $\hat{H}_-$  com autofunção  $\psi_n^{(-)}$  normalizada:

$$\hat{H}_- \psi_n^{(-)}(q, p) = E_n^{(-)} \psi_n^{(-)}(q, p). \quad (4.37)$$

Agora se  $\psi_{n-1}^{(+)}$  for uma autofunção normalizada de  $\hat{H}_+$  com autovalor  $E_{n-1}^{(+)}$ , então

$$\hat{H}_+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) = E_{n-1}^{(+)} \psi_{n-1}^{(+)}(q, p), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.38)$$

Como  $\hat{H}_+ = \hat{B}^- \hat{B}^+$ , multiplicando ambos os lados de (4.38) por  $\hat{B}^+$ , temos

$$\hat{H}_- [\hat{B}^+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p)] = E_{n-1}^{(+)} [\hat{B}^+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p)], \quad (4.39)$$

uma vez que,  $\hat{H}_- = \hat{B}^+ \hat{B}^-$ . A equação (4.39) assegura que se  $\hat{B}^+ \psi_{n-1}^{(+)} \neq 0$ , então  $E_{n-1}^{(+)}$  será um autovalor de  $\hat{H}_-$ . Comparando as equações (4.37) e (4.39), obtemos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(-)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(+)}}} \hat{B}^+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p); \\ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(-)}}} \hat{B}^- \psi_n^{(-)}(q, p); \\ E_n^{(-)} = E_{n-1}^{(+)} &\neq E_0^{(-)}, \quad \text{com } E_0^{(-)} = 0. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Desde que  $\psi_1^{(-)}$  seja uma autofunção normalizada temos que  $E_0^{(+)} \neq 0$ , ou seja, o autovalor de energia do estado fundamental de  $\hat{H}_+$  será não nulo; nessas circunstâncias,  $\hat{H}_+$  não possui autofunção normalizada no estado fundamental; com exceção do autovalor do estado fundamental de  $\hat{H}_-$ , todos os autovalores de  $\hat{H}_+$  são autovalores de  $\hat{H}_-$  e vice-versa. Uma descrição gráfica do alinhamento espectral para este caso, é mostrada na figura (4.1).

## Caso 2

Procedendo com o Caso 2, consideremos a equação

$$\hat{H}_+ \psi_0^{(+)}(q, p) = 0, \Leftrightarrow E_0^{(+)} = 0, \quad (4.41)$$

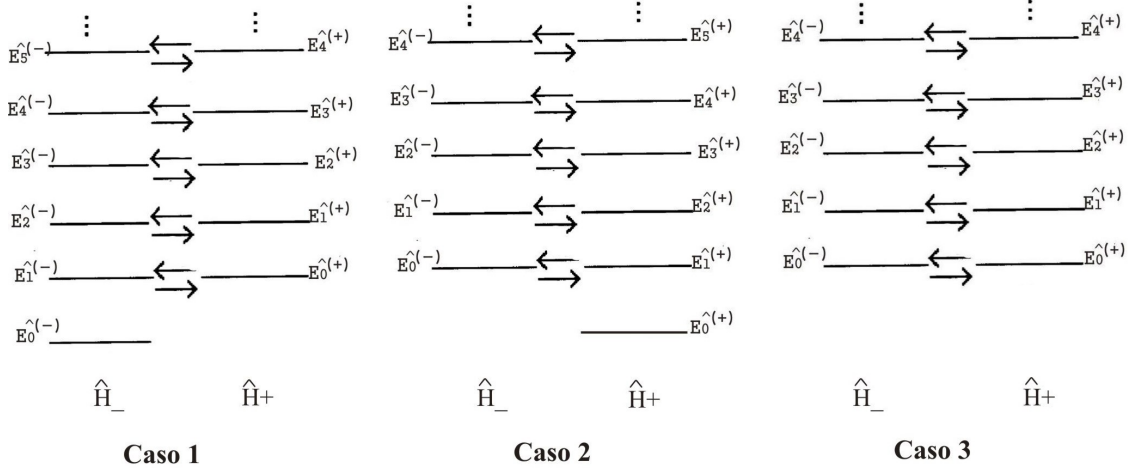


Figura 4.1: Possíveis alinhamentos dos autovalores dos operadores  $\hat{H}^\pm$ .

que corresponde ao estado fundamental de  $\hat{H}_+$ .

A condição (4.41) possibilita supor a seguinte equação de autovalor para  $\hat{H}_+$

$$\hat{H}_+ \psi_n^{(+)}(q, p) = E_n^{(+)} \psi_n^{(+)}(q, p), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.42)$$

onde  $\psi_n^{(+)}$  é uma autofunção normalizada de  $\hat{H}_+$  e  $E_n^{(+)}$  seu autovalor satisfazendo a condição:

$$E_n^{(+)} \neq E_0^{(+)}. \quad (4.43)$$

Seja agora  $\psi_{n-1}^{(-)}$  uma autofunção normalizada de  $\hat{H}_-$  com autovalor  $E_{n-1}^{(-)}$ ; então

$$\hat{H}_- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) = E_{n-1}^{(-)} \psi_{n-1}^{(-)}(q, p), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.44)$$

Multiplicando ambos os lados de (4.44) por  $\hat{B}^-$ , obtemos

$$\hat{H}_+ [\hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p)] = E_{n-1}^{(-)} [\hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p)]. \quad (4.45)$$

Esta equação assegura que, se  $\hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)} \neq 0$ , então  $E_{n-1}^{(-)}$  será um autovalor de  $\hat{H}_+$ . Comparando as equações (4.42) e (4.45), seguem as relações:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(+)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(-)}}} \hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p); \\ \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(+)}}} \hat{B}^+ \psi_n^{(+)}(q, p); \\ E_n^{(+)} = E_{n-1}^{(-)} &\neq E_0^{(+)}, \quad \text{com } E_0^{(+)} = 0. \end{aligned} \quad (4.46)$$

A normalização da autofunção  $\psi_1^{(+)}$  implica que  $E_0^{(-)} \neq 0$ , ou seja, o autovalor do estado fundamental de  $\hat{H}_-$  é não nulo. Além disso, notamos nas relações (4.46) que, com exceção do estado fundamental de  $\hat{H}_+$  os autovalores dos Hamiltonianos parceiros supersimétricos coincidem; o resultado do alinhamento espectral para este caso, é mostrado na figura (4.1).

No caso em que ocorre quebra de Supersimetria, conforme vimos, temos  $E^{(ss)} \neq 0$ ; neste caso, a equação de Schrödinger nos permite analisar um terceiro caso.

### Caso 3

Neste caso  $E^{(ss)} > 0$  e, a equação de Schrödinger (4.30),

$$\begin{pmatrix} \hat{B}^+ \hat{B}^- & 0 \\ 0 & \hat{B}^- \hat{B}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) \\ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{n-1}^{(-)} \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) \\ E_{n-1}^{(+)} \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) \end{pmatrix},$$

conduz às relações:

$$\hat{H}_+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) = E_{n-1}^{(+)} \psi_{n-1}^{(+)}, \quad \hat{H}_- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) = E_{n-1}^{(-)} \psi_{n-1}^{(-)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.47)$$

Notamos que os autovalores dos operadores  $\hat{H}_\pm$  começam com valores positivos, isto é,  $E_{n-1}^{(\pm)} > 0$ , onde  $\psi_{n-1}^{(\pm)}$  são autofunções normalizadas destes operadores.

Multiplicando ambos os lados da segunda equação (4.47) por  $\hat{B}^-$ , obtemos

$$\hat{H}_+ \left[ \hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) \right] = E_{n-1}^{(-)} \left[ \hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) \right], \quad (4.48)$$

que comparando com a primeira equação de (4.47) resulta nas relações:

$$\begin{aligned} \psi_{n-1}^{(+)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(-)}}} \hat{B}^- \psi_{n-1}^{(-)}(q, p); \\ \psi_{n-1}^{(-)}(q, p) &= \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(+)}}} \hat{B}^+ \psi_{n-1}^{(+)}(q, p); \\ E_{n-1}^{(-)} &= E_{n-1}^{(+)} > 0. \end{aligned} \quad (4.49)$$

É interessante notar que  $\hat{H}_-$  e  $\hat{H}_+$  não possuem estado fundamental e seus espectros coincidem; O resultado do alinhamento espectral para este caso é mostrado na figura (4.1).

É importante observar que nas relações (4.40), (4.46) e (4.49), a constante de proporcionalidade  $k$  entre as autofunções  $\psi^{(\pm)} = k(\hat{B}^\mp \psi^{(\mp)})$  foi obtida através da condição de normalização, ou seja,

$$\int dq dp \psi^{(\pm)*}(q, p) \star \psi^{(\pm)}(q, p) = \int dq dp \psi^{(\pm)*}(q, p) \star \psi^{(\pm)}(q, p) = 1 \quad \Rightarrow \quad k = \frac{1}{\sqrt{E^{(\mp)}}}.$$

Concluindo, verificamos através das relações (4.40), (4.46) e (4.49) que os operadores  $\hat{B}^\pm$  graduam os subespaços de Hilbert  $\mathbb{H}_F$ , levando o setor bosônico no setor fermiônico e vice-versa. Dizemos que a Supersimetria é uma simetria exata, dentro dessa formulação simplética, sempre que a função  $\psi_0^{(ss)}$  que descreve o estado fundamental supersimétrico, (vide equação 4.14), estiver associada à energia zero. As estruturas “escadas” dos autovalores mostrados na figura (4.1) e as relações entre os setores bosônicos e fermiônicos  $\psi^{(\pm)}$  são características marcantes de sistemas físicos supersimétricos em uma dimensão espacial.

## 4.2 Os Operadores $\hat{B}^\pm$

Um elemento importante em nosso desenvolvimento é o comutador  $[\hat{B}^-, \hat{B}^+]_-$ . As informações que temos dos operadores  $\hat{B}^\pm$  é que eles são lineares, bosônicos e mutuamente adjuntos. Seguindo a formulação supersimétrica da Mecânica Quântica usual, consideraremos, na Mecânica Quântica Simplética, como representação da álgebra destes operadores, a expressão

$$\hat{B}^- := \frac{i}{\sqrt{2M}} p^\star + W(q^\star), \quad \hat{B}^+ := -\frac{i}{\sqrt{2M}} p^\star + W(q^\star), \quad (4.50)$$

onde  $W(q^\star) = W^\dagger(q^\star)$  é uma função do operador de posição, que chamamos de Superpotencial. Em consequência, substituindo os operadores (4.50) em (4.28), obtemos o operador Hamiltoniano supersimétrico da seguinte forma

$$\hat{H}_{ss} = \left( \frac{1}{2M} (p^\star)^2 + W^2(q^\star) \right) I + \frac{i}{\sqrt{2M}} [W(q^\star), p^\star]_- \sigma_3. \quad (4.51)$$

Na equação acima nota-se que  $W^2(q^\star)$  representa a interação bóson-bóson e  $[W(q^\star), p^\star]_- \sigma_3$  representa a interação bosón-férmion, o que justifica chamarmos  $W(q^\star)$  de Superpotencial.

### 4.2.1 O Oscilador Harmônico Supersimétrico

Pode-se implementar o estudo da Supersimetria na Mecânica Quântica usual através da álgebra dos osciladores harmônicos bosônico e fermiônico [98, 99]. De maneira similar, introduziremos a álgebra<sup>5</sup> desses osciladores, que denominaremos osciladores harmônicos supersimétricos, dentro da formulação Simplética da Mecânica Quântica, por meio dos operadores bosônicos, interpretados aqui como operadores de criação e destruição, definindo:

---

<sup>5</sup>Usaremos os operadores minúsculos,  $\hat{b}^\pm$  e  $\hat{f}^\pm$  para evidenciar que estamos tratando da álgebra do oscilador harmônico.

$$\hat{b}^- := \sqrt{\frac{M\omega_B}{2\hbar}} q \star + \frac{i}{\sqrt{2M\hbar\omega_B}} p \star, \quad \hat{b}^+ := \sqrt{\frac{M\omega_B}{2\hbar}} q \star - \frac{i}{\sqrt{2M\hbar\omega_B}} p \star. \quad (4.52)$$

Segue, com a ajuda das relações (3.11), que os operadores acima satisfazem as seguintes relações de comutação

$$[\hat{b}^-, \hat{b}^+]_- = \hat{1}, \quad [\hat{b}^-, \hat{b}^-]_- = 0, \quad [\hat{b}^+, \hat{b}^+]_- = 0. \quad (4.53)$$

Nesse contexto, escrevemos o operador Hamiltoniano para o oscilador harmônico bosônico na forma

$$\hat{H}_B = \frac{\hbar\omega_B}{2} [\hat{b}^-, \hat{b}^+]_+ = \hbar\omega_B \left( \hat{N}_B + \frac{1}{2} \right), \quad (4.54)$$

onde  $\hat{N}_B := \hat{b}^+ \hat{b}^-$  chama-se operador número bosônico e possui o seguinte espectro [49]:

$$E_B = \hbar\omega_B \left( n_B + \frac{1}{2} \right), \quad n_B = 0, 1, 2, \dots \quad (4.55)$$

Seguindo a analogia com a Mecânica Quântica Supersimétrica [96], o oscilador harmônico fermiônico, por sua vez, pode ser descrito através dos operadores  $\hat{f}^\pm$ , satisfazendo a mesma álgebra dada em (4.23), ou seja

$$[\hat{f}^-, \hat{f}^+]_+ = \hat{1}, \quad [\hat{f}^-, \hat{f}^-]_+ = 0, \quad [\hat{f}^+, \hat{f}^+]_+ = 0. \quad (4.56)$$

Neste caso, o operador Hamiltoniano fermiônico pode ser construído trocando o anticomutador na equação (4.54), por um comutador

$$\hat{H}_F = \frac{\hbar\omega_F}{2} [\hat{f}^-, \hat{f}^+]_- = \hbar\omega_F \left( \hat{N}_F - \frac{1}{2} \right), \quad (4.57)$$

onde definimos o operador número fermiônico  $\hat{N}_F := \hat{f}^+ \hat{f}^-$  obtendo em consequência os seguintes autovalores de energia

$$E_F = \hbar\omega_F \left( n_F - \frac{1}{2} \right), \quad n_F = 0, 1. \quad (4.58)$$

Consideremos agora o sistema composto formado pela “superposição” de osciladores bosônico e fermiônico. A energia de tal sistema  $E$  é dada pela soma das energias  $E_B$  e  $E_F$ , ou seja

$$E = \hbar\omega_B \left( n_B + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_F \left( n_F - \frac{1}{2} \right). \quad (4.59)$$

Notamos na expressão acima que a energia  $E$  permanece inalterada sob a seguinte transformação de simetria:

$$\left\{ \begin{array}{l} n_B \rightarrow n_B - 1 \\ n_F \rightarrow n_F + 1, \end{array} \right. \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{l} n_B \rightarrow n_B + 1 \\ n_F \rightarrow n_F - 1. \end{array} \right.$$

Em outras palavras dizemos que a energia  $E$  permanece inalterada quando é destruído um quantum bosônico ( $n_B \rightarrow n_B - 1$ ) e criado um quantum fermiônico ( $n_F \rightarrow n_F + 1$ ), ou vice-versa, contanto que as frequências  $\omega_B$  e  $\omega_F$  sejam iguais. Tal simetria, aqui considerando o oscilador harmônico, com os operadores  $\hat{b}^\pm$  dados por (4.52) e  $\hat{f}^\pm$  por (4.63), que denominaremos Supersimetria na Mecânica Quântica Simplética, com o operador Hamiltoniano  $\hat{H}_{ss}$  dado por

$$\hat{H}_{ss} = \hbar\omega \left[ \hat{b}^+ \hat{b}^- + \hat{f}^+ \hat{f}^- \right], \quad (4.60)$$

tendo o seguintes espectro de energia

$$E = \hbar\omega(n_B + n_F), \quad (4.61)$$

com  $\omega_B = \omega_F = \omega$ .

É importante notar que todos os estados são duplamente degenerados exceto o estado fundamental em que  $n_B = n_F = 0$  e por isso tem autovalor da energia igual a zero. Notemos que essas degenerescências surgem quando são simultaneamente destruído (ou criado) um quantum bosônico e criado (ou destruído) um quantum fermiônico; assim, é natural que representemos os geradores da Supersimetria em termos dos operadores  $\hat{f}^- \hat{b}^+$  e  $\hat{f}^+ \hat{b}^-$ , isto é

$$\hat{G}_+ := \sqrt{\hbar\omega} \hat{f}^- \otimes \hat{b}^+, \quad \hat{G}_- := \hat{G}_+^\dagger. \quad (4.62)$$

Nesta representação obtemos então:

$$\hat{H}_{ss} = [\hat{G}_-, \hat{G}_+]_+, \quad [\hat{G}_-, \hat{H}_{ss}]_- = 0, \quad [\hat{G}_+, \hat{H}_{ss}]_- = 0,$$

mostrando que a álgebra assim construída é consistente com a álgebra supersimétrica, introduzida através das relações (4.19).

Uma representação da álgebra (4.56) é dada por meio das matrizes de Pauli (4.25), escrevendo

$$\hat{f}^+ := \frac{1}{2}\sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{f}^- := \frac{1}{2}\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.63)$$



onde  $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm \sigma_2$ . Usando esta representação juntamente com as relações (4.52) e (4.53) no operador Hamiltoniano (4.60) encontramos

$$\begin{aligned}\hat{H}_{ss} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2M}(p^{\star})^2 + \frac{M\omega^2}{2}(q^{\star})^2 - \frac{\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2M}(p^{\star})^2 + \frac{M\omega^2}{2}(q^{\star})^2 + \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{H}_- & 0 \\ 0 & \hat{H}_+ \end{pmatrix},\end{aligned}$$

onde definimos os Hamiltonianos Parceiros Supersimétricos:

$$\hat{H}_- := \hat{b}^+ \hat{b}^-, \quad \hat{H}_+ := \hat{b}^- \hat{b}^+,$$

que estão em acordo com as relações gerais (4.29).

Concluindo este Capítulo notemos que, definido o operador bosônico (4.50), sendo dado um operador Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  que descreve algum sistema físico, se tal Hamiltoniano permitir uma expressão em termos dos operadores  $\hat{B}^{\pm}$  então poderemos generalizar, dentro dessa estrutura, o método de Fatoração, o que será apresentado no Capítulo a seguir.

# Capítulo 5

## Fatoração e hierarquia de Hamiltonianos

No Capítulo anterior, apresentamos um desenvolvimento da estrutura Supersimétrica dentro da formulação da Mecânica Quântica Simplética. Esse esquema permitirá, neste Capítulo, generalizar o método de Fatoração e desenvolver a hierarquia de Hamiltonianos. A estrutura deste Capítulo é a seguinte: *(i)* a seção 5.1 está dividida em três subseções - na subseção 5.1.1 apresentamos uma revisão do método de Fatoração e da hierarquia de Hamiltonianos dentro do contexto da Mecânica Quântica usual; na subseção 5.1.2 desenvolvemos o método de Fatoração na Mecânica Quântica Simplética; em seguida fatoramos a equação de Schrödinger, e na subseção 5.1.3, introduzimos a álgebra supersimétrica no método Fatoracional - *(ii)* a seção 5.2 que finaliza o Capítulo com o desenvolvimento da hierarquia de Hamiltonianos e consequentemente a apresentação de uma elegante forma para resolver determinados problemas espectrais de sistemas físicos com a Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica.

### 5.1 Método de Fatoração

#### 5.1.1 Introdução

O método de Fatoração foi introduzido pela primeira vez por Dirac [14], com o objetivo de resolver algebricamente o problema espectral do oscilador harmônico; nesta perspectiva, o

operador Hamiltoniano<sup>1</sup>  $\hat{H}$  pode ser fatorado

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}, \quad \hat{H} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2},$$

onde<sup>2</sup>

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dx} + x \right), \quad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{dx} + x \right).$$

Das equações acima, é possível derivar as relações

$$\hat{H}\hat{a} = \hat{a}(\hat{H} - 1), \quad \hat{H}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{H} + 1),$$

que conduzem às regras de comutação da álgebra de Heisenberg

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.$$

Estas expressões e o fato que  $\hat{H}$  é positivo definido permite gerar as autofunções  $\psi_n$  e os autovalores  $E_n = n + 1/2$ ,  $n = 0, 1, \dots$  do oscilador harmônico.

O segundo grande avanço desse método foi realizado por Schrödinger [100–102], que estudou a equação hipergeométrica e, em geral, a equação diferencial de segunda ordem aplicado ao Hamiltoniano do átomo de Hidrogênio. Em um conjunto de trabalhos, Infeld e Hull [103] estudaram o método de Fatoração e o aplicaram a uma classe de operadores Hamiltonianos que possuem soluções exatas, classificando-os em quatro famílias.

Em 1984 Mielnik realizou uma generalização deste método [104]; sua idéia consistia em transformar os operadores bosônicos  $\hat{b}$  e  $\hat{b}^\dagger$  em termos de operadores diferenciais de primeira ordem, fatorando o Hamiltoniano do oscilador harmônico como

$$\hat{H} = \hat{b}\hat{b}^\dagger - \frac{1}{2}, \quad \hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \frac{d}{dx} + \beta(x) \right], \quad \hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ -\frac{d}{dx} + \beta(x) \right],$$

onde  $\beta(x)$  é uma função de  $x$ . Desta maneira Mielnik foi capaz de determinar a forma mais geral de  $\beta(x)$  e, construir um novo operador Hamiltoniano através do produto  $\hat{b}^\dagger\hat{b}$ , ou seja

$$\hat{\hat{H}} = \hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x), \quad \text{onde } \tilde{V}(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{d\beta}{dx} + 1.$$

Assim, as seguintes relações são válidas:

$$\hat{\hat{H}}\hat{b}^\dagger = \hat{b}^\dagger(\hat{\hat{H}} + 1), \quad \hat{\hat{H}}\hat{b} = \hat{b}(\hat{\hat{H}} - 1),$$

<sup>1</sup>Nesta subseção por questão de simplicidade, assume-se que  $\hbar = \omega = m = 1$ .

<sup>2</sup>Os operadores  $\hat{a}$  e  $\hat{b}$  referem-se aos operadores bosônicos do oscilador harmônico na Mecânica Quântica Usual.

que conectam as autofunções do Hamiltoniano do oscilador harmônico  $\hat{H}$  com  $\hat{\hat{H}}$  e vice versa.

Em 1985 Sukumar [92] utilizando a idéia da Mecânica Quântica Supersimétrica generalizou a fatoração de Mielnik para potenciais  $V(x)$  unidimensionais mais gerais e energias  $\epsilon$  de fatoração arbitrárias, na seguinte maneira

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{A}^- \hat{A}^+ + \epsilon, & \hat{\hat{H}} &= \hat{A}^+ \hat{A}^- + \epsilon, \\ \hat{H} &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), & \hat{\hat{H}} &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x),\end{aligned}$$

com os operadores bosônicos<sup>3</sup> dados por

$$\hat{A}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \frac{d}{dx} + U(x) \right], \quad \hat{A}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ -\frac{d}{dx} + U(x) \right].$$

As relações acima implicam em:

$$\hat{\hat{H}} \hat{A}^+ = \hat{A}^+ \hat{H}, \quad \hat{H} \hat{A}^- = \hat{A}^- \hat{\hat{H}},$$

que gera as autofunções e os autovalores de  $\hat{\hat{H}}$  e  $\hat{H}$ .

