



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**KARLA PEDROZA OLIVEIRA**

**FUNDAMENTOS DA TEORIA DE ESPALHAMENTO  
NA MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA**

**Salvador**

**2022**



**KARLA PEDROZA OLIVEIRA**

**FUNDAMENTOS DA TEORIA DE ESPALHAMENTO  
NA MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA**

**Dissertação de Mestrado**

**Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.**

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

**Coorientadora: Profa. Dra. Maria das Graças R. Martins**

**Salvador**

**2022**

Karla Pedroza Oliveira

Fundamentos da Teoria de Espalhamento na Mecânica Quântica Simplética/ Karla Pedroza Oliveira. – Salvador, 2022-  
79p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. José David Manguiera Viana

Coorientadora: Profa. Dra. Maria das Graças R. Martins

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Bahia  
Instituto de Física  
Programa de Pós-Graduação em Física, 2022.

1. Mecânica Quântica Simplética. 2. Espalhamento. 3. Função de Wigner. I. Orientador. II. Universidade Federal da Bahia. III. Instituto de Física. IV. Fundamentos da Teoria de Espalhamento na Mecânica Quântica Simplética

**KARLA PEDROZA OLIVEIRA**

**FUNDAMENTOS DA TEORIA DE ESPALHAMENTO  
NA MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

Trabalho aprovado. Salvador, 23 de agosto de 2022:

**Banca Examinadora**

---

**Prof. Dr. José David Mangueira Viana**  
Orientador

---

**Prof. Dr. Ademir Eugenio de Santana**  
Examinador externo - UnB

---

**Prof. Dr. Antônio Ferreira da Silva**  
Examinador interno - UFBA

**Salvador**  
**2022**



*Em memória daquele que me  
despertou para Matemática e Ciências,  
Francisco de Assis Oliveira, meu pai.*





# Agradecimentos

Começo meus agradecimentos pela minha professora de Ciências da oitava série, Marta. Ainda me lembro dos detalhes da nossa primeira aula sobre átomos e do quanto eu fiquei fascinada em saber que existem coisas muito, muito, muito menores que um grão de areia, e essas coisas são responsáveis por formar toda a matéria que conhecemos. Era tão abstrato e, ao mesmo tempo, fazia tanto sentido que, a partir daquele dia, eu decidi que me dedicaria a entender mais sobre esse assunto. Pode-se dizer que a minha história com a Física Atômica e Molecular, que me trouxe até este trabalho, começou naquele dia.

Mas antes de conhecer a Professora Marta, os átomos ou mesmo de saber o que era a Física, tinha alguém que já me incentivava a gostar de Matemática e Ciências: meu pai. Durante as longas viagens de carro que fazíamos nas férias, ele jamais dizia quanto tempo faltava para chegarmos ao nosso destino. Invés disso, ele me mostrava o velocímetro e dizia para eu prestar atenção nas placas e fazer um cálculo estimado. Ele costumava me levar para brincar no pátio do aeroporto e foi em uma dessas ocasiões que me ensinou a calcular a área de um terreno, muito antes da professora falar sobre o assunto na sala de aula. Empolgado ao descobrir seu dom didático, ele também me ensinou a fazer cálculos de volume e porcentagem, sem escrever uma equação. Meu pai me dizia que a matemática não precisava ser complicada e que quase tudo poderia ser resolvido sem papel, confiando apenas na lógica do pensamento. Infelizmente, não tive tempo de contar a ele que eu descobri que a matemática é muito mais poderosa do que podíamos imaginar, sendo capaz de nos levar para mundos que a nossa intuição tridimensional não consegue reproduzir em mente.

Imersos nesse universo científico e matemático que eu só conheci depois de entrar na UFBA, direciono meus agradecimentos aos meus orientadores, Professor J. David Vianna e Professora Maria das Graças Martins, e à minha tutora de Iniciação Científica, Andreia Simões. Em 2015, eles aceitaram o desafio de orientar uma estudante que sequer tinha cursado Física 3 e me ensinaram muito mais do que consta nos relatórios que preenchemos ao longo desses anos de vínculo de pesquisa. Além de muita Física e metodologia do trabalho científico, com eles eu aprendi a ter autoconfiança e me inspirei para ser a profissional que me tornei, preocupada em retornar à sociedade, que sustenta a atividade científica nesse país através dos impostos, aquilo que construímos na universidade.

Agradeço também a outros professores com quem tive o prazer de aprender durante a graduação e a pós-graduação na Universidade Federal da Bahia, em especial: Professora Flora, Professor Micael, Professor Newton, Professor Garcia e Professor Não, Gildemar! E também aos meus professores do Ensino Médio, que tenho a honra de ter como colegas

atualmente: Professor Jocemar, Professor Davi Freire, Professor Geraldo e Professor Léo. Eles proporcionaram as aulas que mais me marcaram e, junto a tantos outros, constituíram a base que eu precisei para desenvolver este trabalho.

Não se aprende só com os professores e eu não poderia deixar de fora desses agradecimentos aqueles com quem eu aprendi falando de Física no restaurante universitário, descansando no sofá do diretório acadêmico entre uma aula e outra e até na mesa do barzinho - meus colegas, que se tornaram grandes amigos ao longo desses anos: Sil, minha companhia de estudos desde o ensino médio, com quem ainda compartilho diversos momentos; Lucas, meu primo e mentor na minha chegada à capital, com quem eu aprendi a viver na selva de pedra que é Salvador; Thives, o melhor parceiro de laboratório que eu poderia ter; Tales, mesmo com o dom de me irritar ganhou espaço no meu coração; João, sempre presente nas aventuras da turma, fossem elas boas ou ruins; Carol, me largou para ser a única vítima de Tales ainda no segundo semestre, mas eu já perdoei; Isis, chegou depois, mas eu sei que vai ficar para sempre; Mena, Luan, Ítalo e Amandinha, os veteranos que me receberam com tanto carinho e me fizeram querer ficar; e aquele que passou a ser muito mais que um amigo, se tornando meu maior companheiro, na Física e na vida, Pedro Davi.

Enquanto eu descobria um mundo de oportunidades na capital, o meu maior tesouro me aguardava em Jequié e trabalhava dobrado para que eu tivesse a oportunidade de estudar: minha flor, minha Margarida! A ela eu devo minha vida, minha força e razão para jamais desistir ou desacreditar que sou capaz. Não há palavras no mundo que sejam capazes de expressar minha gratidão a você, mãe.

Por fim, agradeço àqueles que me apoiam em todos os meus projetos e estão comigo há tanto tempo que já são parte de mim: meu irmão, Marcos; minha cunhada, Thalisse; minha segunda mãe, dona Val; meu padrasto, Pablo; meus tios, Zé e Fabrina; meus primos, Tácio e Vitor; e os melhores amigos que alguém pode ter: Ingrid, Pabline, Amanda, Thauan, Sandi, Gabi, Bia, Vivian, Kaena, Léo, Luinho e toda a equipe Feras no Pedal. Obrigada por tudo!

# Resumo

Neste trabalho apresentamos uma construção da teoria de espalhamento baseada em Propagadores no Espaço de Fase usando o formalismo da Mecânica Quântica Simplética (MQS). Inicialmente, a teoria de espalhamento é revisitada utilizando a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica usual, e as expressões da seção de choque com base nessas teorias são desenvolvidas. Na sequência, a descrição da Mecânica Quântica no Espaço de Fase como desenvolvida por Wigner, Weyl e Moyal é apresentada para obter a expressão da seção de choque no Espaço de Fase em termos da função de Wigner; a Mecânica Quântica Simplética é desenvolvida e aplicada ao oscilador harmônico simples como forma de comparar seu resultado com o desenvolvimento de Wigner e ter os elementos básicos da MQS para introduzir os propagadores na teoria. Introduzido o Propagador no Espaço de Fase, usando a MQS, desenvolvemos a Equação de Lippmann-Schwinger no Espaço de Fase e obtivemos soluções para essa equação nos casos unidimensional e tridimensional assintótico. Com a finalidade de testar o desenvolvimento construído, aplicamos os resultados ao problema de uma partícula espalhada por um potencial delta de Dirac unidimensional e mostramos que a seção de choque calculada nessa nova formulação concorda com a obtida via Mecânica Quântica usual.

**Palavras-chave:** Espalhamento; Equação de Lippmann-Schwinger; Seção de Choque; Mecânica Quântica Simplética; Função de Wigner.



# Abstract

In this work we present a construction of the scattering theory based on Propagators in Phase Space using the Symplectic Quantum Mechanics (SQM) formalism. Initially, the scattering theory is revisited using Classical Mechanics and the usual Quantum Mechanics and cross section expressions based on these theories are developed. Next, the description of Quantum Mechanics in Phase Space as developed by Wigner, Weyl and Moyal is presented to obtain the expression of the cross section in Phase Space in terms of the Wigner function; Symplectic Quantum Mechanics is developed and applied to the simple harmonic oscillator as a way of comparing its result with Wigner's development and having the basic elements of SQM to introduce the propagators in the theory. Introduced the Propagator in Phase Space, using the SQM, we developed the Lippmann-Schwinger Equation in Phase Space and obtained solutions for this equation in the one-dimensional and three-dimensional asymptotic cases. In order to test the constructed development, we apply the results to the problem of a particle scattered by a one-dimensional Dirac delta potential and show that the cross section calculated in this new formulation agrees with the one obtained via the usual Quantum Mechanics.

**Keywords:** Scattering; Lippmann-Schwinger Equation; Scattering Cross Section; Symplectic Quantum Mechanics; Wigner Function.



## Lista de ilustrações

Figura 1 – Espalhamento de Rutherford na Mecânica Clássica. . . . .	11
Figura 2 – Representação gráfica do processo de espalhamento. . . . .	26
Figura 3 – Representação esquemática do processo de espalhamento. . . . .	29
Figura 4 – Gráfico de $\sigma$ em função de $\lambda$ , considerando $\hbar = 1$ e $p_0 = 1$ . . . . .	66
Figura 5 – Gráfico de $\sigma$ em função de $p_0$ , considerando $\hbar = 1$ e $\lambda = 1$ . . . . .	66
Figura 6 – Potencial de espalhamento de alcance finito. . . . .	68





# Lista de abreviaturas e siglas

MQ	Mecânica Quântica
MC	Mecânica Clássica
MQS	Mecânica Quântica Simplética
ELS	Equação de Lippmann-Schwinger
SCD	Seção de Choque Diferencial



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Elementos da Mecânica Clássica</b>	<b>5</b>
2.1	Formulações da Mecânica Clássica	5
2.1.1	Mecânica Newtoniana	5
2.1.2	Mecânica Lagrangiana	7
2.1.3	Mecânica Hamiltoniana	8
2.1.3.1	Parênteses de Poisson	9
2.1.3.2	Espaço de Fase e Equação de Liouville	10
2.2	O problema de Espalhamento	10
<b>3</b>	<b>Elementos da Mecânica Quântica Usual</b>	<b>17</b>
3.1	Formulações da Mecânica Quântica	17
3.1.1	Formulação usual	17
3.1.1.1	Características dos Operadores	20
3.1.1.2	Equação de Schrödinger	21
3.1.1.3	Densidade de corrente de probabilidade	21
3.1.2	Representação dos operadores $\hat{q}$ e $\hat{p}$ na MQ usual	22
3.1.3	Conexão entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica	22
3.1.3.1	Álgebra de Lie e a Mecânica Clássica	22
3.2	O problema de Espalhamento	25
3.2.1	Órbitas efetivas e assintóticas	25
3.2.2	Operadores de Möller e Operador de Espalhamento	27
3.2.3	Seção de choque	29
3.2.4	Equação de Lippmann-Schwinger	31
<b>4</b>	<b>Elementos da Mecânica Quântica no Espaço de Fase</b>	<b>33</b>
4.1	Elementos da Formulação de Wigner	33
4.1.1	Propriedades do Produto Estrela	35
4.1.2	Função de Wigner e suas propriedades	36
4.1.3	Observáveis na formulação de Wigner	37
4.1.4	A evolução temporal da função de Wigner	37
4.1.5	Oscilador Harmônico Simples Unidimensional na Formulação de Wigner	39
4.1.6	Seção de Choque e a Função de Wigner	40
<b>5</b>	<b>Elementos da Mecânica Quântica Simplética</b>	<b>43</b>
5.1	Elementos da MQS	43
5.2	Observáveis na formulação da MQS	46
5.3	Evolução temporal da função de estado na MQS	47

5.4	Conexão com a função de Wigner . . . . .	48
5.5	Autofunções de $q^\star$ e $p^\star$ . . . . .	49
5.6	O Oscilador Harmônico na MQS . . . . .	51
5.6.1	Formulação algébrica . . . . .	52
5.6.2	Função de Wigner pela MQS . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Propagadores na Mecânica Quântica Simplética . . . . .</b>	<b>55</b>
6.1	Funções de Green na MQS . . . . .	55
6.2	Evolução Adiabática . . . . .	57
6.3	Equação de Lippmann-Schwinger (ELS) no Espaço de Fase . . . . .	58
6.4	Aplicações . . . . .	59
6.4.1	Propagador uni e tri dimensional no Espaço de Fase . . . . .	59
6.4.1.1	Caso unidimensional . . . . .	60
6.4.1.2	Caso tridimensional . . . . .	62
6.4.2	Expansão de Born . . . . .	62
6.4.3	Espalhamento de uma partícula por um potencial delta de Dirac unidimensional . . . . .	63
6.4.3.1	O potencial delta de Dirac unidimensional na aproximação de Born . . . . .	64
6.4.3.2	Seção de Choque . . . . .	65
6.4.4	ELS assintótica no Espaço de Fase . . . . .	67
<b>7</b>	<b>Conclusões e perspectivas . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>8</b>	<b>Apêndice A: Resolução de Equações Diferenciais pelo método das Funções de Green . . . . .</b>	<b>73</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>75</b>

# 1 Introdução

O estudo de processos de espalhamento desperta o interesse de cientistas de diversas áreas do conhecimento, além da Física e da Química, pois a interpretação de dados de experiências de colisão permite compreender fenômenos importantes para a Biologia, Medicina, Meio Ambiente, entre outras áreas. Na Química, por exemplo, dados de Seção de Choque Diferencial (SCD) são utilizados na identificação de moléculas isômeras [1]; na Biologia e na Medicina, o conhecimento de como partículas interagem com moléculas de DNA é importante para compreender de que forma processos de espalhamento podem ser danosos para organismos, ou ainda, como seu entendimento pode ajudar em tratamentos genéticos [2]; na Física, a colisão de partículas é fundamental para compreensão do mundo subatômico e dos constituintes básicos da matéria [3,4]. Em todas as aplicações citadas, a Mecânica Clássica (MC) não é a teoria adequada para o tratamento do fenômeno, pois estamos abordando episódios que ocorrem em escala atômica ou subatômica e, por isso, devem ser descritos com base na Mecânica Quântica (MQ).

Em geral, os textos introdutórios sobre Teoria Quântica de Espalhamento são desenvolvidos com base no formalismo da MQ construído por Schrödinger, Heisenberg, Dirac e von Neumann, no qual o estado de um sistema é determinado por meio de funções da posição ou do momento ou, de forma mais abstrata, por vetores no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , e os observáveis são determinados a partir de operadores lineares que atuam nas funções de estado, representação matricial desses vetores aplicada aos vetores de estado. Independentemente do formalismo utilizado na descrição de um fenômeno quântico, é necessário garantir a obediência ao Princípio da Incerteza de Heisenberg [5,6] que afirma que, para alguns pares de observáveis como posição e momento, a precisão no conhecimento de uma das grandezas implica em imprecisão na determinação da outra. Por esse motivo, construir um formalismo da MQ sobre o espaço de fase, que trabalha com pares de posição e momento, não é uma tarefa imediata, e obter uma formulação desse tipo tornou-se objeto de estudo de diversos pesquisadores por ser o espaço de fase a variedade natural na qual uma teoria cinética é escrita.

Uma proposta para a MQ no espaço de fase surgiu nos trabalhos de Wigner, em 1932, motivada pelo problema de efetuar uma correção para a estatística quântica e assim desenvolver equações de transporte para super-fluidos [7] e vem sendo utilizada em vários ramos da física, por exemplo, em Informação Quântica [8], Óptica Quântica [9], Física Nuclear [10], Física Atômica [11,12], Matéria Condensada [13,14] e outras áreas como citado por Amorim et al [15]. Nessa formulação, o estado estacionário de um sistema é determinado a partir de uma função  $f_W = f_W(q, p)$ , em que  $q$  e  $p$  são coordenadas de um espaço de fase  $\Gamma$ . Essa função, conhecida como *função de Wigner*, obedece à equação de

Liouville-von Neumann e é obtida aplicando a transformação de Weyl-Wigner na matriz densidade,  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  [16].

Embora seja real, a função de Wigner pode assumir valores negativos e por isso é identificada como uma *quase-distribuição de probabilidade*. No entanto, as densidades de probabilidade associadas à posição e ao momento podem ser determinadas através de  $f_W(q, p)$  usando, respectivamente, as integrais  $\rho(q) = \int dp f_W(q, p)$  e  $\rho(p) = \int dq f_W(q, p)$ .

Na formulação que tem  $f_W(q, p)$  como protagonista os observáveis físicos, antes representados por operadores no espaço de Hilbert, passam a ser determinados a partir de funções no espaço de fase. Isto é, para cada operador  $\hat{A}$  em  $\mathcal{H}$ , tem-se uma função  $a_W(q, p)$  correspondente em  $\Gamma$ , de modo que o produto de dois operadores  $AB$  em  $\mathcal{H}$  não se resume ao produto de duas funções  $a_W(q, p)b_W(q, p)$  em  $\Gamma$ , mas sim a uma função mais complexa, que envolve um produto estrela  $\star$ , isto é,  $\Omega_W : AB \longrightarrow a_W \star b_W$ , em que:

$$\star = \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} - \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} \right) \right].$$

Para obter a função  $f_W(q, p)$  a partir do formalismo de Wigner é necessário aplicar a transformada de Weyl-Wigner à função obtida via MQ usual ou, a partir da transformada de Weyl-Wigner do operador hamiltoniano, utilizar uma equação equivalente à de Liouville-von Neumann [17]. Esse procedimento torna-se problemático ao tentar estender a ideia de função de Wigner a outras situações, como sistemas quânticos não lineares ou sistemas quânticos relativísticos. A fim de contornar esse problema, Oliveira et al. [18, 19] desenvolveram uma formulação da MQ baseada na construção de um espaço de Hilbert simplético  $\mathcal{H}_\Gamma$ , no qual é resgatado uma álgebra de Lie do grupo de Galilei. Nessa formulação, os operadores que se transformam como posição e momento são representados, respectivamente, por:

$$\hat{Q} = q\star = \left( q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p \right),$$

$$\hat{P} = p\star = \left( p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right).$$

Esse formalismo, denominado Mecânica Quântica Simplética (MQS), é autocontido e tem como vantagem a obtenção da função de Wigner do sistema diretamente de uma equação de Schrödinger no espaço de fase. Nos últimos anos, a MQS foi aplicada a diversos sistemas físicos como o oscilador harmônico simples, o átomo de hidrogênio e o potencial de Yukawa [18, 20, 21] e permitiu a extensão da MQ no espaço de fase para o caso relativístico [22]. No presente trabalho, o objetivo é desenvolver os fundamentos de uma Teoria de Espalhamento nessa formulação, um domínio ainda não explorado na literatura.

---

Entre as vantagens de tratar o problema de espalhamento quântico no espaço de fase está a obtenção de uma teoria que recai de forma elegante na MC ao fazer o limite  $\hbar \rightarrow 0$ , uma vez que a equação de Liouville clássica é facilmente recuperada a partir da evolução temporal da função de Wigner [23]. Ao empregar esforços para elucidar os fundamentos da teoria de espalhamento via o formalismo original de Wigner, Remler e outros autores [24–26] perceberam relações entre a teoria de espalhamento no espaço de fase e a teoria clássica de transporte, o que possibilitou estender essa análise para tratar espalhamento inelástico de múltiplas partículas [27]. Dessa forma, obter expressões que traduzem a distribuição das partículas após a interação com o alvo em termos da função de Wigner pode ser uma boa alternativa para compreender processos complexos de espalhamento, devido à analogia com o caso clássico.

Ao longo dos próximos capítulos, construiremos os fundamentos para o desenvolvimento da teoria da Propagadores [5] no espaço de fase usando a MQS, a fim de obter funções ou distribuições que estejam relacionadas à amplitude de probabilidade de uma partícula, que ao sofrer a ação de um potencial, ser espalhada em uma determinada região. Para alcançar esse objetivo iniciaremos o estudo, no capítulo 2, revisitando os formalismos da Mecânica Clássica para compreender como o espalhamento é tratado nessa teoria. No capítulo 3, é feita uma breve revisão da MQ usual e da teoria de espalhamento nesse formalismo. No capítulo 4, apresenta-se a MQ no espaço de fase a partir do formalismo de Wigner e, no capítulo 5, mostra-se como a MQS é utilizada para obter funções de Wigner num formalismo autocontido. No sexto capítulo, o método das funções de Green é utilizado para obter, na MQS, a Equação de Lippmann-Schwinger [4], que compreende a equação de Schrödinger no espaço  $\mathcal{H}_\Gamma$  com a condição de contorno do problema de espalhamento. Aplicações como a obtenção da seção de choque, para o espalhamento de uma partícula por um potencial delta de Dirac unidimensional, são realizadas e seus resultados são comparados com as previsões feitas pela MQ usual.





## 2 Elementos da Mecânica Clássica

Neste capítulo faremos uma breve revisão da Mecânica Clássica, a fim de revisitar os formalismos que regem os movimentos no mundo macroscópico. Essa análise é indispensável para a compreensão das dificuldades encontradas na Física no final do século XIX e início do século XX, que culminaram no surgimento da Mecânica Quântica, cerne desse trabalho.

### 2.1 Formulações da Mecânica Clássica

A Mecânica é a área da Física que busca descrever a dinâmica de corpos e agregados de corpos. Embora as primeiras explicações para as causas dos movimentos tenham sido dadas ainda na Grécia Antiga, somente no século XVII a humanidade teve em suas mãos uma formulação capaz de descrever a movimentação dos corpos, oriunda dos trabalhos de grandes nomes da ciência, como Galileu Galilei e Isaac Newton [28]. Essa primeira formulação (Mecânica Newtoniana), no entanto, não apresentava equações muito amigáveis ao tentar solucionar, no espaço euclidiano, problemas que poderiam ter graus de liberdade eliminados se fossem resolvidos em um espaço de configurações não necessariamente constituído por coordenadas espaciais. A partir da introdução de coordenadas generalizadas e da inclusão de vínculos para simplificação das equações de movimento, nasce a Mecânica Lagrangiana [29, 30]. Nessa formulação, o protagonismo dado ao agente externo “força” na Mecânica Newtoniana dá lugar a grandezas associadas diretamente ao corpo cujo movimento deseja-se descrever: a energia cinética e a energia potencial. Veremos ainda nesse capítulo que as  $s$  equações de Lagrange (em que  $s$  refere-se ao número de graus de liberdade do sistema) podem ser substituídas por  $2s$  equações canônicas, conhecidas como equações de Hamilton. A resolução de problemas dinâmicos a partir da Mecânica Hamiltoniana não necessariamente apresenta um caminho mais cômodo em relação às equações de Lagrange; contudo, essa formulação nos apresenta uma base que pode ser estendida a outros campos, como a Mecânica Quântica [31]; por isso, nesse capítulo, será dada à Mecânica Hamiltoniana uma atenção especial.

#### 2.1.1 Mecânica Newtoniana

Apresentada na obra *Princípios Matemáticos da Filosofia Natural* em 1687, a Mecânica Newtoniana tem como objetivo descrever a movimentação dos corpos como efeito da interação entre eles e o mundo exterior. Para tal, deve-se determinar a localização do objeto para qualquer tempo, o que caracteriza sua trajetória. Amparada em três leis, essa formulação tem como ponto de partida a conservação do momento como estado natural

do corpo e sua variação como consequência das interações, evidenciando a presença do agente força.

Também conhecida como Lei da Inércia, a primeira lei associa a mudança de estado de movimento de um corpo à existência de uma força resultante não nula agindo sobre ele. Assim, uma partícula que está parada em relação a um dado referencial ou que desempenha um deslocamento com velocidade constante é dita “partícula livre” e seu movimento conservará essas qualidades contanto que as forças resultantes atuando sobre ela se anulem.