Desde que a análise é válida para qualquer Hamiltoniano unidimensional  $\hat{H}_1$  com estado fundamental ( $\epsilon \equiv E_0^1, \psi_0^1$ ) o processo de encontrar um parceiro supersimétrico poderá ser iterado [105] para gerar a hierarquia de Hamiltonianos  $\hat{H}_n$ , onde  $(E_n^{(J)}, \psi_n^{(J)})$  são os autoestados de  $\hat{H}_n$  com as propriedades

$$\begin{aligned}E_n^{(m)} &= E_{n-1}^{(m+1)} = \dots = E_1^{(m+n-1)}, & \psi_n^{(m)} &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(m)} - E_{n-1}^{(0)}}} \hat{A}_{n-1}^- \psi_{n-1}^{(m+1)}, \\ \psi_{n-1}^{(m+1)} &= \frac{1}{\sqrt{E_n^{(m)} - E_{n-1}^{(0)}}} \hat{A}_{n-1}^+ \psi_n^{(m)}, & n &= 2, 3, \dots; \quad m = 0, 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Uma representação pictorial dos autovalores na hierarquia de Hamiltonianos é dada na figura (5.1)

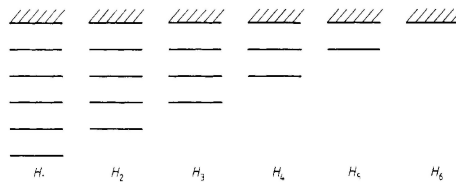


Figura 5.1: Diagrama do autovalores dos Hamiltonianos na hierarquia  $\hat{H}_n$  [92].

Um de nossos objetivos é implementar esse processo, dentro da formulação Simplética da Mecânica Quântica, de modo a generalizar o método de fatoração para construir a hierarquia de Hamiltonianos e obter a correspondente função de Wigner.

<sup>3</sup>Os símbolos  $\pm$  em  $\hat{A}^\pm$  é uma indicação que estes operadores são os operadores bosônicos supersimétricos.

### 5.1.2 Método Fatoracional em $\mathcal{H}_\Gamma$

A equação de Schrödinger é dada por

$$\hat{H}\psi(q, p) = \left( \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + V(\hat{Q}) \right) \psi(q, p). \quad (5.1)$$

onde os operadores  $\hat{Q}$  e  $\hat{P}$  são dados pelas relações (3.7) no espaço  $2Nd$  dimensional, com

$$\hat{P}^2 := \sum_{\mu=1}^{Nd} \hat{P}_\mu^2, \quad \text{e} \quad \hat{Q} = (\hat{Q}_1, \hat{Q}_2, \dots, \hat{Q}_{Nd}). \quad (5.2)$$

Para efetuarmos a fatoração<sup>4</sup> introduzamos, seguindo as idéias de Mielnik [104] e Sukumar [92], operadores de levantamento e abaixamento (4.52), similares aos de criação e aniquilação da Teoria Quântica de Campos, definidos por por:

$$\hat{B}_\mu := \frac{i}{\sqrt{2M}}\hat{P}_\mu + U_\mu(\hat{Q}), \quad \hat{B}_\mu^\dagger := -\frac{i}{\sqrt{2M}}\hat{P}_\mu + U_\mu(\hat{Q}). \quad (5.3)$$

Aqui,  $U_\mu(\hat{Q})$  com  $\mu = 1, 2, \dots, Nd$  é uma função do operador posição  $\hat{Q} = q\star$ .

Com os operadores (5.3), o operador de 2<sup>a</sup> ordem na equação (5.1) poderá ser fatorado em termos de operadores de 1<sup>a</sup> ordem

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^{Nd} \hat{B}_\mu^\dagger \hat{B}_\mu + E_0, \quad (5.4)$$

onde  $E_0$  é uma constante que foi adicionada para garantir que o operador  $\hat{H}$  tenha autovalor do estado fundamental, uma vez que o operador  $\hat{B}_\mu$  possui a propriedade de “aniquilar” a autofunção do estado fundamental  $\psi_0$  de  $\hat{H}$ , isto é

$$\left( \frac{i}{\sqrt{2M}}\hat{P}_\mu + U_\mu(\hat{Q}) \right) \psi_0(q, p) = 0. \quad (5.5)$$

A função  $U_\mu(\hat{Q})$  na equação acima, poderá ser obtida através da equação de Ricatti

$$V(\hat{Q}) = \sum_{\mu=1}^{Nd} \left( U_\mu^2 + \frac{i}{\sqrt{2M}}[U_\mu, \hat{P}_\mu] \right) + E_0, \quad (5.6)$$

obtida<sup>5</sup> igualando o operador  $\hat{H}$  na equação (5.1) com (5.4) e usando os operadores (5.3).

<sup>4</sup>Notamos que a fatoração desenvolvida nesta subseção é geral, não restringindo somente ao espaço tridimensional e aos operadores bosônicos  $\hat{b}$ , e  $\hat{b}^\dagger$  do oscilador harmônico.

<sup>5</sup>Dispensamos os índices  $\mp$  nos operadores  $\hat{B}$ ,  $\hat{B}^\dagger$  e no comutador  $[\cdot, \cdot]$  na equação (5.6) pois nesta subseção não estamos empregando o método supersimétrico.

Assim, resolvendo as equações (5.5) e (5.6) poderemos aplicar o operador de “criação”  $B_\mu^\dagger$ ,  $n$  vezes ao estado fundamental, e obter a solução do problema. Oliveira *et al.* [48] usaram os operadores (5.3) com a função  $U_\mu$  dada por

$$U(\hat{Q}) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega\hat{Q} \equiv \sqrt{\frac{m}{2}}\omega q^\star,$$

para resolver o problema do oscilador harmônico no espaço de fase usando uma forma de fatoração, comumente denominada de Método Algébrico. O processo de fatoração aqui desenvolvido, no entanto, vai além da aplicação ao oscilador harmônico.

Uma representação pictográfica das soluções encontradas com o método algébrico aplicado ao oscilador harmônico é ilustrada na figura (5.2).

$$\begin{array}{c} \vdots \\ \hline \hat{E}_{n-1} \quad \Psi_{n-1} \alpha \hat{b}^\dagger \Psi_{n-2} \\ \vdots \\ \hline \hat{E}_3 \quad \Psi_3 \alpha \hat{b}^\dagger \Psi_2 \\ \hline \hat{E}_2 \quad \Psi_2 \alpha \hat{b}^\dagger \Psi_1 \\ \hline \hat{E}_1 \quad \Psi_1 \alpha \hat{b}^\dagger \Psi_0 \\ \hline \hat{E}_0 \quad \Psi_0 \\ \hat{H} \end{array}$$

Figura 5.2: Método Fatoracional Algébrico.

Analisando o caso 1 na figura (4.1) com a figura (5.2) notamos que podemos generalizar o método de fatoração algébrico através da álgebra da Supersimetria; isso será feita na próxima subseção.

### 5.1.3 Método Fatoracional Supersimétrico em $\mathcal{H}_\Gamma$

Do exposto na subseção anterior tem-se a fatoração<sup>6</sup> do operador Hamiltoniano  $\hat{H}_{(1)}$  na equação de Schrödinger (5.1) em termos dos operadores bosônicos supersimétricos  $\hat{B}_{(1)}^\pm$  [veja

<sup>6</sup>Aqui e na próxima seção, por questão de simplicidade, estaremos assumindo um espaço de fase bidimensional.

relações (4.50)] da seguinte maneira:

$$\hat{H}_{(1)}\psi^{(1)}(q, p) := \left( \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(1)}^- + E_0^{(1)} \right) \psi^{(1)}(q, p) = E^{(1)}\psi^{(1)}(q, p), \quad (5.7)$$

onde  $E_0^{(1)}$  é o autovalor do estado fundamental de  $\hat{H}_{(1)}$ .

Por outro lado, podemos reescrever a equação acima na forma

$$\hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(1)}^- \psi^{(1)}(q, p) = (E^{(1)} - E_0^{(1)})\psi^{(1)}(q, p). \quad (5.8)$$

Comparando as equações (4.29) e (5.8), obtemos

$$\hat{H}_- \psi^{(1)}(q, p) = (E^{(1)} - E_0^{(1)})\psi^{(1)}(q, p). \quad (5.9)$$

Nesse sentido, com a análise feita no Capítulo 4, pode-se dizer que a Supersimetria é uma generalização do método de Fatoração. Além disso notamos, por meio das equações (5.7) e (5.9), que as autofunções de  $\hat{H}_-$  e  $\hat{H}_{(1)}$  são as mesmas.

Como podemos notar na equação (4.35), o autovalor de energia para o estado fundamental de  $\hat{H}_-$  é zero, ou seja

$$\hat{H}_- \psi_0^{(1)}(q, p) = 0 \Leftrightarrow \left( \frac{i}{\sqrt{2M}} \hat{P} + W_{(1)}(\hat{Q}) \right) \psi_0^{(1)}(q, p) = 0; \quad (5.10)$$

neste caso, tivemos que adicionar a constante  $E_0^{(1)}$  na equação (5.7) para a obtenção do espectro correto do operador  $\hat{H}_{(1)}$  dentro da formulação Supersimétrica.

O superpotencial  $W_{(1)}$  na equação (5.10), poderá ser obtido por meio da equação de Ricatti

$$V_{(1)}(\hat{Q}) = W_{(1)}^2(\hat{Q}) + \frac{i}{\sqrt{2M}} [W_{(1)}(\hat{Q}), \hat{P}]_- + E_0^{(1)}, \quad (5.11)$$

que é obtida, substituindo os operadores (4.50) na equação (5.7).

Multiplicando ambos os lados da equação (5.9) por  $\hat{B}_{(1)}^-$ , encontramos

$$\hat{H}_{(2)} \left( \hat{B}_{(1)}^- \psi^{(1)}(q, p) \right) = E^{(1)} \left( \hat{B}_{(1)}^- \psi^{(1)}(q, p) \right), \quad (5.12)$$

em que identificamos o Hamiltoniano parceiro supersimétrico de  $\hat{H}_{(1)}$ , por

$$\hat{H}_{(2)} \equiv \hat{H}_+ + E_0^{(1)}, \quad \text{onde } \hat{H}_+ := \hat{B}_{(1)}^- \hat{B}_{(1)}^+. \quad (5.13)$$

O operador  $\hat{H}_+$  juntamente com (5.9) compõe o Hamiltoniano supersimétrico (4.29). Agora, se  $E^{(2)}$  é um autovalor de  $\hat{H}_{(2)}$  com autofunção normalizada  $\psi^{(2)}$ , então

$$\hat{H}_{(2)}\psi^{(2)}(q, p) = \left[ \frac{1}{2M} \hat{P}^2 + V_{(2)}(\hat{Q}) \right] \psi^{(2)}(q, p) = E^{(2)}\psi^{(2)}(q, p). \quad (5.14)$$

Da equação acima, podemos obter uma segunda equação de Ricatti para este potencial

$$V_{(2)}(\hat{Q}) = W_{(1)}^2(\hat{Q}) - \frac{i}{\sqrt{2M}}[W_{(1)}(\hat{Q}), \hat{P}]_- + E_0^{(1)}, \quad (5.15)$$

com  $V_{(1)}(\hat{Q}) \neq V_{(2)}(\hat{Q})$ , como se pode observar comparando com (5.11).

Se  $E^{(1)}$  não for autovalor do estado fundamental de  $\hat{H}_{(1)}$ , i.e.,  $E^{(1)} \neq E_0^{(1)}$ , então comparando as equações (5.12) e (5.14), temos

$$\psi^{(2)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E^{(1)} - E_0^{(1)}}} \hat{B}_{(1)}^- \psi^{(1)}(q, p).$$

Multiplicando ambos os membros na função acima por  $\hat{B}_{(1)}^+$  e usando (5.9) encontramos

$$\psi^{(1)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E^{(1)} - E_0^{(1)}}} \hat{B}_{(1)}^+ \psi^{(2)}(q, p). \quad (5.16)$$

O fator  $1/\sqrt{E^{(1)} - E_0^{(1)}}$  é obtido considerando a condição de normalização. A menos do autovalor  $E_0^{(1)}$  todos os autovalores<sup>7</sup> dos Hamiltonianos (5.7) e (5.14) coincidem, ou seja

$$E^{(1)} = E^{(2)}, \quad \text{com} \quad E^{(1)} \neq E_0^{(1)}. \quad (5.17)$$

Notamos que a relação acima é semelhante à relação (4.40) com a representação do mapeamento espectral, para o caso discreto, dada na figura (5.3).

$$\begin{array}{c} \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \frac{E_{n-1}^{(1)}}{\Psi_{n-1}^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_{n-2}^{(2)}} \frac{E_{n-2}^{(2)}}{\Psi_{n-2}^{(2)}} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \frac{E_3^{(1)}}{\Psi_3^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_2^{(2)}} \frac{E_2^{(2)}}{\Psi_2^{(2)}} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \frac{E_2^{(1)}}{\Psi_2^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_1^{(2)}} \frac{E_1^{(2)}}{\Psi_1^{(2)}} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \frac{E_1^{(1)}}{\Psi_1^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_0^{(2)}} \frac{E_0^{(2)}}{\Psi_0^{(2)}} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \frac{E_0^{(1)}}{\hat{H}_{(1)}} \hat{B}_{(1)}^- \Psi_0^{(1)} = 0 \quad \hat{H}_{(2)} \end{array}$$

Figura 5.3: Representação esquemática das relações (5.16) e (5.17).

A exposição apresentada nesta seção segue a estrutura do caso 1 do Capítulo 4, com a equação de Schrödinger (5.1) fatorada em termos de operadores bosônicos dados pelas relações

<sup>7</sup>Estamos assumindo que estes autovalores podem ser discretos ou contínuos.



(4.50), com autovalor do estado fundamental dado por  $E_0^{(1)}$ . Como esse desenvolvimento é válido para qualquer Hamiltoniano unidimensional, o processo de encontrar o companheiro supersimétrico poderá ser feito através de iterações para gerar a hierarquia de Hamiltonianos. Essa hierarquia nos possibilitará resolver, conforme veremos no Capítulo 6, determinados problemas físicos, desde que possamos fatorar o operador Hamiltoniano.

## 5.2 Hierarquia de Hamiltonianos

A construção da hierarquia de Hamiltonianos e sua aplicação na resolução de problemas físicos consiste principalmente, conforme veremos, nas soluções das equações (5.11) e (5.15), conhecidas como equações de Ricatti. Analisando essas equações, notamos que nelas há comutadores. No entanto, para obter soluções de problemas físicos é conveniente colocá-las sob a forma de equações diferenciais. Para fazer isso, fazemos uso do Apêndice C e escrevemos os operadores bosônicos<sup>8</sup> (4.50) da seguinte forma

$$\hat{B}_{(1)}^-(\eta) = \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(1)}(\eta), \quad \hat{B}_{(1)}^+(\eta) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(1)}(\eta). \quad (5.18)$$

Nesse caso, o operador Hamiltoniano (veja equação (C.15) do Apêndice C) pode ser fatorado

$$\hat{H}_{(1)}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(1)}(\eta) := \hat{B}_{(1)}^+(\eta) \hat{B}_{(1)}^-(\eta) + E_0^{(1)}. \quad (5.19)$$

A primeira equação de Ricatti é obtida substituindo (5.18) em (5.19) chegando-se a:

$$V_{(1)}(\eta) = W_{(1)}^2(\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(1)}(\eta) + E_0^{(1)}, \quad \text{onde } \eta = 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (5.20)$$

A solução da equação acima nos dá o autovalor de energia do estado fundamental e o superpotencial  $W_{(1)}(\eta)$ . Com este superpotencial podemos calcular a autofunção do estado fundamental de  $\hat{H}_{(1)}(\eta)$  por meio da equação (4.33)

$$\left( \frac{i}{\sqrt{2M}} p \star + W_{(1)}(q \star) \right) \psi_0^{(1)}(q, p) = 0, \quad (5.21)$$

onde usamos a relação (C.11) (veja Apêndice C) para escrever o superpotencial

$$W_{(1)}(q \star) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} W_{(1)}(\eta) e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (5.22)$$

---

<sup>8</sup>Os parênteses nos índices ( $n$ ) vão servir de indicador para os membros da hierarquia.

O parceiro supersimétrico de  $\hat{H}_{(1)}(\eta)$  poderá ser obtido invertendo a ordem dos operadores bosônicos em (5.19), ou seja

$$\hat{H}_{(1)}^+(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(2)}(\eta) = \hat{B}_{(1)}^-(\eta) \hat{B}_{(1)}^+(\eta) + E_0^{(1)} \quad (5.23)$$

Devemos notar que, com a solução da equação (5.20), o potencial  $V_{(2)}(\eta)$  está automaticamente determinado através da segunda equação de Ricatti

$$V_{(2)}(\eta) = W_{(1)}^2(\eta) + \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(1)}(\eta) + E_0^{(1)}, \quad \text{onde } V_{(2)}(\eta) \neq V_{(1)}(\eta), \quad (5.24)$$

que foi obtida substituindo (5.18) em (5.23).

Até o momento, apenas repetimos a estrutura indicada na subseção 5.1.3, lembrando que, com o método fatoracional supersimétrico é possível determinar o autovalor e a autofunção para o nível mais baixo de energia no espectro; este procedimento constitui o 1º membro da hierarquia.

O 2º membro da hierarquia  $\hat{H}_{(2)}$  poderá ser obtido fatorando o operador  $\hat{H}_{(1)}^+(\eta)$ , cujo estado fundamental tem autovalor  $E_0^{(2)}$  que, conforme podemos notar na figura (5.3), está associado ao primeiro estado excitado de  $\hat{H}_{(1)}(\eta)$ , isto é

$$E_0^{(2)} = E_1^{(1)}, \quad (5.25)$$

através de novos operadores bosônicos,

$$\hat{B}_{(2)}^-(\eta) := \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(2)}(\eta), \quad \hat{B}_{(2)}^+(\eta) := -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(2)}(\eta). \quad (5.26)$$

Assim podemos escrever (5.23) na seguinte forma

$$\hat{H}_{(2)}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(2)}(\eta) := \hat{B}_{(2)}^+(\eta) \hat{B}_{(2)}^-(\eta) + E_0^{(2)}, \quad (5.27)$$

com o superpotencial dado pela equação de Ricatti,

$$V_{(2)}(\eta) = W_{(2)}^2(\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(2)}(\eta) + E_0^{(2)}. \quad (5.28)$$

A resolução da equação (5.23) leva ao autovalor de energia  $E_0^{(2)}$  e ao superpotencial. Com este superpotencial, o estado fundamental de  $\hat{H}_{(2)}$  é automaticamente determinado por

$$\left( \frac{i}{\sqrt{2M}} p \star + W_{(2)}(q \star) \right) \psi_0^{(2)}(q, p) = 0, \quad (5.29)$$

onde, novamente, usamos a relação (C.11) em (4.33):

$$W_{(2)}(q^\star) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} W_{(2)}(\eta) e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (5.30)$$

Com a resolução da equação (5.29) podemos determinar a autofunção do primeiro estado excitado de  $\hat{H}_{(1)}$  por meio da relação (5.16):

$$\psi_1^{(1)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_0^{(2)} - E_0^{(1)}}} \hat{B}_{(1)}^+ \psi_0^{(2)}(q, p), \quad (5.31)$$

onde<sup>9</sup>  $\hat{B}_{(1)}^+$  pode ser obtido utilizando a função (5.22) e a relação básica (4.50).

Invertendo a ordem dos operadores  $\hat{B}_{(2)}^\pm(\eta)$  em (5.27) podemos obter o parceiro supersimétrico de  $\hat{H}_{(2)}(\eta)$

$$\hat{H}_{(2)}^+(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(3)}(\eta) = \hat{B}_{(2)}^-(\eta) \hat{B}_{(2)}^+(\eta) + E_0^{(2)}. \quad (5.32)$$

Neste caso, o potencial  $V_{(3)}(\eta)$  também está automaticamente determinado através da solução da equação de Ricatti

$$V_{(3)}(\eta) = W_{(2)}^2(\eta) + \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(2)}(\eta) + E_0^{(2)}, \quad \text{onde } V_{(3)}(\eta) \neq V_{(2)}(\eta) \neq V_{(1)}(\eta). \quad (5.33)$$

Prosseguindo, podemos iniciar a fatoração de  $\hat{H}_{(2)}^+(\eta)$  e construir o 3º membro da hierarquia  $\hat{H}_{(3)}(\eta)$ , cujo estado fundamental  $E_0^{(3)}$  terá autovalor

$$E_0^{(3)} = E_1^{(2)} = E_2^{(1)}, \quad (5.34)$$

definindo novos operadores bosônicos

$$\hat{B}_{(3)}^-(\eta) := \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(3)}(\eta), \quad \hat{B}_{(3)}^+(\eta) := -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(3)}(\eta). \quad (5.35)$$

Com estes operadores escrevemos o Hamiltoniano (5.32) na forma

$$\hat{H}_{(3)}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(3)}(\eta) := \hat{B}_{(3)}^+(\eta) \hat{B}_{(3)}^-(\eta) + E_0^{(3)}. \quad (5.36)$$

O correspondente superpotencial satisfaz a equação de Ricatti

$$V_{(3)}(\eta) = W_{(3)}^2(\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(3)}(\eta) + E_0^{(3)}, \quad (5.37)$$

---

<sup>9</sup>Quando os operadores bosônicos forem escritos sem explicitar seus argumentos, significa que são funções dos operadores estrelas, ou seja:  $\hat{B}^\pm = \hat{B}^\pm(q^\star, p^\star)$ .

com autofunção do estado fundamental  $\psi_0^{(3)}$  satisfazendo

$$\left( \frac{i}{\sqrt{2M}} p^\star + W_{(3)}(q^\star) \right) \psi_0^{(3)}(q, p) = 0, \quad (5.38)$$

onde, novamente, usamos a relação (C.11) em (4.33).

A relação entre as autofunções de  $\hat{H}_{(2)}$  e  $\hat{H}_{(3)}$  é dada por

$$\psi_1^{(2)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_0^{(3)} - E_0^{(2)}}} \hat{B}_{(2)}^+ \psi_0^{(3)}(q, p), \quad (5.39)$$

onde  $\hat{B}_{(2)}^+$  tem a forma básica (4.50); por outro lado, sabemos também de (5.16) que

$$\psi_2^{(1)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_1^{(2)} - E_0^{(1)}}} \hat{B}_{(1)}^+ \psi_1^{(2)}(q, p). \quad (5.40)$$

Assim, (5.39) pode ser reescrita na forma:

$$\psi_2^{(1)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_2^{(1)} - E_0^{(1)}}} \frac{1}{\sqrt{E_1^{(2)} - E_0^{(2)}}} \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(2)}^+ \psi_0^{(3)}(q, p). \quad (5.41)$$

Procedendo dessa maneira, o parceiro supersimétrico de (5.36) é obtido invertendo a ordem dos operadores, dados por (5.35), na equação (5.36)

$$\hat{H}_{(3)}^+(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(4)}(\eta) = \hat{B}_{(3)}^-(\eta) \hat{B}_{(3)}^+(\eta) + E_0^{(3)}. \quad (5.42)$$

Nesse caso, o potencial  $V_{(4)}(\eta)$  é obtido através da equação de Ricatti

$$V_{(4)}(\eta) = W_{(3)}^2(\eta) + \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(3)}(\eta) + E_0^{(3)}, \quad \text{onde } V_{(4)} \neq V_{(3)} \neq V_{(2)} \neq V_{(1)}. \quad (5.43)$$

Notamos, de uma maneira geral, que a hierarquia consiste em fatorar o Hamiltoniano

$$\hat{H}_{(n)}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(n)}(\eta) := \hat{B}_{(n)}^+(\eta) \hat{B}_{(n)}^-(\eta) + E_0^{(n)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.44)$$

em termos de operadores bosônicos

$$\hat{B}_{(n)}^-(\eta) := \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(n)}(\eta), \quad \hat{B}_{(n)}^+(\eta) := -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(n)}(\eta), \quad (5.45)$$

com  $V_{(n)}(\eta)$  satisfazendo a equação de Ricatti

$$V_{(n)}(\eta) = W_{(n)}^2(\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(n)}(\eta) + E_0^{(n)}. \quad (5.46)$$

Nessa forma alternativa de reescrever a hierarquia de Hamiltonianos, a equação de Ricatti, aqui obtida, tem a forma da equação de Ricatti [105] do formalismo supersimétrico usual. No entanto, devemos lembrar que a variável  $\eta$  na equação (5.46) não é uma variável multiplicativa e portanto não comuta com suas autofunções.

A solução da equação de Ricatti (5.46) nos dá o autovalor  $E_0^{(n)}$  do estado fundamental do Hamiltoniano, em cada membro da hierarquia, e o superpotencial  $W_{(n)}(\eta)$  dos operadores bosônicos. Através desta solução, podemos determinar a autofunção  $\psi_0^{(n)}$  do estado fundamental de  $\hat{H}_n$

$$\left( \frac{i}{\sqrt{2M}} p \star + W_{(n)}(q\star) \right) \psi_0^{(n)}(q, p) = 0, \quad (5.47)$$

com  $W_{(n)}(q\star)$  dado através da relação:

$$W_{(n)}(q\star) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} W_{(n)}(\eta) e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (5.48)$$

Invertendo, em (5.44), a ordem dos operadores (5.45), temos o parceiro supersimétrico do operador  $\hat{H}_n(\eta)$ ,

$$\hat{H}_{(n)}^+(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V_{(n+1)}(\eta) = \hat{B}_{(n)}^-(\eta) \hat{B}_{(n)}^+(\eta) + E_0^{(n)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.49)$$

com  $V_{(n+1)}(\eta)$  satisfazendo uma “nova” equação de Ricatti

$$V_{(n+1)}(\eta) = W_{(n)}^2(\eta) + \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(n)}(\eta) + E_0^{(n)}, \quad (5.50)$$

onde devemos ter em mente que  $V_{(n)}(\eta) \neq V_{(n+1)}(\eta)$ .

Nota que se tomamos  $n = 2$  na equação (5.44), com o potencial dado pela equação (5.50), então realizaremos uma segunda fatoração; a hierarquia será construída quando fizermos esse processo de fatoração  $n$  vezes.

Observando as relações (5.25) e (5.34) notamos que os autovalores, em cada etapa da hierarquia, estão inter-relacionados através de

$$E_0^{(n)} = E_1^{(n-1)} = E_2^{(n-2)} = \dots = E_{n-1}^{(1)}, \quad (5.51)$$

com suas respectivas autofunções<sup>10</sup> sendo dadas de acordo com (5.31) (5.39) e (5.40):

$$\psi_n^{(m)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(m+1)} - E_{n-1}^{(m)}}} \hat{B}_{(m)}^+ \psi_{n-1}^{(m+1)}(q, p), \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.52)$$

<sup>10</sup>Aqui, foi colocado um novo rótulo ( $m$ ) para distinguir as autofunções em cada membro da hierarquia.

onde, é importante lembrar que,  $\hat{B}_{(m)}^+$  é obtido substituindo a relação (5.48) na relação básica (4.50). Essas autofunções estão relacionadas com a função do estado fundamental (5.47), por meio de

$$\psi_n^{(m)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(m+1)} - E_{n-1}^{(m)}}} \hat{B}_{(m)}^+ \cdots \frac{1}{\sqrt{E_0^{(m+n)} - E_0^{(m+n-1)}}} \hat{B}_{(m+n-1)}^+ \psi_0^{(m+n)}(q, p). \quad (5.53)$$

A relação (5.51) nos diz que, com exceção do estado fundamental que é aniquilado pelo operador  $\hat{B}_{(m)}^-$  em cada membro da hierarquia, os Hamiltonianos têm os mesmos espectros e as autofunções estão relacionadas de acordo com (5.53). Esse processo se encontra resumido na figura (5.4); nesta figura notamos que cada vez que o processo de fatoração é aplicado, um nível de energia é deixado pra trás e, na medida que uma nova fatoração é feita, uma constante  $E_0^{(n)}$  é adicionada para obter-se o espectro correto do Hamiltoniano que está sendo fatorado.

$$\begin{array}{cccc}
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{E_{n-1}^{(1)}}{\Psi_{n-1}^{(m)} \alpha \hat{B}_{(m)}^+ \Psi_{n-2}^{(m+1)}} & \frac{E_{n-2}^{(2)}}{\Psi_{n-2}^{(m+1)} \alpha \hat{B}_{(m+1)}^+ \Psi_{n-3}^{(m+2)}} & \frac{E_{n-3}^{(3)}}{\Psi_{n-3}^{(m+2)} \alpha \hat{B}_{(m+2)}^+ \Psi_{n-4}^{(m+3)}} & \frac{E_{n-4}^{(4)}}{\Psi_{n-4}^{(m+3)} \alpha \hat{B}_{(m+3)}^+ \Psi_{n-5}^{(m+4)}} \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{E_3^{(1)}}{\Psi_3^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_2^{(2)}} & \frac{E_2^{(2)}}{\Psi_2^{(2)} \alpha \hat{B}_{(2)}^+ \Psi_1^{(3)}} & \frac{E_1^{(3)}}{\Psi_1^{(3)} \alpha \hat{B}_{(3)}^+ \Psi_0^{(4)}} & \frac{E_0^{(4)}}{\Psi_0^{(4)} \alpha \hat{B}_{(4)}^+ \Psi_{-1}^{(5)}} \\
\frac{E_2^{(1)}}{\Psi_2^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_1^{(2)}} & \frac{E_1^{(2)}}{\Psi_1^{(2)} \alpha \hat{B}_{(2)}^+ \Psi_0^{(3)}} & \frac{E_0^{(3)}}{\Psi_0^{(3)} \alpha \hat{B}_{(3)}^- \Psi_{-1}^{(4)}} = 0 & \\
\frac{E_1^{(1)}}{\Psi_1^{(1)} \alpha \hat{B}_{(1)}^+ \Psi_0^{(2)}} & \frac{E_0^{(2)}}{\Psi_0^{(2)} \alpha \hat{B}_{(2)}^- \Psi_{-1}^{(3)}} = 0 & & \\
\frac{E_0^{(1)}}{\hat{H}_{(1)}} & \hat{H}_{(2)} & \hat{H}_{(3)} & \hat{H}_{(4)}
\end{array}$$

Figura 5.4: Representação gráfica da hierarquia de Hamiltonianos e da relação entre suas autofunções e seus autovalores de energias.

Dessa forma, uma vez conhecido o autovalor de energia do estado fundamental e o superpotencial do Hamiltoniano em cada membro da hierarquia, os autovalores e as autofunções do Hamiltoniano original  $\hat{H}_{(1)}$  estão automaticamente determinados por meio das relações (5.51)

e (5.53). Esse procedimento, constitui-se em um elegante método de resolução da equação de Schrödinger, desenvolvimento que faremos no próximo Capítulo.

Finalizaremos esta seção notando que, embora tenhamos colocado o superpotencial  $W_{(m)}$  na equação (5.47) em termo do produto estrela, poderíamos muito bem proceder com o desenvolvimento do método da hierarquia em termo da variável  $\eta$ , ou seja, partindo do conhecimento que os estados fundamentais, em cada membro das hierarquias, são aniquilados pelos operadores cargas supersimétricos e conseqüentemente pelos operadores bosônicos  $\hat{B}_m^-(\eta)$ . Esse procedimento será útil quando estudarmos o átomo de Hidrogênio na seção 6.4. Assim, os estados fundamentais na representação da variável  $\eta$  satisfazem a equação

$$\left( \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{\partial}{\partial \eta} + W_{(m)}(\eta) \right) \phi_0^{(m)}(\eta, p) = 0, \quad (5.54)$$

que possui uma integração imediata

$$\phi_0^{(m)}(\eta, p) = K \left[ e^{-\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int W_{(m)}(\eta) d\eta} \right] C(p), \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.55)$$

onde  $K$  é uma constante e  $C(p)$  é uma função de  $p$  a ser determinada; para que a relação acima satisfaça a condição (C.3) é necessário que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \left| \frac{d^k}{dp^k} C(p) \right| < \infty, \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (5.56)$$

Os estados fundamentais nas coordenadas  $q$  e  $p$ , em cada membro da hierarquia, poderão ser obtidos substituindo (5.55) em (C.18)

$$\psi_0^{(m)}(q, p) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi_0^{(m)}(\eta, p). \quad (5.57)$$

Nessa representação, a solução final (5.53) do Hamiltoniano  $\hat{H}_{(m)}$  é dada por,

$$\psi_n^{(m)}(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ \hat{B}_{(1)}^+(\eta) \dots \hat{B}_{(m+n-1)}^+(\eta) e^{-\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int W_{(m+n)}(\eta) d\eta} \right] C(p), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.58)$$

onde, novamente, fizemos uso da relação (5.55) com  $\hat{B}^-(\eta)$  e  $\hat{B}^+(\eta)$  dados por (5.45).

# Capítulo 6

## Aplicações

### 6.1 Cálculo da função de Wigner usando a hierarquia de Hamiltonianos

#### 6.1.1 Introdução

Vimos no Capítulo 4 que quando a Supersimetria não é quebrada ela é uma simetria exata; nesse sentido, conforme visto no Capítulo 5, a Supersimetria é uma generalização do método de Fatoração com os operadores de aniquilação e destruição identificados com os operadores bosônicos (4.50). A solução da equação (5.11) nos dá o autovalor  $E_0^{(1)}$  e a autofunção  $\psi_0^{(1)}$ , via equação (5.10), do estado fundamental do Hamiltoniano  $\hat{H}_{(1)}$ . Com a solução da primeira equação (5.11) podemos obter um segundo potencial através da segunda equação (5.15), obtida por meio do parceiro supersimétrico (5.13) de  $\hat{H}_{(1)}$ ; caso o Hamiltoniano  $\hat{H}_{(2)}$  permita uma nova fatoração em termos de “novos” operadores bosônicos podemos construir uma hierarquia de Hamiltonianos, como fizemos na seção 5.2. Nesse caso, notamos por meio da figura (5.4) que podemos relacionar as autofunções  $\psi_0^{(n+1)}$  e os espectros de energia  $E_0^{(n)}$  dos estados fundamentais de cada membro da hierarquia com os estados  $\psi_n^{(1)}$  e os espectros <sup>1</sup>  $E_{n-1}^{(1)}$  do Hamiltoniano

---

<sup>1</sup>A omissão nos índices superiores nas autofunções  $\psi_n^{(1)}$  e nos espectros  $E_0^{(1)}$  significa que esses objetos pertencem ao Hamiltoniano de partida.



de partida  $\hat{H}_{(1)}$ , aqui identificado por  $m \equiv 1$  na função (5.53), através das relações:

$$E_{n-1} \equiv E_{n-1}^{(1)} = E_0^{(n)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.1)$$

$$\psi_n(q, p) \equiv \psi_n^{(1)}(q, p) = \frac{1}{\sqrt{E_{n-1}^{(2)} - E_{n-1}^{(1)}}} \hat{B}_{(1)}^+ \cdots \frac{1}{\sqrt{E_0^{(n+1)} - E_0^{(n)}}} \hat{B}_{(n)}^+ \psi_0^{(n+1)}(q, p). \quad (6.2)$$

### 6.1.2 Função de Wigner

A conexão com o formalismo de Wigner pode ser obtida substituindo a relação (6.2) na definição (3.29)

$$\begin{aligned} f_n(q, p) &= \left[ \frac{1}{(E_{n-1}^{(2)} - E_{n-1}^{(1)})} \hat{B}_{(1)}^+ \cdots \frac{1}{(E_0^{(n+1)} - E_0^{(n)})} \hat{B}_{(n)}^+ \psi_0^{(n+1)}(q, p) \right] \star \left[ \hat{B}_{(1)}^+ \cdots \hat{B}_{(n)}^+ \psi_0^{(n+1)}(q, p) \right]^* \\ &= \left[ \frac{1}{(E_{n-1}^{(2)} - E_{n-1}^{(1)})} \hat{B}_{(1)}^+ \cdots \frac{1}{(E_0^{(n+1)} - E_0^{(n)})} \hat{B}_{(n)}^+ \right] \left[ \left( \psi_0^{(n+1)}(q, p) \star \psi_0^{(n+1)*}(q, p) \right) (\hat{B}_{(1)}^+)^* \cdots (\hat{B}_{(n)}^+)^* \right]. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Identificamos a função

$$f_0^{(n)}(q, p) \equiv \psi_0^{(n)}(q, p) \star \psi_0^{(n)*}(q, p), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.4)$$

com a função de Wigner do estado fundamental em cada membro da hierarquia de Hamiltonianos e notando que podemos definir os operadores<sup>2</sup>  $\hat{\overleftarrow{Q}}$  e  $\hat{\overleftarrow{P}}$  por meio da definição do produto estrela:

$$\hat{\overleftarrow{Q}} := \star q = q\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{\overleftarrow{P}} := \star p = p\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}. \quad (6.5)$$

Tomando o complexo conjugado nos operadores (3.7) e usando a definição acima, encontramos

$$\begin{aligned} (\hat{Q})^* &= \left( q\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^* = \left( q\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) = \star q = \hat{\overleftarrow{Q}} \\ (\hat{P})^* &= \left( p\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^* = \left( p\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) = \star p = \hat{\overleftarrow{P}} \end{aligned} \quad (6.6)$$

Assim, para qualquer função de operadores  $\hat{O} = \hat{O}(\hat{Q}, \hat{P})$  atuando à direita de uma função  $\psi \in \mathcal{H}_\Gamma$ , temos

<sup>2</sup>Esta seta não significa vetor de operador, e sim o sentido de atuação do operador na função  $\psi$ .

$$\begin{aligned}
(\hat{O}\psi(q,p))^* &= \psi^*(q,p) \left( O(\hat{Q}, \hat{P}) \right)^* = \psi^*(q,p) \left[ O_1(\hat{Q}) + O_2(\hat{P}) \right]^* \\
&= \psi^*(q,p) \left[ \left( O_1 \left( q\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right)^* + \left( O_2 \left( p\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \right)^* \right] \\
&= \psi^*(q,p) \left[ O_1 \left( q\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \right) + O_2 \left( p\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} \right) \right] \\
&= \left[ O_1 \left( q\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p} \right) + O_2 \left( p\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q} \right) \right] \psi^*(q,p) \\
&= \psi^*(q,p) \hat{O}(\star q, \star p) = \psi^*(q,p) O(\overleftarrow{\hat{Q}}, \overleftarrow{\hat{P}}) = \psi^*(q,p) \overleftarrow{\hat{O}}.
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Substituindo a função (6.4) e usando a relação acima em (6.3), encontramos

$$f_n(q,p) = \frac{1}{(E_{n-1}^{(2)} - E_{n-1}^{(1)})} \hat{B}_{(1)}^+ \cdots \frac{1}{(E_0^{(n+1)} - E_0^{(n)})} \hat{B}_{(n)}^+ \left( f_0^{(n+1)}(q,p) \overleftarrow{\hat{B}}_{(n)}^- \cdots \overleftarrow{\hat{B}}_{(1)}^- \right), \tag{6.8}$$

onde usamos a condição dos operadores  $\hat{B}^\pm$  serem mutuamente adjuntos e definimos o operador bosônico atuando a direita:

$$\overleftarrow{\hat{B}}_{(n)}^- := \frac{i}{\sqrt{2M}} \left( p\hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} \right) + W_{(n)} \left( q\hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \right). \tag{6.9}$$

Em resumo, podemos dizer que a hierarquia de Hamiltonianos consiste em um segundo método de resolver a equação de Schödinger. Esse procedimento consiste em resolver as equações (5.46) e (5.50) de Ricatti. A solução da primeira equação de Ricatti nos dá o autovalor  $E_0^{(n)}$  e o superpotencial  $W_{(n)}$  em cada membro da hierarquia; com a determinação do superpotencial, a função de Wigner (6.4) do estado fundamental poderá ser encontrada através da relação (5.47) e o uso de (6.4). Estas soluções estão associados a solução do problema original, através da relação (6.8). Devemos notar que a construção completa da hierarquia só é possível se o operador Hamiltoniano (5.44) puder ser fatorado em termos de operadores (5.45). Nas seções seguintes aplicaremos esse método para diferentes problemas físicos

## 6.2 Oscilador Harmônico Simples

### 6.2.1 Introdução

O oscilador harmônico é um dos sistemas físicos mais importante que existe; isto porque uma gama de problemas físicos recai em soluções tipo oscilador; sua solução, usando o método de fatoração, foi desenvolvido por Dirac [14]; esse sistema também foi o protótipo de uma teoria quântica de campos [106] e muitas vezes ele tem sido utilizado para se introduzir a álgebra

da supersimetria na mecânica quântica [99]. O problema do oscilador harmônico, dentro da formulação Simplética da Mecânica Quântica, foi resolvido por Oliveira [49] por meio de duas abordagens: método de fatoração e equações diferenciais. Nesta tese, nós o usaremos como uma das formas para introduzir a superálgebra (veja seção 4.2.1) na Mecânica Quântica Simplética.

## 6.2.2 Resolução

O oscilador harmônico simples em termo da variável  $\eta$  (vide Apêndice C) é governado pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}_{(1)}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{M\omega^2}{2} \eta^2, \quad (6.10)$$

onde  $M$  é a massa e  $\omega$  a frequência do oscilador.

Comparando (6.10) com (5.19), obtemos

$$V_{(1)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2} \eta^2. \quad (6.11)$$

Substituindo o potencial acima na equação (5.20), temos a solução

$$W_{(1)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}} \omega \eta, \quad E_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.12)$$

A solução acima permitirá gerar um novo potencial, dado pela equação (5.24)

$$V_{(2)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2} \eta^2 + \hbar\omega, \quad (6.13)$$

que, substituindo na equação (5.28), nos dá uma nova solução

$$W_{(2)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}} \omega \eta, \quad E_0^{(2)} = 3 \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.14)$$

Novamente, a solução acima permitirá determinar um terceiro potencial, através da equação (5.33)

$$V_{(3)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2} \eta^2 + 2\hbar\omega, \quad (6.15)$$

De (6.15) em (5.37), temos a solução

$$W_{(3)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}} \omega \eta, \quad E_0^{(3)} = 5 \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.16)$$

Notamos que, se prosseguirmos dessa maneira, os autovalores de energia formam uma progressão aritmética, cujo termo geral é

$$E_0^{(n)} = E_0^{(1)} + (n-1)r, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.17)$$

com primeiro termo  $E_0^{(1)}$  e a razão  $r$  dados por

$$E_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad r = \hbar\omega. \quad (6.18)$$

Nesse caso, o termo geral fica

$$E_0^{(n)} = \frac{\hbar\omega}{2}(2n - 1) \quad (6.19)$$

que, comparando com a relação (6.1), resulta no espectro do operador (6.10)

$$E_n^{(1)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.20)$$

Das soluções (6.12), (6.14) e (6.16), notamos que o superpotencial mantém-se constante

$$W_{(n)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega\eta, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.21)$$

A substituição da variável  $\eta$  para o operador estrela  $q\star$  é feita, introduzindo (6.21) em (5.48)

$$W_{(n)}(q\star) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega q\star, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.22)$$

Usando (6.22) em (4.50) temos os operadores bosônicos para este sistema

$$\hat{B}_{(n)}^- = \sqrt{\frac{M\omega^2}{2}} \left[ q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{i}{M\omega} \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \right], \quad (6.23)$$

$$\hat{B}_{(n)}^+ = \sqrt{\frac{M\omega^2}{2}} \left[ q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{i}{M\omega} \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \right]. \quad (6.24)$$

O estado fundamental poderá ser encontrado, substituindo (6.22) na equação (5.47), o que nos dá:

$$\left[ \frac{\hbar}{2} \left( i \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{M\omega} \frac{\partial}{\partial q} \right) + \left( q + \frac{i}{M\omega} p \right) \right] \psi_0^{(n)}(q, p) = 0. \quad (6.25)$$

Introduzindo as variáveis

$$z \equiv q + \frac{i}{M\omega} p, \quad z^* = q - \frac{i}{M\omega} p,$$

temos que a equação (6.25) se transformará em uma equação de fácil resolução

$$\left( \frac{\hbar}{M\omega} \frac{d}{dz^*} + z \right) \psi_0^{(n)} = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_0^{(n)}(q, p) = C_0 e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}, \quad (6.26)$$

com

$$H(q, p) = \frac{1}{2M} p^2 + \frac{M\omega^2}{2} q^2.$$

Substituindo (6.26) em (6.4) e impondo a condição de normalização (3.6), encontramos o valor da constante  $C_0$

$$\int \psi_0^{(n)}(q, p) \star \psi_0^{(n)*}(q, p) dq dp = 1 \Rightarrow C_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}}.$$

Portanto, (6.26) fica

$$\psi_0^{(n)}(q, p) = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} e^{-\frac{2}{\hbar \omega} H(q, p)}. \quad (6.27)$$

A função acima irá servir de base para calcular todas as funções de Wigner no estado fundamental de qualquer membro da hierarquia. Substituindo (6.27) em (6.4) e usando a identidade [107] para  $a = b = 1$

$$e^{-\frac{a}{\hbar}(x^2+y^2)} \star e^{-\frac{b}{\hbar}(x^2+y^2)} = \frac{1}{1+ab} e^{-\frac{a+b}{\hbar(1+ab)}(x^2+y^2)}, \quad (6.28)$$

temos

$$0! f_0^{(n)}(q, p) = \frac{1}{\pi \hbar} (-1)^0 e^{-\frac{2}{\hbar \omega} H(q, p)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.29)$$

que corresponde à função de Wigner no estado fundamental, em cada membro da hierarquia.

Nota-se que para o estado fundamental a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula, sujeita ao potencial do oscilador harmônico na posição  $q$  é

$$P_0(q) = \int f_0(q, p) dp = \sqrt{\frac{M\omega}{\pi \hbar}} e^{-\frac{M\omega}{\hbar} q^2}.$$

Este resultado coincide, como podemos notar na figura 6.1, com o encontrado por Cohen-Tannoudi [74].

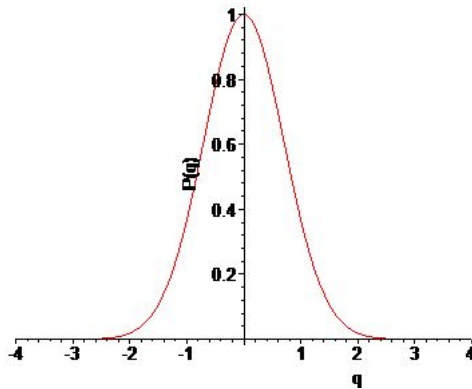


Figura 6.1: Densidade de probabilidade de encontrar a partícula no estado fundamental com coordenada  $q$ .