A segunda lei nos diz como a aplicação de uma força sobre um objeto modifica a sua velocidade. Tomando como momento da partícula o produto dos seus valores de massa e velocidade, Newton estabelece um dos principais postulados da sua teoria, cuja aplicação é poderosa o suficiente para descrever desde modelos semi-clássicos de átomos até a movimentação de corpos celestes:

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}. \quad (2.1)$$

A equação acima é também conhecida como Lei Fundamental da Dinâmica. Sendo a velocidade a derivada de primeira ordem da posição, temos que para obter a trajetória da partícula é necessário resolver uma equação diferencial de segunda ordem, ou seja, precisamos encontrar uma função que obedeça à relação dada e às condições iniciais do problema em questão.

A terceira lei institui que os corpos interagem a partir da criação de pares de forças de mesma magnitude e sentidos contrários, um agindo em cada corpo. Dessa forma, toda a Mecânica Newtoniana pode ser sintetizada em poucas linhas: as interações causam acelerações em pares de partículas na mesma direção e em sentidos opostos, na razão inversa de suas massas. No caso em que se tem um conjunto de partículas em processo de interação, todos os efeitos devem ser somados.

Em geral, se o problema não exigir que a partícula se movimente de um modo complexo e as coordenadas retangulares forem usadas para descrição do movimento, a obtenção da trajetória é relativamente simples. No entanto, ao estabelecer restrições ao movimento (por exemplo, uma partícula que se move na superfície de uma esfera), as equações da Dinâmica Newtoniana podem se tornar muito complicadas, uma vez que as equações de Newton resultariam na projeção do vetor força na superfície percorrida pela trajetória. Além dessa dificuldade de cálculo, pode surgir um outro problema: a Dinâmica Newtoniana exige que todas as forças envolvidas no fenômeno sejam conhecidas. Em muitos problemas, pode ocorrer que conheçamos as energias mas não necessariamente as forças. Assim, outros métodos para a descrição do movimento tem sido desenvolvidos e um grande passo nessa direção é dado com o Princípio de Hamilton, cuja aplicação resulta nas equações de Lagrange.

### 2.1.2 Mecânica Lagrangiana

Uma forma de desenvolver a Mecânica Lagrangiana é usando o Princípio de Hamilton [32, 33], que nos diz que entre todos os caminhos possíveis que um sistema dinâmico pode desenvolver entre dois pontos, em um dado intervalo de tempo, o escolhido será aquele que minimiza a integral temporal da diferença entre as energias cinética e potencial, ou seja:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = 0. \quad (2.2)$$

Para um sistema que se move em um campo conservativo, a energia potencial é uma função unicamente das coordenadas,  $U = U(x)$ . Considerando coordenadas retangulares fixas, a energia cinética será função apenas das velocidades,  $T = T(\dot{x})$ . Assim, definindo uma quantidade  $L = T - U$ , teremos que  $L = L(x, \dot{x})$ , reformulando o Princípio de Hamilton para:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt = 0. \quad (2.3)$$

A solução do problema de variação no qual pretende-se obter uma função unívoca  $x(t)$ , tal que a integral do funcional  $L$  seja um extremo, é dada pela equação de Euler [32], que nos leva às equações abaixo, conhecidas como equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0. \quad (2.4)$$

Nota-se que, por ser definida como a diferença entre as energias cinética e potencial, a lagrangiana  $L$  é uma função escalar; isso significa que  $L$  deve ser invariante em relação às transformações de coordenadas. Também são permitidas transformações que alteram  $L$  sem alterar as equações de movimento.

Podemos então escrever a lagrangiana em termos de coordenadas generalizadas e do parâmetro tempo, o que leva o Princípio de Hamilton à seguinte forma:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0, \quad (2.5)$$

e as equações de Euler-Lagrange tornam-se:

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = 0, \quad (2.6)$$

com  $j = 1, \dots, s$ .

Qualquer conjunto de quantidades  $(q_1, q_2, \dots, q_s)$  que descrevam o estado de um sistema pode ser considerado um conjunto de coordenadas generalizadas. Além disso, deve ser possível escrever esse conjunto em termos das coordenadas retangulares  $(x_{1,1}, \dots, x_{3,n})$  de forma que as transformações entre o espaço euclidiano (formado pelas coordenadas retangulares) e o espaço de configurações (formado pelas coordenadas generalizadas) não alterem as equações de movimento.

O uso de coordenadas generalizadas pode simplificar a solução de muitos problemas dinâmicos. Imaginemos o caso de um sistema de  $n$  partículas: para descrevê-las no espaço euclidiano, precisaríamos de  $n$  vetores de posição, o que implica em  $3n$  coordenadas. Algumas dessas coordenadas podem estar relacionadas caso o problema contenha vínculos. Se houver  $m$  restrições, o número de graus de liberdade cai para  $s = 3n - m$ ; dessa forma, podemos obter um conjunto de  $s$  coordenadas generalizadas apropriadas para a especificação do estado do sistema.

Nota-se também que, na formulação de Lagrange, não é necessário conhecer as forças para obter as equações de movimento. O protagonismo dessa grandeza vetorial é dado agora a grandezas escalares: energias cinética e potencial. Esse fato nos possibilita transitar de um espaço no qual as equações de movimento poderiam ser muito complicadas para outro em que esse problema pode ser solucionado de forma mais simples.

### 2.1.3 Mecânica Hamiltoniana

Na Dinâmica Hamiltoniana [33], as  $s$  equações de segunda ordem da Mecânica Lagrangiana podem ser substituídas por  $2s$  equações de primeira ordem, expressas em termos das quantidades de movimento generalizadas e suas derivadas temporais:

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \\ \dot{p}_i &= \frac{\partial L}{\partial q^i}. \end{aligned} \tag{2.7}$$

A função lagrangiana  $L$  é, em geral, dependente do conjunto de variáveis  $(q^i, \dot{q}^i, t)$ . As velocidades generalizadas,  $\dot{q}^i$ , podem ser expressas com dependência no conjunto  $(q^i, p_i, t)$ , uma vez que consideramos potenciais dependentes apenas de  $q^i$ . Dessa forma, é possível realizar uma mudança de variáveis  $(q^i, \dot{q}^i, t) \mapsto (q^i, p_i, t)$  e obter  $H = H(q^i, p_i, t)$ , denominado Hamiltoniano. Esse processo nos leva às equações canônicas de movimento, também conhecidas como equações de Hamilton:

$$\begin{aligned} \dot{q}^i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q^i}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Uma das vantagens da dinâmica de Hamilton está na maior liberdade na escolha das variáveis, uma vez que  $q^i$  e  $p_i$  são independentes, enquanto na dinâmica de Lagrange trabalhamos com  $q^i$  e  $\dot{q}^i$ , que possuem dependência direta. Além disso,  $q^i$  e  $p_i$  são quantidades canonicamente conjugadas e isso significa que, se  $H$  não é função explícita de  $q^i$ ,  $p_i$  é uma constante de movimento, isto é,  $\dot{p}_i = 0$ .

Denominamos cíclicas as coordenadas que não aparecem explicitamente nas expressões das energias cinética e potencial. Note que uma coordenada cíclica em  $H$  também

é cíclica em  $L$ ; contudo, devido à aparência simétrica das equações canônicas, somente na formulação hamiltoniana é possível utilizar essa característica para reduzir graus de liberdade do sistema.

Na prática, o método de Lagrange costuma ser mais direto na obtenção das equações de movimento. Assim, a maior vantagem do método de Hamilton está na possibilidade de extensão para áreas além da Mecânica Clássica, como a Mecânica Estatística e a Mecânica Quântica.

### 2.1.3.1 Parênteses de Poisson

Os Parênteses de Poisson [33] são identidades matemáticas de grande utilidade da Mecânica Hamiltoniana. Considerando duas funções no espaço de fase  $u(q^i, p_i)$  e  $v(q^i, p_i)$ , definimos como Parênteses de Poisson  $\{u, v\}$  a operação:

$$\{u, v\} = \sum_k \left( \frac{\partial u}{\partial q^k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q^k} \right). \quad (2.9)$$

Algumas propriedades dos Parênteses de Poisson são:

1. **Assimetria:**  $\{u, v\} = -\{v, u\}$
2. **Linearidade:**  $\{u, v_1 + v_2\} = \{u, v_1\} + \{u, v_2\}$
3. **Regra de Leibniz:**  $\{u, v_1 v_2\} = \{u, v_1\} v_2 + v_1 \{u, v_2\}$
4. **Identidade de Jacobi:**  $\{u, \{v_1, v_2\}\} + \{v_2, \{u, v_1\}\} + \{v_1, \{v_2, u\}\} = 0$

Usando a eq. 2.9, as equações de Hamilton podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned} \dot{q}^k &= \{q^k, H\}, \\ \dot{p}_k &= \{p_k, H\}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Com os Parênteses de Poisson e as equações de Hamilton, podemos identificar se uma quantidade  $u(q^i, p_i, t)$  é uma constante de movimento. Escrevendo:

$$\frac{du}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial u}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial u}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (2.11)$$

e usando as equações de Hamilton, teremos:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \sum_i \left( \frac{\partial u}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q^i} \right) + \frac{\partial u}{\partial t} \\ &= \{u, H\} + \frac{\partial u}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Assim, se  $u$  não depender explicitamente do tempo e  $\{u, H\} = 0$ , teremos que  $u$  necessariamente é uma constante de movimento.

Outra utilidade dos parênteses de Poisson está na possibilidade de obtenção de uma constante de movimento a partir do conhecimento de outras duas, usando a identidade de Jacobi.

### 2.1.3.2 Espaço de Fase e Equação de Liouville

Ao trocar a Mecânica Lagrangiana pela Mecânica Hamiltoniana, deixamos de trabalhar com o espaço de configurações, formado pelas coordenadas generalizadas, e passamos a descrever os problemas em um espaço  $2s$  dimensional formado pelas variáveis  $(q^1, \dots, q^s, p_1, \dots, p_s)$ , denominado espaço de fase,  $\Gamma$ . Cada ponto nesse espaço determina um estado do sistema, de forma que uma trajetória bem definida no espaço de fase é capaz de caracterizar a sua evolução.

Entretanto, quando se trata de um sistema com elevado número de partículas, sobretudo microscópicas, o conhecimento completo do sistema em qualquer instante torna-se impossível, sendo necessário dar ao tratamento um caráter estatístico. A área da Física responsável por resolver problemas dessa natureza é a Mecânica Estatística [30] que se baseia no fato de que, associado a um estado macroscópico, existe uma infinidade de estados microscópicos distintos possíveis, sendo cada um desses estados representado por um ponto no espaço de fase. O conjunto desses pontos está relacionado a uma função densidade de estado,  $\rho(q, p, t)$ , que conecta um determinado número de estados,  $dN$ , a um volume infinitesimal no espaço de fase, de forma que:

$$dN = \rho(q, p, t) dq dp. \quad (2.13)$$

O estado do sistema passa a ser representado pela função de distribuição  $\rho(q, p, t)$  e sua evolução é dada pela Equação de Liouville:

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

Normalizada, a função  $\rho(q, p, t)$  pode ser interpretada como uma função densidade de probabilidade. Com ela, é possível calcular o valor esperado de um observável  $A(q, p)$ :

$$\langle A \rangle = \int dq dp A(q, p) \rho(q, p, t). \quad (2.15)$$

A Mecânica Estatística é um exemplo clássico de como a Mecânica Hamiltoniana pode ser útil ao estender-se por outras áreas da Física. No capítulo seguinte, veremos como essa extensão acontece na Mecânica Quântica, foco desse trabalho.

## 2.2 O problema de Espalhamento

O objetivo desse trabalho é relacionar a teoria de propagadores com o espalhamento de partículas por um potencial, usando a Mecânica Quântica Simplética. Para tal, é

interessante relembrar como a Teoria de Espalhamento é desenvolvida na Mecânica Clássica e na Mecânica Quântica usual, a fim de comparar os desdobramentos.

Começando pela Mecânica Clássica, vamos contemplar um modelo construído para o espalhamento elástico, em grandes ângulos, de uma partícula por um potencial esfericamente simétrico, como o potencial coulombiano. Pensando em um espalhamento do tipo electrón-molécula ou Rutherford, podemos considerar que a molécula espalhadora mantém-se fixa durante o processo de espalhamento, uma vez que sua massa é muito superior à da partícula defletida.

A partícula espalhada, de carga  $ze$ , sofre uma deflexão  $\theta$  ao interagir com o centro espalhador, de carga  $Ze$ . Denominaremos  $\varphi(t)$  o ângulo que, acompanhado do vetor  $r(t)$ , identifica a localização dessa partícula. Esse esquema é apresentado na figura a seguir.

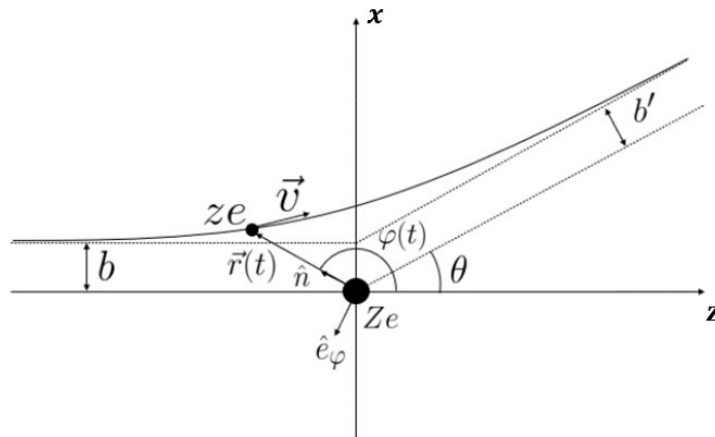


Figura 1 – Espalhamento de Rutherford na Mecânica Clássica.

Nosso objetivo nesse estudo é determinar a distribuição angular das partículas espalhadas utilizando a Mecânica Clássica. Essa distribuição é uma função  $N(\theta)$ , que está relacionada ao número de partículas espalhadas num determinado ângulo  $\theta$ . Qualquer uma das formulações apresentadas nos tópicos anteriores poderia ser utilizada para tal; por razões práticas, é escolhida a formulação Newtoniana.

O primeiro passo para descrição desse problema na Mecânica Clássica é a obtenção da trajetória ou órbita. Partindo da formulação newtoniana, a equação da trajetória ou órbita é obtida a partir da Lei Fundamental da Dinâmica, eq. 2.1.

O vetor de posição  $\vec{r}(t)$  pode ser escrito em termos do vetor unitário  $\hat{n}$ , de tal forma que  $\vec{r} = r\hat{n}$ . Ao considerar um círculo unitário no plano  $xz$  envolvendo os versores  $\hat{e}_\varphi$  e  $\hat{n}$ , chegamos à relação a seguir, que corresponde à velocidade da partícula espalhada:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{dr}{dt}\hat{n} + r\frac{d\hat{n}}{dt} = \frac{dr}{dt}\hat{n} + r\dot{\varphi}\hat{e}_\varphi = \vec{v}. \quad (2.16)$$

Derivando a eq. 2.16, obtém-se o vetor aceleração:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \left[ \frac{d^2r}{dt^2} \hat{n} - r\dot{\varphi}^2 \right] \hat{n} + [2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi}] \hat{e}_\varphi = \vec{a}. \quad (2.17)$$

Vamos supor que a única força que age sobre a partícula seja a força de interação coulombiana. Considerando  $ze$  a carga da partícula incidente e  $Ze$  a carga do alvo, teremos:

$$\vec{F} = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \hat{n}. \quad (2.18)$$

Com isso, a eq. 2.1 fica:

$$\vec{F} = m \left[ \left( \frac{d^2r}{dt^2} \hat{n} - r\dot{\varphi}^2 \right) \hat{n} + (2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi}) \hat{e}_\varphi \right] = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \hat{n}. \quad (2.19)$$

Logo, teremos que:

$$\frac{d^2r}{dt^2} - r\dot{\varphi}^2 = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m} \frac{1}{r^2}, \quad (2.20)$$

$$2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi} = 0. \quad (2.21)$$

Antes de continuar o processo de obtenção da trajetória, é interessante analisarmos o que acontece com o momento angular da partícula incidente, uma vez que esses resultados serão utilizados a seguir. Segundo a mecânica newtoniana, o momento angular é calculado como:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r} \times \vec{v} = mr\hat{n} \times (\dot{r}\hat{n} + \dot{\varphi}r\hat{e}_\varphi) = m\dot{\varphi}r^2\hat{e}_y. \quad (2.22)$$

Com isso, temos que  $\varphi$  é, em módulo:

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{mr^2}. \quad (2.23)$$

Ao encontrar constantes de movimento, reduzimos o número de graus de liberdade do sistema, tornando a solução mais simples. A conservação do momento angular nos leva a

$$L = -mbv_0 = -mb'v_\infty, \quad (2.24)$$

sendo  $v_0$  a velocidade inicial da partícula incidente,  $v_\infty$  a velocidade da partícula após a interação, e  $b$  e  $b'$  parâmetros de impacto que definem a distância perpendicular entre a partícula e o centro espalhador, como mostra a fig. 1.

Além da conservação do momento angular, podemos considerar a conservação da energia, pois estamos tratando espalhamento elástico,

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}mv_\infty^2 \rightarrow v_0 = v_\infty. \quad (2.25)$$

Com isso, temos que  $b = b'$ .



Voltando à eq. 2.20 e usando, por conveniência, a substituição  $u = \frac{1}{r}$  e a eq. 2.23, obtém-se

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = - \left( \frac{m}{L} \right)^2 \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m}. \quad (2.26)$$

Usando  $L = -mbv_0$ , teremos

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = - \left( \frac{1}{b^2v_0^2} \right) \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 m}. \quad (2.27)$$

A menor distância  $D$  entre a partícula incidente e o alvo ocorrerá quando a energia cinética inicial se igualar à energia potencial. Assim:

$$D = \frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 mv_0^2}. \quad (2.28)$$

Usando eq. 2.28 em eq. 2.27, teremos:

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} + u = - \frac{D}{2b^2}. \quad (2.29)$$

A eq. 2.29 é de fácil solução, e o resultado nos indica que a trajetória  $u(\varphi)$  deve ser da forma

$$u(\varphi) = A\cos\varphi + B\sen\varphi - \frac{D}{2b^2}. \quad (2.30)$$

Para encontrar as constantes A e B, utilizamos as condições de contorno para o problema de espalhamento:

$$\dot{r}(\varphi = \pi) = -v_0 \rightarrow \frac{du}{d\varphi} = \frac{mv_0}{L}, \quad (2.31)$$

$$u(\varphi = \pi) = 0. \quad (2.32)$$

Aplicando as condições 2.31 e 2.32 à solução 2.30, conclui-se que a trajetória  $u(\varphi)$  é dada por

$$u(\varphi) = -\frac{D}{2b^2}(1 + \cos\varphi) + \frac{1}{b}\sen\varphi. \quad (2.33)$$

Nosso objetivo agora é relacionar o ângulo de espalhamento,  $\theta$ , e o parâmetro de impacto,  $b$ , utilizando a eq. 2.33.

Quando  $\varphi = \theta$ ,  $r \rightarrow \infty$ ; logo  $u(\varphi = \theta) = 0$ , ou seja

$$-\frac{D}{2b^2}(1 + \cos\theta) + \frac{1}{b}\sen\theta = 0 \rightarrow b = \frac{D}{2} \frac{1 + \cos\theta}{\sen\theta}. \quad (2.34)$$

Utilizando algumas identidades trigonométricas, chega-se ao seguinte resultado:

$$b = \frac{D}{2} \cotg \left( \frac{\theta}{2} \right). \quad (2.35)$$

Agora temos os elementos necessários para determinar a distribuição angular das partículas após o espalhamento.

O número de partículas espalhadas em um ângulo  $\theta$ ,  $N(\theta)$ , pode ser escrito como a intensidade do feixe incidente,  $I$ , multiplicada pelo elemento de área delimitada pelo intervalo  $b$  e  $b + db$ , ou seja

$$N(\theta)d\theta = IdA = 2\pi I b db. \quad (2.36)$$

No entanto, a quantidade medida diretamente no experimento refere-se ao número de partículas espalhadas em um ângulo  $\theta$ , num certo intervalo de tempo, e é denominada seção de choque,  $\sigma(\theta)$ . Essa grandeza é dada pela razão entre o número de partículas espalhadas e a intensidade do feixe incidente, de forma que podemos escrever:

$$N(\theta)d\theta = I\sigma d\Omega, \quad (2.37)$$

sendo  $d\Omega$  o elemento de ângulo sólido, que pode ser relacionado à abertura angular  $d\theta$  como

$$d\Omega = 2\pi \text{sen}\theta d\theta. \quad (2.38)$$

Como o número de partículas espalhadas, com parâmetro de impacto na faixa  $[b, b + db]$ , deve ser igual ao número de partículas espalhadas no intervalo angular  $[\theta, \theta + d\theta]$ , teremos que

$$2\pi I b db = -I\sigma(\theta)\text{sen}\theta d\theta, \quad (2.39)$$

em que o sinal negativo aparece devido ao fato de  $\frac{db}{d\theta}$  ser negativo, uma vez que a lei de interação é tal que a deflexão angular diminui com o aumento do parâmetro de impacto.

Com isso, obtemos

$$\sigma(\theta) = -\frac{b}{\text{sen}\theta} \frac{db}{d\theta}. \quad (2.40)$$

Usando a eq. 2.35 em eq. 2.40, concluímos que a seção de choque é calculada como:

$$\sigma(\theta) = \frac{D^2}{16} \frac{1}{\text{sen}^4(\frac{\theta}{2})}. \quad (2.41)$$

O resultado da eq. 2.41 é também obtido ao tratar o espalhamento por um potencial coulombiano usando a Mecânica Quântica [4, 5]. Contudo, o formalismo clássico falha ao descrever sistemas microscópicos como átomos e moléculas; logo, o tratamento da teoria de espalhamento por essa formulação também fica comprometido.

É interessante ressaltar que no estudo do espalhamento, seja clássico ou quântico, não é necessário conhecer o que acontece com a partícula espalhada na região de atuação do potencial. As grandezas que são obtidas em laboratório, como a seção de choque, levam em consideração o comportamento da partícula antes e depois da interação, uma vez que o

período de atuação do potencial é muito curto e, por isso, torna-se não observável. Sendo assim, não é necessário conhecer a órbita efetiva da partícula, sendo suficiente determinar a tendência dessa trajetória antes e depois de interagir com o alvo.



## 3 Elementos da Mecânica Quântica Usual

Neste capítulo, faremos uma breve revisão da Mecânica Quântica usual. Para tal, apresentaremos as principais formulações da Mecânica Quântica, assim como fizemos para a Mecânica Clássica no capítulo anterior, a fim de compará-las e entender, em capítulo posterior, as vantagens da Mecânica Quântica Simplética.

### 3.1 Formulações da Mecânica Quântica

No final do século XIX e início do século XX, os físicos começaram a perceber que a Mecânica Clássica, o Eletromagnetismo e a Física Estatística não eram suficientes para descrever todos os fenômenos até então observados, de interesse dessa ciência [34]. Entre os empecilhos para a soberania da Física Clássica estavam o problema da radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico e os frustrantes resultados da experiência de Michelson-Morley. O último desses fenômenos pôde ser explicado a partir do desenvolvimento da Teoria da Relatividade e o entendimento dos primeiros deu origem à Mecânica Quântica.

A Mecânica Quântica é, atualmente, a teoria mais indicada para o tratamento de partículas microscópicas. Na sua construção, foi necessário abandonar o determinismo da Mecânica Clássica em prol de um tratamento probabilístico, no qual densidades de probabilidade e valores médios são analisados ao invés de trajetórias [6].

A construção de um formalismo quanto-mecânico baseia-se na quantização de sistemas físicos e existem, na literatura, diversos caminhos que podem ser seguidos para alcançar esse objetivo. O mais conhecido deles, adotado na maioria dos textos básicos para graduação e pós-graduação, é baseado em operadores que atuam no espaço de Hilbert e foi desenvolvido, na década de 1920, por Schrödinger, Heisenberg, Born, Dirac, von Neumann e outros [35]. Outra possibilidade corresponde à quantização de Moyal, respaldada na função quasi-distribuição de Wigner e na lei de correspondência de Weyl entre operadores no espaço de Hilbert e funções no espaço de fase [7]. Existe ainda uma terceira formulação bastante conhecida, concebida e formulada nos trabalhos de Dirac e Feynman [36] que se refere às integrais de trajetória [37]. Neste capítulo, faremos uma breve revisão das principais características do formalismo usual e veremos como ocorre a construção de uma teoria de espalhamento nessa formulação.