Objetiva-se com este estudo encontrar a função de Wigner (6.8) do problema em questão. Para fazer isso notamos que a função de Wigner, correspondendo ao primeiro estado excitado, é obtida fazendo  $n = 1$  na relação (6.8)

$$f_1(q, p) = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{B}_{(1)}^+ f_0^{(2)}(q, p) \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.30)$$

Tomando  $n = 2$  em (6.29) e substituindo na função acima, encontramos

$$1! f_1(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^1 \left[ 1! - \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.31)$$

O segundo estado excitado do problema original é obtido, fazendo  $n = 2$  na relação (6.8)

$$f_2(q, p) = \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(2)}^+ f_0^{(3)}(q, p) \hat{B}_{(2)}^- \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.32)$$

Simplificando a função acima, e usando (6.29) com  $n = 3$ , temos

$$2! f_2(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^2 \left[ 2! - 4 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 + \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.33)$$

O terceiro estado excitado é encontrado fazendo  $n = 3$  na relação (6.8)

$$f_3(q, p) = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(2)}^+ \hat{B}_{(3)}^+ f_0^{(4)}(q, p) \hat{B}_{(3)}^- \hat{B}_{(2)}^- \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.34)$$

Um cálculo, não trivial, com à ajuda da função (6.29) para  $n = 4$ , levará à expressão da função acima

$$3! f_3(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^3 \left[ 3! - 18 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 + 9 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 - \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^3 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.35)$$

De uma maneira análoga temos que a função de Wigner, para o quarto estado excitado do oscilador, fica

$$4! f_4(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^4 \left[ 4! - 96 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 + 72 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 - 16 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^3 + \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^4 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.36)$$

Se procedermos desta forma, iremos notar que o termo geral da série de funções será

$$n! f_n = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^n \left\{ (-1)^n \left[ \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^n - \frac{n^2}{1!} \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^{(n-1)} + \frac{n^2(n-1)^2}{2!} \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^{(n-2)} + \dots \right] \right\} e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H},$$

que podemos escrever, de uma maneira compacta, da seguinte forma

$$f_n(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^n \mathbb{L}_n \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right) e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.37)$$

onde  $\mathbb{L}_n \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)$  são Polinômios de Laguerre [108]. Este resultado está de acordo com aquele que encontramos (2.46) no Capítulo 2 usando o formalismo de Wigner.

## 6.3 Partícula Carregada em um Campo Magnético Constante

### 6.3.1 Introdução

Este sistema físico está relacionado com a geometria Não-Comutativa, que foi proposta pela primeira vez por Heisenberg [109], numa carta endereçada a Peierls, com o intuito de resolver o problema das integrais divergentes em Teoria Quântica de Campos. Posteriormente, essa noção foi repassada por Pauli a Oppenheimer que orientava Snyder, o qual publicou [110], em 1947, a primeira proposta de Teoria de Campos em espaços Não-Comutativos [111]. Devido ao processo de Renormalização a idéia de geometria Não-Comutativa foi esquecida durante certo tempo e somente com os trabalhos do físico francês Alain Connes [112] e colaboradores é que a proposta foi retomada. Com relação ao sistema apresentado nesta seção, o mesmo foi estudado por Dulat, Li, Wang [113], e Dayi, Kelleyane [114] sob o ponto de vista de duas abordagens diferentes: uma usando o espaço-tempo Não-Comutativo e outra com espaço de fase Não-Comutativo; na formulação Simplética da Mecânica Quântica, esse sistema foi estudado por Amorim *et al.* [109] e Amorim [115].

### 6.3.2 Resolução

O presente sistema é conhecido na literatura como o problema de Landau [116] e consiste em um elétron de carga  $e$  e massa  $M$  movendo-se no plano  $q = (q_1, q_2)$ , onde atua um campo magnético, homogêneo e perpendicular.

Nesse caso, o operador Hamiltoniano<sup>3</sup> é dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left( \hat{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{Q}) \right) \cdot \left( \hat{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{Q}) \right). \quad (6.38)$$

Aqui,  $c$  é a velocidade da luz, e os operadores  $\hat{P}$ ,  $\hat{Q}$  e  $\vec{A}$  representam o momentum, a posição e o potencial vetor, respectivamente

$$\hat{P} = (\hat{P}_1, \hat{P}_2), \quad \hat{Q} = (\hat{Q}_1, \hat{Q}_2), \quad \vec{A}(\hat{Q}) = (A_1(\hat{Q}), A_2(\hat{Q})). \quad (6.39)$$

---

<sup>3</sup>O ponto  $(\cdot)$  entre os operadores de “vetores” representa o produto escalar usual entre vetores.

As relações (3.11) nos mostram que o operador  $\hat{P}$  nem sempre comuta com o operador vetorial  $\vec{A}$ , pois esse é função do operador posição  $\hat{Q}$ . Escolhendo os operadores  $A_1$  e  $A_2$  em (6.39) na forma

$$A_1 = -\frac{\mathcal{B}}{2}\hat{Q}_2, \quad A_2 = \frac{\mathcal{B}}{2}\hat{Q}_1, \quad (6.40)$$

onde  $\mathcal{B}$  é a magnitude do campo magnético, e substituindo em (6.38) encontramos

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + \omega\epsilon^{jk}\hat{Q}_j\hat{P}_k + \frac{M}{2}\omega^2\hat{Q}^2, \quad j, k = 1, 2, \quad (6.41)$$

onde usamos as relações fundamentais (3.11).

Na relação acima,  $\epsilon^{jk}$  é a métrica antisimétrica induzida no espaço bidimensional, ou seja

$$\epsilon_{jk} := \begin{cases} 1, & \text{se } j \neq k, \\ 0, & \text{se } j = k, \end{cases} \quad (6.42)$$

onde identificamos:

$$\omega \equiv \frac{e\mathcal{B}}{2Mc}, \quad (6.43)$$

como uma frequência do tipo ciclotron.

Assumindo  $\hat{P}_k = M\dot{\hat{Q}}_k$ , onde o ponto em  $\hat{Q}$  significa a derivada desse operador com relação ao tempo, podemos obter o Lagrangiano para o problema de Landau através da substituição de (6.38) na relação [6]

$$L(\hat{Q}, \dot{\hat{Q}}) = \hat{P} \cdot \dot{\hat{Q}} - \hat{H},$$

ou seja

$$L(\hat{Q}, \dot{\hat{Q}}) = \frac{M}{2}\dot{\hat{Q}}^2 - \omega\epsilon^{jk}\hat{Q}_j\dot{\hat{Q}}_k - \frac{M}{2}\omega^2\hat{Q}^2. \quad (6.44)$$

Na condição em que  $\omega \gg 1$ , isto é

$$\frac{M}{\mathcal{B}} \ll 1, \quad (6.45)$$

que corresponde ao regime de campo magnético extremamente forte ou partícula de pequena massa, podemos desprezar o primeiro e o último termos na relação (6.44) e obter

$$L(\hat{Q}, \dot{\hat{Q}}) = -\omega\epsilon^{jk}\hat{Q}_j\dot{\hat{Q}}_k. \quad (6.46)$$

Na condição (6.45), o operador momentum  $\hat{P}$  será dado por

$$\hat{P}^k = \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{\hat{Q}}_k} \Rightarrow \hat{P}^k = \omega\hat{Q}^k. \quad (6.47)$$



onde foi usada a relação  $\hat{Q}^k = \epsilon^{kj} \hat{Q}_j$  com  $\epsilon^{jk} = -\epsilon^{kj}$ .

Assim, usando (6.47) em (3.11), teremos

$$[\hat{Q}_j, \hat{Q}^k] = \frac{i\hbar}{\omega} \delta_j^k. \quad (6.48)$$

Esta relação evidencia o fato de que no regime do campo magnético extremamente forte ou pequena massa, (6.45), as coordenadas da partícula passam a ser não-comutativas.

Nosso objetivo será resolver o problema de Landau via hierarquia de Hamiltonianos, e obter o espectro de energia e a função de Wigner. Desenvolvendo explicitamente a expressão (6.41), ficamos com

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left( \hat{P}_1 - \frac{M\omega}{2} \hat{Q}_2 \right)^2 + \frac{M\omega^2}{2} \left( \frac{\hat{P}_2}{M\omega} + \frac{\hat{Q}_1}{2} \right)^2. \quad (6.49)$$

Definindo “novos” operadores

$$\hat{p} := \hat{P}_1 - \frac{M\omega}{2} \hat{Q}_2, \quad \hat{q} := \frac{1}{M\omega} \hat{P}_2 + \frac{1}{2} \hat{Q}_1, \quad (6.50)$$

temos

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (6.51)$$

onde foram usadas, novamente as relações (3.11). Portanto temos que (6.49) fica

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{M\omega^2}{2} \hat{q}^2, \quad (6.52)$$

o que, na Mecânica Quântica Simplética, definido em termos da coordenada  $\eta$  nos dá

$$\hat{H}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{M\omega^2}{2} \eta^2, \quad (6.53)$$

e resulta no operador do oscilador harmônico simples.

Comparando (6.53) com (5.19), obtemos

$$V_{(1)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2} \eta^2, \quad (6.54)$$

que substituindo na equação (5.20), temos a solução

$$W_{(1)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}} \omega \eta, \quad e_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.55)$$

Esta solução permite gerar um novo potencial, dado pela equação (5.24)

$$V_{(2)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2} \eta^2 + \hbar\omega, \quad (6.56)$$

que, substituindo na equação (5.28), nos dá uma nova solução

$$W_{(2)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega\eta, \quad e_0^{(2)} = 3\frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.57)$$

Novamente, a solução acima permitirá determinar um terceiro potencial, através da equação (5.33)

$$V_{(3)}(\eta) = \frac{M\omega^2}{2}\eta^2 + 2\hbar\omega, \quad (6.58)$$

Substituindo (6.58) em (5.37), temos a solução

$$W_{(3)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega\eta, \quad E_0^{(3)} = 5\frac{\hbar\omega}{2}. \quad (6.59)$$

Notamos que, se prosseguirmos dessa maneira, os autovalores de energia formam uma progressão aritmética, cujo termo geral é

$$e_0^{(n)} = \frac{\hbar\omega}{2}(2n - 1) \quad (6.60)$$

que, comparando com a relação (6.1) resulta no espectro do operador (6.38)

$$e_n^{(1)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.61)$$

Das soluções (6.55), (6.57) e (6.59), notamos que o superpotencial mantém-se constante

$$W_{(n)}(\eta) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega\eta, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.62)$$

A substituição da variável  $\eta$  para o operador estrela  $q\star$  é feita, introduzindo (6.62) em (5.48)

$$W_{(n)}(q\star) = \sqrt{\frac{M}{2}}\omega q\star, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.63)$$

O estado fundamental poderá ser encontrado, substituindo (6.63) na equação (5.47), o que nos dá:

$$\psi_0^{(n)}(q, p) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}e^{-\frac{2}{\hbar\omega}H(q, p)}, \quad (6.64)$$

onde fizemos uma mudança de variável e aplicamos a condição de normalização (3.6), onde

$$H(q, p) = \frac{1}{2M}p^2 + \frac{M\omega^2}{2}q^2, \quad \text{com, } p := p_1 - \frac{M\omega}{2}q_2, \quad q := \frac{1}{M\omega}p_2 + \frac{1}{2}q_1. \quad (6.65)$$

A função (6.64) irá servir de base para calcular todas as funções de Wigner no estado fundamental de qualquer membro da hierarquia. Substituindo (6.64) em (6.4) e usando a identidade (6.28), temos:

$$0!f_0^{(n)}(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar}(-1)^0e^{-\frac{2}{\hbar\omega}H(q, p)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.66)$$

que corresponde à função de Wigner no estado fundamental em cada membro da hierarquia; em particular a função de Wigner, correspondendo ao primeiro estado excitado, é obtida fazendo  $n = 1$  na relação (6.8), isto é

$$f_1(q, p) = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{B}_{(1)}^+ f_0^{(2)}(q, p) \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.67)$$

Tomando  $n = 2$  em (6.66) e substituindo na função acima, encontramos

$$1! f_1(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^1 \left[ 1! - \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.68)$$

Fazendo  $n = 2$  na relação (6.8) obtemos o segundo estado excitado do operador (6.38)

$$f_2(q, p) = \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(2)}^+ f_0^{(3)}(q, p) \hat{B}_{(2)}^- \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.69)$$

Simplificando a função acima, e usando (6.66) com  $n = 3$ , temos

$$2! f_2(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^2 \left[ 2! - 4 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 + \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.70)$$

O terceiro estado excitado é encontrado fazendo  $n = 3$  na relação (6.8)

$$f_3(q, p) = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \hat{B}_{(1)}^+ \hat{B}_{(2)}^+ \hat{B}_{(3)}^+ f_0^{(4)}(q, p) \hat{B}_{(3)}^- \hat{B}_{(2)}^- \hat{B}_{(1)}^- \quad (6.71)$$

Um cálculo longo e cansativo com à ajuda da função (6.66) para  $n = 4$ , levará a relação (6.71) na expressão

$$3! f_3(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^3 \left[ 3! - 18 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^1 + 9 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 - \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^3 \right] e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}. \quad (6.72)$$

Notamos que se prosseguirmos nos cálculos das próximas funções de Wigner notamos, conforme vimos na subseção 6.2, que as expressões que irão surgir entre os colchetes formarão os polinômios  $\mathbb{L}_n$  de Laguerre [108]. Assim, o termo geral da função de Wigner fica

$$f_n(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^n \mathbb{L}_n \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right) e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(q, p)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.73)$$

com  $\omega$  e  $H(q, p)$  dadas respectivamente pelas relações (6.43) e (6.65).

Notamos que a função de Wigner acima, bem como o espectro de energia (6.61), estão de acordo com os encontrados por Dulat, Li, Wang [113] e Dayi, Kelleyane [114]; isto evidência a consistência da hierarquia de Hamiltonianos na solução de problemas físicos.

## 6.4 Átomo de Hidrogênio Unidimensional

### 6.4.1 Introdução

O átomo de Hidrogênio é o sistema atômico mais simples, porém realístico que ocorre na natureza. Esse sistema é de grande importância histórica pois foi o primeiro sistema que Schrödinger tratou com a mecânica quântica. Sua solução com a mecânica quântica usual, empregando o método de fatoração, foi tratada por Rosas-Ortiz [117]; e no contexto do espaço de fase seu estudo foi realizado por Li e Lu [118]. Nesta seção, usaremos nosso desenvolvimento da hierarquia de Hamiltonianos para tratar esse sistema; o caráter tridimensional apresenta certa dificuldade no tratamento matemático. Em função disso, estudaremos o sistema do ponto de vista unidimensional. Veremos que os autovalores e autofunções, usando o método da hierarquia de Hamiltonianos, estarão de acordo com os obtidos pelas teorias de Schrödinger, Bohr e por Li e Lu [118].

### 6.4.2 Resolução

Sendo esse um sistema de duas partículas de massas  $M_1$  e  $M_2$  é bem conhecido da teoria clássica que é possível, usando coordenadas de centro de massa

$$\vec{R} = \frac{M_1\vec{r}_1 + M_2\vec{r}_2}{M_1 + M_2}, \quad (6.74)$$

e coordenadas relativas

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (6.75)$$

onde  $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$  e  $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$  são os vetores-posição das partículas 1 e 2, respectivamente, escrever o Hamiltoniano  $H$  do sistema como

$$H = H_{CM} + H_{rel}, \quad (6.76)$$

em que

$$H_{CM} = \frac{\vec{P}^2}{2M}, \quad \vec{P} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2, \quad M = M_1 + M_2, \quad (6.77)$$

e

$$H_{rel} = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r), \quad \text{com } \vec{p} = \mu\dot{\vec{r}}, \quad r = |\vec{r}|, \quad \mu = \frac{M_1M_2}{M_1 + M_2}. \quad (6.78)$$

Levando esse resultado para a Teoria Quântica, mostra-se que da equação de Schrödinger

$$\hat{H}\psi(x_1, y_2, z_1, x_2, y_2, z_2) = E\psi(x_1, y_2, z_1, x_2, y_2, z_2) \quad (6.79)$$

fica

$$\left(\hat{H}_{CM} + \hat{H}_{rel}\right)\psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\psi(\vec{r}, \vec{R}), \quad (6.80)$$

o que possibilita usar o método de separação de variáveis, escrevendo-se

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\psi_1(\vec{r})\psi_2(\vec{R}), \quad (6.81)$$

e obtendo-se duas equações:

$$\hat{H}_{rel}\psi_1(\vec{r}) = E_1\psi_1(\vec{r}), \quad (6.82)$$

$$\hat{H}_{CM}\psi_2(\vec{R}) = E_2\psi_2(\vec{R}), \quad (6.83)$$

com  $E = E_1 + E_2$ , onde  $E_1$  corresponde à energia referente ao movimento relativo das partículas e  $E_2$  à energia do movimento de centro de massa. Desta forma a equação importante é a equação (6.82) que contém a interação entre as partículas e corresponde a uma partícula de massa reduzida

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}, \quad (6.84)$$

movendo-se sob a ação de potencial  $V(\vec{r})$ .

Seja então uma partícula de massa reduzida  $\mu$  e carga  $(-e)$  que se move sob a ação do potencial coulombiano criado pelo núcleo de carga  $(+e)$ , que consideramos fixo na origem do sistema de coordenadas, com  $q$  sendo a posição e  $p$  o momento da partícula.

Tratando o caso unidimensional, devemos considerar o problema em dois casos:  $q > 0$  e  $q < 0$ , uma vez que a equação original é

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(+e)(-e)}{|q|}\right)\psi_1(\vec{q}) = E\psi_1(\vec{q}), \quad (6.85)$$

onde  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do vácuo. Trataremos do caso em que  $q > 0$ . O caso para  $q < 0$  será resolvido em seguida.

No caso em questão, o problema será simplificado se tratarmos na representação da variável  $\eta$  (veja Apêndice C). Usando no potencial (C.10) os seguintes valores para as constantes:

$$V_n^{(+)} = V_{m+1}^{(-)} = 0, \quad V_1^{(-)} = \frac{(+e)(-e)}{4\pi\epsilon_0},$$

podemos escrever a equação de Schrödinger (6.86) (veja C.4) na seguinte forma

$$\hat{H}(\eta)\phi(\eta, p) = E\phi(\eta, p), \quad \text{com} \quad \eta = 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, \quad (6.86)$$

onde o operador Hamiltoniano é dado por

$$\hat{H}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\eta}. \quad (6.87)$$

Comparando a equação acima com (5.44) podemos identificar:

$$V_{(n)}(\eta) \equiv -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\eta},$$

que substituindo na equação (5.46) nos dá

$$-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\eta} = W_{(n)}^2(\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(n)}(\eta) + E_0^{(n)}. \quad (6.88)$$

Inspecionando a equação acima, notamos que sua solução geral possui a seguinte forma:

$$W_{(n)}(\eta) = -\frac{\alpha_{(n)}}{\eta} + \beta_{(n)}, \quad \text{com} \quad \alpha_{(n)} > 0, \quad (6.89)$$

onde  $\alpha_{(n)}$  e  $\beta_{(n)}$  são constantes.

O problema de encontrar os autovalores da energia e os superpotenciais no átomo de Hidrogênio consiste em achar os valores das constantes  $\alpha$  e  $\beta$  nas equações de Ricatti (5.46) e (5.50). Substituindo (6.89) em (6.88) para  $n = 1$ , podemos identificar:

$$\begin{cases} \alpha_{(1)} & \equiv & \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \\ \beta_{(1)} & \equiv & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\alpha_{(1)}} \\ E_0^{(1)} & \equiv & -\beta_{(1)}^2. \end{cases}$$

Os valores das constantes acima, nos dão as seguintes soluções:

$$W_{(1)}(\eta) = -\frac{(1)\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{1}{\eta} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sqrt{2\mu}}{2\hbar} \frac{1}{(1)}, \quad E_0^{(1)} = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{(1)^2}. \quad (6.90)$$

Substituindo (6.90) em (5.50) obtemos um novo potencial

$$V_{(2)}(\eta) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\eta} + \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{1}{\eta^2}.$$

Substituindo (6.89) em (5.46) para  $n = 2$  com o potencial acima, podemos identificar novas constantes:

$$\begin{cases} \alpha_{(2)} & \equiv & \frac{2\hbar}{\sqrt{2\mu}} \\ \beta_{(2)} & \equiv & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\alpha_{(2)}} \\ E_0^{(2)} & \equiv & -\beta_{(2)}^2. \end{cases}$$

Assim, o segundo nível de solução na equação de Ricatti é

$$W_{(2)}(\eta) = -\frac{(2)\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{1}{\eta} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sqrt{2\mu}}{2\hbar} \frac{1}{(2)}, \quad E_0^{(2)} = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{(2)^2}. \quad (6.91)$$

Novamente, através das soluções acima, podemos construir um novo potencial por meio da equação (5.50)

$$V_{(3)}(\eta) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\eta} + \frac{3\hbar^2}{\mu} \frac{1}{\eta^2}.$$

O terceiro nível da hierarquia pode ser construído por meio do potencial acima. Substituindo (6.89) em (5.46) para  $n = 3$  com o potencial acima, podemos identificar as constantes:

$$\begin{cases} \alpha_{(3)} & \equiv & \frac{3\hbar}{\sqrt{2\mu}} \\ \beta_{(3)} & \equiv & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\alpha_{(3)}} \\ E_0^{(3)} & \equiv & -\beta_{(3)}^2. \end{cases}$$

Portanto para  $n = 3$  na hierarquia, temos as soluções da equação de Ricatti (5.46)

$$W_{(3)}(\eta) = -\frac{(3)\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{1}{\eta} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sqrt{2\mu}}{2\hbar} \frac{1}{(3)}, \quad E_0^{(3)} = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{(3)^2}. \quad (6.92)$$

Notamos que se prosseguirmos dessa maneira, poderemos mostrar que para  $n$  etapas temos as soluções da equação de Ricatti:

$$W_{(n)}(\eta) = -\frac{(n)\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{1}{\eta} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sqrt{2\mu}}{2\hbar} \frac{1}{(n)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.93)$$

$$E_0^{(n)} = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{(n)^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Substituindo a relação acima em (6.1) temos o espectro de energia do átomo de Hidrogênio

$$E_{n-1} = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.94)$$

Este resultado está de acordo com os obtidos por Bohr [66], Schrödinger [69] e encontrados em diversos livros textos de Mecânica Quântica [65, 72–76, 116, 120]. A igualdade do espectro de energia do átomo de Hidrogênio em vários formalismos é uma indicação óbvia que tal espectro, como se deve esperar, não depende das coordenadas utilizadas para descrever tal sistema.

As autofunções do sistema em questão poderão ser encontradas escrevendo a relação (5.58) na forma

$$\psi_n^+(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ \hat{B}_{(1)}^+(\eta) \dots \hat{B}_{(n)}^+(\eta) e^{-\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int W_{(n+1)}(\eta) d\eta} \right] C(p), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6.95)$$

onde<sup>4</sup> os estados fundamentais  $\phi_0^{(n)+}$  em cada membro da hierarquia poderão ser obtidas, substituindo o superpotencial (6.93) em (5.55), ou seja

$$\phi_0^{(n)+}(\eta, p) = K \left[ \eta^{(n)} e^{-\frac{1}{(n)} \frac{\eta}{a_0}} \right] C(p), \quad a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}, \quad (6.96)$$

com  $a_0$  um parâmetro com dimensão de comprimento que introduzimos para tornar a exponencial adimensional.

Aqui, com o objetivo de prosseguir os cálculos, devemos especificar uma forma particular da função  $C(p)$ . Para tanto, assumimos que  $C(p)$  seja uma função da forma

$$C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.97)$$

satisfazendo a identidade:

$$\eta^n C(p) = 2^n (q - a_0)^n C(p). \quad (6.98)$$

Observe que esta função não satisfaz a condição (5.56), mas sempre é possível encontrar uma região do espaço em que a integral (5.56) converge sob o limite finito desta região [118].

Substituindo (6.97) e (6.98) em (6.96) encontramos

$$\phi_0^{(n)+}(\eta, p) = K (q - a_0)^{(n)} e^{-\frac{2}{(n)} \frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.99)$$

que substituindo em (5.57) nos dá os estados fundamentais para cada membro da hierarquia

$$\psi_0^{(n)+}(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} (q - a_0)^{(n)} e^{-\frac{2}{(n)} \frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.100)$$

em particular, tomando  $n = 1$  na função acima temos a autofunção do estado fundamental do sistema em questão

$$\psi_0^+(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} (q - a_0) e^{-2 \frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}. \quad (6.101)$$

As demais autofunções do átomo de Hidrogênio poderão ser calculadas por meio da relação (6.97) com ajuda da identidade (6.98) em (6.95); assim a autofunção do primeiro estado excitado poderá ser encontrada, usando  $n = 2$  em (6.93) e substituindo em (6.95) com  $n = 1$ , ou seja,

$$\psi_1^+(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - \left( \frac{2(q - a_0)}{2a_0} \right) \right] (q - a_0) e^{-\frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}. \quad (6.102)$$

---

<sup>4</sup>O símbolo + especifica que as funções são definidas na região  $q > 0$ .