#### 3.1.1 Formulação usual

Em geral, os livros-texto de graduação e de pós-graduação apresentam o conteúdo de Mecânica Quântica através do formalismo de Schrödinger [38] ou da Mecânica das

Matrizes de Heisenberg [39]. Essas duas formulações são equivalentes e constituem o que chamamos de formulação usual da Mecânica Quântica.

Na MQ usual, o estado de um sistema físico é determinado através de um vetor representado por ket  $|\psi\rangle$ , construído num espaço de Hilbert ( $\mathcal{H}$ ) complexo, e os observáveis físicos são operadores hermitianos que atuam nesse espaço.

**Espaço de Hilbert ( $\mathcal{H}$ )** é um espaço vetorial real ou complexo no qual o produto escalar  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$  satisfaz as seguintes propriedades:

1.  $\langle\psi_1|[\alpha|\psi_2\rangle + \beta|\psi_3\rangle] = \alpha\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \beta\langle\psi_1|\psi_3\rangle$ ;
2.  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$  se  $\mathcal{H}$  é real e  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$  se  $\mathcal{H}$  é complexo;
3.  $\langle\psi_1|\psi_1\rangle \geq 0$ ; logo  $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = 0 \iff |\psi_1\rangle = 0$
4.  $\mathcal{H}$  é completo em relação à norma, definida como:

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

e isso significa em linhas gerais que, para que um vetor  $|\psi\rangle = \sum_i C_i |\phi_i\rangle \in \mathcal{H}$ , dado que  $|\phi_i\rangle \in \mathcal{H}$ , é necessário que  $\sum_i |C_i|^2$  seja finito.

Qualquer subconjunto de vetores de  $\mathcal{H}$ , que contenha todas as propriedades de um espaço de Hilbert, é denominado um **subespaço** de  $\mathcal{H}$ , denotado por  $\mathcal{S}$ .

Dizemos que um vetor  $|\phi\rangle$  é ortogonal ao subespaço  $\mathcal{S}$  se ele for ortogonal a qualquer vetor pertencente a  $\mathcal{S}$ , isto é, se  $\langle\phi|\psi\rangle = 0$  para todo  $|\psi\rangle$  pertencente a  $\mathcal{S}$ .

O conjunto de todos os vetores ortogonais a  $\mathcal{S}$ ,  $\mathcal{S}^\perp$ , é denominado complemento ortogonal de  $\mathcal{S}$ . Verifica-se então que qualquer vetor  $|\psi\rangle$  em  $\mathcal{H}$  pode ser escrito como uma combinação de vetores pertencentes a  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{S}^\perp$ . De forma geral, se

$$\mathcal{H} = \mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{S}_n,$$

ou seja, se os subespaços  $\mathcal{S}_i$  forem ortogonais entre si, o que nos indica que  $\mathcal{H}$  é a soma direta dos subespaços  $\mathcal{S}_i$ , podemos escrever qualquer vetor  $|\psi\rangle$  em  $\mathcal{H}$  como:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + \dots + |\psi_n\rangle,$$

sendo cada  $|\psi_i\rangle$  pertencente a um  $\mathcal{S}_i$ .

**Observáveis** são as grandezas físicas, representadas por operadores hermitianos em  $\mathcal{H}$ . De acordo com a álgebra linear, ao atuar em um autovetor  $|\psi\rangle$ , um operador  $\hat{A}$  nos dá:

$$\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle,$$

sendo  $\alpha$  na MQ usual interpretado como resultado da medida da grandeza representada por  $\hat{A}$ .

A condição de que  $\hat{A}$  deve ser hermitiano para ser considerado um observável físico nos garante que  $\alpha \in \mathcal{R}$ , corpo dos reais.

Um ket  $|\psi\rangle$  pode ser expandido em termos dos autovetores próprios das coordenadas,  $|q\rangle$ , ou seja:

$$|\psi\rangle = \int d^3q |q\rangle \langle q|\psi\rangle,$$

onde são válidas as relações de normalização e completeza,

$$\langle q|q'\rangle = \delta^3(q - q'),$$

$$1 = \int d^3q |q\rangle \langle q|.$$

Ou, em termos dos autovetores próprios dos momentos,  $|p\rangle$ , i.e.:

$$|\psi\rangle = \int d^3p |p\rangle \langle p|\psi\rangle,$$

em que são válidas as relações de normalização e completeza,

$$\langle p|p'\rangle = \delta^3(p - p'),$$

$$1 = \int d^3p |p\rangle \langle p|.$$

Os coeficientes  $\langle q|\psi\rangle$  e  $\langle p|\psi\rangle$  são interpretados de forma que  $|\langle q|\psi\rangle|^2$  e  $|\langle p|\psi\rangle|^2$  representam densidades de probabilidade associadas à posição e ao momento, respectivamente.

O produto interno  $\langle q|\psi\rangle$  é usualmente chamado de função de onda na representação das posições, e  $\langle p|\psi\rangle$  é a função de onda na representação dos momentos. Nós os notamos por  $\psi_q$  e  $\psi_p$ , respectivamente.

As funções de onda na representação dos momentos e das posições são transformadas de Fourier uma da outra, isto é:

$$\langle q|\psi\rangle = \psi_q = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{p} \exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{q}}{\hbar}\right) \psi_p$$

$$\langle p|\psi\rangle = \psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{q} \exp\left(\frac{-i\vec{p}\cdot\vec{q}}{\hbar}\right) \psi_q$$

O **valor médio do observável**  $\langle \hat{A} \rangle$ , num autoestado  $\psi_q$  normalizado, é calculado a partir do produto interno:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int d^3q \langle \psi | q \rangle \langle q | \hat{A} | \psi \rangle = \int d^3q \langle \psi | q \rangle \langle q | \alpha | \psi \rangle \\ &= \alpha \int d^3q \langle \psi | q \rangle \langle q | \psi \rangle = \alpha \int \langle \psi | \psi \rangle = \alpha.\end{aligned}$$

### 3.1.1.1 Características dos Operadores

Saber identificar as características dos Operadores e trabalhar com elas ao desenvolver cálculos em MQ são habilidades necessárias para realizar esse estudo. Definiremos aqui o que são operadores lineares, unitários e isométricos e revisaremos como calcular o inverso de operadores.

(i) *Operadores lineares* são operações  $\hat{A}$  que atuam sobre vetores em um espaço  $\mathcal{H}$  e levam a um vetor também em  $\mathcal{H}$ , satisfazendo a condição:

$$\hat{A}(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = a\hat{A}|\psi\rangle + b\hat{A}|\phi\rangle,$$

em que  $a$  e  $b$  são números complexos.

(ii) *Operadores unitários* são operadores lineares  $\hat{A}$  em  $\mathcal{H}$  que preservam a norma de  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  e cujo domínio de definição e imagens é todo o  $\mathcal{H}$ , i.e:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\hat{A}) &= \text{Im}(\hat{A}) = \mathcal{H} \\ |\hat{A}|\psi\rangle| &= ||\psi\rangle|.\end{aligned}$$

Se  $\hat{A}$  é unitário, é válida a relação:  $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^\dagger = 1$ .

(iii) *Operadores isométricos*, assim como os unitários, atuam sobre  $\mathcal{H}$  preservando a norma. Contudo, o conjunto imagem não coincide, necessariamente, com o domínio de definição. Tem-se, portanto,

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\hat{A}) &= \mathcal{H}; \text{Im}(\hat{A}) \neq \mathcal{H} \\ |\hat{A}|\psi\rangle| &= ||\psi\rangle|.\end{aligned}$$

(iv) Dizemos que um operador  $\hat{A}$  é *inversível* em todo o  $\mathcal{H}$  se, para todo estado  $|\psi\rangle$ , existir um estado  $|\psi_0\rangle$  do qual ele evoluiu e para o qual pode retornar, isto é:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \hat{A}|\psi_0\rangle \\ |\psi_0\rangle &= \hat{A}^{-1}|\psi\rangle.\end{aligned}$$

Um exemplo de operador inversível no estudo da MQ é o operador de evolução temporal, em alguns casos em que, ao atuar em um estado  $|\psi_{(t=0)}\rangle$ , obtém-se o estado em



um instante posterior,  $|\psi_{(t>0)}\rangle$ , e o estado anterior pode ser retomado a partir da aplicação do inverso do operador de evolução temporal a esse estado  $|\psi_{(t>0)}\rangle$ .

### 3.1.1.2 Equação de Schrödinger

Enquanto na MC a evolução do sistema é dada pela 2ª lei de Newton, equações de Lagrange e equações de Hamilton, na MQ usual a evolução temporal do sistema é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_t\rangle = H |\psi_t\rangle. \quad (3.1)$$

Nessa equação,  $H$  é o *operador Hamiltoniano* do sistema. Se  $H$  não depende explicitamente do tempo, a solução tem a forma:

$$|\psi_t\rangle = U(t) |\psi\rangle = e^{-iHt} |\psi_q\rangle, \quad \hbar = 1 \quad (3.2)$$

onde  $U(t)$  é denominado *operador de evolução temporal* e  $|\psi\rangle$  é um vetor no espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ , no instante inicial ( $t = 0$ ).

Se o vetor  $|\psi\rangle$  representa um estado estacionário do sistema, ele deve obedecer a equação de Schrödinger independente do tempo, escrita como:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (3.3)$$

na qual o autovalor  $E$  nos dá a energia do sistema.

### 3.1.1.3 Densidade de corrente de probabilidade

Na MQ usual, o módulo ao quadrado da função de onda é interpretado como uma densidade de probabilidade. Sendo  $\psi(x, t)$  solução da equação de Schrödinger, podemos escrever:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2. \quad (3.4)$$

Podemos definir uma grandeza  $J(x, t)$  como:

$$J(x, t) = - \left[ \frac{i\hbar}{2m} \right] [\psi * \nabla \psi - (\nabla \psi *) \psi], \quad (3.5)$$

e mostrar que  $J(x, t)$  satisfaz a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J(x, t) = 0. \quad (3.6)$$

Assim, denominamos  $J(x, t)$  densidade de corrente de probabilidade. Essa grandeza será importante ao definirmos a seção de choque diferencial (SCD), como veremos adiante.

### 3.1.2 Representação dos operadores $\hat{q}$ e $\hat{p}$ na MQ usual

A descrição quântica de um sistema com  $n$  graus de liberdade, representado por um hamiltoniano  $H(q, p)$ , pode ser formulada [5] ao encontrar os operadores lineares  $\hat{q}_j(t)$  e  $\hat{p}_j(t)$ , com  $j = 1, \dots, n$ , que operam no espaço  $\mathcal{H}$  e satisfazem as equações:

$$\frac{d\hat{q}_j(t)}{dt} = i\hbar[H(\hat{q}_j(t), \hat{p}_j(t)), \hat{q}_j(t)] \quad (3.7)$$

$$\frac{d\hat{p}_j(t)}{dt} = i\hbar[H(\hat{q}_j(t), \hat{p}_j(t)), \hat{p}_j(t)], \quad (3.8)$$

onde a operação  $[A, B] = AB - BA$  é chamada de comutador de A e B. Pode-se mostrar que, para um conjunto de operadores  $\hat{q}_j(t)$  e  $\hat{p}_j(t)$  em MQ, as relações a seguir devem ser obedecidas:

$$[\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t)] = 0, \quad (3.9)$$

$$[\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t)] = 0, \quad (3.10)$$

$$[\hat{q}_j(t), \hat{p}_k(t)] = i\hbar\delta_{jk}. \quad (3.11)$$

Para resolver esse problema, denominado *Problema de Heisenberg* [40], J. von Neumann [35] sugeriu a seguinte representação para os operadores  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$ :

$$\hat{q}\psi = q\psi, \quad (3.12)$$

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\psi. \quad (3.13)$$

Essa representação, que denominamos representação usual da Mecânica Quântica reproduz as formulações de Schrödinger e Heisenberg, que foram unificadas por Dirac em 1927 através da generalização do conceito de estado por um formalismo algébrico, e a proposição de regras de quantização conhecidas como quantização canônica [35, 41].

### 3.1.3 Conexão entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica

#### 3.1.3.1 Álgebra de Lie e a Mecânica Clássica

Uma álgebra de Lie,  $g$ , considera um espaço vetorial sobre um corpo  $V$ , munido de uma operação  $[\cdot, \cdot]$  chamada de *Parêntese de Lie*, que satisfaz as seguintes propriedades  $\forall \alpha, \beta \in V$  e  $X, Y, Z \in g$ :

- i)  $X, Y \in g \longrightarrow [X, Y] \in g$
- ii)  $[X, \alpha Y + \beta Z] = \alpha [X, Y] + \beta [X, Z]$
- iii)  $[X, Y] = -[Y, X]$
- iv)  $[X, [Y, Z]] + [Y, [X, Z]] + [Z, [X, Y]] = 0.$

A base do espaço vetorial de uma álgebra de Lie é dada por [18]:

$$\{e_i, e_j\} = C_{ij}^k e_k, \quad (3.14)$$

onde os coeficientes  $C_{ij}^k$  são as constantes da álgebra de Lie, que devem obedecer as seguintes propriedades:

$$C_{ij}^k = -C_{ji}^k,$$

$$C_{ij}^m C_{mk}^r + C_{jk}^m C_{mi}^r + C_{ki}^m C_{mj}^r = 0.$$

Analisando as propriedades do *Parêntese de Poisson*, apresentadas no capítulo anterior, verifica-se que essa estrutura matemática satisfaz as condições de um Parêntese de Lie. Logo, pode-se concluir que os observáveis físicos da MC satisfazem uma álgebra de Lie, sendo o Parêntese de Poisson a operação dessa álgebra.

Outra estrutura matemática muito presente em Física Teórica é a Teoria de Grupos. Um grupo,  $G$ , é definido como um conjunto de elementos que obedece as seguintes propriedades:

- i) Existe, entre os elementos do grupo, uma lei de composição ( $\circ$ ), de tal forma que  $a \circ b \in G, \forall a, b \in G$ ;
- ii) Existe um elemento  $n$ , chamado elemento neutro, que pertence ao grupo e que, ao operar com qualquer outro elemento do grupo, fornece o próprio elemento, isto é:  $a \circ n = n \circ a = a, \forall a \in G$ ;
- iii) Existe,  $\forall a \in G$ , um elemento inverso,  $a^{-1}$ , de forma que:  $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = n$ , onde  $n$  é o elemento neutro;
- iii) A lei de composição interna é associativa, isto é:  $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$

Através da Teoria de Grupos é possível construir uma linguagem matemática capaz de descrever as simetrias da natureza. O *Grupo de Galilei*, por exemplo, garante a invariância das leis físicas para uma mudança de referencial entre dois sistemas inerciais com velocidade relativa muito inferior à velocidade da luz. As equações envolvidas nessa transformação estão representadas abaixo:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{x}} &= R\mathbf{x} - \mathbf{v}t + \mathbf{a} \\ \bar{t} &= t + \tau,\end{aligned}\tag{3.15}$$

onde  $\mathbf{x}$  pertence ao espaço euclidiano tridimensional,  $\mathbf{v}$  representa a velocidade relativa entre os dois referenciais,  $R$  representa uma rotação espacial,  $\mathbf{a}$  uma translação espacial e  $\tau$  uma translação temporal.

Ao realizar as rotações por ângulos  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  ao longo dos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , nesta ordem, obtém-se a matriz de rotação representada abaixo [33]:

$$R = \begin{bmatrix} \cos\gamma\cos\beta & \sin\gamma\cos\beta + \cos\gamma\sin\beta\sin\alpha & \sin\gamma\sin\alpha - \cos\gamma\sin\beta\cos\alpha \\ -\sin\gamma\cos\beta & \cos\gamma\cos\beta - \sin\gamma\sin\beta\sin\alpha & \cos\gamma\sin\alpha + \sin\gamma\sin\beta\cos\alpha \\ \sin\beta & -\cos\beta\sin\alpha & \cos\beta\cos\alpha \end{bmatrix}$$

As equações 3.15 podem então ser escritas como:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ t' \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} & v_1 & a_1 \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} & v_2 & a_2 \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} & v_3 & a_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \tau \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ t \\ 1 \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ t \\ 1 \end{bmatrix}\tag{3.16}$$

onde  $R_{ij}$  representam os elementos da matriz de rotação,  $a_i$  representam os elementos de translação espacial, e  $v_i$  os elementos do vetor velocidade relativa.

Pode-se mostrar que o grupo de Galilei é um grupo de Lie [18], e que a álgebra de Lie pode ser construída considerando os geradores infinitesimais do grupo, obtidos através das relações:

$$d\bar{\mathbf{x}}^i = \frac{\partial G^i(\mathbf{x}, b)}{\partial b^j} \Big|_{b=0} \delta b^j\tag{3.17}$$

onde  $G$  é a matriz de transformação associada ao grupo, e  $b^j$  são os parâmetros do grupo. No caso do Grupo de Galilei temos 10 parâmetros e, em consequência, 10 geradores: 3 associados à rotação espacial ( $L_1, L_2, L_3$ ), 3 à translação espacial ( $P_1, P_2, P_3$ ), 3 ao boost ( $K_1, K_2, K_3$ ) e 1 à translação temporal ( $H$ ). As constantes de estrutura do Grupo de Galilei ficam então definidas pelas relações de comutação entre esses geradores, dados abaixo:

$$\begin{aligned}[L_i, L_j] &= \epsilon_{ijk} L_k & [K_i, P_j] &= 0 \\ [L_i, K_j] &= \epsilon_{ijk} K_k & [K_i, H] &= iP_i \\ [L_i, P_j] &= \epsilon_{ijk} P_k & [P_i, P_j] &= 0 \\ [L_i, H] &= 0 & [P_i, H] &= 0 \\ [K_i, K_j] &= 0.\end{aligned}\tag{3.18}$$

Ao representarmos o grupo de Galilei em um espaço vetorial, obtemos a expressão em termos de exponenciais, ou seja,

$$G(\mathbf{x}, b) = e^{b_H H} e^{b_P \cdot P} e^{b_K \cdot K} e^{b_L \cdot L}. \quad (3.19)$$

A demonstração desses resultados e uma discussão aprofundada sobre a álgebra de Lie do Grupo de Galilei podem ser consultadas nas referências [18, 42, 43].

Em particular, no caso em que o espaço vetorial é o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , os operadores hermitianos que representam os geradores em  $\mathcal{H}$  são interpretados como grandezas físicas e cada uma das transformações de Galilei no  $(R^3, t)$  tem, pelo Teorema de Wigner, sua representação em  $\mathcal{H}$ , espaço dos estados do sistema físico.

## 3.2 O problema de Espalhamento

Analogamente ao que foi feito no Capítulo 2, trataremos aqui o problema de espalhamento elástico de uma partícula por um potencial central  $V(r)$ . A diferença é que, agora, estamos considerando a partícula como um objeto quântico; logo, suas leis não poderão mais ser determinadas pela Mecânica Clássica. Ao invés de usar a segunda lei de Newton para determinar o que acontece com a partícula após interagir com o alvo, usaremos a Equação de Schrödinger, seguindo assim o caminho usual para tratar problemas de Mecânica Quântica.

No nosso tratamento, simularemos o processo de espalhamento de uma partícula leve e sem spin, por um alvo fixo e pesado, o que nos dá uma descrição simplificada para o caso de um espalhamento elétron - átomo ou elétron - molécula. Nosso objetivo é apresentar os elementos básicos para o desenvolvimento da teoria de propagadores na MQS e verificar como alguns desses elementos aparecem nessa formulação.

### 3.2.1 Órbitas efetivas e assintóticas

O tratamento dependente do tempo para o espalhamento quântico tem uma correspondência com o espalhamento clássico, apresentado no capítulo 2. Em ambos os casos, a partícula comporta-se como praticamente livre até alcançar a região de atuação do potencial. Dentro dessa região, ocorre toda a interação, mas essa situação não dura mais do que poucos milésimos de segundos se estivermos tratando problemas de espalhamento do tipo elétron - átomo, cuja região de interação é de alguns diâmetros atômicos. Uma vez longe da região de interação, a partícula volta a comportar-se como no início da análise, como uma partícula livre.

O processo descrito acima pode ser representado a partir da fig. 2, na qual a *assíntota in* refere-se à “órbita” incidente e a *assíntota out* à “órbita” emergente. Para

descrever o processo de espalhamento, é suficiente conhecer essas assíntotas, uma vez que a região de interação não é observável. Nesse tratamento, a “órbita” não se refere à trajetória da partícula espalhada, pois trata-se de um fenômeno quântico; ela descreve o estado real do sistema ao longo de todo o processo, enquanto as assíntotas *in* e *out*, representadas pelas setas vermelhas, indicam estados aproximados. [44]

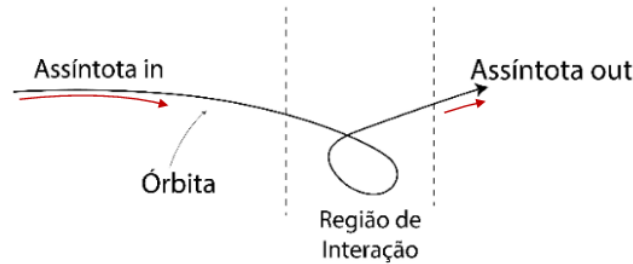


Figura 2 – Representação gráfica do processo de espalhamento.

No entanto, tratando-se de um problema do âmbito da Mecânica Quântica, o conceito de órbita perde o sentido<sup>1</sup>, e torna-se necessário a substituição da trajetória como meio de identificação do movimento pelo conhecimento de um vetor de estado,  $|\psi_t\rangle$ , ou função de onda,  $\psi(x, t)$ , que carrega toda a informação necessária sobre o sistema. Agora, em vez de trabalharmos com a equação de Newton, trabalhamos com a equação de Schrödinger dependente do tempo, que nos mostra como o sistema evolui a partir da expressão abaixo:

$$i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle, \quad (3.20)$$

onde considerou-se  $\hbar = 1$ .

A solução geral para  $|\psi_t\rangle$  tem a forma:

$$|\psi_t\rangle = U(t)|\psi\rangle = e^{-iHt}|\psi\rangle, \quad (3.21)$$

onde  $U(t)$  é o operador de evolução temporal e  $|\psi\rangle$  é um vetor no espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ .

Todo estado  $U(t)|\psi\rangle$  pode ser unicamente determinado pelo vetor fixo  $|\psi\rangle$ , que retrata o estado em  $t = 0$ . Os vetores  $|\psi\rangle$  formam o espaço  $\mathcal{H}$ , e têm associado a eles o hamiltoniano  $H = H_0 + V$ , onde  $H_0$  é o hamiltoniano da partícula livre,  $H_0 = \frac{p^2}{2m}$ , e  $V$  é um potencial local, isto é, um potencial que depende apenas da posição da partícula.

Se considerarmos que  $U(t)|\psi\rangle$  é um vetor que descreve a evolução temporal de um processo de espalhamento então, bem antes da colisão em  $t \rightarrow -\infty$ , esse vetor deve descrever uma partícula livre; logo, antes da região de interação, o operador de evolução temporal deve ser dado por  $U_0(t) = e^{-iH_0t}$ . Com isso espera-se que, para  $t \rightarrow -\infty$ ,

<sup>1</sup> manteremos, no entanto, essa denominação como forma didática de nos referirmos ao problema.

tenhamos a seguinte condição assintótica:

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} U_0(t)|\psi_{in}\rangle, \quad (3.22)$$

onde  $|\psi_{in}\rangle$  é o vetor de estado da partícula incidente que descreve, no caso geral, um pacote de ondas livre.

De modo análogo, quando a partícula move-se para longe do potencial espera-se que seu estado tenda novamente ao estado de uma partícula livre. Sendo assim, escrevemos para o vetor emergente,  $|\psi_{out}\rangle$ , a seguinte relação:

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} U_0(t)|\psi_{out}\rangle. \quad (3.23)$$

Em analogia ao caso clássico, denominamos os vetores  $|\psi_{in}\rangle$  e  $|\psi_{out}\rangle$  de órbitas assíntotas *in* e *out* do vetor efetivo  $U(t)|\psi\rangle$ .

Podemos então imaginar que, para todo  $|\psi_{in}\rangle$  no espaço  $\mathcal{H}$ , existe um  $|\psi\rangle$  de modo que:

$$U(t)|\psi\rangle - U_0(t)|\psi_{in}\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} 0 \quad (3.24)$$

Da mesma forma, para  $|\psi_{out}\rangle$ :

$$U(t)|\psi\rangle - U_0(t)|\psi_{out}\rangle \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0 \quad (3.25)$$

Esses resultados seguem de um teorema [44] e para demonstrá-lo multiplica-se as expressões 3.24 e 3.25 pelo operador unitário  $U^\dagger$ , obtendo-se

$$|\psi\rangle - U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} 0, \quad (3.26)$$

$$|\psi\rangle - U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{out}\rangle \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0, \quad (3.27)$$

com

$$U(t) = e^{-iHt},$$

$$U_0(t) = e^{-iH_0t}.$$

Segue ainda [44] que o teorema é válido desde que o potencial para  $r \rightarrow \infty$  caia mais rapidamente que  $r^{-3}$ , e que na origem seja menos singular que  $r^{-3/2}$ .

### 3.2.2 Operadores de Möller e Operador de Espalhamento

A demonstração da condição assintótica nos garante que, para  $V(r)$  satisfazendo as condições citadas na seção anterior, qualquer estado  $|\psi_{in}\rangle$  em  $\mathcal{H}$  é uma assíntota *in* de

uma órbita efetiva  $U(t)|\psi\rangle$ , assim como qualquer estado  $|\psi_{out}\rangle$  é uma assíntota *out* dessa mesma órbita. Além disso, ao considerarmos um estado efetivo  $|\psi\rangle$  em  $t = 0$ , ele estará relacionado com as assíntotas *in* e *out* através das expressões:

$$|\psi\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle, \quad (3.28)$$

$$|\psi\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{out}\rangle = \Omega_-|\psi_{out}\rangle, \quad (3.29)$$

onde introduzimos os operadores  $\Omega_\pm = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t)U_0(t)$ , denominados operadores de Möller. Esses operadores, ao atuarem sobre um vetor em  $\mathcal{H}$ , nos retornam o estado efetivo  $|\psi\rangle$  em  $t = 0$ .

Embora toda assíntota em  $\mathcal{H}$  esteja associada a uma órbita efetiva, a recíproca não é, necessariamente, verdadeira [44]. Ou seja, nem toda órbita efetiva  $U(t)|\psi\rangle$  tem associada a ela assíntotas *in* e *out*. Por exemplo, se  $U(t)|\psi\rangle$  descreve um estado estacionário ligado, teremos a partícula sempre próxima ao potencial e não haverá, associadas a esse estado, assíntotas *in* e *out*.

Denominando o subespaço das assíntotas *in* de  $R_+$ , o subespaço das assíntotas *out* de  $R_-$  e o subespaço dos estados ligados de  $\mathcal{B}$ , teremos que  $R_+$  e  $R_-$  serão ortogonais a  $\mathcal{B}$ , isto é,  $R_+ \perp \mathcal{B}$  e  $R_- \perp \mathcal{B}$ . Pode-se ainda mostrar que [4] o conjunto dos estados com assíntotas *in*, notado pelo subespaço  $R_+$ , e o conjunto dos estados com assíntotas *out*, notado pelo subespaço  $R_-$ , são coincidentes, ou seja,  $R_+ = R_- = R_\pm$ . Logo, o espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ , que contém todos os estados possíveis, pode ser expandido como:  $\mathcal{H} = R_\pm \oplus \mathcal{B}$ .

Em seções anteriores, discutimos que para descrever um processo de espalhamento não é necessário conhecer a órbita efetiva do sistema. Na realidade, é suficiente identificar a assíntota *out* a partir do conhecimento da assíntota *in*. Formalmente, para calcular  $|\psi_{out}\rangle$  em termos da  $|\psi_{in}\rangle$ , utiliza-se o *operador de espalhamento*, definido como  $S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$ . De fato, temos que

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle = S |\psi_{in}\rangle, \quad (3.30)$$

ou seja, a partir da aplicação do operador  $S$  na assíntota *in*, podemos obter a assíntota *out*. Como os operadores de Möller, contidos na definição do operador de espalhamento são unitários, nota-se que o operador  $S$  é tal que  $S^\dagger S = 1$ .

Para obter a probabilidade que uma partícula que “entra” em processo de espalhamento com assíntota *in*  $|\psi_{in}\rangle$  tem de ser detectada com uma assíntota *out*  $|\psi_{out}\rangle$ , devemos calcular a amplitude de probabilidade de ocorrer em  $t = 0$  os estados efetivos, isto é:

$$\rho_{|\psi_{in}\rangle \rightarrow |\psi_{out}\rangle} = |\langle \psi_- | \psi_+ \rangle|^2. \quad (3.31)$$

Então, introduzindo as definições  $|\psi_+\rangle = \Omega_+ |\psi_{in}\rangle$  e  $|\psi_-\rangle = \Omega_- |\psi_{out}\rangle$ , segue de 3.31 com a definição do operador de espalhamento, que

$$\rho_{|\psi_{in}\rangle \rightarrow |\psi_{out}\rangle} = |\langle \psi_{out} | \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle|^2 = |\langle \psi_{out} | S |\psi_{in}\rangle|^2. \quad (3.32)$$



Podemos, então, concluir que os elementos de matriz do operador de espalhamento entre as assíntotas nos fornecem as amplitudes de probabilidade associadas ao processo de espalhamento.

### 3.2.3 Seção de choque

Seja no caso clássico ou quântico, a grandeza importante na descrição de um processo de espalhamento é a seção de choque. Essa grandeza nos dá a relação entre o número de partículas incidentes e espalhadas em um ângulo sólido  $d\Omega$ .

Para deixar a análise mais clara, vamos usar o referencial indicado na fig. 3 [45]. Note que colocamos a origem no centro espalhador e escolhemos a direção do feixe incidente ao longo do eixo  $z$ . A posição do detector, onde é feita a medida, coincide com o ponto  $P$  e é representada pelas coordenadas  $(r, \theta, \varphi)$ .

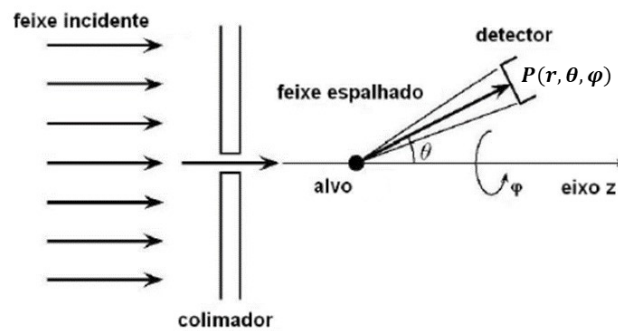


Figura 3 – Representação esquemática do processo de espalhamento.

A seção de choque diferencial (SCD) descreve a distribuição das partículas após serem espalhadas pelo alvo e é definida como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I_{out}}{I_{in}} = \frac{J_{out}/d\Omega}{J_{in}/dA}, \quad (3.33)$$

onde  $J_{in}$  representa o fluxo ou densidade de corrente de probabilidade do feixe incidente no elemento de área  $dA$ , e  $J_{out}$  é o fluxo ou densidade de corrente de probabilidade do feixe espalhado no elemento de ângulo sólido  $d\Omega$ .

A seção de choque total, que nos dá o número total de partículas espalhadas por unidade de tempo dividida pelo fluxo incidente, é calculada a partir da integração da seção de choque diferencial ao longo de todo o eixo polar e azimutal:

$$\sigma_{total} = \int d\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sigma(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (3.34)$$

Para obter a SCD devemos, então, encontrar os fluxos incidente e espalhado, através da relação 3.5, que são obtidos com o conhecimento do estado do sistema antes e depois

do processo de espalhamento. Se considerarmos a Equação de Schrödinger independente do tempo e lembrando que estamos fazendo um tratamento não relativístico do problema, teremos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi, \quad (3.35)$$

onde  $V(r)$  é o potencial de interação.

Fazendo a substituição  $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$  e utilizando as expressões de energia e momento da partícula incidente, dadas por:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad e \quad p = \hbar k \quad (3.36)$$

em que  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  e  $\lambda$  é o comprimento de onda associado à partícula, obtém-se de 3.35 a expressão:

$$[\nabla_r^2 + k^2 - U(r)]\psi(r) = 0. \quad (3.37)$$

A eq. 3.37 é uma equação diferencial não homogênea de segunda ordem, o que significa que uma solução dessa equação pode ser escrita como a soma da solução da parte homogênea com uma solução particular:

$$\psi(r) = \varphi_h(r) + \varphi_p(r), \quad (3.38)$$

em que  $\varphi_h(r)$  é a solução da equação homogênea associada (quando  $U(r) = 0$ ) e  $\varphi_p(r)$  é uma solução particular. A equação homogênea associada à eq. 3.37 é conhecida como Equação de Helmholtz e caracteriza, no caso de  $U(r) = 0$ , o comportamento de uma partícula livre uma vez que, se o potencial é constante (neste caso, nulo) a força que age sobre a partícula é nula ( $F = -\nabla U$ ). Uma possível solução para a parte homogênea é:

$$\varphi_h(r) = A e^{ik_i r}, \quad (3.39)$$

em que  $A$  é uma constante, e  $k_i$  é o vetor de onda incidente. Essa função é também conhecida como função de onda plana.

Após a colisão, uma fração das partículas incidentes é espalhada pelo potencial  $V(r)$  na forma de uma onda esférica divergente, e a outra segue sem modificação, na forma de uma onda plana. Sendo assim, uma solução particular da equação de Schrödinger habilitada a descrever o problema de espalhamento após a colisão, deve ser uma função de ondas esféricas divergentes:

$$\varphi_p(r) = B f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ik_r r}}{r}, \quad (3.40)$$

em que  $B$  é uma constante,  $k_r$  é o vetor de onda espalhada e  $f_k(\theta, \varphi)$  é chamada amplitude de espalhamento.

Dessa forma, teremos como solução assintótica para o problema de espalhamento a equação abaixo:

$$\psi \sim C \left[ e^{ik_i r} + f_k(\theta, \varphi) \left( \frac{e^{ik_r r}}{r} \right) \right]. \quad (3.41)$$

Na eq. 3.41,  $k_i$  e  $k_r$  são, respectivamente, os vetores de onda incidente e emergente. Como o espalhamento é elástico, esses vetores devem ser iguais em módulo e têm o valor  $k_i = k_r = k = p/\hbar$ , em que  $p$  é o momento linear da partícula incidente.

Substituindo a eq. 3.39 em eq. 3.5 encontra-se a expressão para  $J_{in}$ , e substituindo a eq. 3.41 em eq. 3.5, encontra-se  $J_{out}$ . Combinando as expressões encontradas com a definição de SCD, obtém-se a seguinte relação:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2. \quad (3.42)$$

A solução 3.41 subentende uma condição de contorno que deve ser atendida para que a eq. 3.37 descreva o problema de espalhamento.

### 3.2.4 Equação de Lippmann-Schwinger

Uma maneira de obter uma solução geral para o problema de espalhamento é resolver a equação de Schrödinger, com as devidas condições de contorno, através do método da função de Green.

Sendo  $|\phi\rangle$  o autovetor de estado associado ao Hamiltoniano da partícula livre, isto é,  $H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ , e  $|\psi\rangle$  o autovetor associado ao Hamiltoniano completo, ou seja,  $(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , pode-se propor uma solução geral que tenha a forma:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle, \quad (3.43)$$

que condiz com a condição de que  $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$  quando  $V \rightarrow 0$ . A eq. 3.43 é conhecida como equação de Lippmann-Schwinger na forma independente de representação. Essa equação segue da equação de Schrödinger e possibilita introduzir as condições de contorno do problema de espalhamento.

Note que o operador  $\frac{1}{E - H_0}$  na eq. 3.43 não é definido para qualquer autovalor de  $H_0$ . Para contornar essa singularidade, torna-se a energia “levemente” complexa, adicionando ao denominador um termo  $\pm i\epsilon$ , onde  $\epsilon \ll 1$ . Com isso, a eq. 3.43 passa a ser escrita como:

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + \pm i\epsilon} V |\psi^\pm\rangle, \quad (3.44)$$

onde os sinais  $\pm i\epsilon$  referem-se às condições de contorno a adotar.

Na forma integral, a equação de Lippmann-Schwinger pode ser escrita na representação das coordenadas ou dos momentos, respectivamente, pelas expressões:

$$\langle x|\psi^\pm\rangle = \langle x|\phi\rangle + \int d^3x' \left\langle x \left| \frac{1}{E - H_0 + \pm i\epsilon} \right| x' \right\rangle \langle x'|V|\psi^\pm\rangle, \quad (3.45)$$

$$\langle p|\psi^\pm\rangle = \langle p|\phi\rangle + \int d^3p' \left\langle p \left| \frac{1}{E - H_0 + \pm i\epsilon} \right| p' \right\rangle \langle p'|V|\psi^\pm\rangle, \quad (3.46)$$

sendo essas o ponto de partida para aplicação da teoria a vários problemas de interesse, como pode ser encontrado nas referências [45–49].

## 4 Elementos da Mecânica Quântica no Espaço de Fase

Neste capítulo, apresentamos aspectos importantes da Mecânica Quântica no Espaço de Fase, abordando os formalismos de Wigner e Weyl [7, 50].

O estudo da Mecânica Quântica no Espaço de Fase, embora pareça problemático devido ao Princípio da Incerteza de Heisenberg, traz vantagens teóricas e práticas por este espaço representar a variedade natural na qual uma teoria cinética é escrita. Ainda que as funções  $f(q, p)$  não possam representar observáveis físicos em sistemas do mundo microscópico, é possível obter um formalismo para a Mecânica Quântica que trabalhe com funções desse tipo e esteja de acordo com os princípios estabelecidos pela teoria quântica.

Wigner propôs, em 1932, um formalismo deste tipo para a MQ através da construção de uma espécie de transformada de Fourier da matriz densidade, que ficou conhecida como função de Wigner. Naquele momento, seu objetivo era efetuar correções quânticas à Mecânica Estatística, sem abandonar o conceito de espaço de fase, a fim de estudar problemas como a superfluidez do hélio, que não podiam ser solucionados pela Mecânica Estatística Clássica. No entanto, o formalismo proposto por Wigner mostrou-se útil não somente para a Mecânica Estatística Quântica, e hoje sabe-se que ele também pode ser usado em problemas de uma única partícula, além de possuir aplicações em diversas áreas como Física Nuclear, Matéria Condensada, Física de Plasma e Óptica Quântica.

O formalismo proposto por Wigner teve diversos desdobramentos tais como, por exemplo, o desenvolvimento de Moyal [50] e o da Mecânica Quântica Simplética (MQS), formulada por Oliveira et al. [19] em 2002, ao partir da teoria de representação de grupo no espaço de fase e o uso do Produto Estrela.

Como o nosso objetivo neste trabalho é introduzir a Teoria da Propagadores na MQS, apresentaremos nas próximas seções as bases da Teoria de Wigner como foi proposta inicialmente e, no Capítulo 5, os elementos da MQS, a fim de desenvolvermos nossa formulação da Teoria de Propagadores no capítulo seguinte.

### 4.1 Elementos da Formulação de Wigner

Em termos da matriz densidade, uma das equações importantes da MQ é a equação de Liouville-Von Neumann [5]:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)], \quad (4.1)$$

na qual  $H(t)$  é o hamiltoniano do sistema e  $\rho(t) = \sum_i \omega_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|$  é a matriz densidade.

Em problemas de Mecânica Estatística Quântica a matriz densidade,  $\rho(t)$ , é o objeto que sintetiza todas as informações sobre o sistema. Ela apresenta as seguintes propriedades:

- $\rho$  é hermitiana, isto é:  $\rho^\dagger = \rho$
- $\rho$  possui traço unitário, isto é:  $\text{tr}(\rho) = 1$ .

O valor esperado de uma grandeza  $A$  nessa formulação pode ser obtido através da relação:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A). \quad (4.2)$$

Partindo das relações de completeza e do produto escalar usados na MQ usual, é possível escrever o operador densidade,  $\rho$ , no caso unidimensional, como:

$$\begin{aligned} \rho &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dp' dp'' dq' dq'' |q''\rangle \langle q'' | p''\rangle \langle p'' | \rho | p'\rangle \langle p' | q'\rangle \langle q'| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp' dp'' dq' dq''}{2\pi\hbar} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p'' q'' - p' q') \right] \langle p'' | \rho | p'\rangle |q''\rangle \langle q'|, \end{aligned} \quad (4.3)$$

e usando a transformação de variáveis:

$$2p = p' + p'', \quad 2q = q' + q'', \quad u = p'' - p', \quad v = q'' - q', \quad (4.4)$$

obtém-se:

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dpdq}{2\pi\hbar} f(p, q) \Delta(p, q), \quad (4.5)$$

onde:

$$f(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} du \exp \left( \frac{i}{\hbar} pv \right) \langle q - v/2 | \rho | q + v/2 \rangle, \quad (4.6)$$

$$\Delta(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp \left( \frac{i}{\hbar} qu \right) |p - u/2\rangle \langle p + u/2|. \quad (4.7)$$

A função  $f(q, p)$  é denominada [16, 17] transformada de Weyl da matriz densidade em relação aos operadores momento e posição, também conhecida como *função de Wigner* ou *transformada de Weyl-Wigner*; já o termo  $\Delta(p, q)$  representa uma base de operadores no espaço de fase. Dessa forma, nota-se que com a transformação 4.4 é possível decompor o operador  $\rho$  (ou qualquer outro) em uma base no espaço de fase.

Também é possível demonstrar que [16]:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \Delta(p, q) &= |q\rangle \langle q|, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} \Delta(p, q) &= |p\rangle \langle p|. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Aplicando o operador densidade nos dois membros das equações 4.8 e usando a transformada de Weyl da matriz densidade, eq. 4.6, obtém-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} f(p, q) = |\Psi(q)|^2 = \sigma(q) \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} f(p, q) = |\Phi(p)|^2 = \sigma(p). \quad (4.9)$$

As relações 4.9 nos mostram que a integração da função de Wigner no espaço dos momentos e das posições nos permite recuperar as probabilidades associadas às funções de onda nos espaços das posições e dos momentos, respectivamente.

Para resolver problemas da MQ no espaço de fase através da transformada de Weyl, também é importante verificar como se dá o produto de operadores nessa formulação, uma vez que esse cálculo é utilizado ao realizar medidas sucessivas e na observação das regras de comutação entre os observáveis. Pode-se mostrar [18] que a transformada de Weyl do produto de dois operadores é dada por:

$$AB(q, p) = A(p, q) \exp \left[ \frac{\hbar}{2i} \left( \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \right) \right] B(p, q). \quad (4.10)$$

Note que a transformada de Weyl do produto de operadores  $AB$  não se resume ao produto das transformadas  $A(q, p)B(q, p)$ , e envolve em sua definição um operador exponencial, que denominamos *produto estrela*, denotado pelo símbolo  $\star$  e definido como:

$$\star \equiv \exp \left[ \frac{\hbar}{2i} \left( \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \right) \right]. \quad (4.11)$$

O produto estrela é também conhecido na literatura como produto de Moyal e é importante no campo da matemática denominado Geometria não-comutativa [50]. Dado o interesse dessa operação na formulação de Wigner, devemos destacar algumas de suas propriedades.

#### 4.1.1 Propriedades do Produto Estrela

1. Produto  $\star$  de uma constante,  $c$ , por uma função no espaço de fase,  $f(q, p)$ :

$$c \star f(q, p) = f(q, p) \star c = cf(q, p).$$

2. Produto  $\star$  de duas funções no espaço de fase,  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$ :

$$f(q, p) \star g(q, p) = f \left( q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}}, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right) g(q, p) = f(q, p) g \left( q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}}, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right).$$

3. Associatividade do produto  $\star$ :

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)).$$

4. Não comutatividade do produto  $\star$ :

$$f(q, p) \star g(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p)$$

5. Complexo conjugado do produto  $\star$  de duas funções no espaço de fase:

$$(f \star g)^\dagger = g^\dagger \star f^\dagger.$$

6. Integração do produto  $\star$  de duas funções no espaço de fase, desde que as funções sejam nulas no infinito:

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dq dp = \int f(q, p) g(q, p) dq dp.$$

As demonstrações das propriedades acima apresentadas podem ser consultadas em detalhes nas referências [21, 22].

#### 4.1.2 Função de Wigner e suas propriedades

Na eq. 4.6, definimos a função de Wigner associada ao operador densidade, considerando  $q$  e  $p$  coordenadas unidimensionais. Essa definição, construída para ser utilizada em problemas de Mecânica Estatística Quântica, pode ser extrapolada para o estudo de um estado puro qualquer. Usando a definição do operador densidade para um estado puro na eq. 4.6, a função de Wigner associada a um estado  $|\psi\rangle$  se reduz a:

$$f(p, q; t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \Psi(q - v/2; t) \Psi^*(q + v/2; t) \quad (4.12)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \Phi(p + u/2; t) \Phi^*(p - u/2; t), \quad (4.13)$$

ou seja, é possível construir uma função de Wigner a partir de um estado  $\Psi(q, t)$  no espaço das posições ou do seu correspondente no espaço dos momentos,  $\Phi(p, t)$ , obtidos a partir da formulação usual, aplicando neles a transformação de Weyl. Essa transformação leva os estados do espaço de Hilbert para uma representação no espaço de fase.

A função de Wigner é uma função denominada quasi-probabilidade: embora seja real,  $f(q, p; t)$  pode assumir valores negativos; por isso, não pode ser encarada como uma função de probabilidade. Podemos constatar essa característica da função de Wigner analisando as probabilidades associadas aos estados  $|\alpha\rangle$  e  $|\beta\rangle$ , com as correspondentes funções de Wigner  $f_\alpha$  e  $f_\beta$ , respectivamente. Temos, então:

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = (2\pi\hbar)^{-1} \int f_\alpha(q, p) f_\beta(q, p) dq dp. \quad (4.14)$$

Analisando o lado esquerdo da equação acima, percebemos que o resultado deve ser positivo ou, se  $|\alpha\rangle$  e  $|\beta\rangle$  forem ortogonais, nulo. Porém  $f_\alpha$  e  $f_\beta$  não são necessariamente



nulas, o que nos leva a concluir que  $f_\alpha$  e  $f_\beta$  podem assumir valores positivos e negativos para que a integral se anule. Como a probabilidade deve ser positiva, dizemos que  $f(q, p)$  é uma função quasi-probabilidade. Embora ela não nos forneça diretamente densidades de probabilidade no espaço das posições ou dos momentos, podemos calculá-las a partir das expressões 4.9, que envolvem a função de Wigner.

Além das densidades de probabilidade associadas à integração de  $f(q, p)$  no espaço dos momentos e das posições, também identificamos uma propriedade da função de Wigner associada à sua normalização. Pode-se mostrar [16] que:

$$\int f(q, p) dq dp = \int dq \langle q | \rho | q \rangle = \text{Tr } \rho = 1. \quad (4.15)$$

Outra propriedade da função de Wigner decorre da desigualdade de Cauchy-Schwarz e traz em seu conteúdo a informação do *Princípio da Incerteza*:

$$|f(q, p)| \leq \frac{2}{h}. \quad (4.16)$$

A desigualdade acima nos indica que a função de Wigner é diferente de zero numa região cuja área do espaço de fase é menor ou igual a  $2/h$ . Podemos então concluir que o espaço de fase no qual estamos trabalhando não é simplesmente o espaço de fase clássico pois contém, em sua estrutura, o princípio básico da MQ de que posição e momento não podem ser determinados simultaneamente com precisão.

### 4.1.3 Observáveis na formulação de Wigner

A eq. 4.6 nos indica como obter uma função no espaço de fase que seja correspondente ao operador densidade,  $\rho$ , usualmente definido no espaço de Hilbert. Esse método pode ser generalizado para qualquer operador, de modo que, dado  $\hat{A}$  no espaço de Hilbert, pode-se obter uma função equivalente a ele no espaço de fase,  $A_w(q, p)$ , através da relação:

$$A_w(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(\frac{i}{h}pv\right) \langle q - v/2 | \hat{A} | q + v/2 \rangle \quad (4.17)$$

Com o uso da propriedade 4.15, pode-se mostrar que o valor médio do observável associado ao operador  $\hat{A}$  e à função  $A_w(q, p)$  pode ser determinado através da expressão:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \int dq dp A_w(q, p) f(q, p) = \text{Tr}(\rho \hat{A}), \quad (4.18)$$

onde  $f(q, p)$  é a função de Wigner associada ao estado  $|\Psi\rangle$ , obtida com a eq. 4.12.