Fazendo  $n = 2$  em (6.95) com a ajuda de (6.93) para  $n = 3$ , encontramos a autofunção do segundo estado excitado do problema

$$\psi_2^+(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - 2 \left( \frac{2(q-a_0)}{3a_0} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{2(q-a_0)}{3a_0} \right)^2 \right] (q-a_0) e^{-\frac{2(q-a_0)}{3a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.103)$$

onde, novamente, usamos as relações (6.97) e (6.98).

Observando as séries de funções (6.101), (6.102) e (6.103), notamos que poderemos reescrever o termo geral desta série como:

$$\begin{cases} \psi_{1-1}^+(q, p) &= K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} (q-a_0) e^{-2\frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}; \\ \psi_{2-1}^+(q, p) &= K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - \left( \frac{2(q-a_0)}{2a_0} \right) \right] (q-a_0) e^{-\frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}; \\ \psi_{3-2}^+(q, p) &= K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - 2 \left( \frac{2(q-a_0)}{3a_0} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{2(q-a_0)}{3a_0} \right)^2 \right] (q-a_0) e^{-\frac{2(q-a_0)}{3a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}; \\ &\vdots \\ \psi_{n-1}^+(q, p) &= K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \mathbb{L}_{n-1}^1 \left( \frac{2(q-a_0)}{na_0} \right) (q-a_0) e^{-\frac{2(q-a_0)}{na_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}. \end{cases}$$

onde  $\mathbb{L}_n^1$  são conhecidos como Polinômios Associados de Laguerre [108].

Também podemos reescrever a solução final acima, em termos da série hipergeométrica  $\mathbb{F}$  [116], através da relação:

$$\mathbb{L}_n^1 \left( \frac{2(q-a_0)}{na_0} \right) = -\frac{(n!)^2}{(n-1)!} \mathbb{F} \left[ 1-n, 2, \left( \frac{2(q-a_0)}{na_0} \right) \right]. \quad (6.104)$$

Portanto<sup>5</sup>,

$$\psi_{n-1}^+(q, p) = K e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \mathbb{F} \left[ 1-n, 2, \left( \frac{2(q-a_0)}{na_0} \right) \right] (q-a_0) e^{-\frac{2(q-a_0)}{na_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.105)$$

Para o 2º caso, isto é,  $q < 0$  devemos levar em consideração a transformação do operador diferencial

$$\frac{\partial}{\partial \eta} = -\frac{\partial}{\partial \eta},$$

e reescrever as equações de Ricatti na forma

$$\begin{aligned} V_{(n)}(-\eta) &= W_{(n)}^2(-\eta) + \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(n)}(-\eta) + E_0^{(n)}; \\ V_{(n+1)}(-\eta) &= W_{(n)}^2(-\eta) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{\partial}{\partial \eta} W_{(n)}(-\eta) + E_0^{(n)}, \end{aligned} \quad (6.106)$$

com o potencial dado por

$$V_{(n)}(-\eta) = \frac{\hbar^2}{a_0 \mu \eta}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.107)$$

<sup>5</sup>Durante esses cálculos, algumas constantes foram absorvidas na constante de normalização  $K$ .

As soluções das equações de Ricatti são

$$W_{(n)}(-\eta) = \frac{\alpha_{(n)}}{\eta} + \beta_{(n)}, \quad \alpha_{(n)} > 0, \quad (6.108)$$

onde  $\alpha_{(n)}$  e  $\beta_{(n)}$  são constantes.

Substituindo esta solução na primeira equação de Ricatti (6.106) e levando em consideração o potencial (6.107) encontramos os valores das constantes para  $n = 1$ :

$$\begin{cases} \alpha_{(1)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}; \\ \beta_{(1)} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{1}{a_0}; \\ E_0^{(1)} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{a_0^2}. \end{cases}$$

Substituindo estas constantes em (6.108), encontramos

$$W_{(1)}(-\eta) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left( \frac{1}{\eta} + \frac{1}{a_0} \right). \quad (6.109)$$

Este superpotencial, em conjunto com o espectro de energia  $E_0^{(1)}$ , permite construir outro potencial através da segunda equação de Ricatti

$$V_{(2)}(-\eta) = \frac{\hbar^2}{\mu} \left( \frac{1}{a_0\eta} + \frac{1}{\eta^2} \right),$$

onde  $V_{(1)}(-\eta) \neq V_{(2)}(-\eta)$ .

Procedendo dessa maneira, temos que a solução geral será da forma:

$$W_{(n)}(-\eta) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left[ \frac{(n)}{\eta} + \frac{1}{a_0} \frac{1}{(n)} \right], \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.110)$$

$$E_0^{(n)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \frac{1}{(n)^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Note que os espectros da energia são os mesmos.

As autofunções<sup>6</sup> dos estados fundamentais em cada etapa da hierarquia, poderão ser encontradas por meio da condição:  $\hat{B}_{(n)}(-\eta)\phi_0^{(n)-}(-\eta, p) = 0$ , isto é

$$\phi_0^{(n)-}(-\eta, p) = K \left[ \eta^{(n)} e^{\frac{\eta}{a_0} \frac{1}{(n)}} \right] C(p), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.111)$$

Em particular, usando  $n = 1$  em (6.111) e em seguida substituindo em (5.57) e, levando em consideração que  $q < 0$ , encontramos a autofunção do estado fundamental do problema

$$\psi_0^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} (q - a_0) e^{2\frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.112)$$

---

<sup>6</sup>O símbolo  $-$  nas autofunções significa que estas funções são válidas no caso  $q < 0$ .

onde usamos as relações (6.97) e (6.98).

As demais autofunções poderão ser encontradas considerando  $q < 0$  em (5.58), ou seja:

$$\psi_n^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ \hat{B}_{(1)}^+(-\eta) \dots \hat{B}_{(n)}^+(-\eta) e^{\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int W_{(n+1)}(-\eta) d\eta} \right] C(p), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.113)$$

O primeiro estado excitado poderá ser encontrada tomando  $n = 1$  na relação acima, com  $n = 2$  em (6.110) e usando as relações (6.97), (6.98)

$$\psi_1^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - \left( \frac{-2(q - a_0)}{2a_0} \right) \right] (q - a_0) e^{\frac{(q-a_0)}{a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.114)$$

De maneira análogo para  $n = 2$  em (6.113), com a ajuda de (6.110) para  $n = 3$ , encontramos o segundo estado excitado do problema

$$\psi_2^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ 1 - 2 \left( \frac{-2(q - a_0)}{3a_0} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{-2(q - a_0)}{3a_0} \right)^2 \right] (q - a_0) e^{\frac{2(q-a_0)}{3a_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.115)$$

onde, novamente, usamos as relações (6.97) e (6.98).

De uma maneira geral podemos escrever o termo geral da série de funções (6.112), (6.114) e (6.115) como

$$\psi_{n-1}^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \mathbb{L}_{n-1}^1 \left( -\frac{2(q - a_0)}{na_0} \right) (q - a_0) e^{\frac{2(q-a_0)}{na_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6.116)$$

onde novamente,  $\mathbb{L}_n^1$  são os Polinômios Associados de Laguerre. A solução final, também pode ser escrita em termo da série hipergeométrica

$$\psi_{n-1}^-(-q, p) = K e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \mathbb{F} \left( 1 - n, 2, -\frac{2(q - a_0)}{na_0} \right) (q - a_0) e^{\frac{2(q-a_0)}{na_0}} e^{\frac{4i}{\hbar} a_0 p}, \quad (6.117)$$

Os resultados (6.105) e (6.117) são consistentes com os encontrados por Li e Lu [118] e por Amorim *et al.* [119] usando outros procedimentos.

Para obter mais interpretações físicas do sistema como por exemplo o raio da primeira “órbita” do estado fundamental, podemos calcular a função de Wigner desse estado.

Substituindo (6.101) em (6.4) e levando em consideração a aproximação do produto estrela até a primeira ordem, temos a função de Wigner para esse estado

$$f_0^+(q, p) \approx K' (q - a_0)^2 e^{-4 \frac{(q-a_0)}{a_0}}. \quad (6.118)$$

onde  $K'$  é uma constante.

A densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental do átomo de Hidrogênio, na posição  $q$ , é então

$$P_0(q) = \int dp f_0^+(q, p).$$

Assim, escolhendo uma região finita no espaço dos momenta de tal maneira que a integral acima seja finita, encontramos

$$P_0(q) = \frac{8}{a_0} \left( \frac{q - a_0}{a_0} \right)^2 e^{-4 \frac{(q - a_0)}{a_0}}. \quad (6.119)$$

A densidade de probabilidade será máxima em

$$\frac{dP_0}{dq} = 0 \Rightarrow q = a_0, \quad (6.120)$$

onde reconhecemos  $a_0$  como sendo o raio de Bohr.

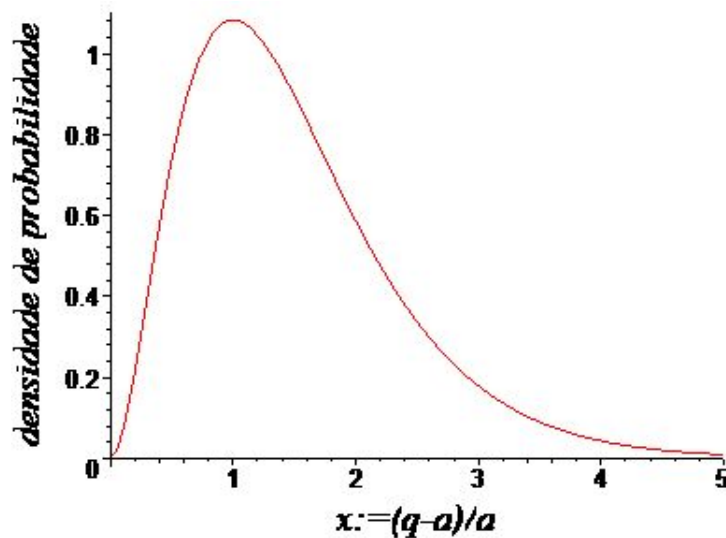


Figura 6.2: Densidade de probabilidade de encontrar o elétron no estado fundamental do átomo de Hidrogênio.

Na figura (6.2) temos o comportamento gráfico da densidade de probabilidade. Notamos que é máxima para uma distância do elétron ao núcleo igual ao raio de Bohr  $q = a_0$ , como esperado.

## 6.5 Átomo de Hélio

### 6.5.1 Introdução

Sabe-se que a equação de Schrödinger, para o caso de sistemas atômicos, admite solução exata somente no caso do átomo de um elétron, o átomo de Hidrogênio. Assim para estudar sistema atômico composto de dois ou mais elétrons deve-se recorrer a métodos aproximativos [120], dentre eles, destacando-se o Método WKB e o Método Variacional. O sistema mais simples e ainda assim realístico, composto por dois elétrons, é o átomo de Hélio. Analisando a semelhança entre a função de onda gaussiana de um oscilador harmônico esfericamente simétrico e o estado  $1s$  do átomo de Hidrogênio, alguns autores [121,122] estudaram a solução da equação de Schrödinger para o átomo de Hélio por meio de um artifício que consiste em trocar as interações coulombianas pelo potencial do oscilador harmônico; é o chamado átomo de Hélio de Hooke. Seguindo essa linha de pesquisas, Wulfman [123] substituiu todas as interações no átomo de Hélio por interações do tipo oscilador harmônico e aplicou o modelo na descrição de moléculas. Em nosso trabalho, também fazemos um estudo similar, do átomo de Hélio no contexto da Mecânica Quântica Simplética usando o método da hierarquia de Hamiltonianos.

### 6.5.2 Resolução

Nosso sistema é o átomo de Hélio unidimensional onde consideraremos todas as interações harmônicas; um sistema como esse, composto por três partículas puntiformes - 2 elétrons e um núcleo - terá ao todo 3 coordenadas cartesianas generalizadas. Como a massa do núcleo é 1832 vezes maior que a massa do elétron, assumiremos que o núcleo se encontra fixo na origem  $O$  do sistema de coordenadas e a massa reduzida do sistema elétron-núcleo será aproximadamente igual a  $\mu \approx m$ , onde  $m$  é a massa do elétron. Nesse caso, o sistema será descrito com as coordenadas  $q_1$  e  $q_2$  localizando os elétrons conforme mostramos na figura (6.3).

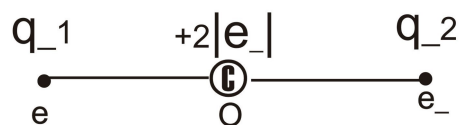


Figura 6.3: Representação esquemática do átomo de Hélio unidimensional.

De acordo com o modelo de Wulfman [123] a equação de Schrödinger no espaço de fase para esse sistema, pode ser escrita da seguinte forma

$$\hat{H}\psi_0(q_1, q_2, p_1, p_2) = E\psi_0(q_1, q_2, p_1, p_2), \quad (6.121)$$

onde o operador Hamiltoniano é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} + \frac{m\omega_a^2}{2} (\hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2) - \frac{m}{2} \frac{\omega_r^2}{2} (\hat{Q}_1 - \hat{Q}_2)^2. \quad (6.122)$$

Neste Hamiltoniano, temos:

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 = p_1 \star \quad \text{e} \quad \hat{P}_2 = p_2 \star \quad \text{os operadores estrela de momenta dos elétrons;} \\ \hat{Q}_1 = q_1 \star \quad \text{e} \quad \hat{Q}_2 = q_2 \star \quad \text{os operadores estrela de posições dos elétrons,} \end{aligned}$$

onde  $\omega_r$  e  $\omega_a$  são as frequências relativas às forças efetivas entre os sistema elétron-elétron e elétron-núcleo.

Com o intuito de simplificar os cálculos, faremos uma transformação de coordenadas de forma a identificar os operadores fundamentais da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_a = q_a \star &\equiv \frac{\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2}{\sqrt{2}} &\Rightarrow \quad \hat{Q}_a^2 + \hat{Q}_r^2 = \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2; \\ \hat{Q}_r = q_r \star &\equiv \frac{\hat{Q}_1 - \hat{Q}_2}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (6.123)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_a = p_a \star &\equiv \frac{\hat{P}_1 + \hat{P}_2}{\sqrt{2}} &\Rightarrow \quad \hat{P}_a^2 + \hat{P}_r^2 = \hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2. \\ \hat{P}_r = p_r \star &\equiv \frac{\hat{P}_1 - \hat{P}_2}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (6.124)$$

É possível mostrar, a partir das transformações (6.123) e (6.124), que o Hamiltoniano  $\hat{H}$  dado por (6.122) torna-se

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_r, \quad (6.125)$$

onde identificamos:

$$\hat{H}_a \equiv \frac{1}{2m} \hat{P}_a^2 + \frac{m\omega_a^2}{2} \hat{Q}_a^2, \quad \hat{H}_r \equiv \frac{1}{2m} \hat{P}_r^2 + \frac{m\omega_{ar}^2}{2} \hat{Q}_r^2, \quad \omega_{ar}^2 \equiv \omega_a^2 - \omega_r^2, \quad (6.126)$$

e

$$\hat{H}\psi_0(q_a, q_r, p_a, p_r) = E\psi_0(q_a, q_r, p_a, p_r). \quad (6.127)$$

Nota-se que temos um parâmetro de acoplamento  $\omega_{ar}$  como deveríamos esperar, uma vez que o sistema é composto por duas interações: elétron-núcleo e elétron-elétron. Numa configuração em que  $\omega_a^2 = \omega_r^2$  a interação elétron-elétron se cancela e o sistema como um todo se comporta

como um único oscilador com interação elétron-núcleo  $\omega_a$ , e energia cinética total dada por  $\hat{H}_c = (\hat{P}_a^2 + \hat{P}_r^2)/2m$ .

Com os Hamiltonianos  $\hat{H}_a$  e  $\hat{H}_r$  é possível resolver a equação (6.127) por meio do método de separação de variáveis, ou seja, podemos propor que:

$$\psi_0(q_a, q_r, p_a, p_r) = \varphi_0(q_a, p_a)\phi_0(q_r, p_r). \quad (6.128)$$

Nesse caso, podemos reescrever a equação (6.127) da seguinte maneira

$$\frac{1}{\varphi_0(q_a, p_a)} \left( \frac{1}{2m} \hat{P}_a^2 + \frac{m\omega_a^2}{2} \hat{Q}_a^2 \right) \varphi_0(q_a, p_a) = \frac{1}{\phi_0(q_r, p_r)} \left( E - \frac{1}{2m} \hat{P}_r^2 - \frac{m\omega_{ar}^2}{2} \hat{Q}_r^2 \right) \phi_0(q_r, p_r). \quad (6.129)$$

Como o membro esquerdo dessa equação não depende de  $q_r$  ou  $p_r$ , enquanto o membro direito não depende de  $q_a$  ou  $p_a$ , temos que o valor comum de ambos não pode depender de nenhuma dessas variáveis; o valor comum deverá portanto ser uma constante, que denotamos por  $\gamma_0$ . Obtemos assim um sistema de duas equações, escrevendo que cada um dos membros é igual a essa constante

$$\begin{cases} \left( \frac{1}{2m} \hat{P}_a^2 + \frac{m\omega_a^2}{2} \hat{Q}_a^2 \right) \varphi_0(q_a, p_a) = \gamma_0 \varphi_0(q_a, p_a); \\ \left( \frac{1}{2m} \hat{P}_r^2 + \frac{m\omega_{ar}^2}{2} \hat{Q}_r^2 \right) \phi_0(q_r, p_r) = (E_0 - \gamma_0) \phi_0(q_r, p_r). \end{cases} \quad (6.130)$$

Cada uma das equações do sistema acima corresponde a uma equação de Schrödinger para o oscilador harmônico unidimensional onde os operadores  $\hat{Q}_a, \hat{P}_a, \hat{Q}_r, \hat{P}_r$ , conforme vimos nas relações (6.123) e (6.124), são dados por:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_a &= q_a^\star = q_a \hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_a}, & \hat{P}_a &= p_a^\star = p_a \hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_a}; \\ \hat{Q}_r &= q_r^\star = q_r \hat{1} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_r}, & \hat{P}_r &= p_r^\star = p_r \hat{1} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_r}. \end{aligned} \quad (6.131)$$

As equações (6.130) podem ser resolvidas com o método da hierarquia de Hamiltonianos aqui desenvolvido. Com esse objetivo, consideremos as variáveis

$$\begin{aligned} \eta_a &= 2q_a + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_a}, & \hat{p}_a &:= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta_a}; \\ \eta_r &= 2q_r + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_r}, & \hat{p}_r &:= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta_r}, \end{aligned} \quad (6.132)$$

o que nos dá, correspondendo ao sistema de (6.130), as equações

$$\begin{cases} \hat{H}_{(a)}(\eta) \varphi_0(\eta_a, p_a) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta_a^2} + \frac{m\omega_a^2}{2} \eta_a^2 \right) \varphi_0(\eta_a, p_a) = \gamma_0 \varphi_0(\eta_a, p_a); \\ \hat{H}_{(r)}(\eta) \varphi_0(\eta_r, p_r) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta_r^2} + \frac{m\omega_{ar}^2}{2} \eta_r^2 \right) \varphi_0(\eta_r, p_r) = (E_0 - \gamma_0) \varphi_0(\eta_r, p_r). \end{cases} \quad (6.133)$$

Então, fatorando os Hamiltonianos (primeiro membro do sistema de equações acima) em termos dos operadores bosônicos (5.45) segue que

$$\begin{cases} \hat{H}_{(a_1)}(\eta) = \hat{B}_{(a_1)}^+(\eta)\hat{B}_{(a_1)}^-(\eta) + \gamma_0^{(1)}; \\ \hat{H}_{(r_1)}(\eta) = \hat{B}_{(r_1)}^+(\eta)\hat{B}_{(r_1)}(\eta) + E_0^{(1)} - \gamma_0^{(1)}. \end{cases} \quad (6.134)$$

Os potenciais destes Hamiltonianos são

$$V_{(a_1)}(\eta_a) = \frac{m\omega_a^2}{2}\eta_a^2, \quad V_{(r_1)}(\eta_r) = \frac{m\omega_{ar}^2}{2}\eta_r^2, \quad (6.135)$$

que substituindo na equação (5.46) para  $n = 1$ , obtemos as soluções:

$$W_{(a_1)}(\eta_a) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_a\eta_a, \quad \gamma_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega_a}{2}; \quad W_{(r_1)}(\eta_r) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_{ar}\eta_r, \quad E_0^{(1)} - \gamma_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega_{ar}}{2}. \quad (6.136)$$

O conjunto das soluções acima permite gerar dois novos potenciais através da equação (5.50), ou seja

$$V_{(a_2)}(\eta_a) = \frac{m\omega_a^2}{2}\eta_a^2 + \hbar\omega_a, \quad V_{(r_2)}(\eta_r) = \frac{m\omega_{ar}^2}{2}\eta_r^2 + \hbar\omega_{ar}, \quad (6.137)$$

que substituindo na equação (5.46) para  $n = 2$ , nos dá as soluções:

$$W_{(a_2)}(\eta_a) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_a\eta_a, \quad \gamma_0^{(2)} = 3\frac{\hbar\omega_a}{2}; \quad W_{(r_2)}(\eta_r) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_{ar}\eta_r, \quad E_0^{(2)} - \gamma_0^{(2)} = 3\frac{\hbar\omega_{ar}}{2}. \quad (6.138)$$

Novamente, substituindo as soluções acima na equação (5.50) temos dois novos potenciais

$$V_{(a_3)}(\eta_a) = \frac{m\omega_a^2}{2}\eta_a^2 + 2\hbar\omega_a, \quad V_{(r_3)}(\eta_r) = \frac{m\omega_{ar}^2}{2}\eta_r^2 + 2\hbar\omega_{ar}, \quad (6.139)$$

que substituindo na relação (5.46) para  $n = 3$ , encontramos as soluções:

$$W_{(a_3)}(\eta_a) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_a\eta_a, \quad \gamma_0^{(3)} = 5\frac{\hbar\omega_a}{2}; \quad W_{(r_3)}(\eta_r) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_{ar}\eta_r, \quad E_0^{(3)} - \gamma_0^{(3)} = 5\frac{\hbar\omega_{ar}}{2}. \quad (6.140)$$

Nota-se que se prosseguirmos dessa maneira, veremos que os superpotenciais se manterão constantes

$$W_{(a_n)}(\eta_a) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_a\eta_a, \quad W_{(r_n)}(\eta_r) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_{ar}\eta_r, \quad (6.141)$$

e os termos gerais dos espectros de energias dos operadores  $\hat{H}_a$  e  $\hat{H}_r$  serão

$$\gamma_0^{(n)} = \frac{\hbar\omega_a}{2}(2n - 1), \quad E_0^{(n)} - \gamma_0^{(n)} = \frac{\hbar\omega_{ar}}{2}(2n - 1). \quad (6.142)$$



Comparando (6.142) com (6.1), encontramos

$$\gamma_n = \hbar\omega_a \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad E_n - \gamma_n = \hbar\omega_{ar} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.143)$$

Substituindo a primeira relação na segunda relação da expressão acima, teremos o espectro de energia do sistema físico

$$E_n = (\hbar\omega_a + \hbar\omega_{ar}) \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.144)$$

Nota-se que a resolução de problemas pelo método da hierarquia de Hamiltonianos nos dará automaticamente os autovalores de todos os níveis de energias sem necessariamente calcular os autoestados desses níveis.