### 4.1.4 A evolução temporal da função de Wigner

É possível estabelecer a evolução temporal da função de Wigner partindo da equação de Liouville-von Neumann, apresentada na eq. 4.1, ou seja:

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

Usando o operador:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{ipv/\hbar} \langle q - v/2 | (\cdot) | q + v/2 \rangle, \quad (4.19)$$

e aplicando-o nos dois membros de 4.1, obtém-se:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{ipv/\hbar} \langle q - v/2 | \rho | q + v/2 \rangle \right\} \\ = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dv e^{ipv/\hbar} \langle q - v/2 | [H, \rho] | q + v/2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Com os resultados 4.6 e 4.10, podemos concluir que:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(q, p, t) = H_w(q, p, t) \star f(q, p, t) - f(q, p, t) \star H_w(q, p, t), \quad (4.21)$$

ou, simplesmente:

$$i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} = \{H_w, f\}_M, \quad (4.22)$$

onde o termo  $\{a, b\}_M = a \star b - b \star a$  é conhecido como *parêntese de Moyal*.

O termo  $H_w$  que aparece na evolução temporal da função de Wigner é a transformada de Weyl do operador hamiltoniano usual. Pode-se mostrar que no limite em que a constante de Planck tende a zero, o parêntese de Moyal se reduz ao parêntese de Poisson, recuperando a equação de Liouville clássica, eq. 2.14, com o hamiltoniano transformado ( $H_w$ ) no lugar do hamiltoniano clássico ( $H$ ).

Note que a eq. 4.22 preserva a forma algébrica da equação de Liouville-Von Neumann da formulação usual. Esse fato é consequência da propriedade que nos diz que o produto de dois observáveis corresponde ao produto estrela das suas respectivas transformadas de Weyl. Analisando essa semelhança, pode-se imaginar que deve existir uma função de Wigner associada a uma equação de autovalores, tal como aparece no formalismo usual, mas agora envolvendo o produto estrela. De fato pode-se mostrar [18] que essa equivalência existe, isto é, dada a equação de autovalores da MQ usual:

$$H\Psi = E\Psi,$$

existe uma função de Wigner,  $f(q, p)$ , associada à autofunção  $\Psi$ , de modo que:

$$H \star f(q, p) = H_w f(q, p) = E f(q, p), \quad (4.23)$$

sendo  $E$  o autovalor do hamiltoniano.

Com isso, conclui-se que há três caminhos possíveis para obter a função de Wigner através do formalismo apresentado nesta seção:

- Obter  $\Psi$  através do formalismo usual e calcular a transformada de Weyl-Wigner dessa função, usando a relação 4.12;
- Calcular a transformada de Weyl-Wigner do operador hamiltoniano,  $H_w$ , e usar a equação equivalente à equação de Liouville-Von Neumann, eq. 4.22;
- Usar a equação de autovalores no espaço de fase, eq. 4.23.

Para elucidar o primeiro processo consideraremos na seção a seguir o caso do Oscilador Harmônico Unidimensional.

#### 4.1.5 Oscilador Harmônico Simples Unidimensional na Formulação de Wigner

Como aplicação dos desenvolvimentos das seções anteriores, obteremos a função de Wigner para o Oscilador Harmônico Simples unidimensional, tomando a transformada de Weyl-Wigner da função de estado obtida com o formalismo usual, na descrição de Schrödinger.

Considerando um tratamento não-relativístico e independente do tempo, a equação de Schrödinger para o OHS unidimensional, de massa  $m$  e frequência angular  $\omega$ , é:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.24)$$

A solução da eq. 4.24 pode ser obtida de diversas formas, como pelo método de expansão em série de potências [34] ou usando o formalismo algébrico proposto por Dirac [31], e é bem estabelecido na literatura. Na representação das posições,  $\psi(x)$  é escrita em termos dos polinômios de Hermite como:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left( \frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}(\kappa x)^2\right) H_n(\kappa x), \quad (4.25)$$

onde  $\kappa = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ .

Substituindo a eq. 4.25 na transformada de Weyl-Wigner, eq. 4.12, obtemos a relação:

$$f_n(x, p) = \frac{1}{\pi \hbar} \frac{1}{2^n n!} \frac{e^{-(\kappa x)^2}}{\sqrt{\pi}} \int d\xi \exp\left[-\xi^2 - \frac{i}{\hbar} 2p \frac{\xi}{\kappa}\right] H_n(\kappa x + \xi) H_n(\kappa x - \xi), \quad (4.26)$$

onde  $\xi = \kappa \frac{v}{2}$ .

Usando a transformação de coordenadas

$$\eta = \xi + \frac{ip}{\hbar\kappa}, \quad (4.27)$$

podemos reescrever a eq. 4.26 como:

$$f_n(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \frac{1}{2^n n!} \frac{e^{-\left((\kappa x)^2 + \left(\frac{p}{\hbar\kappa}\right)^2\right)}}{\sqrt{\pi}} \int d\eta e^{-\eta^2} H_n(\eta + z_1) H_n(-\eta - z_2), \quad (4.28)$$

em que as variáveis  $z_1$  e  $z_2$  são dadas por:

$$z_1 = \kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa}, \quad z_2 = -\kappa x - \frac{ip}{\hbar\kappa}. \quad (4.29)$$

Usando a propriedade de simetria dos polinômios de Hermite

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x), \quad (4.30)$$

e a relação entre os polinômios de Hermite e os polinômios de Laguerre [51]:

$$\int d\eta e^{-\eta^2} H_n(\eta + z_1) H_n(\eta + z_2) = 2^n n! \sqrt{\pi} L_n(-2z_1 z_2), \quad (4.31)$$

conclui-se que a função de Wigner associada ao OHS unidimensional é dada por:

$$f_n(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{2}{\hbar\omega} H(x, p)} L_n\left(\frac{4}{\hbar\omega} H(x, p)\right) \quad (4.32)$$

Esse resultado é coerente com outros métodos para obtenção da função de Wigner. Na referência [52], a função de Wigner para o OHS unidimensional é obtida através da equação de autovalores 4.23 e também resulta em uma distribuição em termos dos polinômios de Laguerre. Além de concordar com resultados teóricos obtidos por outros métodos, a função 4.32 é coerente com valores obtidos em laboratório, através de processos de tomografia quântica [53–55].

#### 4.1.6 Seção de Choque e a Função de Wigner

Uma das questões importantes na formulação de Wigner é como expressar o resultado de uma experiência de espalhamento nesta formulação. Com esse objetivo consideramos um pacote de ondas (feixe de partículas) proximamente uniforme [4] com momentum  $p = p_0$  que incide sobre um potencial localizado  $V$ . Uma condição física para a realização da experiência é que a extensão do pacote de ondas (de ordem  $L^{1/2}$ ) seja bem maior que a região de alcance do potencial. Na experiência de espalhamento, depois que o pacote interage com o potencial, o feixe emergente (espalhado) é detectado no ângulo sólido  $d\Omega = \sin\theta d\phi$ , como sugere a figura 3. Depois de um tempo suficientemente longo, todas as partículas espalhadas são detectadas e podemos escrever para as partículas espalhadas que [26]:

$$\frac{dN_{\text{esp}}}{d^3p} = \int d^3R f(p, R, t)|_{t \rightarrow \infty}. \quad (4.33)$$

Lembrando que a densidade de corrente de probabilidade é dada por:

$$J(q, t) = \frac{1}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi) = \int d^3 p v_p f(q, p, t), \quad (4.34)$$

com  $v_p = p/m$ , tem-se para o fluxo incidente ao longo da direção  $\hat{p}_0$ :

$$\frac{dN_{inc}}{dA} = \int_{-\infty}^{\infty} dt J_0 \cdot \hat{p}_0 f_0(q, p, t), \quad (4.35)$$

onde  $f_0(q, p, t)$  é a função de Wigner da partícula livre.

Deve-se notar que para  $dN_{inc}/dA$  tem-se também a expressão [26]:

$$\frac{dN_{inc}}{dA} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 p \int d^3 q \delta(q \cdot \hat{v}_0) \varphi^* \left( p - \frac{1}{2} q \right) \varphi \left( p - \frac{1}{2} q \right). \quad (4.36)$$

Segue então pela definição de SCD que:

$$\frac{d\sigma}{d^3 p} = \frac{\int d^3 q f(q, p, t)|_{t \rightarrow \infty}}{dN_{inc}/dA}, \quad (4.37)$$

onde, para calcular  $dN_{inc}/dA$ , pode-se usar eq. 4.35 ou eq. 4.36.



## 5 Elementos da Mecânica Quântica Simplética

No formalismo de Wigner as variáveis dinâmicas, antes representadas por operadores no espaço de Hilbert (MQ usual), passam a ser descritas por funções no espaço de fase, sendo o produto dessas funções determinado pelas propriedades do produto estrela. Ou seja, pode-se definir um operador estrela  $\hat{A} = A(q, p) \star$  que, ao atuar em uma função  $B(q, p)$  resulta em  $\hat{A}(B(q, p)) = A(q, p) \star B(q, p)$ . A Mecânica Quântica Simplética (MQS) explora este fato e busca uma representação da álgebra de Lie do grupo de Galilei estendida em termos de operadores definidos usando esse produto estrela.

Ao longo desse capítulo, veremos como os postulados da MQ são construídos nessa formulação, de que forma a função de onda obtida dela pode ser relacionada com a função de Wigner e, para comparação com a formulação usual, consideraremos o caso do Oscilador Harmônico Simples Unidimensional na MQS.

### 5.1 Elementos da MQS

Consideremos  $\mathbf{Q}$  uma variedade de dimensão  $n$ , na qual cada ponto é representado por coordenadas  $q = (q^1, \dots, q^n)$ . No espaço cotangente a essa variedade  $\mathbf{T}^*\mathbf{Q}$ , cada ponto é especificado pelo par  $(q, p) = (q^1, \dots, q^n; p_1, \dots, p_n)$ .

Define-se uma estrutura simplética em  $\mathbf{T}^*\mathbf{Q}$  através da 2-forma:

$$\omega = dq \wedge dp, \quad (5.1)$$

onde

$$\Lambda = \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}}. \quad (5.2)$$

Para duas funções,  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$ , podemos escrever:

$$\begin{aligned} X_f &= f\Lambda = \frac{\partial f}{\partial q} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \frac{\partial f}{\partial p} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}}, \\ X_g &= g\Lambda = \frac{\partial g}{\partial q} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \frac{\partial g}{\partial p} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Podemos também verificar que  $\{f, g\} = \omega(f\Lambda, g\Lambda) = f\Lambda g$ , onde  $\{\cdot, \cdot\}$  é o parêntese de Poisson [18].

O espaço das funções  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$  é o espaço das funções definidas sobre o espaço de fase,  $\Gamma$ .

A Mecânica Quântica Simplética (MQS) [18, 21, 56] baseia-se na construção de um espaço de Hilbert formado por um conjunto de funções complexas  $\Psi(q, p; t)$ , de quadrado integrável em  $\Gamma$ , de modo que:

$$\int dqdp \Psi^\dagger(q, p; t) \star \Psi(q, p; t) = \int dqdp \Psi^\dagger(q, p; t) \Psi(q, p; t) < \infty. \quad (5.4)$$

Esse conjunto de funções deve obedecer aos axiomas do espaço de Hilbert, tendo seu produto interno definido como:

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle_\Gamma = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \star \Psi_n(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \Psi_n(q, p; t). \quad (5.5)$$

Essas funções também devem satisfazer as condições de normalização:

$$\int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \star \Psi_m(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \Psi_m(q, p; t) = 1, \quad (5.6)$$

e podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \Psi(q, p) &= \langle q, p | \Psi \rangle, \\ \Psi(q, p)^\dagger &= \langle \Psi | q, p \rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

sendo  $\{|q, p\rangle\}$  um conjunto de autokets de dois operadores hermitianos  $\bar{Q}$  e  $\bar{P}$ ; esses autokets de  $\bar{Q}$  e  $\bar{P}$  obedecem a relação de completeza:

$$\int dqdp |q, p\rangle \langle q, p| = 1. \quad (5.8)$$

O conjunto de funções  $\Psi(q, p, t)$ , com as relações 5.4 e 5.6, define o que chamamos de *Espaço de Hilbert Simplético*,  $\mathbf{H}_\Gamma$ .

Para determinar a álgebra desse espaço, vamos considerar transformações unitárias  $U : \mathbf{H}_\Gamma \rightarrow \mathbf{H}_\Gamma$  tal que  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$  seja invariante.

Como demonstrado por Oliveira et al [19], considerando-se os operadores

$$\begin{aligned} \hat{P}_i \Psi(q, p; t) &= p_i \star \Psi(q, p; t) = \left( p_i - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \Psi(q, p; t), \\ \hat{Q}_i \Psi(q, p; t) &= q_i \star \Psi(q, p; t) = \left( q_i + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \Psi(q, p; t), \end{aligned} \quad (5.9)$$

nota-se que:

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar \delta_{jk} \quad (5.10)$$

e podemos resgatar a álgebra de Lie do grupo de Galilei no espaço  $\mathbf{H}_\Gamma$ .

Das definições 5.9, segue que os geradores da translação temporal ( $H$ ), da rotação ( $L_i$ ) e do boost ( $K_i$ ) assumem as formas:

$$\begin{aligned} \hat{H} \Psi(q, p; t) &= h(q^\star, p^\star) \Psi(q, p; t) = h \star \Psi(q, p; t) = \frac{1}{2m} \left[ (p_1^\star)^2 + (p_2^\star)^2 + (p_3^\star)^2 \right] \Psi(q, p; t) \\ &= \frac{1}{2m} \left[ \left( p_1 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^2 + \left( p_2 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^2 + \left( p_3 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_3} \right)^2 \right] \Psi(q, p; t), \end{aligned} \quad (5.11)$$



$$\begin{aligned}\widehat{L}_i\Psi(q, p; t) &= l_i(q\star, p\star)\Psi(q, p; t) = \varepsilon_{ijk}(q_j\star)(p_k\star)\Psi(q, p; t) \\ &= \left( \varepsilon_{ijk}q_jp_k - \frac{i\hbar}{2}\varepsilon_{ijk}q_j\frac{\partial}{\partial p_k} + \frac{i\hbar}{2}\varepsilon_{ijk}p_j\frac{\partial}{\partial q_k} + \frac{\hbar^2}{4}\varepsilon_{ijk}\frac{\partial^2}{\partial q_j\partial p_k} \right)\Psi(q, p; t),\end{aligned}\quad (5.12)$$

$$\widehat{K}_i\Psi(q, p; t) = k_i(q\star, p\star)\Psi(q, p; t) = (mq_i\star - tp_i\star)\Psi(q, p; t). \quad (5.13)$$

Com efeito, mostra-se que esses geradores, incluindo o gerador das translações espaciais ( $P_i$ ), obedecem à álgebra de Lie do grupo de Galilei [20, 22], definida no capítulo 3. Além disso,  $\widehat{P}$  e  $\widehat{Q}$  satisfazem a relação de Heisenberg, eq. 5.10, o que nos indica que essa formulação é compatível com o princípio fundamental da MQ.

Trabalhando com operadores proporcionais à identidade,  $\bar{P}_j = 2p_j\mathbf{1}$  e  $\bar{Q}_j = 2q_j\mathbf{1}$ , ( $j = 1, 2, 3$ ), observa-se que  $\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_j$  transformam-se como posição e momento, satisfazendo as relações:

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\widehat{K}\right)\bar{Q}_j\exp\left(\frac{i}{\hbar}v\widehat{K}\right) &= \bar{Q}_j + v_jt\mathbf{1}, \\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\widehat{K}\right)\bar{P}_k\exp\left(\frac{i}{\hbar}v\widehat{K}\right) &= \bar{P}_k + mv_k\mathbf{1};\end{aligned}\quad (5.14)$$

$\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_j$  não podem ser avaliados como os observáveis físicos posição e momento, pois constata-se que eles comutam entre si, isto é:

$$[\bar{Q}_j, \bar{P}_k] = 0. \quad (5.15)$$

Entretanto, eles são hermitianos e, pelo teorema espectral, é possível determinar um conjunto de autovetores normalizados,  $|q, p\rangle$ , tal que

$$\bar{Q}_j|q, p\rangle = q|q, p\rangle \quad \text{e} \quad \bar{P}_j|q, p\rangle = p|q, p\rangle, \quad (5.16)$$

onde são válidas as relações:

$$\langle q, p | q', p' \rangle = \delta(q - q')\delta(p - p'), \quad (5.17)$$

$$\int dqdp|q, p\rangle\langle q, p| = \mathbf{1}. \quad (5.18)$$

Note que os operadores  $\bar{Q}_j$  e  $\bar{P}_j$  tem autovalores associados  $q_j$  e  $p_j$ , respectivamente, que podem ser encarados como coordenadas de um espaço de fase. Esse espaço de fase, no entanto, carrega as características da MQ através do produto estrela,  $\star$ . Quando projetamos um vetor  $|\Psi(t)\rangle$  sobre o espaço  $\mathbf{H}_\Gamma$ , gerado pelos kets  $|q, p\rangle$ , obtemos uma função  $\Psi(q, p, t)$ :

$$\Psi(q, p, t) = \langle q, p | \Psi(t) \rangle, \quad (5.19)$$

o que justifica as relações 5.7 e o produto escalar 5.5.

$\Psi(q, p, t)$  é uma função de estado mas, diferente da formulação usual, seu módulo ao quadrado não está relacionado à amplitude de probabilidade uma vez que as coordenadas  $q$  e  $p$ , que aparecem em seu conteúdo, são autovalores dos operadores  $\bar{Q}$  e  $\bar{P}$ , que são representações das coordenadas da variedade simplética, mas não constituem os observáveis posição e momento.

Concluindo esta seção notamos que o complexo conjugado de 5.19 é obtido através da projeção do bra  $\langle \Psi |$  sobre o espaço  $\mathbf{H}_\Gamma$ , i.e.:

$$\Psi(q, p, t)^\dagger = \langle \Psi(t) | q, p \rangle, \quad (5.20)$$

e o produto interno entre dois vetores  $|\Psi_1\rangle$  e  $|\Psi_2\rangle$ , pertencentes a  $\mathbf{H}_\Gamma$ , pode ser escrito de uma forma consistente, como:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &= \left\langle \Psi_1 \left| \left( \int dqdp |q, p\rangle \langle q, p| \right) \right| \Psi_2 \right\rangle = \\ &= \int dqdp \Psi_1^\dagger(q, p) \Psi_2(q, p) = \int dqdp \Psi_1^\dagger(q, p) \star \Psi_2(q, p). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Nas próximas subseções, veremos como os postulados da MQ aparecem nessa formulação e de que forma a função  $\Psi(q, p, t)$  está associada à função de Wigner, que nos dará a interpretação física do problema através das relações 4.9 e 4.18.

## 5.2 Observáveis na formulação da MQS

Na MQS, os observáveis  $A$  passam a ser representados por operadores estrela de modo que, ao projetar o vetor  $A|\Psi\rangle$  na base  $\{|q, p\rangle\}$ , teremos:

$$\langle q, p | A | \Psi \rangle = \int dq' dp' \langle q, p | A | q', p' \rangle \langle q', p' | \Psi \rangle. \quad (5.22)$$

Usando a relação 5.17, pode-se propor [19]

$$\langle q, p | A | q, p \rangle = \hat{A} \delta(p - p') \delta(q - q'), \quad (5.23)$$

e associando-se as duas últimas relações, obtém-se:

$$\langle q, p | A | \Psi \rangle = a(q \star, p \star) \Psi(q, p) = a(q, p) \star \Psi(q, p). \quad (5.24)$$

Para calcular o valor médio do observável  $\hat{A}$  no estado  $\Psi$ , analogamente ao que é feito na MQ usual, deve-se realizar o produto interno  $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$ . Usando as relações de completudeza no espaço de Hilbert simplético, obtemos:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \int dqdp \int dq' dp' \langle \Psi | q, p \rangle \langle q, p | A | q', p' \rangle \langle q', p' | \Psi \rangle, \quad (5.25)$$

que, por eq. 5.23 e eq. 5.24, nos dá:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dqdp a(q, p) \left[ \Psi^\dagger(q, p) \star \Psi(q, p) \right]. \quad (5.26)$$

No caso particular em que  $\hat{A} = \hat{Q}$ , temos que:

$$\begin{aligned}\langle \hat{Q} \rangle &= \int dqdpq [\Psi^\dagger(q, p) \star \Psi(q, p)] = \int dqdpq [\Psi^\dagger(q, p) \Psi(q, p)] \\ &= \int dqdpq [\Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)] = \int dq \sigma(q).\end{aligned}\quad (5.27)$$

Note que, por essa relação, o termo  $\sigma(q) = \int dp [\Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)]$  representa a densidade de probabilidade associada ao observável  $\hat{Q}$ , no valor  $q$ . Analogamente, podemos associar a probabilidade relativa ao momento com o termo  $\sigma(p) = \int dq [\Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)]$ .

### 5.3 Evolução temporal da função de estado na MQS

Considerando que o gerador das translações temporais na MQS é dado por  $\hat{H} = h\star$  e que o operador evolução temporal é  $U(t) = e_\star^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}}$  (vide eq. 5.31) segue que, para um observável  $\hat{A}$ , devemos ter pela transformação usual de operadores:

$$\hat{A}(t) = e_\star^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \hat{A}(0) e_\star^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}}, \quad (5.28)$$

o que nos dá:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = [\hat{A}(t), \hat{H}], \quad (5.29)$$

e, em particular, para  $\hat{Q}(t)$  e  $\hat{P}(t)$

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\hat{Q}(t)}{dt} &= [\hat{Q}(t), \hat{H}] \\ i\hbar \frac{d\hat{P}}{dt} &= [\hat{P}(t), \hat{H}].\end{aligned}\quad (5.30)$$

Definindo a exponencial de um operador estrela,  $e_\star^{\hat{A}}$ , como:

$$e_\star^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}(\hat{A})^2 + \frac{1}{3!}(\hat{A})^3 + \dots = 1 + a\star + \frac{1}{2!}a\star a\star + \frac{1}{3!}a\star a\star a\star + \dots \quad (5.31)$$

e usando o resultado da eq. 5.28, com  $\hat{H} = h\star$ , obtém-se que o valor médio do observável  $\hat{A}$  pode ser escrito como:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \int dqdp \varphi^\dagger e_\star^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \hat{A}(0) e_\star^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \varphi, \quad (5.32)$$

onde  $\varphi$  não depende explicitamente do tempo.

Definindo:

$$\psi(t) = e_\star^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \varphi = e_\star^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \psi(0), \quad (5.33)$$

segue que

$$\psi^\dagger(t) = \psi^\dagger(0) e_\star^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}}. \quad (5.34)$$

Daí temos que o valor esperado de um observável  $\hat{A}(t)$  também pode ser calculado a partir da definição de estados que evoluem no tempo,  $\psi(t)$ , e operadores estacionários,  $\hat{A}(0)$ , ou seja, por eq. 5.32:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \int dq dp \psi^\dagger(t) \hat{A}(0) \psi(t) = \int dq dp \psi^\dagger(t) \star a(0) \star \psi(t). \quad (5.35)$$

Com isso observa-se que também na MQS pode-se desenvolver a teoria considerando os observáveis dependentes do tempo e os estados independentes do tempo (descrição de Heisenberg) ou os observáveis independentes do tempo e os estados dependentes do tempo (descrição de Schrödinger).

Neste caso, da descrição de Schrödinger, obtém-se que

$$\frac{d}{dt} \psi(t) = \frac{d}{dt} \left( e_{\star}^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi(0) \right) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \left( e_{\star}^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi(0) \right) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi(t). \quad (5.36)$$

Reorganizando os termos, temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H} \psi(t), \quad (5.37)$$

ou ainda, sabendo que  $\hat{H} = h\star$ ,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = h \star \psi(t) \quad (5.38)$$

que é a equação de Schrödinger da MQS e denominada equação de Schrödinger no espaço de fase.

## 5.4 Conexão com a função de Wigner

Vimos que a função  $\Psi(q, p, t)$ , obtida com o formalismo da MQS, não tem seu módulo ao quadrado associado a uma densidade de probabilidade, como acontece com a solução obtida via formalismo usual. Entretanto, vimos que o produto  $\Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t)$  está associado à densidade de probabilidade, através das relações:

$$\begin{aligned} \sigma(q) &= \int dp \left[ \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p) \right], \\ \sigma(p) &= \int dq \left[ \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p) \right]. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Analisando a semelhança entre as equações 4.9 e 5.39, encontramos uma indicação de que o produto entre as chaves pode ser interpretado como uma função de Wigner.

De fato, pode-se verificar que  $\Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) = f(q, p, t)$  satisfaz a todas as propriedades da função de Wigner, discutidas na seção 4.1.1 [20].

Por exemplo, partindo de eq. 5.38 e considerando seu conjugado,

$$-i\hbar \partial_t \Psi^\dagger(q, p, t) = \Psi^\dagger(q, p, t) \widehat{H}, \quad (5.40)$$

podemos verificar que:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \left( \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) \right) &= \widehat{H} \left( \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) \right) - \left( \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) \right) \widehat{H} \\ &= h \star f - f \star h \\ &= i\hbar\{h, f\}_M, \end{aligned} \quad (5.41)$$

ou seja, a derivada temporal dessa função recai no parêntese de Moyal, assim como foi verificado para a função de Wigner em eq. 4.22. Além disso, essa função também obedece a uma relação de normalização,

$$\int dqdp f(q, p) = \int dqdp \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p) = 1 \quad (5.42)$$

e é real, uma vez que  $f^\dagger = f$ , embora não seja necessariamente positiva.

Sendo assim, a solução da equação de Schrödinger no espaço de fase está associada à função de Wigner pela relação

$$\Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p) = f(q, p) \quad (5.43)$$

e por seu intermédio será obtida a interpretação física da teoria.

## 5.5 Autofunções de $q\star$ e $p\star$

Para ilustrar uma aplicação do formalismo da MQS, calcularemos as autofunções estacionárias associadas aos operadores  $q\star$  e  $p\star$ . Esses resultados serão resgatados ao estudarmos a Teoria de Espalhamento no espaço de fase, pois as autofunções do operador  $p\star$  coincidem com as autofunções do operador hamiltoniano da partícula livre, que retrata o estado do sistema distante do potencial de alcance finito.

Desejamos calcular as autofunções correspondentes às equações de autovalores:

$$p \star \langle q, p | \Psi_{p'} \rangle = \left( p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) \langle q, p | \Psi_{p'} \rangle = p' \langle q, p | \Psi_{p'} \rangle, \quad (5.44)$$

$$q \star \langle q, p | \Psi_{q'} \rangle = \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \langle q, p | \Psi_{q'} \rangle = q' \langle q, p | \Psi_{q'} \rangle, \quad (5.45)$$

em que notamos o autovetor de  $p\star$  com autovalor  $p'$  por  $|\Psi_{p'}\rangle$  e o autovetor de  $q\star$  com autovalor  $q'$  por  $|\Psi_{q'}\rangle$ .

Tomemos primeiro a equação de autovalores para o operador  $p\star$ , eq. 5.44. Podemos reescrevê-la como:

$$\partial_q \Psi_{p'} = \frac{2i}{\hbar} (p' - p) \Psi_{p'}, \quad (5.46)$$

onde, para simplificar a notação, estamos usando

$$\langle q, p | \Psi_{p'} \rangle = \Psi_{p'}(q, p) = \Psi_{p'}.$$

Considerando que a solução  $\Psi_{p'}$  pode ser escrita como um produto de duas funções que dependem separadamente somente dos entes  $q$  e  $p$ , teremos:

$$\Psi_{p'} = f(q)g(p). \quad (5.47)$$

Com isso, podemos reescrever eq. 5.46 como:

$$\partial_q f(q)g(p) = \frac{2i}{\hbar}(p' - p)f(q)g(p). \quad (5.48)$$

Nota-se assim que a função  $g(p)$  é uma função arbitrária, e  $f(q)$  é uma exponencial, de modo que a solução  $\Psi_{p'}$  tem a forma:

$$\langle q, p | \Psi_{p'} \rangle = \Psi_{p'}(q, p) = e^{\frac{2i}{\hbar}(p'-p) \cdot q} g(p). \quad (5.49)$$

Procedendo de maneira análoga para eq. 5.45, conclui-se que a solução  $\Psi_{q'}$  deve ter a forma:

$$\langle q, p | \Psi_{q'} \rangle = \Psi_{q'}(q, p) = e^{-\frac{2i}{\hbar}(q'-q) \cdot p} f(q), \quad (5.50)$$

onde  $f(q)$  também é uma função arbitrária.

Considerando que as funções  $f(q)$  e  $g(p)$  são normalizadas, podemos mostrar que a constante de normalização para as funções  $\Psi_{p'}$  e  $\Psi_{q'}$  é  $(2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}}$ . Com isso, temos os resultados:

$$\langle q, p | \Psi_{p'} \rangle = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} e^{\frac{2i}{\hbar}(p'-p) \cdot q} g(p), \quad (5.51)$$

$$\langle \Psi_{p'} | q, p \rangle = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} e^{-\frac{2i}{\hbar}(p'-p) \cdot q} g(p), \quad (5.52)$$

$$\langle q, p | \Psi_{q'} \rangle = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} e^{-\frac{2i}{\hbar}(q'-q) \cdot p} f(q), \quad (5.53)$$

$$\langle \Psi_{q'} | q, p \rangle = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} e^{\frac{2i}{\hbar}(q'-q) \cdot p} f(q). \quad (5.54)$$

As funções arbitrárias  $f$  e  $g$  surgem na solução das equações 5.45 e 5.44 e fazem com que existam infinitas soluções para o problema. Podemos escolher essas funções de forma que uma transformada de Fourier esteja implícita entre as autofunções  $\Psi_{q'}$  e  $\Psi_{p'}$  [57], tal como acontece na MQ usual; ou seja:

$$\Psi_{q'} \sim \int d^3 p' e^{-\frac{ip' \cdot q'}{\hbar}} \Psi_{p'}. \quad (5.55)$$

Podemos mostrar que isso é possível definindo  $g = g(p, p', \lambda)$  e  $f = f(q, q', \lambda)$  como as gaussianas expressas abaixo:

$$f = f(q, q', \lambda) = \left( \frac{1}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\lambda(2q - q')^2 / 2\hbar}, \quad (5.56)$$

$$g = g(p, p', \lambda) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/4}} e^{-(2p-p')^2/2\hbar\lambda}, \quad (5.57)$$

onde o valor  $\lambda$  é um parâmetro constante, sendo  $\lambda > 0$ .

Com isso, verifica-se que os brackets  $\langle \Psi_p | \Psi_q \rangle$  e  $\langle \Psi_q | \Psi_p \rangle$  devem ter como resultado:

$$\langle \Psi_p | \Psi_q \rangle = \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot q}, \quad (5.58)$$

$$\langle \Psi_q | \Psi_p \rangle = \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot q}. \quad (5.59)$$

No próximo capítulo, usaremos os resultados das autofunções dos operadores  $p^\star$  e  $q^\star$  para o desenvolvimento da ELS no Espaço de Fase via MQS nos casos unidimensional e tridimensional. Para tal, além das conclusões obtidas nessa seção, precisaremos das autofunções de  $p^\star$  e  $q^\star$  no caso unidimensional, que podem ser obtidas através de um procedimento análogo ao desenvolvido anteriormente e estão expressas nas relações abaixo, a fim de facilitar a visualização para cálculos posteriores.

$$\langle q, p | \psi_{q'} \rangle = \psi_{q'}(q, p) = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{2i}{\hbar}(q-q')p}, \quad (5.60)$$

$$\langle \psi_{q'} | q, p \rangle = \psi_{q'}^\dagger(q, p) = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar}(q-q')p}, \quad (5.61)$$

$$\langle q, p | \psi_{p'} \rangle = \psi_{p'}(q, p) = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar}(p-p')q}, \quad (5.62)$$

$$\langle \psi_{p'} | q, p \rangle = \psi_{p'}^\dagger(q, p) = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{2i}{\hbar}(p-p')q}, \quad (5.63)$$

$$\langle \psi_{q'} | \psi_{p'} \rangle = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar}p'q'}, \quad (5.64)$$

$$\langle \psi_{p'} | \psi_{q'} \rangle = (\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{i}{\hbar}p'q'}. \quad (5.65)$$

Nesses resultados, as funções arbitrárias  $f(q, q', \lambda)$  e  $g(p, p', \lambda)$  foram omitidas pois nas integrações que surgirão elas sempre estarão multiplicadas por suas conjugadas, o que nos levará à unidade considerando  $\int dq |f(q, q', \lambda)|^2 = 1$  e  $\int dp |g(p, p', \lambda)|^2 = 1$  [57].

## 5.6 O Oscilador Harmônico na MQS

Nessa seção, veremos como obter soluções para o OHS unidimensional no espaço de fase usando a representação da MQS. Assim como na MQ usual, é possível resolver

esse problema no espaço de fase via método algébrico, usando operadores de criação e aniquilação [18], ou através de equações diferenciais [56]. Para o desenvolvimento que será apresentado, adotaremos o método algébrico.

### 5.6.1 Formulação algébrica

Já vimos que o operador hamiltoniano para esse problema é

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{Q}^2}{2}. \quad (5.66)$$

Definindo os operadores de criação  $\hat{A}^\dagger$  e aniquilação  $\hat{A}$  como:

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{Q} + \frac{i}{m\omega} \hat{P} \right) \text{ e } \hat{A}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{Q} - \frac{i}{m\omega} \hat{P} \right), \quad (5.67)$$

temos as propriedades

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{A}^\dagger] &= \mathbf{1} \\ [\hat{H}, \hat{A}^\dagger \hat{A}] &= [\hat{H}, \hat{A} \hat{A}^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Usando a relação de Heisenberg,  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar\mathbf{1}$ , podemos reescrever o operador  $\hat{H}$  como:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{A}^\dagger \hat{A} + \frac{1}{2} \mathbf{1} \right) = \hbar\omega \left( \hat{A} \hat{A}^\dagger - \frac{1}{2} \mathbf{1} \right). \quad (5.69)$$

Como o operador  $\hat{H}$  comuta com  $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ , é possível obter para eles um conjunto de autovetores simultâneos. Além disso, com a eq. 5.69 observa-se que os autovalores associados a eles diferem entre si por um fator  $\frac{\hbar\omega}{2}\mathbf{1}$ . Portanto, resolver a equação  $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$  é equivalente a obter soluções para a equação de autovalores:

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} \psi_n = \lambda_n \psi_n. \quad (5.70)$$

Como na MQS os operadores são representados por funções no espaço de fase que envolvem o produto  $\star$ , podemos reescrever eq. 5.70 como:

$$a^\dagger \star a \star \psi_n(q, p) = \lambda_n \psi_n(q, p), \quad (5.71)$$

onde

$$\hat{A} \longrightarrow a \star = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( q \star + \frac{i}{m\omega} p \star \right), \quad (5.72)$$

$$\hat{A}^\dagger \longrightarrow a^\dagger \star = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( q \star - \frac{i}{m\omega} p \star \right). \quad (5.73)$$

Usando a propriedade  $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = \mathbf{1}$  e a eq. 5.71, obtém-se:

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} (\hat{A}^\dagger \psi_n) = (\lambda_n + 1) (\hat{A}^\dagger \psi_n) \quad (5.74)$$



$$\hat{A}^\dagger \hat{A} (\hat{A} \psi_n) = (\lambda_n - 1) (\hat{A} \psi_n), \quad (5.75)$$

o que nos indica que  $a^\dagger \star$  e  $a \star$  representam, na MQS, os operadores de criação e aniquilação. Além disso, nota-se que  $\lambda_n$  são números inteiros positivos [18, 19]. Da eq. 5.69, podemos escrever que os autovalores de  $\hat{H}$  são:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (5.76)$$

Para determinar o estado de mais baixa energia,  $\psi_0$ , deve-se aplicar a este estado o operador de aniquilação,  $a \star$ , e obter zero como resultado. Dessa forma, garante-se a inexistência de autovalores negativos, ou seja,

$$a \star \psi_0 = 0. \quad (5.77)$$

Usando eq. 5.74 e eq. 5.9,

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[ q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p + \frac{i}{m\omega} \left( p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right) \right] \psi_0 = 0. \quad (5.78)$$

Reescrevendo a equação anterior separando a parte real da parte imaginária, concluímos que para resolver o problema é necessário solucionar simultaneamente as duas equações a seguir:

$$\left( q + \frac{\hbar}{2m\omega} \partial_q \right) \psi_0 = 0 \text{ e } \left( \frac{p}{m\omega} + \frac{\hbar}{2} \partial_p \right) \psi_0 = 0, \quad (5.79)$$

cuja solução geral é:

$$\psi_0 = C_0 \left[ \exp - \left( \frac{m\omega}{\hbar} q^2 + \frac{p^2}{m\omega\hbar} \right) \right] = C_0 \exp \left( \frac{-2H(q, p)}{\hbar\omega} \right), \quad (5.80)$$

onde  $H(q, p)$  é a hamiltoniana clássica do OHS.

A solução 5.80 precisa ainda ser normalizada,

$$\int dqdp \psi_0^\dagger \star \psi_0 = C_0^2 \int dqdp \exp \left( \frac{-2H}{\hbar\omega} \right) \star \left( \frac{-2H}{\hbar\omega} \right) = 1, \quad (5.81)$$

Pode-se mostrar [18] que a constante de normalização para o estado fundamental do OHS unidimensional, na formulação da MQS, é

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \exp \left( \frac{-2H}{\hbar\omega} \right) \quad (5.82)$$

Com isso, as soluções para os estados excitados podem ser determinadas a partir da aplicação do operador de criação,  $a^\dagger \star$ , ao estado fundamental. Normalizadas, essas funções são escritas a partir da expressão:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger \star)^n \psi_0. \quad (5.83)$$

Ou ainda,

$$\psi_n = \psi_n = \frac{3^n}{\sqrt{n}} \left[ \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \left( q - \frac{ip}{m\omega} \right) \right]^n \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right). \quad (5.84)$$

Com isso, temos que os primeiros estados construídos a partir do estado fundamental são expressos por:

$$\psi_1 = 3\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \left( q - \frac{ip}{m\omega} \right) \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right), \quad (5.85)$$

$$\psi_2 = \frac{9\sqrt{2}}{2} \left( \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \right)^2 \left( q - \frac{ip}{m\omega} \right)^2 \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right), \quad (5.86)$$

$$\psi_3 = 9\sqrt{3} \left( \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \right)^3 \left( q - \frac{ip}{m\omega} \right)^3 \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right). \quad (5.87)$$

## 5.6.2 Função de Wigner pela MQS

Podemos obter a função de Wigner para o OHS unidimensional substituindo eq. 5.84 em eq. 5.43:

$$\begin{aligned} f^n(q, p) &= \psi_n(q, p) \star \psi_n^\dagger(q, p) = \\ &= \frac{3^n}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{2e}{m\omega\pi}} \left( a^\dagger \star \right)^n \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right) \star \frac{3^n}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{2e}{m\omega\pi}} \left( a \star \right)^n \exp\left(\frac{-2H}{\hbar\omega}\right). \end{aligned} \quad (5.88)$$

Em particular, para  $n = 1$ , temos:

$$f^{(1)} \sim \left[ 1 - \frac{4H}{\hbar\omega} \right] e^{-2H/\hbar\omega}, \quad (5.89)$$

para  $n = 2$ ,

$$f^{(2)} \sim \left[ 2 - 4 \left( \frac{1H}{\hbar\omega} \right) + \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 \right] e^{-2H/\hbar\omega}, \quad (5.90)$$

e para  $n = 3$ ,

$$f^{(3)} \sim \left[ 6 - 18 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right) + 9 \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^2 - \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right)^3 \right] e^{-2H/\hbar\omega}. \quad (5.91)$$

Os termos entre colchetes são identificados como os polinômios de Laguerre. Com isso, podemos escrever, de forma geral,

$$f^{(n)} \sim L_n \left( \frac{4H}{\hbar\omega} \right) e^{-2H/\hbar\omega}, \quad (5.92)$$

resultado que concorda com o obtido na seção 4.1.5.

## 6 Propagadores na Mecânica Quântica Sim- plética

A teoria de Propagadores em MQ constitui uma ferramenta importante para análise de processos de espalhamento. A partir desse estudo, podemos obter soluções no futuro a partir do conhecimento de um estado no passado, que pode ser considerado um sistema livre sob determinadas condições.

Para o desenvolvimento desse capítulo, no qual apresentaremos a Teoria de Propagadores na MQS, é necessário compreender como Funções de Green são utilizadas na resolução de equações diferenciais não homogêneas; essa discussão geral é apresentada no Apêndice A.

### 6.1 Funções de Green na MQS

Considerando uma análise dependente do tempo e não relativística, a equação de Schrödinger no espaço de fase pode ser escrita como:

$$i\hbar\partial_t\Psi(q, p, t) = \hat{H}(\hat{Q}, \hat{P})\Psi(q, p, t), \quad (6.1)$$

com

$$\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{Q}) = \hat{H}_0 + V(\hat{Q}), \quad (6.2)$$

onde os operadores  $\hat{Q}$  e  $\hat{P}$  são representados por eq. 5.9.

Usando eq. 6.2 em eq. 6.1, temos:

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H}_0)\Psi(q, p, t) = V(\hat{Q})\Psi(q, p, t). \quad (6.3)$$

Para encontrar a função  $\Psi(q, p, t)$ , que resolve a eq. 6.3, podemos usar o método da função de Green. Ao operador  $L_0 = \hat{H}_0 - i\hbar\partial_t$  vamos associar uma função de Green  $G_0(q', p', t'; q, p, t)$ , de modo que:

$$L_0 G_0(q', p', t'; q, p, t) = -\delta^3(q - q')\delta^3(p - p')\delta(t - t'), \quad (6.4)$$

onde adotamos a convenção usual [58] do sinal menos no segundo membro.

Ao operador  $L = \hat{H} - i\hbar\partial_t$  vamos associar uma função de Green  $G(q', p', t'; q, p, t)$ , de modo que:

$$L G(q', p', t'; q, p, t) = -\delta^3(q - q')\delta^3(p - p')\delta(t - t'). \quad (6.5)$$

Como  $L = L_0 + V$ , podemos escrever:

$$L_0 G(q', p', t'; q, p, t) + V G(q', p', t'; q, p, t) = -\delta^3(q - q')\delta^3(p - p')\delta(t - t'),$$

ou,

$$L_0 G(q', p', t'; q, p, t) = -\delta^3(q - q')\delta^3(p - p')\delta(t - t') - V G(q', p', t'; q, p, t). \quad (6.6)$$

Consideremos a expressão 6.6 como uma nova equação diferencial a ser resolvida pelo método das funções de Green. Sabendo que a função de Green associada a  $L_0$  é  $G_0$ , e notando que a fonte associada à eq. 6.6 é o termo  $\rho = \delta^3(q - q')\delta^3(p - p')\delta(t - t') + V G(q', p', t'; q, p, t)$ , podemos escrever a solução  $G$  como:

$$G(q', p', t'; q, p, t) = G_0(q', p', t'; q, p, t) + \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 G_0(q', p', t'; q, p, t) V(q_1, p_1, t_1) G(q_1, p_1, t_1; q, p, t) \quad (6.7)$$

Usando processo iterativo, segue que

$$\begin{aligned} G(q', p', t'; q, p, t) &= G_0(q', p', t'; q, p, t) \\ &+ \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) V(q_1, p_1, t_1) G_0(q_1, p_1, t_1; q, p, t) \\ &+ \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 d^3 q_2 d^3 p_2 dt_2 G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) V(q_1, p_1, t_1) G_0(q_1, p_1, t_1; q_2, p_2, t_2) \times \\ &\times V(q_2, p_2, t_2) G_0(q_2, p_2, t_2; q, p, t) + \dots \end{aligned} \quad (6.8)$$

Visando a teoria de espalhamento dependente do tempo, o nosso objetivo é associar um estado no passado, quando  $t \rightarrow -\infty$ , a um estado no futuro, quando  $t \rightarrow \infty$ . A condição de contorno do problema é que, para  $t \rightarrow \pm\infty$  (quando a partícula incidente está longe do potencial),  $\Psi(q, p, t) \rightarrow \varphi(q, p, t)$ , onde  $\varphi(q, p, t)$  é a solução da partícula livre no espaço de fase. Dessa forma, a quasi-amplitude no futuro pode ser escrita em termos da quasi-amplitude no passado usando as funções de Green associadas aos operadores  $L$  e  $L_0$ , as quais são na teoria denominadas propagadores. Incluindo o fator  $i$  por conveniência, teremos para  $t' > t$ :

$$\Psi(q', p', t') = i \int d^3 q d^3 p G(q', p', t'; q, p, t) \Psi(q, p, t), \quad (6.9)$$

com condição de contorno:

$$G(q', p', t'; q, p, t) = 0, \quad (6.10)$$

para  $t' < t$ .

As relações 6.9 e 6.10 podem ser sintetizadas com a introdução da função degrau:

$$\Theta(t' - t) = \begin{cases} 1, & \text{se } t' > t \\ 0, & \text{se } t' < t \end{cases} \quad (6.11)$$

Com isso, teremos:

$$\Theta(t' - t)\Psi(q', p', t') = i \int d^3q d^3p G(q', p', t'; q, p, t)\Psi(q, p, t), \quad (6.12)$$

Pode-se mostrar, usando eq. 6.1 e eq. 6.12, que  $G(q', p', t', q, p, t)$  satisfaz a equação:

$$[i\hbar\partial_t' - \hat{H}(\hat{Q}', \hat{P}')]G(q', p', t'; q, p, t) = \delta^3(q' - q)\delta^3(p' - p)\delta(t' - t), \quad (6.13)$$

o que permite escrever, para a função  $G_0(q', p', t'; q, p, t)$ , a equação:

$$[i\hbar\partial_t' - \hat{H}_0(\hat{Q}', \hat{P}')]G_0(q', p', t'; q, p, t) = \delta^3(q' - q)\delta^3(p' - p)\delta(t' - t), \quad (6.14)$$

ou,

$$\left[ i\hbar\partial_t' - \frac{p'^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8m}\partial_{q'}^2 + \frac{i\hbar p'}{2m}\partial_{q'} \right] G_0(q', p', t'; q, p, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^3k_1 d^3k_2 d\omega e^{ik_1 \cdot (q' - q)} e^{ik_2 \cdot (p' - p)} e^{-i\omega(t' - t)}, \quad (6.15)$$

onde usamos a representação integral da função delta de Dirac.

Tomando a transformada de Fourier da função  $G_0(q', p', t'; q, p, t)$ :

$$G_0(q', p', t'; q, p, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(2\pi)^6} \int d^3k_1 d^3k_2 d\omega e^{ik_1 \cdot q'} e^{ik_2 \cdot p'} e^{-i\omega t'} g(k_1, k_2, \omega; q, p, t) \quad (6.16)$$

e levando-a à eq. 6.15, com o desenvolvimento feito no Apêndice A, obtemos a função de Green associada à partícula livre,  $G_0$ , ou seja,

$$G_0(q', p', t'; q, p, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k_1 d^3k_2 d\omega \frac{e^{ik_1 \cdot (q' - q)} e^{ik_2 \cdot (p' - p)} e^{-i\omega(t' - t)}}{\left[ \hbar\omega - \frac{p'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{8m} - \frac{\hbar k_1 \cdot p'}{2m} \right]}. \quad (6.17)$$

## 6.2 Evolução Adiabática

Uma maneira de obter a quasi-amplitude no futuro  $t \rightarrow \infty$ , a partir da quasi-amplitude no passado  $t \rightarrow -\infty$ , é considerando o comportamento assintótico do potencial com a hipótese do desligamento adiabático. Para isso, escrevemos  $V$  como o limite expresso abaixo:

$$V \longrightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{-\eta|t|}, \quad (6.18)$$

onde  $\eta$  é um coeficiente positivo, responsável por determinar a rapidez com a qual o potencial torna-se nulo à medida que nos afastamos do centro espalhador.

Com essa hipótese, a solução exata  $\Psi$  da equação de Schrödinger no espaço de fase se aproxima, no passado e no futuro, da solução da partícula livre, representada por  $\varphi$ .

No futuro, a função de onda  $\Psi$  pode ser escrita como:

$$\Psi(q', p', t') = \lim_{t \rightarrow -\infty} i \int d^3q d^3p dt G(q', p', t'; q, p, t) \varphi(q, p, t). \quad (6.19)$$

Expressando  $G$  em termos de  $G_0$ , ou seja, usando eq. 6.8 e eq. 6.9, teremos:

$$\begin{aligned}\Psi(q', p', t') &= \lim_{t \rightarrow -\infty} i \int d^3 q d^3 p dt [G_0(q', p', t'; q, p, t) \\ &+ \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) V(q_1, p_1, t_1) G(q_1, p_1, t_1; q, p, t)] \varphi(q, p, t) \\ &= \varphi(q', p', t') + \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) V \Psi(q_1, p_1, t_1).\end{aligned}\tag{6.20}$$

A expressão 6.20, embora fechada, não resolve o problema pois a solução procurada também aparece na integral à direita da equação. No entanto, ela inclui as condições de contorno do problema de espalhamento e nos oferece uma forma aproximada para resolver o problema no caso de potenciais fracos. Como nosso interesse é obter soluções assintóticas, e sabemos que em  $t' \rightarrow \infty$  a partícula emerge da região de atuação do potencial como uma partícula livre, podemos propor que toda a informação pode ser obtida considerando soluções  $\varphi_f(q', p', t')$ , quando  $t' \rightarrow \infty$ , a partir do conhecimento da função inicial  $\varphi_i(q, p, t)$ , em  $t \rightarrow -\infty$ .