No entanto, interessa-nos o valor de energia do estado fundamental. Fazendo  $n = 0$  na relação (6.144), encontramos

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_a}{2} + \frac{\hbar}{2}\omega_a (1 - \lambda)^{\frac{1}{2}}, \quad (6.145)$$

onde  $\lambda = \omega_r^2/\omega_a^2$  é o parâmetro de acoplamento elétron-núcleo-elétron.

Assumindo  $\omega_r \ll \omega_a$  podemos fazer uma expansão, até a primeira ordem, em (6.145) e reescrevê-la da seguinte forma

$$E_0 \approx \hbar\omega_a \left( 1 - \frac{\lambda}{4} \right). \quad (6.146)$$

Esta relação está de acordo com a encontrada por [119] usando outro procedimento.

Objetiva-se determinar a função de Wigner do estado fundamental do problema em questão. Para fazer isto, devemos reescrever os superpotenciais, dados na variável  $\eta$  (6.141), em termos dos operadores estrela (6.131); isto é feito substituindo (6.141) em (5.48)

$$\begin{aligned} W_{(a_n)}(\hat{Q}_a) &= \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_a \hat{Q}_a, \\ W_{(r_n)}(\hat{Q}_a) &= \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_{ar} \hat{Q}_r. \end{aligned} \quad (6.147)$$

Substituindo as relações acima em (5.47) e depois de resolver as equações diferenciais, encontramos

$$\varphi_0(q_a, p_a) \propto e^{-\frac{2}{\hbar\omega_a}H(q_a, p_a)}, \quad \phi_0(q_r, p_r) \propto e^{-\frac{2}{\hbar\omega_{ar}}H(q_r, p_r)}, \quad (6.148)$$

onde fizemos as identificações:

$$H(q_a, p_a) \equiv \frac{1}{2m}p_a^2 + \frac{m\omega_a^2}{2}q_a^2, \quad H(q_r, p_r) \equiv \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{m\omega_{ar}^2}{2}q_r^2. \quad (6.149)$$

Substituindo (6.148) em (6.128)

$$\psi_0(q_a, q_r, p_a, p_r) = C e^{-\frac{1}{m\hbar\omega_a} p_a^2 - \frac{m\omega_a}{\hbar} q_a^2 - \frac{1}{m\hbar\omega_{ar}} p_r^2 - \frac{m\omega_{ar}}{\hbar} q_r^2}, \quad (6.150)$$

com  $C$  uma constante. Fazendo uma transformação de coordenadas

$$\begin{aligned} x_a &= \sqrt{m\omega_a} q_a & \therefore & \frac{\partial}{\partial q_a} = \sqrt{m\omega_a} \frac{\partial}{\partial x_a}; \\ y_a &= \frac{p_a}{\sqrt{m\omega_a}} & \therefore & \frac{\partial}{\partial p_a} = \frac{1}{\sqrt{m\omega_a}} \frac{\partial}{\partial y_a}; \\ x_r &= \sqrt{m\omega_{ar}} q_r & \therefore & \frac{\partial}{\partial q_r} = \sqrt{m\omega_{ar}} \frac{\partial}{\partial x_r}; \\ y_r &= \frac{p_r}{\sqrt{m\omega_{ar}}} & \therefore & \frac{\partial}{\partial p_r} = \frac{1}{\sqrt{m\omega_{ar}}} \frac{\partial}{\partial y_r}, \end{aligned} \quad (6.151)$$

é possível mostrar que:  $|J(x_a, y_a, x_r, y_r)| = 1$  e, nesse caso, temos que a função (6.150) pode ser escrita da seguinte forma

$$\psi_0(x_a, y_r, x_a, y_r) = C e^{-\frac{1}{\hbar}(x_a^2 + y_a^2 + x_r^2 + y_r^2)}. \quad (6.152)$$

Usando as derivadas de (6.151), mostra-se que o produto estrela fica invariante

$$\star = e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q_a} \frac{\partial}{\partial p_a} - \frac{\partial}{\partial p_a} \frac{\partial}{\partial q_a} + \frac{\partial}{\partial q_r} \frac{\partial}{\partial p_r} - \frac{\partial}{\partial p_r} \frac{\partial}{\partial q_r} \right)} = e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_a} - \frac{\partial}{\partial y_a} \frac{\partial}{\partial x_a} + \frac{\partial}{\partial x_r} \frac{\partial}{\partial y_r} - \frac{\partial}{\partial y_r} \frac{\partial}{\partial x_r} \right)}. \quad (6.153)$$

Substituindo (6.153) e (6.152) em (6.4) temos a função de Wigner do problema

$$f_0(x_a, x_r, y_a, y_r) = C^2 e^{-\frac{1}{\hbar}(x_a^2 + y_a^2 + x_r^2 + y_r^2)} \star e^{-\frac{1}{\hbar}(x_a^2 + y_a^2 + x_r^2 + y_r^2)}. \quad (6.154)$$

onde, usando a identidade (6.28) com  $a = b = 1$ , temos finalmente

$$f_0(x_a, x_r, y_a, y_r) = \frac{C^2}{2} e^{-\frac{1}{\hbar}(x_a^2 + y_a^2 + x_r^2 + y_r^2)}. \quad (6.155)$$

Para calcular a constante  $C$ , vamos usar a condição de normalização em conjunto com a propriedade da integral:  $\int dq dp \psi_1 \star \psi_2 = \int dq dp \psi_1 \psi_2$ , segue então que

$$\int dx_a dx_r dy_a dy_r f_0(x_a, x_r, y_a, y_r) = C^2 \int dx_a e^{-\alpha x_a^2} \int dy_a e^{-\alpha y_a^2} \int dx_r e^{-\alpha x_r^2} \int dy_r e^{-\alpha y_r^2} = 1, \quad (6.156)$$

onde  $\alpha = 2/\hbar$ . Resolvendo essas integrais, encontramos:

$$C = 2/(\hbar\pi),$$

que, substituindo em (6.155) resulta para a função de Wigner normalizada

$$f_0(q_a, q_r, p_a, p_r) = \frac{2}{(\hbar\pi)^2} e^{-\frac{1}{m\hbar\omega_a} p_a^2 - \frac{m\omega_a}{\hbar} q_a^2 - \frac{1}{m\hbar\omega_{ar}} p_r^2 - \frac{m\omega_{ar}}{\hbar} q_r^2}, \quad (6.157)$$

onde usamos as relações (6.151).

A densidade de probabilidade no espaço das coordenadas é

$$P_0(q_a, q_r) = \int dp_a dp_r f_0(q_a, q_r, p_a, p_r).$$

Realizando a integral acima, temos

$$P_0(q_a, q_r) = K e^{-\frac{m}{\hbar}(\omega_a q_a^2 + \omega_{ar} q_r^2)},$$

onde  $K = 2m\sqrt{\omega_a\omega_{ar}}/\hbar\pi$ .

Uma representação gráfica dessa densidade de probabilidade é mostrada na figura (6.4). Nesta figura notamos a simetria nas coordenadas  $q_r$  e  $q_a$ , e isto se deve ao fato das interações serem do tipo harmônicas; em consequência disso, também obtemos um gráfico análogo se calculamos a densidade de probabilidade no espaço dos momenta.

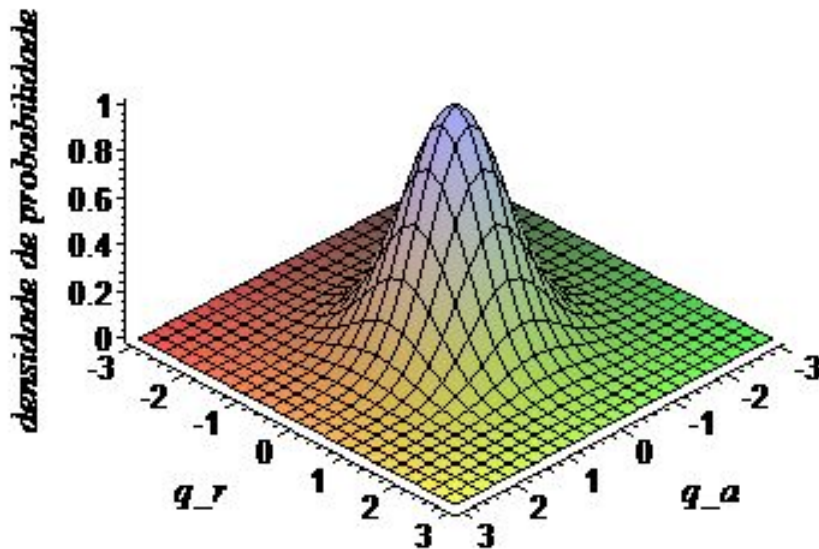


Figura 6.4: Densidade de probabilidade, no espaço das coordenadas, de encontrar o elétron no estado fundamental, no átomo de Hélio de Hooke.

# Capítulo 7

## Conclusões e Perspectivas

Entre as formulações da Mecânica Quântica há a Teoria Quântica no Espaço de Fase. Proposta inicialmente por Wigner em 1932 [17] que tinha como objetivo efetuar correções quânticas no regime de baixas temperaturas da Mecânica Estatística Clássica, essa formulação vem tendo várias aplicações e desenvolvimentos. Entre os desenvolvimentos pode-se citar Moyal [35] que possibilitou estudar sistemas quânticos tendo como base uma estrutura algébrica; na seqüência seguem os trabalhos de Curtright, Uematsu, Zachos e Fairlie [37–45], que têm como objetivo a quantização de sistemas físicos através do uso do Produto Estrela, e na primeira década desse século a Formulação Simplética [48] baseado na teoria de representação de grupo.

A Formulação Simplética expõe de forma clara a existência das variáveis  $(q, p)$  comutantes mas apresenta dificuldades no que se refere a aplicação já que tanto o momentum como a coordenada são operadores que envolvem derivadas e assim deixam de ser multiplicativos.

Buscando métodos que sejam capazes de resolver a Equação de Schrödinger na Formulação Simplética desenvolvemos nesta Tese a Formulação Supersimétrica da Teoria Quântica Simplética. Mostramos que, a partir da Formulação Supersimétrica da Mecânica Quântica Usual [56, 57], é possível introduzir a álgebra Supersimétrica dentro da Formulação da Mecânica Quântica no espaço de fase; esta álgebra permitiu aplicar o método de fatoração em um operador Hamiltoniano da Mecânica Quântica Simplética e construir o parceiro supersimétrico deste Hamiltoniano; realizando esta etapa  $n$  vezes é possível construir uma hierarquia de Hamiltonianos todos interligados com as autofunções e autovalores do Hamiltoniano de partida; esta hierarquia mostramos ser um elegante método de resolver problemas espectral de sistemas físicos

Como aplicações consideramos sistemas descritos pela Mecânica Quântica Supersimétrica usual: o oscilador harmônico, uma partícula carregada em um campo magnético constante, o átomo de Hidrogênio e o átomo de Hélio de Hooke. Em cada um desses casos foi possível, a partir do desenvolvimento da Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica, calcular as autofunções e os autovalores e posteriormente encontrar a função de Wigner.

Como perspectivas do trabalho deve-se notar que existem outros potenciais que poderão ser estudados com nosso procedimento como, por exemplo: potencial trigonométrico de Pöschl-Teller [95], potencial de Morse [105], potencial atrativo  $sech^2(x)$ , entre outros [96]. Além disso, alguns autores [127–129] vêm estudando a álgebra supersimétrica na Mecânica Quântica para dimensões espaciais maiores que um; isso possibilita ampliar nosso trabalho para implementar estas dimensões.

Vimos que a construção da hierarquia só é possível quando podemos fatorar a equação de Schrödinger; neste caso tal equação admite uma solução analítica, caso contrário deve-se recorrer a métodos aproximativos. Um desses métodos e que permitir uma possível extensão de nosso trabalho é o *método variacional* [120, 124–126].

Baseando-se na idéia de representação de grupo de Poincaré sobre  $\Gamma$ , Amorim *et al.*, [87, 115, 130, 131], desenvolveram uma teoria de campos relativística no espaço de fase e estudaram os campos de Schrödinger, Klei-Gordon e Dirac. Dentro deste contexto, surge a possibilidade de estudar a Supersimetria por meio do conceito de Supercampo e Superespaço [54, 55], bem como uma possível formulação da teoria das Cordas [132], sendo esse um outro domínio de pesquisa que podemos desenvolver.

# Apêndice A

## Propriedades do Produto Estrela

Neste apêndice, provaremos as principais propriedades referentes ao Produto Estrela<sup>1</sup> definido no Capítulo 3. Antes de procedermos a estas demonstrações, devemos mencionar que a relação (3.3) pode ser reescrita sob uma forma mais usual, em termos de operadores diferenciais que atuam à direita por meio de:

$$F_1(q, p; t) \star F_2(q, p; t) = e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)} F_1(q, p; t) F_2(q', p'; t) \Big|_{(q', p')=(q, p)}, \quad (\text{A.1})$$

onde as variáveis linhas e não-linhas são introduzidas para fazer diferença entre a derivação à esquerda e à direita; no final do processo, as “novas” coordenadas  $q'$  e  $p'$  serão convertidas nas antigas  $q$  e  $p$ .

Pode-se mostrar [49] que, além das duas representações do produto estrela (3.3) e (A.1), existe a representação integral

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \left( \frac{1}{\pi\hbar} \right)^2 \int dq' dq'' dp' dp'' F_1(q', p') F_2(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar} [p(q'-q'') + p'(q''-q) + p''(q-q')]}. \quad (\text{A.2})$$

Nota-se que as funções do espaço de Hilbert são da forma  $\Psi(q, p)$  satisfazendo a propriedade (3.4); portanto, é de se esperar que estas integrais convirgam e que as funções são bem comportadas no sentido de que são infinitamente diferenciáveis e anulam-se quando  $(q, p) \rightarrow \pm\infty$ .

Para provar (A.2), inicia-se com as representações dos deltas de Dirac na forma integral

$$\delta(q' - q) = \frac{1}{\pi\hbar} \int e^{-\frac{2i}{\hbar} u(q'-q)} du, \quad \delta(p' - p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int e^{-\frac{2i}{\hbar} v(p'-p)} dv,$$

---

<sup>1</sup>Por questão de simplicidade estamos considerando duas variáveis  $q$  e  $p$ .

que, substituindo na expressão

$$F_1(q, p) = \int dq' dp' F_1(q', p') \delta(q' - q) \delta(p' - p),$$

tem-se

$$F_1(q, p) = \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^2 \int dq' dp' F_1(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar} u(q' - q)} e^{-\frac{2i}{\hbar} v(p' - p)} dv du.$$

Fazendo o produto estrela da função acima com  $F_2$ , encontra-se

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \frac{1}{(\pi \hbar)^2} \int dq' dp' dv du F_1(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar} [u(q' - q) + v(p' - p)]} e^{\frac{\hbar}{2i} \left( \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right)} F_2(q, p). \quad (\text{A.3})$$

Notando que a relação

$$e^{-\frac{2i}{\hbar} [u(q' - q) + v(p' - p)]} e^{\frac{\hbar}{2i} \left( \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right)} F_2(q, p) = e^{-\frac{2i}{\hbar} [u(q' - q) + v(p' - p)]} e^{-u \frac{\partial}{\partial p} + v \frac{\partial}{\partial q}} F_2(q, p), \quad (\text{A.4})$$

é válida e sabendo que uma expansão de Taylor da função  $F_1(q + v, p - u)$  nas proximidades dos pontos  $(q, p)$  é da forma

$$F_1(q + v, p - u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( v \frac{\partial}{\partial q} - u \frac{\partial}{\partial p} \right)^n F_1(q, p) = e^{(v \frac{\partial}{\partial q} - u \frac{\partial}{\partial p})} F_1(q, p). \quad (\text{A.5})$$

obtém-se

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \frac{1}{(\pi \hbar)^2} \int dq' dp' dv du F_1(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar} [u(q' - q) + v(p' - p)]} F_2(q + v, p - u). \quad (\text{A.6})$$

Fazendo uma transformação de coordenadas

$$q'' = q + v, \quad p'' = p - u,$$

e notando que

$$|J(q'', p'')| = \left| \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial q''} & \frac{\partial u}{\partial p''} \\ \frac{\partial v}{\partial q''} & \frac{\partial v}{\partial p''} \end{pmatrix} \right| = \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 1.$$

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \frac{1}{(\pi \hbar)^2} \int dq' dp' dq'' dp'' F_1(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar} [(p - p'')(q' - q) + (q'' - q)(p' - p)]} F_2(q'', p''). \quad (\text{A.7})$$

Simplificando os expoentes da exponencial acima

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \frac{1}{(\pi \hbar)^2} \int dq' dq'' dp' dp'' F_1(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar} [p(q' - q'') + p'(q'' - q) + p''(q - q')]} F_2(q'', p''), \quad (\text{A.8})$$

prova-se o que queríamos.

## Propriedades

Provaremos as principais propriedades que são relevantes neste trabalho.

1. Se  $c$  for qualquer constante complexa ou uma função independente das variáveis  $q$  e  $p$ , isto é,  $c(t)$ , então

$$F_1(q, p) \star c = c \star F_1(q, p) = cF_1(q, p).$$

Prova

$$\begin{aligned} c \star F_1(q, p) &= \left[ 1 + \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right) + \dots \right] cF_1(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= cF_1(q, p) + \frac{i\hbar}{2} \left[ \frac{\partial c}{\partial q} \frac{\partial F_1(q', p')}{\partial p'} - \frac{\partial c}{\partial p} \frac{\partial F_1(q', p')}{\partial q'} \right] \Big|_{(q', p')=(q, p)} + \dots \\ &= cF_1(q, p). \\ F_1(q, p) \star c &= \left[ 1 + \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right) + \dots \right] F_1(q', p')c \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= F_1(q, p)c + \frac{i\hbar}{2} \left[ \frac{\partial F_1(q', p')}{\partial q} \frac{\partial c}{\partial p'} - \frac{\partial F_1(q', p')}{\partial p} \frac{\partial c}{\partial q'} \right] \Big|_{(q', p')=(q, p)} + \dots \\ &= F_1(q, p)c. \end{aligned}$$

Nesta demonstração tem-se  $\partial c/\partial p' = \partial c/\partial q' = 0$  uma vez que,  $c$  é uma constante e todos os termos superiores se anulam por conter derivadas de constante.

2. Não Comutatividade

$$F_1(q, p) \star F_2(q, p) \neq F_2(q, p) \star F_1(q, p).$$

Prova

$$\begin{aligned} F_1(q, p) \star F_2(q, p) &= e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)} F_1(q, p) F_2(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= e^{-\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial p'} \frac{\partial}{\partial q} \right)} F_2(q', p') F_1(q, p) \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &\neq e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)} F_2(q, p) F_1(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= F_2(q, p) \star F_1(q, p). \end{aligned}$$



### 3. Associatividade

$$[F_1(q, p) \star F_2(q, p)] \star F_3(q, p) = F_1(q, p) \star [F_2(q, p) \star F_3(q, p)].$$

Prova

$$\begin{aligned} (F_1 \star F_2) \star F_3 &= \left[ e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p''} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q''} \right)} F_1(q, p) F_2(q'', p'') \Big|_{(q'', p'')=(q, p)} \right] \star F_3(q, p) \\ &= e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q''} \frac{\partial}{\partial p'''} - \frac{\partial}{\partial p''} \frac{\partial}{\partial q'''} \right)} \left[ e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p''} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q''} \right)} F_1(q, p) F_2(q'', p'') \right] F_3(q''', p''') \\ &= e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p''} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q''} \right)} F_1(q, p) \left[ e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q''} \frac{\partial}{\partial p'''} - \frac{\partial}{\partial p''} \frac{\partial}{\partial q'''} \right)} F_2(q'', p'') F_3(q''', p''') \right] \\ &= e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p''} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q''} \right)} F_1(q, p) [F_2(q'', p'') \star F_3(q, p)] \Big|_{(q'', p'')=(q, p)} \\ &= F_1 \star (F_2 \star F_3). \end{aligned}$$

### 4. Existência do Conjugado Complexo

$$[F_1(q, p) \star F_2(q, p)]^* = F_2^*(q, p) \star F_1^*(q, p).$$

Prova

$$\begin{aligned} [F_1(q, p) \star F_2(q, p)]^* &= \left[ e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)} F_1(q, p) F_2(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \right]^* \\ &= \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)^n F_1(q, p) F_2(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \right]^* \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n \right]^* \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)^n F_1^*(q, p) F_2^*(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n (-1)^n \left( \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q'} \right)^n F_1^*(q, p) F_2^*(q', p') \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i\hbar}{2} \right)^n \left( \frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial p'} \frac{\partial}{\partial q} \right)^n F_2^*(q', p') F_1^*(q, p) \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= e^{\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial p'} \frac{\partial}{\partial q} \right)} F_2^*(q', p') F_1^*(q, p) \Big|_{(q', p')=(q, p)} \\ &= F_2^*(q, p) \star F_1^*(q, p), \end{aligned}$$

onde usou-se na terceira igualdade a relação:

$$[(i)^n]^* = [(i)^*]^n = [(-i)]^n = [-1(i)]^n = (-1)^n(i)^n.$$

## 5. Propriedade da Integral

Essa é uma das propriedades mais importantes que são utilizadas na Tese. Essa propriedade afirma que, ao se efetuar uma integração de um produto estrela entre duas funções,  $F_1(q, p) \star F_2(q, p)$ , esse produto se trivializa, isto é

$$\int dqdp F_1(q, p) \star F_2(q, p) = \int dqdp F_1(q, p) F_2(q, p)$$

Prova

Para provar essa propriedade, realiza-se uma integração na representação integral do produto estrela (A.8) e reescreve-se

$$\begin{aligned} \int dqdp F_1 \star F_2 &= \int dq' dq'' dp' dp'' F_1(q', p') F_2(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar}(p'q'' - p''q')} \\ &\cdot \frac{1}{\pi\hbar} \int dq e^{-\frac{2i}{\hbar}q(p'' - p')} \frac{1}{\pi\hbar} \int dp e^{-\frac{2i}{\hbar}p(q' - q'')} \\ &= \int dq' dq'' dp' dp'' F_1(q', p') F_2(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar}p'q''} e^{\frac{2i}{\hbar}p''q'} \delta(p'' - p') \delta(q' - q'') \\ &= \int dq' dp' F_1(q', p') F_2(q', p') e^{-\frac{2i}{\hbar}p'q'} e^{\frac{2i}{\hbar}p'q'} \\ &= \int dqdp F_1(q, p) F_2(q, p), \end{aligned}$$

onde na última passagem levou-se em consideração que as variáveis de integração não afetam o resultado da integral. A propriedade da integral nos mostra que nossa representação do produto escalar (3.5) é consistente com nossa definição do produto estrela.

# Apêndice B

## Representação do Grupo de Galilei sobre o espaço de Hilbert

Neste Apêndice faremos um estudo da representação do grupo de Galilei sobre o espaço de Hilbert da Mecânica Quântica; veremos quais são os geradores da álgebra de Lie desse grupo. As principais fontes consultadas foram [72, 133, 134].

Como toda teoria, a Mecânica Quântica admite transformações, ou seja, quando se descreve o mesmo fenômeno físico usando dois sistemas de referência, obtém-se descrições distintas na forma do mesmo fenômeno. Essas descrições devem ser equivalentes já que, representam o mesmo fenômeno. As características matemáticas dessas transformações são descritas em um elegante teorema [135], chamado teorema de Wigner.

**Teorema B.0.1 (Wigner)** *Qualquer mapeamento no espaço vetorial  $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle$ , tal que  $|\langle\Phi|\Psi\rangle| = |\langle\Phi'|\Psi'\rangle|$ , pode ser implementado mediante um operador  $\hat{U}$ :*

$$|\Psi'\rangle = \hat{U}|\Psi\rangle, \quad |\Phi'\rangle = \hat{U}|\Phi\rangle \quad (\text{B.1})$$

onde  $\hat{U}$  é unitário (linear) ou anti-unitário (anti-linear).