Embora a interpretação física da MQS seja obtida via função de Wigner, através do produto  $\Psi \star \Psi^\dagger$  podemos desenvolver, formalmente, o que seria o elemento de matriz de um operador quasi-probabilidade de espalhamento nessa formulação. De modo análogo ao desenvolvimento da MQ usual, esse elemento seria dado por:

$$S_{fi} = \lim_{t' \rightarrow \infty} \int d^3 q' d^3 p' \varphi_f^\dagger(q', p', t') \star \Psi_i(q', p', t')\tag{6.21}$$

Usando eq. 6.20,

$$\begin{aligned}S_{fi} &= \lim_{t' \rightarrow \infty} \int d^3 q' d^3 p' \varphi_f^\dagger(q', p', t') \star [\varphi_i(q', p', t') + \\ &\int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) V(q_1, p_1, t_1) \Psi(q_1, p_1, t_1)] \\ S_{fi} &= \delta_{fi} + \int d^3 q_1 d^3 p_1 dt_1 \varphi_f^\dagger(q', p', t') G_0(q', p', t'; q_1, p_1, t_1) \Psi(q_1, p_1, t_1)\end{aligned}$$

Na última expressão, o produto  $\star$  é retirado da integral usando a propriedade da trivialização do produto estrela em uma integração no espaço de fase.

### 6.3 Equação de Lippmann-Schwinger (ELS) no Espaço de Fase

A eq. 6.20 pode ser reescrita de forma geral (sem explicitar a representação) como:

$$|\psi^{(+)}, t'\rangle = |\varphi_{p_0}, t'\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt G_0(t', t) V(\hat{Q}) |\psi^{(+)}, t\rangle.\tag{6.22}$$

Considerando a situação de espalhamento elástico, podemos propor que  $|\varphi_{p_0}, t'\rangle$   $|\psi^{(+)}, t'\rangle$  são autovetores do operador energia, escrevendo:

$$|\varphi, t'\rangle = |\varphi_{p_0}\rangle e^{-\frac{iE}{\hbar}t'},\tag{6.23}$$

$$|\psi^{(+)}, t'\rangle = |\psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{iE}{\hbar}t'}. \quad (6.24)$$

Usando a expressão da função de Green  $G_0$  como [4]:

$$G_0(t, t') = -i \frac{\theta(t' - t)}{\hbar} e^{-i\hat{H}_0(t-t')}, \quad (6.25)$$

e como  $t'$  é o tempo futuro, podemos substituir o limite superior em eq. 6.22 por  $t'$ . Então substituindo eq. 6.24 e eq. 6.25 em eq. 6.22, e fazendo o cálculo para  $t' = 0$ , teremos:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\varphi_{p_0}\rangle + \int_{-\infty}^0 \left(-\frac{i}{\hbar}\right) e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} V(\hat{Q}) |\psi^{(+)}\rangle. \quad (6.26)$$

Empregando a hipótese do desligamento adiabático do potencial, substituímos  $V(\hat{Q})$  por  $\hat{V}e^{-\eta|t|}$ , o que nos dá

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\varphi_{p_0}\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t \rightarrow -\infty} \int_t^0 dt e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 - E - i\eta\hbar)t} \hat{V} |\psi^{(+)}\rangle, \quad (6.27)$$

onde explicitamos o limite  $t \rightarrow -\infty$ .

Fazendo a integração em  $t$  e aplicando o limite, obtemos que

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\varphi_{p_0}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\eta\hbar} \hat{V} |\psi^{(+)}\rangle, \quad (6.28)$$

que é a equação de Lippmann-Schwinger na MQS. Em particular, na base  $|q, p\rangle$ , temos:

$$\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle = \langle q, p | \varphi_{p_0} \rangle + \left\langle q, p \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\eta\hbar} V(\hat{Q}) \right| \psi^{(+)} \right\rangle, \quad (6.29)$$

que se torna a Equação de Lippmann-Schwinger na descrição do espaço de fase.

## 6.4 Aplicações

Nesta seção apresentaremos desenvolvimentos da teoria de espalhamento como aplicação da Equação de Lippmann-Schwinger no espaço de fase.

### 6.4.1 Propagador uni e tri dimensional no Espaço de Fase

Usando a relação de completeza da base  $|q, p\rangle$  no espaço de fase segue, da eq. 6.29, que

$$\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle = \langle q, p | \varphi_{p_0} \rangle + \int d^3q' d^3p' \left\langle q, p \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| q', p' \right\rangle \langle q', p' | V(\hat{Q}) | \psi^{(+)} \rangle, \quad (6.30)$$

em que a constante  $\epsilon$  está redefinida em termos de  $\eta$  e  $\hbar$ .

A eq. 6.30 mostra que para obter a solução  $\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle$  é necessário determinar o ente  $\langle q, p | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} | q', p' \rangle$ , que é identificado como função de Green associada ao operador

$(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)$ , onde  $E = p_0^2/2m$  e  $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m = p^\star^2/2m = \frac{1}{2m} \left( p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right)^2$ . Uma vez que  $p_0$  e  $m$  são, respectivamente, o momento inicial da partícula incidente e sua massa, o termo  $\langle q, p \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| q', p' \rangle$  é a função de Green associada ao estado livre, que denotaremos por  $G_0(q', p'; q, p)$ . Considerando que o espalhamento que trataremos é do tipo elástico, a energia e o momento da partícula incidente, representadas por  $E$  e  $p_0$ , devem se conservar.

Para aplicar a eq. 6.30, vamos desenvolver o propagador no espaço de fase, via MQS, para os casos uni e tridimensional.

#### 6.4.1.1 Caso unidimensional

No tratamento unidimensional, reescrevemos a eq. 6.30 como:

$$\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle = \langle q, p | \varphi_{p_0} \rangle + \int dq' dp' \left\langle q, p \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| q', p' \right\rangle \langle q', p' | V(\hat{Q}) | \psi^{(+)} \rangle. \quad (6.31)$$

Embora estejamos usando a mesma notação para os vetores e as bases dos desenvolvimentos anteriores, destacamos que nesta seção esses entes têm caráter unidimensional.

Sabendo que a relação de completeza para as autofunções do operador  $p^\star$  é dada por

$$\int dp'' |\psi_{p''}\rangle \langle \psi_{p''}| = 1,$$

e que uma equação de autovalores para esse operador pode ser escrita como

$$p^\star^2 |\psi_{p''}\rangle = p''^2 |\psi_{p''}\rangle,$$

podemos expressar a função de Green associada à partícula livre unidimensional da seguinte forma:

$$G_0(q', p', q, p) = \left\langle q, p \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| q', p' \right\rangle = 2m \int dp'' \frac{\langle q, p | \psi_{p''}\rangle \langle \psi_{p''} | q', p' \rangle}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon}, \quad (6.32)$$

onde usamos que  $\hat{H}_0 = h_0(q^\star, p^\star) = \frac{p^\star^2}{2m}$ .

Usando as relações de completeza para as autofunções  $\psi_{q''}$  e  $\psi_{q'''}$ , e os resultados eq. 5.64 e eq. 5.65, teremos:

$$G_0(q', p', q, p) = 2m \frac{1}{\pi\hbar} \int dq'' dq''' \langle q, p | \psi_{q'''} \rangle \langle \psi_{q'''} | q', p' \rangle \int dp'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(q'' - q''')p''}}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon}. \quad (6.33)$$

O resultado da integral em  $dp''$  pode ser obtido pelo método de resíduos, resultando em

$$\int dp'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(q'' - q''')p''}}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon} = \frac{\pi i e^{\frac{i}{\hbar}(q'' - q''')p_0}}{p_0}. \quad (6.34)$$

Com isso, a expressão para  $G_0(q', p'; q, p)$  fica:

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{2m}{\pi\hbar} \frac{(\pi i)}{p_0} \int dq'' dq''' \langle q, p | \psi_{q''} \rangle \langle \psi_{q''} | q', p' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(q'' - q''')p_0}. \quad (6.35)$$



Usando as relações das autofunções dos operadores  $q\star$  e  $p\star$ , obtidas para o caso unidimensional no final da seção 5.5, teremos:

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{2mi}{\pi\hbar^2 p_0} \int dq'' dq''' e^{-\frac{2i}{\hbar}(q''-q)p} e^{\frac{2i}{\hbar}(q'''-q')p'} e^{\frac{i}{\hbar}(q''-q''')p_0}. \quad (6.36)$$

Separando as integrais em  $dq''$  e  $dq'''$ ,

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{2mi}{\pi\hbar^2 p_0} e^{-\frac{2i}{\hbar}q'p'} \int dq'' e^{-\frac{2i}{\hbar}(q''-q)p} e^{\frac{i}{\hbar}q''p_0} \int dq''' e^{\frac{i}{\hbar}(2p'-p_0)q''}. \quad (6.37)$$

Sabendo que o resultado da integral em  $dq'''$  é:

$$\int dq''' e^{\frac{i}{\hbar}(2p'-p_0)q''} = 2\pi\hbar\delta(2p' - p_0),$$

temos

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{4mi}{\pi\hbar p_0} e^{-\frac{2i}{\hbar}q'p'} e^{\frac{2i}{\hbar}qp} \delta(2p' - p_0) \int dq'' e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-2p)q''}. \quad (6.38)$$

Integrando em  $dq''$  e usando a *propriedade da paridade da delta de Dirac*, obtemos:

$$\int dq'' e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-2p)q''} = 2\pi\hbar\delta(p_0 - 2p) = 2\pi\hbar\delta(2p - p_0)$$

Com isso, teremos:

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{8\pi mi}{p_0} e^{\frac{2i}{\hbar}(qp-q'p')} \delta(2p' - p_0) \delta(2p - p_0) \quad (6.39)$$

No entanto,

$$\delta(2p' - p_0) \delta(2p - p_0) = \delta(2p - 2p') = \frac{1}{2} \delta(p - p'),$$

e assim a função de Green associada ao operador  $H_0\star$  no caso unidimensional é:

$$G_0(q', p'; q, p) = \frac{4\pi mi}{p_0} e^{\frac{2i}{\hbar}(qp-q'p')} \delta(p - p') \quad (6.40)$$

Substituindo esse resultado na eq. 6.31, segue que

$$\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle = \langle q, p | \varphi_{p_0} \rangle + \frac{4m\pi i}{p_0} \int dq' dp' e^{\frac{2i}{\hbar}(qp-q'p')} \delta(p - p') \langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle. \quad (6.41)$$

A eq. 6.41 é a ELS unidimensional não assintótica no espaço de fase. Note que, ao aplicá-la para um determinado potencial, deve-se realizar a integração do termo  $\langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle$  em  $dq'$  e  $dp'$ . Como o estado  $|\psi^{(+)}\rangle$  não é conhecido, aparecendo nos dois membros da equação, para determinar o termo  $\langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle$  costuma-se propor uma solução aproximada para  $|\psi^{(+)}\rangle$ , expandido-a em termos de uma série de potências de  $V$  aplicada ao estado livre  $|\varphi_{p_0}\rangle$ .

### 6.4.1.2 Caso tridimensional

Para realizar o tratamento tridimensional da ELS no espaço de fase, devemos retornar à eq. 6.30 e calcular o termo  $\langle q, p | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} | q', p' \rangle$ , que agora refere-se à função de Green associada ao estado livre tridimensional.

O termo  $G_0(q', p', q, p)$  pode então ser escrito como:

$$G_0(q', p', q, p) = 2m \int d^3 p'' \frac{\langle q, p | \psi_{p''} \rangle \langle \psi_{p''} | q', p' \rangle}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon}. \quad (6.42)$$

Usando as relações de completeza para as autofunções  $\psi_{q''}$  e  $\psi_{q'''}$ , e os resultados eq. 5.58 e eq. 5.59, teremos:

$$\begin{aligned} G_0(q', p', q, p) &= 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \int d^3 q'' d^3 q''' d^3 p'' \frac{\langle q, p | \psi_{q''} \rangle e^{\frac{i}{\hbar} p'' \cdot q''} e^{-\frac{i}{\hbar} p'' \cdot q'''} \langle \psi_{q'''} | q', p' \rangle}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon} \\ &= 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \int d^3 q'' d^3 q''' \langle q, p | \psi_{q''} \rangle \langle \psi_{q'''} | q', p' \rangle \int d^3 p'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (q'' - q''') \cdot p''}}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (6.43)$$

A integral em  $dp''$ , na eq. 6.43, é realizada pelo método de resíduos, resultando em

$$\int d^3 p'' \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (q'' - q''') \cdot p''}}{p_0^2 - p''^2 + i\epsilon} = (2\pi)^2 \hbar \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_0 |q'' - q'''|}}{|q'' - q'''|}. \quad (6.44)$$

Usando também os resultados 5.53 e 5.54, a expressão 6.43 fica escrita como:

$$G_0(q', p'; q, p) = 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \left[ (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \right]^2 \int d^3 q'' d^3 q''' \frac{e^{-\frac{2i}{\hbar} (q'' - q) \cdot p} e^{\frac{2i}{\hbar} (q''' - q') \cdot p'} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 |q'' - q'''|}}{|q'' - q'''|}. \quad (6.45)$$

A integração que surge na eq. 6.45 não é trivial. Note, no entanto, que para obter resultados de espalhamento coerentes com os coletados em laboratório, não é necessário ter conhecimento desse resultado. Ao realizar um experimento de espalhamento, o detector é colocado muito longe do centro espalhador, quando comparado à região de interação; por isso, é suficiente analisar o resultado assintótico da função de Green, que será desenvolvido na seção 6.4.4.

## 6.4.2 Expansão de Born

O uso da ELS exige o tratamento do termo  $\langle q', p' | V(\hat{Q}) | \psi^{(+)} \rangle$ , que aparece à direita da equação. Note que esse termo envolve o estado que estamos buscando e uma maneira de tratá-lo é propondo que  $|\psi^{(+)} \rangle$  seja escrita em termos do estado livre,  $|\varphi_{p_0} \rangle$ , cujo resultado é conhecido.

Podemos alcançar esse objetivo introduzindo, no espaço de fase, um operador de transição  $\hat{T}$  tal que tenhamos

$$\hat{V} |\psi^{(+)} \rangle = \hat{T} |\varphi_{p_0} \rangle. \quad (6.46)$$

Segue, multiplicando a ELS (eq. 6.28), por  $\hat{V}$  que

$$\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle = \hat{V}|\varphi_{p_0}\rangle + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle, \quad (6.47)$$

ou seja,

$$\hat{T}|\varphi_{p_0}\rangle = \hat{V}|\varphi_{p_0}\rangle + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{T}|\varphi_{p_0}\rangle. \quad (6.48)$$

Ou ainda, como eq. 6.49 deve ser verificada para todo  $|\varphi_{p_0}\rangle$

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{T}. \quad (6.49)$$

Por um processo iterativo, temos

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V} + \dots \quad (6.50)$$

e daí a expansão de Born para  $|\psi^{(+)}\rangle$  segue como:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\varphi_{p_0}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}|\varphi_{p_0}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}|\varphi_{p_0}\rangle + \dots \quad (6.51)$$

Essa série truncada nos fornece a aproximação de Born, no espaço de fase, cuja ordem depende do número de potências de  $\hat{V}$ . Numa aproximação de ordem 1, por exemplo, consideramos  $V|\psi^{(+)}\rangle \approx V|\varphi_{p_0}\rangle$ ; numa aproximação de ordem 2,  $V|\psi^{(+)}\rangle \approx V|\varphi_{p_0}\rangle + V\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}V|\varphi_{p_0}\rangle$ , e assim por diante.

Na prática, a aproximação de ordem mais baixa pode ser utilizada para o estudo de potenciais fracos, i.e. aqueles que caem rapidamente com o aumento da distância em relação ao centro espalhador.

### 6.4.3 Espalhamento de uma partícula por um potencial delta de Dirac unidimensional

Como um teste do desenvolvimento consideraremos o problema de espalhamento elástico de uma partícula por um potencial delta de Dirac unidimensional, no espaço de fase, via MQS.

Para o desenvolvimento do termo que envolve o potencial na ELS, usaremos a expansão de Born de ordem 1.

Os resultados da seção 4.1.6 serão então utilizados para determinar a SCD para esse sistema, e a expressão calculada será comparada com a obtida via MQ usual, já conhecida na literatura.

## 6.4.3.1 O potencial delta de Dirac unidimensional na aproximação de Born

Vamos retomar à eq. 6.41 e considerar o potencial

$$V = \lambda \delta(q' - a) \delta(p' - b), \quad (6.52)$$

em que  $\lambda$ ,  $a$  e  $b$  são constantes.

Tomando uma aproximação de Born de ordem 1, podemos escrever:

$$\langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle = \langle q', p' | V | \varphi_{p_0} \rangle = \lambda \delta(q' - a) \delta(p' - b) \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle. \quad (6.53)$$

Sabendo que

$$\langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle = \frac{1}{2m} (\pi \hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar} (p_0 - p) q'}, \quad (6.54)$$

o estado após o espalhamento será:

$$\begin{aligned} \langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle &= \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle \\ &+ \frac{4m\pi i}{p_0} \int dq' dp' e^{\frac{2i}{\hbar} (qp - q'p')} \delta(p - p') \lambda \delta(q' - a) \delta(p' - b) \frac{1}{2m} (\pi \hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar} (p_0 - p) q'}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Separando as integrais em  $dq'$  e  $dp'$ , podemos reescrever

$$\begin{aligned} \langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle &= \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle + \frac{4m\pi i}{p_0} \frac{1}{2m} (\pi \hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \int dq' \delta(q' - a) e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \times \\ &\times \int dp' \delta(p' - b) \delta(p' - p) e^{-\frac{4i}{\hbar} p' q'}. \end{aligned} \quad (6.56)$$

Usando a propriedade da filtragem da distribuição delta de Dirac ao realizar a integral em  $dp'$ , teremos

$$\langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle = \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle + \frac{4m\pi i}{p_0} \frac{1}{2m} (\pi \hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \int dq' \delta(q' - a) e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \delta(p - b) e^{-\frac{2i}{\hbar} b q'}, \quad (6.57)$$

e reorganizando os termos para destacar a integral em  $dq'$ ,

$$\langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle = \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle + \frac{4m\pi i}{p_0} \frac{1}{2m} (\pi \hbar)^{-1/2} e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \delta(p - b) \int dq' \delta(q' - a) e^{\frac{2i}{\hbar} (p_0 - 2b) q'}. \quad (6.58)$$

Mais uma vez, usamos a propriedade da filtragem, agora para realizar a integração em  $dq'$ , chegamos ao estado:

$$\langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle = \langle q', p' | \varphi_{p_0} \rangle + 2\sqrt{\frac{\pi}{\hbar}} \frac{\lambda}{p_0} i e^{\frac{2i}{\hbar} (p_0 - 2b) a} e^{\frac{2i}{\hbar} p_0 q'} \delta(p - b). \quad (6.59)$$

Esse resultado indica que, no caso unidimensional, o *estado espalhado* será diferente do *estado incidente* para  $p = b$ , podendo a variável  $q$  assumir, em princípio, qualquer valor; adotaremos que  $q$  varia no intervalo  $(-L, L)$ ,  $L \rightarrow \infty$ , e escreveremos 6.59 como:

$$\langle q', p' | \psi^{(+)} \rangle = \varphi_{p_0} + \psi_{esp}. \quad (6.60)$$

## 6.4.3.2 Seção de Choque

Considerando o potencial delta de Dirac unidimensional (eq. 6.52) calculemos, a partir da eq. 6.59, a seção de choque para esse potencial na primeira aproximação de Born.

Usando a eq. 4.37 no caso unidimensional, temos

$$\begin{aligned}\frac{dN_{inc}}{dA} &= \int dp \int dq \delta(q) \varphi^* \left( p - \frac{1}{2}q \right) \varphi \left( p + \frac{1}{2}q \right) \\ &= \int dp \varphi^*(p) \varphi(p) = L,\end{aligned}\tag{6.61}$$

onde usamos a normalização no intervalo  $(-L, L)$ .

Assim, a expressão 4.37 para o caso unidimensional nos dá

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{L} \int dp \int dq f(q, p) = \frac{1}{L} \int dp \int dq \psi_{esp} \star \psi_{esp}^\dagger = \\ &= \frac{1}{L} \int dp \int dq \psi_{esp} \psi_{esp}^\dagger,\end{aligned}\tag{6.62}$$

onde usamos a propriedade da trivialização do produto estrela.

Da eq. 6.59 segue que

$$f(q, p) = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{\lambda^2}{p_0^2} \frac{1}{L} \delta^2(p - b),\tag{6.63}$$

em que utilizamos  $\frac{1}{\sqrt{L}}$  como fator de normalização de  $e^{\frac{2i}{\hbar}qp}$ .

Obtemos, assim, das eq. 6.62 e eq. 6.63 que

$$\sigma = \frac{1}{L^2} \frac{4\pi}{\hbar} \frac{\lambda^2}{p_0^2} \int dp \int dq \delta^2(p - b).\tag{6.64}$$

Para realizar a integral de  $\delta^2(p - b)$  suponhamos que as possíveis transições numa dada região espacial  $(-L/2, L/2)$  tenham uma forma de “mancha”, i.e., escrevamos

$$2\pi(p - b) \longrightarrow \int_{-L/2}^{L/2} dq e^{i(p-b)q} = \frac{2\text{sen}(L/2)(p - b)}{(p - b)}\tag{6.65}$$

ou ainda,

$$[2\pi\delta(p - b)]^2 \longrightarrow \frac{4\text{sen}^2(L/2)(p - b)}{(p - b)^2}.\tag{6.66}$$

Agora, notando que como função de  $p$ , a área sob essa curva é  $2\pi L$ , pode-se identificar

$$[2\pi\delta(p - b)]^2 = 2\pi L 2\pi\delta(p - b),\tag{6.67}$$

que, levando à eq. 6.64, resulta em

$$\sigma = \frac{1}{L^2} \frac{4\pi}{\hbar^2} \frac{\lambda^2}{p_0^2} \int dp \int_{-L/2}^{L/2} dq L \delta(p - b),\tag{6.68}$$

ou seja,

$$\sigma = \frac{4\pi}{\hbar^2} \frac{\lambda^2}{p_0^2}. \quad (6.69)$$

O resultado 6.69 coincide, a menos de constantes, com o obtido por Lapidus [59] para a primeira aproximação de Born, indicando a coerência do nosso desenvolvimento.

Realizando os gráficos associados à eq. 6.69 temos:

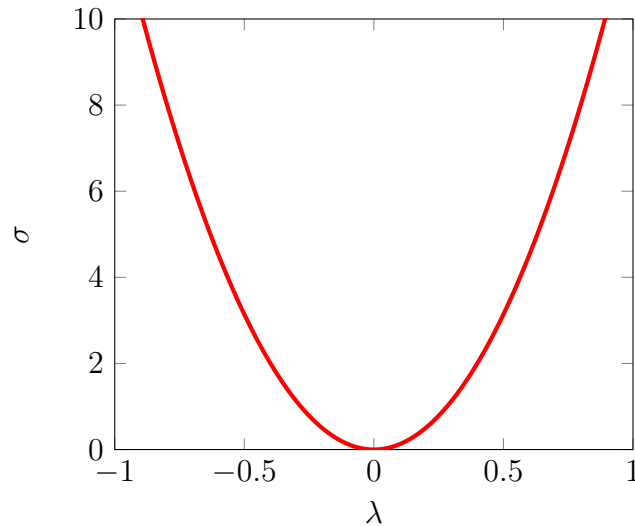


Figura 4 – Gráfico de  $\sigma$  em função de  $\lambda$ , considerando  $\hbar = 1$  e  $p_0 = 1$ .

1

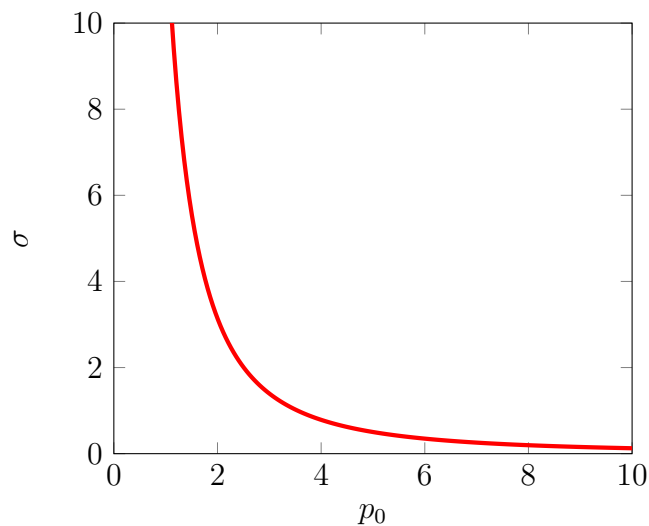


Figura 5 – Gráfico de  $\sigma$  em função de  $p_0$ , considerando  $\hbar = 1$  e  $\lambda = 1$ .

Nota-se que a seção de choque aumenta com o módulo do parâmetro  $\lambda$  e diminui com o aumento do momento da partícula incidente,  $p_0$ . Esse comportamento é esperado,

<sup>1</sup> No gráfico da figura 5 o ponto representa uma vírgula. Dessa forma, os valores  $-0.5$  e  $0.5$  referem-se à  $-0,5$  e  $0,5$ .

pois o aumento do módulo do parâmetro  $\lambda$  torna o potencial mais intenso, aumentando as deflexões, e o aumento do momento da partícula incidente implica numa maior energia, fazendo com que a partícula tenha maior probabilidade de passar pelo alvo sem sofrer espalhamento.

#### 6.4.4 ELS assintótica no Espaço de Fase

Nessa seção, nosso objetivo é obter a ELS assintótica para o caso tridimensional. Partiremos da eq. 6.45 e consideraremos as seguintes transformações nas variáveis  $q$ ,  $q'$ ,  $q''$  e  $q'''$ :

$$r = q - q'' \longrightarrow q'' = q - r \longrightarrow dq'' = -dr \quad (6.70)$$

$$r' = q' - q''' \longrightarrow q''' = q' - r' \longrightarrow dq''' = -dr' \quad (6.71)$$

Com essas transformações, reescrevemos a eq. 6.45 como:

$$G(q', p'; q, p) = 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \left[ (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \right]^2 \int d^3 q'' d^3 q''' \frac{e^{\frac{2i}{\hbar}(p \cdot r - p' \cdot r' + \frac{p_0}{2}|q - (q' + r - r')|)}}{|q - (q' + r - r')|}. \quad (6.72)$$

O denominador na integral da eq. 6.72 pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} |q - (q' + r - r')| &= \sqrt{[q - (q' + r - r')][q - (q' + r - r')]} \\ &= [q^2 - 2q \cdot (q' + r - r') + (q' + r - r')^2]^{1/2} \\ &= q \left[ 1 - \frac{2(q' + r - r')}{q} \cos\alpha + \frac{(q' + r - r')^2}{q^2} \right]^{1/2}, \end{aligned}$$

onde  $\alpha$  é o ângulo indicado na fig. 6. Nessa figura, o vetor  $\bar{q}$  compreende a região de atuação do potencial, enquanto o vetor  $q$  refere-se à região na qual coloca-se o aparelho de medida, distante do potencial.

Considerando que o vetor  $\bar{q} = (q' + r - r')$  é medido na região de atuação do potencial, e que  $q$  é medido distante dessa região, como mostra a fig. 6, podemos reescrever o denominador na eq. 6.72 usando a expansão binomial e tomando  $q \gg \bar{q}$ . Obtemos então:

$$|q - (q' + r - r')| \approx q[1 - \hat{q} \cdot (q' + r - r')] \sim q$$

onde  $\hat{q} = q/|q|$ .

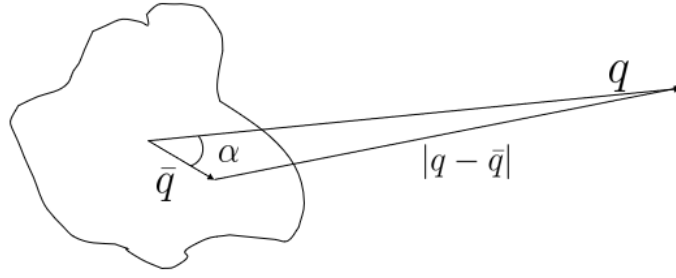


Figura 6 – Potencial de espalhamento de alcance finito.

Com isso, teremos que o resultado assintótico da eq. 6.72 será:

$$G(q', p'; q, p) = 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \left[ (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \right]^2 \frac{1}{q} \int d^3 q'' d^3 q''' e^{\frac{2i}{\hbar}(p \cdot r - p' \cdot r' + \frac{p_0}{2}|q - (q' + r - r')|)}$$
(6.73)

Considerando  $p'' = \frac{p_0}{2} \hat{q}$ , teremos:

$$G(q', p'; q, p) = 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \left[ (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \right]^2 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \cdot q}}{q} \int d^3 q'' d^3 q''' e^{\frac{2i}{\hbar}(p - p'') \cdot r} e^{\frac{2i}{\hbar}(p'' - p') \cdot r'} e^{-\frac{2i}{\hbar} p'' \cdot q'}$$
(6.74)

Retornando às variáveis  $q''$  e  $q'''$ ,

$$G(q', p'; q, p) = 2m \left[ \frac{\hbar^2}{4\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^2 \left[ (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \right]^2 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \cdot q}}{q} \times$$

$$\times \int d^3 q'' d^3 q''' e^{-\frac{2i}{\hbar}(p'' - p) \cdot q} e^{-\frac{2i}{\hbar}(p - p'') \cdot q''} e^{\frac{2i}{\hbar}(p'' - p') \cdot q'} e^{\frac{2i}{\hbar}(p' - p'') \cdot q'''}$$
(6.75)

Usando a definição da delta de Dirac tridimensional e os resultados das autofunções do operador  $p_\star$ , teremos:

$$G_0(q', p', q, p) = m(\pi\hbar)^5 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \cdot q}}{q} \delta^3(p'' - p) \delta^3(p' - p'') \langle \psi_{p''} | q, p \rangle \langle q', p' | \psi_{p''} \rangle$$
(6.76)

Com esse resultado, concluímos que a solução assintótica da ELS no espaço de fase é:

$$\langle q, p | \psi^{(+)} \rangle = \langle q, p | \varphi \rangle + m(\pi\hbar)^5 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \cdot q}}{q} \int d^3 q' d^3 p' \delta^3(p'' - p) \delta^3(p' - p'') \times$$

$$\times \langle \psi_{p''} | q, p \rangle \langle q', p' | \psi_{p''} \rangle \langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle.$$
(6.77)

A eq. 6.77 possui semelhanças com o resultado obtido via MQ usual. Note que, com a MQS, encontramos que o estado espalhado também é moldado por uma onda esférica divergente, representada pelo termo  $e^{\frac{i}{\hbar} p_0 \cdot q}/q$ . No entanto, não é possível neste estágio verificar se existe uma relação, na MQS, entre a *amplitude de espalhamento* e a SCD, tal



como verifica-se na MQ usual. O fato é que, havendo esta relação, nosso resultado indica que a expressão da “amplitude de espalhamento” será dada por:

$$\mathcal{F}(q, p) = m(\pi\hbar)^5 \int d^3q' d^3p' \delta^3(p'' - p) \delta^3(p' - p'') \langle \psi_{p''} | q, p \rangle \langle q', p' | \psi_{p''} \rangle \langle q', p' | V | \psi^{(+)} \rangle. \quad (6.78)$$



## 7 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho apresentamos um desenvolvimento para construção da teoria de espalhamento baseada em Propagadores no espaço de fase usando o formalismo da MQS. A Equação de Lippmann-Schwinger foi obtida e sua expressão assintótica determinada. Para resolver a ELS nesse espaço, foi necessário desenvolver as autofunções dos operadores  $q^\star$  e  $p^\star$  para os casos unidimensional e tridimensional. Com esses resultados, obtivemos as funções de Green associadas ao estado livre unidimensional e ao estado livre tridimensional, considerando a situação em que se deseja obter o estado da partícula espalhada quando esta encontra-se muito distante da região de alcance do potencial. As autofunções do hamiltoniano simplético de uma partícula, após interagir com um potencial delta de Dirac unidimensional,  $\psi(q, p)$  e  $\psi^\dagger(q, p)$ , foram determinadas usando a aproximação de Born de ordem 1 e permitiram calcular a função de Wigner associada a esse estado através da operação  $\psi(q, p) \star \psi^\dagger(q, p)$ . Na literatura, a função de Wigner já vem sendo explorada para descrição de processos de espalhamento no espaço de fase e a seção de choque pode ser determinada em termos dessa grandeza [23, 24, 26]. Dessa forma, foi possível calcular a seção de choque associada ao espalhamento de uma partícula por um potencial delta de Dirac unidimensional no espaço de fase, constatando que o resultado encontrado coincide, a menos de constantes, com o obtido via MQ usual [59].

Embora a determinação da seção de choque no espaço de fase via MQS tenha sido ilustrada para uma situação simples, a comparação dos valores obtidos com o método usual indica que o formalismo desenvolvido neste trabalho é coerente e pode ser aplicado para casos mais complexos. Ao tratar a ELS tridimensional no caso assintótico, observamos um comportamento similar ao obtido na MQ usual: a função espalhada na representação da MQS também está moldada por uma onda esférica divergente. Embora não tenha sido possível observar uma relação entre uma *amplitude de espalhamento* no espaço de fase e a SCD, tal como verifica-se na MQ usual, nosso resultado indica uma possível expressão para essa amplitude simplética.

Entre as perspectivas futuras para este trabalho, podemos citar:

- Explorar o resultado 6.77 e sua relação com a SCD no espaço de fase, e utilizar essa equação para caracterização de um sistema mais complexo, como o espalhamento de uma partícula por um potencial de Yukawa [21];
- desenvolver o termo  $\langle q', p' | V | \psi^+ \rangle$  no espaço de fase considerando potenciais que envolvam interação entre várias partículas, como o potencial elétron-átomo ou elétron-molécula;

- estender o desenvolvimento realizado neste trabalho para situações de espalhamento inelástico, reações e/ou tratamento de colisões nas quais os efeitos relativísticos não podem ser ignorados.

## 8 Apêndice A: Resolução de Equações Diferenciais pelo método das Funções de Green

O método das funções de Green é muito utilizado na Física e na Matemática para resolução de equações diferenciais não homogêneas. O objetivo é obter soluções para equações do tipo:

$$\hat{L}(x)\phi(x) = -\rho(x) \quad (8.1)$$

onde  $\phi(x) = \phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  satisfaz a determinadas condições de contorno e  $\rho(x) = \rho(x_1, x_2, \dots, x_n)$  é denominada função fonte. O operador diferencial,  $\hat{L}$ , é escrito, na sua forma completa, como:

$$\hat{L}(x) = a_0 + \sum_i a_i \partial_i + \sum_{ij} a_{ij} \partial_{ij} + \dots + \sum_{i,j,\dots,n} a_{ij\dots n} \partial_{ij\dots n} \quad (8.2)$$

Para obter uma solução para 8.1, vamos considerar uma função fonte como uma delta de Dirac,  $\delta(x - y)$ , de modo que:

$$\hat{L}G(x, y) = -\delta(x - y), \quad (8.3)$$

onde  $G(x - y)$  é uma função que obedece, nas variáveis  $x$ , as mesmas condições de contorno da solução  $\phi(x)$ . A função  $G$  é batizada como função de Green associada ao operador  $\hat{L}$  e às condições de contorno da solução  $\phi$ . Para resolver o problema, vamos supor que existe uma solução para  $\phi$ , e que esta é da forma:

$$\phi(x) = \int G(x, y)\rho(y)dy \quad (8.4)$$

Usando as relações 8.3 e 8.4 e as propriedades da função Delta de Dirac, retornamos à equação 8.1:

$$\hat{L}(x)\phi(x) = \int \hat{L}(x)G(x, y)\rho(y)dy = - \int \delta(x - y)\rho(y)dy = -\rho(x). \quad (8.5)$$

Isso mostra que, de fato, 8.4 é uma solução para 8.1. Dessa forma, conhecendo a função de Green, é possível determinar a solução da equação 8.1 para qualquer fonte, desde que seja possível realizar a integral 8.4.

Para determinar a função de Green, vamos supor que  $G(x, y)$  existe e que tem associada a ela uma transformada de Fourier  $g(k, y)$ ; logo:

$$G(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int g(k, y)e^{ik \cdot x} dk, \quad (8.6)$$

onde

$$k \cdot x = k_1 x_1 + K_2 x_2 + \dots + k_n x_n$$

$$dk = dk_1 dk_2 \dots dk_n.$$

Usando a definição da transformada de Fourier da função delta,

$$\delta(x - y) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ik \cdot (x-y)} dk, \quad (8.7)$$

e substituindo 8.6 em 8.1, com a forma explícita de  $\hat{L}$ , 8.2, nota-se que é possível escrever a função  $g(k, y)$  como:

$$g(k, y) = -\frac{e^{-ik \cdot y}}{a_0 + a_1 i k_1 + \dots + a_{n \dots n} (i k_n)^\alpha}. \quad (8.8)$$

Substituindo 8.8 em 8.6, encontra-se que a função de Green pode ser determinada pela integral abaixo:

$$G(x, y) = -\frac{1}{(2\pi)^n} \int \frac{e^{ik \cdot (x-y)}}{a_0 + a_1 i k_1 + \dots + a_{n \dots n} (i k_n)^\alpha} dk, \quad (8.9)$$

o que em geral necessita de integração usando a Teoria de Resíduos [58].

# Referências

- 1 LOPES, A. R. et al. Electron collisions with isomers of  $C_4H_8$  and  $C_4H_{10}$ . *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, v. 37, n. 5, p. 997, 2004. Citado na página 1.
- 2 BOUDAIFFA, B. et al. Resonant formation of dna strand breaks by low-energy (3 to 20 eV) electrons. *Science*, v. 287, n. 5458, p. 1658–1660, 2000. Citado na página 1.
- 3 RUTHERFORD, E. The scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  particles by matter and the structure of the atom. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 21, n. 125, p. 669–688, 1911. Citado na página 1.
- 4 JOACHAIN, C. J. *Quantum Collision Theory*. Amsterdam: North-Holland Physics Publishing, 1975. Citado 6 vezes nas páginas 1, 3, 14, 28, 40 e 59.
- 5 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica Quântica Moderna*. 2nd. ed. Porto Alegre: BOOKMAN, 2013. Citado 5 vezes nas páginas 1, 3, 14, 22 e 33.
- 6 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics: Basic Concepts, Tools and Applications*. 2nd. ed. Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2020. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 17.
- 7 WIGNER, E. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium. *Physical Review*, v. 40, n. 5, p. 749–759, 1932. Citado 3 vezes nas páginas 1, 17 e 33.
- 8 WEBER, P. E. R. et al. Non-classical properties of superposition thermal quantum states. *Annals of Physics*, v. 443, p. 168986, 2022. Citado na página 1.
- 9 SCHLEICH, W. P. *Quantum Optics in Phase Space*. Berlin: Wiley-VCH, 2001. Citado na página 1.
- 10 BELITSKY, A. V.; JI, X.; YUAN, F. Quark imaging in the proton via quantum phase-space distributions. *Physical Review D*, v. 69, n. 7, p. 074014, 2004. Citado na página 1.
- 11 LEE, H.-W.; SCULLY, M. O. The Wigner phase-space description of collision processes. *Foundations of Physics*, v. 13, n. 1, p. 61–72, 1983. Citado na página 1.
- 12 SPRINGBORG, M.; DAHL, J. P. Wigner’s phase-space function and atomic structure: Ii. Ground states for closed-shell atoms. *Physical Review A*, v. 36, n. 3, p. 1050, 1987. Citado na página 1.
- 13 L. DEMEIO et al. Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors. *Physica B: Condensed Matter*, v. 314, n. 1–4, p. 104–107, 2002. Citado na página 1.
- 14 DICKMAN, R.; O’CONNELL, R. F. Wigner-distribution-and Green’s-function approach to quantum corrections and implications for the melting temperature of two-dimensional Wigner crystals. *Physical Review B*, v. 32, n. 1, p. 471–473, 1985. Citado na página 1.

- 15 AMORIM, R. G. G. et al. Wigner Function at 80 years and the origins of noncommutative geometry. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 35, p. 1–14, 2013. Citado na página 1.
- 16 MARCHIOLLI, M. A. Mecânica Quântica no Espaço de Fase: I. Formulação de Weyl-Wigner. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 24, n. 4, p. 421–436, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 2, 34 e 37.
- 17 AMORIM, R. G. G. Física Quântica no Espaço de Fase. *Sitientibus Série Ciências Físicas*, v. 7, p. 1–12, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 34.
- 18 OLIVEIRA, M. D. **Mecânica Quântica no Espaço de Fase via Representações do Grupo de Galilei**. Orientador: A. E. Santana. 2002. 115f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2002. Citado 10 vezes nas páginas 2, 23, 24, 25, 35, 38, 43, 44, 52 e 53.
- 19 OLIVEIRA, M. D. et al. Symplectic Quantum Mechanics. *Annals of Physics*, v. 312, n. 2, p. 492–510, 2004. Citado 5 vezes nas páginas 2, 33, 44, 46 e 53.
- 20 CAMPOS FILHO, P. S. S. **Mecânica Quântica Simplética e Potencial de Coulomb**. Orientador: J. D. M. Vianna. 2018. 93f. Tese (Doutorado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 2, 45 e 48.
- 21 PEREIRA, P. D. M. **A Mecânica Quântica no Espaço de Fase e o Potencial de Yukawa**. Orientador: J. D. M. Vianna. 2021. 151f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2021. Citado 4 vezes nas páginas 2, 36, 44 e 71.
- 22 AMORIM, R. G. G. **Formulações de teorias de campos via estruturas simpléticas e o produto de Weyl**. Orientador: A. E. Santana. 2006. 104f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade de Brasília, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 2, 36 e 45.
- 23 LEE, H.-W.; SCULLY, M. O. The Wigner Phase-Space Description of Collision Processes. *Foundations of Physics*, v. 13, n. 1, p. 61–72, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 71.
- 24 REMLER, E. A. Use of the Wigner Representation in Scattering Problems. *Annals of Physics*, v. 95, n. 2, p. 455–495, 1975. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 71.
- 25 REMLER, E. A.; SATHE, A. P. Quasi-Classical Scattering Theory and Bound State Production Processes. *Annals of Physics*, v. 91, n. 2, p. 295–324, 1975. Citado na página 3.
- 26 CARRUTHERS, P.; ZACHARIASEN, F. Quantum Collision Theory with Phase-Space Distributions. *Reviews of Modern Physics*, v. 55, n. 1, p. 245–285, 1983. Citado 4 vezes nas páginas 3, 40, 41 e 71.
- 27 THIES, M. Quantum Theory of Inelastic Multiple Scattering in Phase Space. *Annals of Physics*, v. 123, n. 2, p. 411–441, 1979. Citado na página 3.
- 28 NEWTON, I. *Principia: Princípios Matemáticos de Filosofia Natural: Livro I*. São Paulo: Edusp, 2018. Citado na página 5.



- 29 LEMOS, N. A. *Mecânica Analítica*. 1a. ed. Rio de Janeiro: Editora Livraria da Física, 2007. Citado na página 5.
- 30 LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Curso de Física: Mecânica*. São Paulo: Hemus, 2002. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 10.
- 31 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2nd. ed. São Paulo: Pearson, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 39.
- 32 THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Dinâmica Clássica de Partículas e Sistemas*. Tradução da 5a edição norte-americana. São Paulo: Cengage Learning, 2013. Citado na página 7.
- 33 GOLDSTEIN H.; POOLE, C.; SAFKO, J. *Classical Mechanics*. 3rd. ed. Boston: Addison Wesley, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 7, 8, 9 e 24.
- 34 EISBERG, R. M.; RESNICK, R. *Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. São Paulo: Campus, 1979. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 39.
- 35 NEUMANN, J. V. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton: Princeton University Press, 1971. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.
- 36 VIANNA, J. D. M. Feynman e as Integrais de Trajetória. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 40, n. 4, e4206, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2017-0373>>. Citado na página 17.
- 37 FEYNMAN, R. P. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, v. 20, n. 2, p. 367–387, 1948. Citado na página 17.
- 38 SCHRÖDINGER, E. *Collected Papers of Wave Mechanics*. Providence, Island: AMS Chelsea Publis, 1982. Citado na página 17.
- 39 HEISENBERG, W. *The Physical Principles of the Quantum Theory*. New York: Dover, 1950. Citado na página 18.
- 40 VIANNA, J. D. M.; FAZZIO, A.; CANUTO, S. *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos*. São Paulo: Livraria da Física, 2004. Citado na página 22.
- 41 DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. New York: Oxford Science Publications, 1993. Citado na página 22.
- 42 WEYL, H. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*. New York: Dover Publications, 1950. Citado na página 25.
- 43 BALLENTINE, L. E. *Quantum Mechanics*. London: World Scientific, 1998. Citado na página 25.
- 44 VIANNA, J. D. M.; MARTINS, M. G. R. *Teoria Quântica de Espalhamento*. Notas de Curso, Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Bahia, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 26, 27 e 28.
- 45 SANTOS, M. C. L. ***Espalhamento Elástico Elétron-Molécula: um estudo usando o Método Interação de Configurações e Potenciais Modelo***. Orientadora: M. G. R. Martins. 2015. 60f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 32.

- 46 SIMÕES, A. S. ***Espalhamento Elástico Elétron-Molécula: um estudo usando o Método de Interação de Configuração e a Teoria do Funcional da Densidade***. Orientadora: M. G. R. Martins. 2013. 86f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2013. Citado na página 32.
- 47 MARTINS, M. G. R. et al. Elastic Scattering of Low-Energy Electrons by N<sub>2</sub> Including the Effect of Target Electronic Correlation. *Chemical Physics*, v. 320, n. 2–3, p. 239–256, 2006. Citado na página 32.
- 48 MARTINS, M. G. R. ***Estudos sobre a Inclusão da Correlação Eletrônica do Alvo no Espalhamento Elástico Elétron-Molécula e sobre a Ionização Molecular por Impacto de Elétrons***. Orientador: L. E. Machado. 2003. 107f. Tese (Doutorado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de São Carlos, 2003. Citado na página 32.
- 49 FERREIRA, I. L. M. ***Estudo do Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas Triatômicas utilizando os Métodos HF, CI e DFT***. Orientadora: M. G. R. Martins. 2016. 69f. Dissertação (Mestrado) - Programa da Pós-Graduação em Física, Universidade Federal da Bahia, 2016. Citado na página 32.
- 50 MOYAL, J. E. Quantum Mechanics as a Statistical Theory. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 45, n. 1, p. 99–124. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 35.
- 51 SCHLEICH, W. *Quantum Optics in Phase Space*. 1st. ed. Berlin, New York: Wiley-VCH, 2001. Citado na página 40.
- 52 CURTRIGHT, T.; FAIRLIE, D.; ZACHOS, C. Features of time-independent Wigner functions. *Physical Review D*, v. 58, n. 2, p. 025002, 1998. Citado na página 40.
- 53 LUTTERBACH, L. G.; DAVIDOVICH, L. Method for Direct Measurement of the Wigner Function in Cavity QED and Ion Traps. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 13, p. 2547–2550, 1997. Citado na página 40.
- 54 DOUCE, T. et al. Direct measurement of the biphoton Wigner function through two-photon interference. *Scientific Reports*, v. 3, n. 1, p. 1–6, 2013. Citado na página 40.
- 55 TIAN, Y. et al. Measurement of complete and continuous Wigner functions for discrete atomic systems. *Physical Review A*, v. 97, n. 1, p. 013840, 2018. Citado na página 40.
- 56 CAMPOS, P.; MARTINS, M. G. R.; VIANNA, J. D. M. Quantum Mechanics on Phase Space and the Coulomb Potential. *Physics Letters A*, v. 381, n. 13, p. 1129–1133, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 52.
- 57 HU, X.; LI, Q. Comment on “A quantum mechanical representation in phase space” [J. Chem. Phys. **98**, 3103 (1993)]. *The Journal of Chemical Physics*, v. 101, n. 8, p. 7187–7188, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 51.
- 58 ARFKEN, G. *Mathematical Methods for Physicists*. 2nd. ed. New York: Academic Press, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 55 e 74.

---

59 LAPIDUS, I. R. Born Series for Scattering by a One-Dimensional Delta-Function Potential. *American Journal of Physics*, v. 37, n. 10, p. 1064–1065, 1969. Citado 2 vezes nas páginas 66 e 71.