Se um operador linear  $\hat{U}$  é unitário então, por definição

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}, \quad (\text{B.2})$$

onde  $\hat{1}$  é o operador identidade. É importante observar que a transformação implementada por

um operador unitário <sup>1</sup> conserva o produto escalar (2.17), isto é

$$\langle \Phi' | \Psi' \rangle = \langle \Phi \hat{U}^\dagger \hat{U} \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle. \quad (\text{B.3})$$

Isto é muito importante uma vez que, quantidades observáveis (probabilidades) aparecem na Mecânica Quântica, como produtos escalares de estados.

Define-se a exponencial de um operador abstrato  $\hat{X}$  da seguinte forma

$$e^{is\hat{X}} := \hat{1} + is\hat{X} + \frac{(is)^2}{2!} \hat{X}\hat{X} + \frac{(is)^3}{3!} \hat{X}\hat{X}\hat{X} + \dots, \quad (\text{B.4})$$

que é dominada pela equação diferencial

$$\frac{d}{ds} e^{is\hat{X}} = i\hat{X} e^{is\hat{X}}, \quad (\text{B.5})$$

onde  $s$  é um parâmetro real e  $i$  é a unidade imaginária.

Seja uma família de operadores unitários  $\hat{U}(s)$  rotulados por um parâmetro contínuo real  $s$ , e tal que

$$\hat{U}(0) = \hat{1}, \quad \hat{U}(s_1 + s_2) = \hat{U}(s_1)\hat{U}(s_2). \quad (\text{B.6})$$

Diferenciando a segunda expressão acima com relação ao parâmetro  $s_1$  e tomando  $s_1 = 0$ , tem-se

$$\left. \frac{\partial \hat{U}(s_1 + s_2)}{\partial s_1} \right|_{s_1=0} = \left. \frac{d}{ds_1} \hat{U}(s_1) \right|_{s_1=0} \hat{U}(s_2). \quad (\text{B.7})$$

Define-se

$$\left. \frac{d\hat{U}(s)}{ds} \right|_{s=0} := \frac{i}{\hbar} \hat{K}, \quad (\text{B.8})$$

onde se usa a constante de Planck  $\hbar$  apenas para fixar as unidades. Nesse caso, pode-se reescrever a equação (B.7) da seguinte forma

$$\left. \frac{d\hat{U}(s)}{ds_1} \right|_{s=s_2} = \frac{i}{\hbar} \hat{K} \hat{U}(s_2). \quad (\text{B.9})$$

Lembrando que  $\hat{U}(0) = \hat{1}$ , então a comparação com (B.5) permite obter a solução

$$\hat{U}(s) = e^{\frac{i}{\hbar} s \hat{K}}. \quad (\text{B.10})$$

---

<sup>1</sup>A menos que seja explicitado o contrário, todos os operadores tratados neste Apêndice serão operadores lineares.

O operador  $\hat{K}$  é denominado gerador da família de operadores unitários (gerador do grupo). No caso de transformações unitárias infinitesimais tem-se de (B.10)

$$\hat{U}(s) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar}s\hat{K} + \dots, \quad \hat{U}^\dagger(s) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}s\hat{K}^\dagger + \dots \quad (\text{B.11})$$

A condição de unitariedade do operador  $\hat{U}$  requer que

$$\hat{U}(s)\hat{U}^\dagger(s) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar}s(\hat{K} - \hat{K}^\dagger) \dots \equiv \hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{K} = \hat{K}^\dagger, \quad (\text{B.12})$$

ou seja, os geradores da representação do grupo são operadores hermitianos.

Sabe-se que as simetrias do espaço-tempo incluem rotações, translações, e transformações entre referenciais inerciais. As transformações entre referenciais inerciais no caso relativístico são conhecidas como transformações de Lorentz. Contudo, sabe-se que no limite em que a velocidade da luz  $c$  tende ao “infinito” [3], as transformações de Lorentz tendem às transformações de Galilei. Portanto, tem-se interesse em simetrias associadas às transformações de pontos no espaço-tempo galileano:

$$(\vec{x}, t) \rightarrow (\vec{x}', t'), \quad \text{onde} \quad t' = t + b, \quad \vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a} + \vec{v}t. \quad (\text{B.13})$$

A matriz  $R$  caracteriza uma rotação,  $\vec{a}$  uma translação no espaço,  $\vec{v}$  um “boost”, ou seja, a velocidade do referencial inercial  $S$  com respeito ao referencial inercial  $S'$ , e  $b$  uma translação no tempo. Denota-se a transformação de Galilei por

$$(\vec{x}', t') = \tau(\vec{x}, t) = (R\vec{x} + \vec{a} + \vec{v}t, t + b). \quad (\text{B.14})$$

É possível mostrar que qualquer transformação de Galilei pode ser escrita:

$$\tau_2\tau_1(\vec{x}, t) = (R_3\vec{x} + \vec{a}_3 + \vec{v}_3t, t + b_3), \quad \Rightarrow \quad \tau_2\tau_1 = \tau_3, \quad (\text{B.15})$$

onde identifica-se:

$$\begin{aligned} R_3 &\equiv R_2R_1 \\ \vec{a}_3 &\equiv R_2\vec{a}_1 + \vec{v}_2b_1 + \vec{a}_2 \\ \vec{v}_3 &\equiv R_2\vec{v}_1 + \vec{v}_2 \\ b_3 &\equiv b_1 + b_2. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Assim, nota-se que as transformações de Galilei formam um grupo: o grupo de Galilei.

Sabe-se que as leis da Física no limite não-relativístico são invariantes sob as transformações de Galilei (B.14); por isso, as descrições de um sistema quântico em sistema de referência relacionados por estas transformações devem ser equivalentes. Correspondentemente a uma transformação de coordenadas (B.14), existe uma transformação unitária no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  que a representa. Desta forma se,  $\tau_2\tau_1 = \tau_3$  no espaço-tempo, deve-se ter que:  $|\Psi\rangle \propto \hat{U}(\tau_1)\hat{U}(\tau_2)|\Phi\rangle$  e  $|\Psi'\rangle \propto \hat{U}(\tau_3)|\Phi\rangle$  descrevem mesmo estado quântico. Isso não quer dizer que  $|\Psi\rangle$  e  $|\Psi'\rangle$  sejam necessariamente o mesmo vetor  $|\Psi\rangle$ , uma vez que dois vetores  $|\Psi'\rangle$  e  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ , diferindo por no máximo uma fase

$$|\Psi'\rangle = e^{i\alpha} |\Psi\rangle, \quad (\text{B.17})$$

são fisicamente equivalentes. Em consequência pode-se escrever para a relação entre os operadores  $\hat{U}(\tau)$ , de uma maneira geral que

$$e^{i\omega(\tau_3)}\hat{U}(\tau_3) = \hat{U}(\tau_2)\hat{U}(\tau_1), \quad (\text{B.18})$$

onde  $\omega(\tau_3)$  é um fator de fase real. Diz-se que  $\hat{U}(\tau)$  é uma representação do grupo de Galilei no espaço  $\mathcal{H}$ .

Elucidando, seja uma translação espacial:  $(\vec{x}, t) \rightarrow (\vec{x}', t) = \tau(\vec{a})(\vec{x}, t) := (\vec{x} + \vec{a}, t)$ . Se  $\vec{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$ , então  $(\vec{x}', t) = (x_1 + a_1, x_2 + a_2, x_3 + a_3, t)$ , onde  $\vec{a} \equiv (a_1, a_2, a_3)$ . Define-se:

$$\begin{aligned} \tau_1(a_1)(\vec{x}, t) &:= (x_1 + a_1, x_2, x_3, t), \\ \tau_2(a_2)(\vec{x}, t) &:= (x_1, x_2 + a_2, x_3, t), \\ \tau_3(a_3)(\vec{x}, t) &:= (x_1, x_2, x_3 + a_3, t); \end{aligned}$$

então, tem-se a combinação

$$\begin{aligned} \tau_1(a_1)\tau_2(a_2)\tau_3(a_3)(\vec{x}, t) &= \tau_1(a_1)\tau_2(a_2)(x_1, x_2, x_3 + a_3, t), \\ &= \tau_1(a_1)(x_1, x_2 + a_2, x_3 + a_3, t), \\ &= (x_1 + a_1, x_2 + a_2, x_3 + a_3, t) = (\vec{x}', t). \end{aligned}$$

Portanto

$$\tau(\vec{a}) = \tau_1(a_1)\tau_2(a_2)\tau_3(a_3). \quad (\text{B.19})$$

Correspondendo a  $\tau(\vec{a})$  tem-se um operador unitário  $\hat{U}(\tau)$  no espaço  $\mathcal{H}$ , ou seja

$$\begin{aligned}\tau_1(a_1) &\mapsto \hat{U}_1(a_1) = e^{\frac{i}{\hbar}a_1\hat{K}_1}, \\ \tau_2(a_2) &\mapsto \hat{U}_2(a_2) = e^{\frac{i}{\hbar}a_2\hat{K}_2}, \\ \tau_3(a_3) &\mapsto \hat{U}_3(a_3) = e^{\frac{i}{\hbar}a_3\hat{K}_3}.\end{aligned}$$

Assim

$$\hat{U}(\vec{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}a_1\hat{K}_1}e^{\frac{i}{\hbar}a_2\hat{K}_2}e^{\frac{i}{\hbar}a_3\hat{K}_3} \quad \Rightarrow \quad \hat{U}(\vec{a}) = \prod_{\mu=1}^3 e^{\frac{i}{\hbar}a_\mu\hat{K}_\mu}, \quad (\text{B.20})$$

com  $\hat{K}_\mu = \hat{K}_\mu^\dagger$ . Esse raciocínio pode ser generalizado para incluir as 3 rotações em torno de cada um dos eixos, os 3 boosts (translação no espaço de velocidade), e a translação temporal, resultando

$$\hat{U}(\tau) = \prod_{\mu=1}^{10} e^{\frac{i}{\hbar}s_\mu\hat{K}_\mu}, \quad \text{com} \quad \tau \equiv (R, \vec{a}, \vec{v}, b). \quad (\text{B.21})$$

Portanto, no espaço tri-dimensional um sistema constituído de 1 partícula tem ao todo 10 geradores.

Pode-se notar que, uma das propriedades que caracteriza um grupo contínuo, conhecido como grupo de Lie, é que o produto dos elementos do grupo são funções analíticas dos parâmetros que caracterizam o grupo. A natureza analítica das funções nos permite desenvolver o conceito de gerador e reduzir a análise do grupo a um estudo dos elementos na vizinhança do elemento identidade. Sabe-se que os geradores do grupo de Lie formam um espaço vetorial e a dimensão deste espaço é igual ao número de geradores linearmente independentes do grupo. Daí incluindo o comutador dos geradores como uma lei de composição tem-se uma álgebra. De fato, considerando a relação

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{K}_\mu}e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{K}_\nu}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{K}_\mu}e^{i\epsilon\hat{K}_\nu} = \hat{1} + \frac{\epsilon^2}{\hbar^2}[\hat{K}_\nu, \hat{K}_\mu] + \dots, \quad (\text{B.22})$$

e lembrando que, uma sucessão de transformação de Galilei deve ser igual a uma única transformação, a menos de um fator de fase, ou seja,

$$\hat{U}_\mu^{-1}\hat{U}_\nu^{-1}\hat{U}_\mu\hat{U}_\nu = e^{i\omega(\epsilon)}\hat{U}(\tau) = \hat{1} + \frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda=1}^{10}s_\lambda\hat{K}_\lambda + \hat{1}i\omega, \quad (\text{B.23})$$

a comparação dessa expressão com (B.22) implica em que o comutador entre dois geradores pode ser escrito como uma combinação linear dos geradores mais uma constante  $B_{\mu\nu}$  decorrente do fator de fase

$$[\hat{K}_\mu, \hat{K}_\nu] = i \sum_{\lambda=1}^{10} C_{\mu\nu}^\lambda \hat{K}_\lambda + i\hat{1}B_{\mu\nu}, \quad (\text{B.24})$$

ou seja, o comutador pode ser visto como uma operação interna no conjunto de geradores. As constantes  $C_{\mu\nu}^\lambda$  são chamadas constantes de estrutura do grupo; o cálculo dessas constantes pode ser realizado através das regras de multiplicação (B.16) para as transformações do espaço-tempo.

Associado a cada um dos dez parâmetros do grupo de Galilei em  $(3 + 1)$  dimensões tem-se um gerador; especificamente tem-se de forma resumida a seguinte tabela (B.1):

Transf. no Espaço-Tempo	Operador Unitário em $\mathcal{H}$
$\vec{x} \rightarrow R_\mu(\theta_\mu)\vec{x}$	$\hat{U}_\mu(\theta_\mu) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta_\mu\hat{J}_\mu}$
$x_\mu \rightarrow x_\mu + a_\mu$	$\hat{U}_\mu(a_\mu) = e^{-\frac{i}{\hbar}a_\mu\hat{P}_\mu}$
$x_\mu \rightarrow x_\mu + v_\mu t$	$\hat{U}_\mu(v_\mu) = e^{\frac{i}{\hbar}v_\mu\hat{G}_\mu}$
$t \rightarrow t + b$	$\hat{U}(b) = e^{\frac{i}{\hbar}b\hat{H}}$

Tabela B.1: Geradores do Grupo de Galilei.

Os geradores  $\{-\hat{J}_\mu, -\hat{P}_\mu, \hat{G}_\mu, \hat{H}\}$ ,  $\mu = 1, 2, 3$  são formas específicas dos geradores genéricos  $\hat{K}_\mu$ ,  $\mu = 1, \dots, 10$ . O sinal de menos é meramente uma questão de conveniência.

Vamos calcular os comutadores dos geradores. O procedimento é o mesmo que fizemos em (B.22) e (B.23), isto é, usa-se a regra de multiplicação envolvendo os operadores  $U(s)$  e as transformações no espaço-tempo. Considerando as translações espaciais, por exemplo, temos de (B.22):

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_1}e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_2}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_1}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_2} = \hat{1} + \frac{\epsilon^2}{\hbar^2}[\hat{P}_2, \hat{P}_1] + \dots, \quad (\text{B.25})$$

que corresponde à seguinte transformação no espaço de Galilei:

$$\begin{aligned} (x_1, x_2, x_3, t) &\longrightarrow (x_1, x_2 - \epsilon, x_3, t) \\ &\longrightarrow (x_1 - \epsilon, x_2 - \epsilon, x_3, t) \\ &\longrightarrow (x_1 - \epsilon, x_2, x_3, t) \\ &\longrightarrow (x_1, x_2, x_3, t). \end{aligned}$$

Portanto,  $e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_1}e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_2}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_1}e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{P}_2}$  tem que ser igual ao operador  $\hat{1}$  a menos de um fator de fase

$$\hat{1} + \frac{\epsilon^2}{\hbar^2}[\hat{P}_2, \hat{P}_1] + \dots = \hat{1}e^{i\omega(\epsilon)} = \hat{1} + \hat{1}i\omega + \dots. \quad (\text{B.26})$$



Usando a relação (B.24), tem-se

$$\hat{1} + i \sum_{\lambda=1}^{10} \left( \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} C_{21}^\lambda \right) \hat{K}_\lambda + \hat{1} i \left( \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} B_{21} \right) + \dots = \hat{1} + \hat{1} i \omega + \dots, \quad (\text{B.27})$$

o que nos leva a concluir que:  $C_{21}^\lambda \equiv 0$  e  $B_{21} = (?)$ . Portanto

$$[\hat{P}_2, \hat{P}_1] = 0 + \hat{1} (?), \quad (\text{B.28})$$

onde  $\hat{1} (?)$  indica um possível múltiplo do operador identidade. Procedendo desta maneira [133] é possível calcular todos os outros comutadores que se encontram resumidos na tabela abaixo

$[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0 + \hat{1} (?)$	$[\hat{G}_\mu, \hat{G}_\nu] = 0 + \hat{1} (?)$	$[\hat{J}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{P}_\lambda + \hat{1} (?)$
$[\hat{P}_\mu, \hat{H}] = 0 + \hat{1} (?)$	$[\hat{G}_\mu, \hat{H}] = i\hbar \hat{P}_\mu + \hat{1} (?)$	$[\hat{J}_\mu, \hat{G}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{G}_\lambda + \hat{1} (?)$
$[\hat{J}_\mu, \hat{H}] = 0 + \hat{1} (?)$	$[\hat{G}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0 + \hat{1} (?)$	$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}_\lambda + \hat{1} (?)$

onde na ultima coluna da tabela definiu-se o tensor de Levi-Cívica:

$$\varepsilon_{\mu\nu\lambda} := \begin{cases} +1, & \text{se } \varepsilon_{\mu\nu\lambda} = \varepsilon_{\nu\lambda\mu} = \varepsilon_{\lambda\mu\nu}, \\ -1, & \text{se } \varepsilon_{\nu\mu\lambda} = \varepsilon_{\mu\lambda\nu} = \varepsilon_{\lambda\nu\mu}; \quad \mu = 1, \nu = 2, \lambda = 3, \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases} \quad (\text{B.29})$$

Usa-se a definição do produto de Lie (B.24) para calcular as constantes  $B_{\mu\nu}$  nas relações de comutação

$$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}_\lambda + \hat{1} i B_{\mu\nu}, \quad [\hat{J}_\nu, \hat{J}_\mu] = i\hbar \varepsilon_{\nu\mu\lambda} \hat{J}_\lambda + \hat{1} i B_{\nu\mu}, \quad (\text{B.30})$$

decorrentes do fator de fase. Usando a propriedade de antisimetria do comutador, e o fato que  $\varepsilon_{\mu\nu\lambda} = -\varepsilon_{\nu\mu\lambda}$ , percebe-se que  $B_{\mu\nu} = -B_{\nu\mu}$ . Assim, as constantes decorrentes do fator de fase são antissimétricas e podem ser escritas como  $B_{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B_\lambda$ , onde  $B_\lambda$  são números reais. Dessa forma

$$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \left( \hat{J}_\lambda + \hat{1} \frac{1}{\hbar} B_\lambda \right). \quad (\text{B.31})$$

Definindo-se o operador  $\hat{J}'_\mu := \hat{J}_\mu + \hat{1} B_\mu / \hbar$ , pode-se mostrar [72] que:  $[\hat{J}'_\mu, \hat{J}'_\nu] = [\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu]$ . Segue então

$$[\hat{J}'_\mu, \hat{J}'_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}'_\lambda, \quad (\text{B.32})$$

cuja ação do operador unitário no vetor  $|\Psi\rangle$  será

$$\hat{U}'_\mu |\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}'_\mu} |\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(\hat{J}_\mu + \frac{1}{\hbar}B_\mu)} |\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_\mu} e^{-1\frac{i}{\hbar^2}\theta B_\mu} |\Psi\rangle = \hat{U}_\mu \left( e^{-\frac{i}{\hbar^2}\theta B_\mu} |\Psi\rangle \right).$$

Logo, o único efeito adicional de  $\hat{U}'_\mu$  é multiplicar todo vetor  $|\Psi\rangle$  por uma fase; como uma fase não tem significado físico no vetor, então  $\hat{U}'_\mu$  e  $\hat{U}_\mu$  são equivalentes e pode-se escrever:

$$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{J}_\lambda. \quad (\text{B.33})$$

Procedendo da mesma maneira, verifica-se que

$$[\hat{J}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{P}_\lambda, \quad [\hat{J}_\mu, \hat{G}_\nu] = i\hbar\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{G}_\lambda. \quad (\text{B.34})$$

Sabe-se que os geradores da representação do grupo de Galilei no espaço  $\mathcal{H}$  formam uma álgebra, a álgebra de Lie e, portanto satisfazem a identidade de Jacobi,

$$[[\hat{K}_\mu, \hat{K}_\nu], \hat{K}_\lambda] + [[\hat{K}_\nu, \hat{K}_\lambda], \hat{K}_\mu] + [[\hat{K}_\lambda, \hat{K}_\mu], \hat{K}_\nu] = 0. \quad (\text{B.35})$$

Usando essa identidade e notando que todo operador comuta com o múltiplo do operador identidade, é possível calcular os outros comutadores

$$[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0, \quad [\hat{P}_\mu, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{J}_\mu, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{G}_\mu, \hat{G}_\nu] = 0, \quad [\hat{G}_\kappa, \hat{H}] = i\hbar\hat{P}_\kappa. \quad (\text{B.36})$$

Por fim, será calculado a relação

$$[\hat{G}_\nu, \hat{P}_\lambda] = 0 + \hat{1}(\?). \quad (\text{B.37})$$

Para fazer isto, identifica-se:

$$\hat{K}_\mu \equiv \hat{J}_\mu, \quad \hat{K}_\nu \equiv \hat{G}_\nu, \quad \hat{K}_\lambda \equiv \hat{P}_\lambda,$$

na identidade de Jacobi e usa-se as relações (B.34). Assim

$$[[\hat{J}_\mu, \hat{G}_\nu], \hat{P}_\lambda] = [[\hat{P}_\lambda, \hat{G}_\nu], \hat{J}_\mu] + [[\hat{J}_\mu, \hat{P}_\lambda], \hat{G}_\nu]$$

O primeiro termo do lado direito da igualdade acima é nulo por conta da relação (B.37).

Portanto

$$[\varepsilon_{\mu\nu\gamma}\hat{G}_\gamma, \hat{P}_\lambda] = [\varepsilon_{\mu\lambda\beta}\hat{P}_\beta, \hat{G}_\nu]. \quad (\text{B.38})$$

Para  $\mu = \lambda = 1$  e  $\nu = 2$ , obtém-se

$$[\hat{G}_3, \hat{P}_1] = 0.$$

De forma geral:

$$[\hat{G}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0, \quad \text{se } \mu \neq \nu. \quad (\text{B.39})$$

Agora fazendo  $\mu = 1$ ,  $\nu = 2$  e  $\lambda = 3$ , tem-se

$$[\varepsilon_{12\gamma} \hat{G}_\gamma, \hat{P}_3] = [\varepsilon_{13\beta} \hat{P}_\beta, \hat{G}_2] \quad \Rightarrow \quad [\hat{G}_3, \hat{P}_3] = -[\hat{P}_2, \hat{G}_2] = [\hat{G}_2, \hat{P}_2].$$

De forma geral:

$$[\hat{G}_1, \hat{P}_1] = [\hat{G}_2, \hat{P}_2] = [\hat{G}_3, \hat{P}_3]. \quad (\text{B.40})$$

Combinando as relações (B.39) e (B.40), temos que:

$$[\hat{G}_\mu, \hat{P}_\nu] = \hat{1} i\hbar M \delta_{\mu\nu}, \quad (\text{B.41})$$

onde  $M$  é uma constante e  $\delta_{\mu\nu}$  é a delta de Kronecker definido por

$$\delta_{\mu\nu} := \begin{cases} 1, & \text{se } \mu = \nu \\ 0, & \text{se } \mu \neq \nu. \end{cases} \quad (\text{B.42})$$

Podemos resumir os comutadores dos geradores da representação do grupo de Galilei na tabela abaixo:

$[\hat{P}_\mu, \hat{H}] = 0$	$[\hat{J}_\mu, \hat{J}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}_\lambda$	$[\hat{J}_\mu, \hat{H}] = 0$
$[\hat{G}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar M \delta_{\mu\nu}$	$[\hat{J}_\mu, \hat{G}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{G}_\lambda$	$[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0$
$[\hat{G}_\mu, \hat{G}_\nu] = 0$	$[\hat{J}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{P}_\lambda$	$[\hat{G}_\mu, \hat{H}] = i\hbar \hat{P}_\mu$

Tabela B.2: Comutadores dos geradores do Grupo de Galilei.

# Apêndice C

## Forma Alternativa da Equação de Schrödinger no Espaço de Fase

Iniciaremos procurando uma solução assintótica da equação de Schrödinger. Se  $\psi(q, p)$  representa o estado de um sistema físico no espaço de fase<sup>1</sup> seu valor deve aproximar-se de zero à medida que  $(q, p)$  se aproxima do infinito, isto é

$$\lim_{(q,p) \rightarrow \pm\infty} \psi(q, p) \rightarrow 0, \quad (\text{C.1})$$

de tal modo que a relação (3.4) seja satisfeita. Uma maneira de satisfazer a condição de contorno (C.1) é assumir uma solução da equação (3.27) da seguinte forma

$$\psi(q, p) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi(q, p), \quad (\text{C.2})$$

onde  $\phi(q, p)$  é uma função que também satisfaz:

$$\int dqdp \phi^*(q, p) \phi(q, p) < \infty. \quad (\text{C.3})$$

Substituindo (C.2) em (3.27), temos

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V(\eta) \right) \phi(\eta, p) = E \phi(\eta, p), \quad \eta := 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}. \quad (\text{C.4})$$

Esta equação representa uma outra forma da equação de Schrödinger no espaço de fase e possui semelhança com a equação de Schrödinger usual, encontrada em diversos livros textos,

---

<sup>1</sup>Por simplicidade, estamos assumindo um espaço de fase bidimensional.

na representação de coordenadas. No entanto, devemos lembrar que com a variável  $\eta$  contém um operador diferencial e portanto não comuta com  $p$ .

Objetiva-se neste Apêndice demonstrar a equação (C.4). Para fazer isso, primeiro devemos provar duas identidades fundamentais relacionadas aos operadores momentum e posição. No caso do operador momentum, temos

$$\hat{P} = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \quad (\text{C.5})$$

e

$$\hat{P}^2 = \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (\text{C.6})$$

A demonstração da relação (C.5) é feita aplicando a expressão  $e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}}$ , em uma função arbitrária  $\psi \in \mathcal{H}_\Gamma$  e usando a regra da derivada do produto:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \right) \psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \psi \right) \\ &= \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi = \hat{P}\psi. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Levando em consideração à arbitrariedade da função  $\psi$  temos provado a relação (C.5). A relação (C.6) é provada aplicando a expressão  $e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 e^{\frac{2ipq}{\hbar}}$  em uma função arbitrária  $\psi \in \mathcal{H}_\Gamma$  e usando a relação (C.5), juntamente com a regra da derivada do produto, isto é

$$\begin{aligned} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \left[ \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi \right] = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \left[ e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{P}\psi \right] \\ &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \right) \hat{P}\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \hat{P}\psi \right] \\ &= \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \hat{P}\psi = \hat{P}^2\psi \end{aligned}$$

Levando em consideração a arbitrariedade de  $\psi$  temos demonstrado a identidade (C.6).

No caso do operador posição temos, para todo número natural não-nulo  $n$ , a seguinte identidade:

$$\hat{Q}^n = \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (\text{C.8})$$

A demonstração da identidade acima é feita por indução, aplicando o operador

$$e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}},$$

$n$  vezes em uma função arbitrária  $\psi \in \mathcal{H}_\Gamma$ , isto é

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} 2q \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi \right) + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi \right) \\
&= 2q\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \right) \psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \psi \\
&= 2q\psi - q\psi + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \psi = \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi = \hat{Q}\psi \\
e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^2 e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left[ \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi \right] \\
&= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}\psi \right) \\
&= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} 2q \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}\psi \right) + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}\psi \right) \\
&= 2q\hat{Q}\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \right) \hat{Q}\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}\psi \\
&= 2q\hat{Q}\psi - q\hat{Q}\psi + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}\psi = q\hat{Q}\psi + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}\psi = \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \hat{Q}\psi \\
&= \hat{Q}^2\psi \\
&\vdots \\
e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left[ \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^{n-1} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \psi \right] \\
&= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}^{n-1}\psi \right) \\
&= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} 2q \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}^{n-1}\psi \right) + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}^{n-1}\psi \right) \\
&= 2q\hat{Q}^{n-1}\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \right) \hat{Q}^{n-1}\psi + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}^{n-1}\psi \\
&= 2q\hat{Q}^{n-1}\psi - q\hat{Q}^{n-1}\psi + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}^{n-1}\psi = q\hat{Q}^{n-1}\psi + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \hat{Q}^{n-1}\psi \\
&= \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^{n-1} \hat{Q}\psi = \hat{Q}^n\psi.
\end{aligned}$$

Considerando a arbitrariedade de  $\psi$ , a última relação acima nos leva diretamente à identidade (C.8).

Multiplicando ambos os membros da última relação acima, primeiro pela esquerda por  $e^{\frac{2ipq}{\hbar}}$ , e em seguida pela direita por  $e^{-\frac{2ipq}{\hbar}}$ , e levando em consideração que  $\psi$  é arbitrário, podemos

reescrever a identidade (C.8) de outra forma:

$$\left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^n = e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \hat{Q}^n e^{-\frac{2ipq}{\hbar}}. \quad (\text{C.9})$$

De uma maneira geral, podemos mostrar que para toda função do operador posição que possa ser expandida<sup>2</sup> em uma série de potência da forma

$$V(\hat{Q}) = \sum_{m=1}^M V_m^{(-)} \hat{Q}^{-m} + \sum_{n=0}^{\infty} V_n^{(+)} \hat{Q}^n, \quad (\text{C.10})$$

é válida a seguinte identidade:

$$V(\hat{Q}) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} V \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \quad (\text{C.11})$$

onde  $M$  é um número natural não-nulo e  $V^{(\mp)}$  são os coeficientes da expansão.

Para demonstrar a identidade (C.11) multiplicaremos (C.10) pelo operador  $\hat{Q}^M$  e usaremos as identidades (C.8) e (C.9), ou seja

$$\begin{aligned} \hat{Q}^M V(\hat{Q}) &= \hat{Q}^M \left( \sum_{m=1}^M V_m^{(-)} \hat{Q}^{-m} + \sum_{n=0}^{\infty} V_n^{(+)} \hat{Q}^n \right) \\ &= \sum_{m=1}^M V_m^{(-)} \hat{Q}^{(M-m)} + \sum_{n=0}^{\infty} V_n^{(+)} \hat{Q}^{(M+n)} \\ &= \sum_{m=1}^M V_m^{(-)} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^{(M-m)} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} + \sum_{n=0}^{\infty} V_n^{(+)} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^{(M+n)} e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \\ &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^M \left[ \sum_{m=1}^M V_m^{(-)} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^{-m} + \sum_{n=0}^{\infty} V_n^{(+)} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^n \right] e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \\ &= \hat{Q}^M e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} V \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}}. \end{aligned}$$

Multiplicando ambos os membros da relação acima pelo inverso  $\hat{Q}^{-M}$  do operador  $\hat{Q}^M$ , obtemos a identidade (C.11).

---

<sup>2</sup>Nota que se a soma no primeiro termo de (C.10) fosse até  $\infty$ , a demonstração de (C.11) não seria possível uma vez que, conforme veremos, teríamos que fazer uso de um objeto sem sentido como o operador inverso que, neste caso, seria dado por  $\hat{Q}^{-\infty}$ .

Substituindo (C.2) em (3.27) e usando as identidades (C.6) e (C.11), temos

$$\begin{aligned}
E \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) &= \left( \frac{1}{2M} \hat{P}^2 + V(\hat{Q}) \right) \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) \\
&= \frac{1}{2M} \hat{P}^2 \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) + V(\hat{Q}) \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) \\
&= \frac{1}{2M} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} V \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) e^{\frac{2ipq}{\hbar}} \left( e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) \\
&= \frac{1}{2M} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) + e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} V \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \left( e^{\frac{2ipq}{\hbar}} e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi \right) \\
e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} E \phi &= e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \left[ \frac{1}{2M} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + V \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \phi
\end{aligned}$$

Como  $e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \neq 0$ , podemos cancelar os termos exponenciais na expressão acima,

$$E \phi(q, p) = \left[ \frac{1}{2M} \left( -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + V \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \phi(q, p). \quad (\text{C.12})$$

Fazendo uma mudança de variável na equação (C.12)

$$\eta := \left( 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right), \quad \text{com } \phi(q, p) \equiv \phi(\eta, p), \quad (\text{C.13})$$

e usando

$$\frac{\partial}{\partial q} \phi(\eta, p) = \left( \frac{\partial \eta}{\partial q} \right) \frac{\partial}{\partial \eta} \phi(\eta, p) = 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \phi(\eta, p),$$

podemos reescrever a equação acima na seguinte forma:

$$\hat{H}(\eta) \phi(\eta, p) = E \phi(\eta, p), \quad (\text{C.14})$$

que corresponde a equação (C.4), onde definimos o operador Hamiltoniano

$$\hat{H}(\eta) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V(\eta), \quad (\text{C.15})$$

e o operador momentum

$$\hat{p}_\eta := -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \equiv -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}. \quad (\text{C.16})$$

É importante observar que o operador acima assim definido satisfaz as relações fundamentais de comutadores entre  $\eta$  e  $\hat{p}_\eta$ , ou seja

$$[\eta, \hat{p}_\eta] = i\hbar, \quad [\hat{p}_\eta, \hat{p}_{\eta'}] = [\eta, \eta'] = 0. \quad (\text{C.17})$$

A solução final da equação de Schrödinger independente do tempo nas coordenadas  $(q, p)$ , é obtida usando a solução da equação (C.14) em (C.2), ou seja

$$\psi(q, p) = e^{-\frac{2ipq}{\hbar}} \phi(\eta, p). \quad (\text{C.18})$$



# Referências

- [1] G. Galilei, *O Ensaaiador*, Abril, São Paulo, 1973. (Coleção Os Pensadores vol. XII).
- [2] \_\_\_\_\_, *A Mensagem das Estrelas*. Tradução de C. Z. Camenietzki, Museu de Astronomia e Ciências Afins, Rio de Janeiro, 1987.
- [3] H. A. Lorentz, A. Einstein, H. Minkowski, *O Princípio da Relatividade*. Tradução do alemão por B. G. Taubner, F. Calouste Gulbenkian, vol. I, Lisboa, 1958.
- [4] I. Newton, *Principia*, Livro I. Traduções de T. Ricci *et al.*, Edusp, São Paulo, 2012.
- [5] \_\_\_\_\_, *Principia*, Livros II e III. Tradução de A. K. T. Assis, Edusp, São Paulo, 2012.
- [6] L. Landau, E. Lifshitz, *Mecânica*. Tradução do Russo por E. da Silva Braga, Mir, Moscou, 1978.
- [7] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, Canadá, 1987.
- [8] J. W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, Scribner's sons, New York, 1902.
- [9] P. A. Schulz, Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 509.
- [10] A. Einstein, *O Ano Miraculoso de Einstein - Cinco Artigos que Mudaram a Face da Física*, UFRJ, Rio de Janeiro, 2005.
- [11] H. M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica*, vol. 2, Edgard Blücher, São Paulo, 2002.
- [12] G. Gamow, *Thirty Years That Shook Physics - The Story of Quantum Theory*, Dover, New York, 1985.

- [13] A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica*, Edusp, São Paulo, 2003.
- [14] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, O. University Press, Oxford, 1935, 1958.
- [15] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Translated from the German by R. T. Beyer, P. University Press, New Jersey, 1983.
- [16] R. P. Feynman, *Revs. Mod. Phys.* 20, 367 (1948).
- [17] E. Wigner, *Phys. Rev.* 40 (1932) 749.
- [18] P. A. M. Dirac, *Rev. Mod. Phys.* 17 (1945) 195.
- [19] J. E. Harriman, *J. Chem. Phys.* 100 (1994) 3651.
- [20] G. Torres-Vega, J. H. Frederick, *J. Chem. Phys.* 93 (1990) 8862.
- [21] \_\_\_\_\_, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 3103.
- [22] Qian-Shu Li, Xu-Guang Hu, *Phys. Scrip.* 51 (1995) 417.
- [23] T. Takabayasi, *Progress. Theor. Phys.* 11 (1954) 341.
- [24] K. İmre *et al.*, *J. Math. Phys.* 8 (1967) 1097.
- [25] G. A. Baker, *Phys. Rev.* 109 (1958) 2198.
- [26] H. J. Groenewold, *Physica* 12 (1946) 405.
- [27] Y. S. Kim, M. E. Noz, *Phase Space Picture and Quantum Mechanics - Group Theoretical Approach*, W. Scientific, London, 1991.
- [28] S. W. McDonald, *Phys. Rep.* 158 (1988) 337.
- [29] K. Takahashi, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 98 (1989) 109.
- [30] L. Cohen, *J. Math. Phys.* 7 (1966) 781.
- [31] R. J. Glauber, *Phys. Rev. Lett.* 10 (1963) 84.

- [32] N.L. Balazs, B.K. Jennings, Rev. Sec. Phys. Latt. 104 (1984) 347.
- [33] K. Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Japan 22 (1940) 264.
- [34] J. E. Harriman, J. Chem. Phys. 88 (1988) 6399.
- [35] J. E. Moyal, Proc. Camb. Phil. Soc. 45 (1949) 99.
- [36] P. Henselder, A. C. Hirshfeld, T. Spornat, Ann. Phys. 317 (2005) 107.
- [37] D. B. Fairlie, arXiv: hep-th/9806198v1 (1998).
- [38] \_\_\_\_\_, Proc. Camb. Phil. Soc. 60 (1964) 581.
- [39] T. L. Curtright, T. Uematsu, C. K. Zachos, arXiv: hep-th/0011137v2 (2001).
- [40] T. L. Curtright, D. B. Fairlie, C.K. Zachos, arXiv: hep-th/9711183v3 (1998).
- [41] T. L. Curtright, C. K. Zachos, arXiv: hep-th/0105226v3 (2001).
- [42] \_\_\_\_\_, arXiv: hep-th/9810164v1 (1998).
- [43] \_\_\_\_\_, arXiv: 1104.5269v2 [physics.hist-ph] (2011).
- [44] C. K. Zachos, arXiv: hep-th/011014v3 (2002).
- [45] \_\_\_\_\_, arXiv: hep-th/9912238v2 (2000).
- [46] B. Leaf, J. Math. Phys. 9 (1968) 65.
- [47] I. Stewart, *Uma História da Simetria na Matemática*. Tradução de C. Carina, Jorge Zahar, Rio de Janeiro, 2012.
- [48] M. D. Oliveira, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, and J. D. M. Vianna, Ann. Phys. 312 (2004) 492.
- [49] M. D. de Oliveira, *Mecânica quântica no espaço de fase via representação do grupo de galilei*, Dissertação de Mestrado, IF-UFBA, Salvador, (2002).

- [50] M. Livio, *A Equação que Ninguém Conseguia Resolver - Como um Gênio da Matemática Descobriu a Linguagem da Simetria*. Tradução de J. de Paula Assis, Record, Rio de Janeiro, 2011.
- [51] E. Wigner, *Ann. Math.* 40 (1939) 149.
- [52] \_\_\_\_\_, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*. Translated from the German by J. J. Griffin, Academic Press Inc, New York, 1959.
- [53] S. Coleman, J. Mandula, *Phys. Rev.* 159 (1967) 115.
- [54] J. Wess and B. Zumino, *Nucl. Phys.* B70 (1974) 39.
- [55] S. Ferrara, B. Zumino and J. Wess, *Phys. Lett.* 51B (1974) 239.
- [56] H. Nicolai, *J. Phys. A: Math. Gen.* 9 (1976) 1497.
- [57] E. Witten, *Nucl. Phys.* B185 (1981) 513.
- [58] B. F. Schutz, *Geometrical Methods of Mathematical Physics*, Cambridge University Press, London, 1980.
- [59] T. Frankel, *The Geometry of Physics - An Introduction*, Cambridge University Press, New York, 1997.
- [60] M. Schönberg, *IL Nuovo Cimento* 9(12) (1952) 1139.
- [61] \_\_\_\_\_, *IL Nuovo Cimento* 10(4) (1953) 419.
- [62] \_\_\_\_\_, *IL Nuovo Cimento* 10(6) (1953) 698.
- [63] H. Umezawa, *Advanced Field Theory - Micro, Macro, and Thermal Physics*, American Institute of Physics, New York, 1993.
- [64] H. Umezawa, H. Matsumoto e M. Tachiki *Thermofield Dynamics and Condensed States*, North Holland, New York, 1982.

- [65] R. Eisberg, R. Resnick, *Física Quântica - Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Tradução do Inglês por P. C. Ribeiro, E. F. da Silveira, Elsevier, Rio de Janeiro, 1979.
- [66] N. Bohr, *Sobre a Constituição de Átomos e Moléculas*. Tradução do inglês por E. Namorado, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1963. (Coleção Clássicos da Ciência, vol. 2).
- [67] L. de Broglie, *Nature* 112 (1923) 540.
- [68] W. Heisenberg, *Z. Phys.* 33 (1925) 879.
- [69] E. Schrödinger, *Ann. Phys.* (4) 79 (1925a) 361.
- [70] \_\_\_\_\_, *Ann. Phys.* (4) 79 (1926) 734.
- [71] T. M. Apostol, *Cálculo com funções de várias variáveis e Álgebra Linear, com Aplicações às Equações Diferenciais e às Probabilidades*. Tradução do inglês por J. F. Marques, vol. 2, Reverté, Barcelona, 1999.
- [72] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, New Jersey, 1990.
- [73] A. Messiah, *Quantum Mechanics*. Translated from the French by G. M. Temmer, vol. 1, J. Wiley & Sons, New York, 1966.
- [74] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*. Translated from the French by S. R. Hemley, N. Ostrowsky, D. Ostrowsky, vol. 1, Wiley-Interscience, Canada, 2005.
- [75] D. H. McIntyre, *Quantum Mechanics*, Pearson, San Francisco, 2012.
- [76] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, New York, 1994.
- [77] E. Schrödinger, *Ann. Phys.* 79 (1925b) 489.
- [78] \_\_\_\_\_, *Ann. Phys.* 80 (1926a) 437.
- [79] \_\_\_\_\_, *Ann. Phys.* 81 (1926b) 109.
- [80] M. Born, *Z. Physik* 38 (1926) 803.

- [81] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc. 26 (1930) 376.
- [82] L. H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc. 23 (1926) 542.
- [83] Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. 24 (1927) 111.
- [84] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, Rev. Sec. Phys. Lett. 106 (1984) 121.
- [85] J. Nearing, *Mathematical Tools for Physics*, Nearing, Miami, 2003.
- [86] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover, New York, 1972.
- [87] R. G. G. Amorim, *Formulação de Teorias de Campos via estruturas simpléticas e o produto de Weyl*, Dissertação de Mestrado, IF-UnB, Brasília, (2006).
- [88] J. J. Wlodarz, J. Chem. Phys. 100 (1994) 7476.
- [89] R. L. Rodrigues, arXiv: hep-th/0205017v6 (2002).
- [90] L. E. Gendenshtein, I. V. Krive, Usp. Fiz. Nauk 146, (1985) 553.
- [91] R. W. Haymaker, A. R. P. Rau, Am. J. Phys. 54 (1986) 928.
- [92] C. V. Sukumar, J. Phys. A: Math. Gen. 18 (1985) 2917.
- [93] G. Junker, S. Matthiesen, A. Inomata, arXiv: hep-th/9510230v1 (1995).
- [94] R. L. Rodrigues, Rev. Bras. Ens. Fís. 19 (1997) 374.
- [95] D. J. Fernandes, arXiv: 0910.0192v1 [quant-ph] (2009).
- [96] B. K. Bagchi, *Supersymmetry in Classical Mechanics*, Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics, CHAPMAN & HALL/CRC, (2001).
- [97] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics* W. Scientific, Singapore, 2001.
- [98] E. D. Filho, *Supersimetria Aplicada à Mecânica Quântica*, Unesp, São Paulo, 2009.

- [99] F. Ravndal *Elementary Supersymmetry*. CERN School of Physics CERN 85-11, (1985) 300.
- [100] E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. A 46 (1940) 9.
- [101] \_\_\_\_\_, Proc. Roy. Irish Acad. A 47 (1941) 53.
- [102] \_\_\_\_\_, Proc. Roy. Irish Acad. A 46 (1941) 183.
- [103] L. Infeld, T. E. Hull, Rev. Mod. Phys. 23 (1951) 21.
- [104] B. Mielnik, J. Math. Phys. 25 (1984) 3387.
- [105] C. V. Sukumar, J. Phys. A: Math. Gen. 18 (1985) L57.
- [106] A. Zee, *Quantum Field Theory in a Nutshell*, Princeton Univ. Press, New Jersey, 2010.
- [107] T. L. Curtright, D. B. Fairlie, C. K. Zachos, W. Scientific. 34 (2011) 1
- [108] G. B. Arfken, H. J. Weber, *Física Matemática*. Tradução da 6<sup>a</sup> ed. por A. S. Marques, Elsevier, Rio de Janeiro, 2007.
- [109] R. G. G. Amorim, M. C. B. Fernandes, A. R. Queiroz, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, Rev. Bras. Ens. Fís. 35 (2013) 3604.
- [110] H. S. Snyder, Phys. Rev. 71 (1947) 38.
- [111] M. R. Douglas, N. A. Nekrasov, Rev. Mod. Phys. 73 (2001) 977.
- [112] A. Connes, arXiv: math/0011193v1 [math.QA] (2000).
- [113] S. Dulat, K. Li, J. Wang, Theor. and Math. Phys. 167 (2011) 628.
- [114] Ö. F. Dayi, L. T. Kelleyane, arXiv: hep-th/0202062v1 (2002).
- [115] R. G. G. Amorim, *Geometria não-comutativa e teoria de campos simplética*, Tese de Doutorado, IF-UnB, (2009).
- [116] L. Landau, E. Lifshitz, *Mecânica Quântica - Teoria não Relativística*. Tradução do Russo por J. N. T. Rabelo, vol. 2, Mir, Moscou, 1985b.

- [117] J. O. Rosas-Ortiz, arXiv: quant-ph/9806020v3 (1998).
- [118] Qian-Shu Li, L. Lu, Chem. Phys. Lett. 336 (2001) 118.
- [119] R. G. G. Amorim, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, *Schrödinger equation in phase-space for fermion many-body systems*, UnB. ( A ser publicado).
- [120] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Tokyo, 1968.
- [121] N. R. Kestner, O. Sinanoglu, Phys. Rev. 128 (1962) 2687.
- [122] D. P. O'Neill, P. M. W. Gill, Phys. Rev. A 68 (2003) 022505-1.
- [123] C. E. Wulfman, J. Chem. Phys. 33 (1960) 1567.
- [124] J. C. B. de Araujo, G. R. P. Borges, E. D. Filho, Rev. Bras. Ens. Fís. 28 (2006) 41.
- [125] E. D. Filho, R. M. Ricotta, Tend. Apl. Comput. 6 (2005) 73.
- [126] \_\_\_\_\_, arXiv: hep-th/0111023v1 (2001).
- [127] R. L. Rodrigues, V. B. Bezerra and A. N. Vaidya, arXiv: hep-th/0201208v1 (2002).
- [128] R. L. Rodrigues and A. N. Vaidya, arXiv: hep-th/0308189v1 (2003).
- [129] V. P. Berezovoj and A. I. Pashnev, Class. Quantum Grav. 8 (1991) 2141.
- [130] R. G. G. Amorim, F. C. Khanna, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, Phys. A 388 (2009) 3771.
- [131] R. G. G. Amorim, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, arXiv: hep-th/0611081v1 (2006).
- [132] B. Zwiebach, *A First Course in String Theory*, Cambridge, London, 2004.
- [133] T. F. Jordan, *Linear Operators for Quantum Mechanics*, Dover, New York, 1997.
- [134] \_\_\_\_\_, Am. Jour. Phys. 43 (1975) 1089.
- [135] V. Bargmann, J. Math. Phys. 5 (1964) 862.