



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

ANTÔNIO ISRAEL PAZ PIRES

**OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO NOS
FORMALISMOS DE SCHRÖDINGER E HEISENBERG DA MECÂNICA
QUÂNTICA**

FORTALEZA

2021

ANTÔNIO ISABEL PAZ PIRES

OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO NOS FORMALISMOS
DE SCHRÖDINGER E HEISENBERG DA MECÂNICA QUÂNTICA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

Coorientador: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga.

FORTALEZA
2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- P743o Pires, Antônio Isael Paz.
Operador de translação dependente da posição nos formalismos de Schrödinger e Heisenberg da Mecânica Quântica / Antônio Isael Paz Pires. – 2021.
60 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.
Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.
Coorientação: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga.
1. Mecânica Quântica. 2. Operador translação modificado. 3. Formulação de Schrödinger. 4. Formulação de Heisenberg. I. Título.

CDD 530

ANTÔNIO ISABEL PAZ PIRES

OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO NOS FORMALISMOS
DE SCHRÖDINGER E HEISENBERG DA MECÂNICA QUÂNTICA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 24/05/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho
(Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga
(Coorientador)
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira (UNILAB)

Prof. Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

*Ao meu pai José Augusto Eduardo Pires... Um
homem de verdade.*

*“ No ensino básico, me ensinaram que um sapo transformando-se
em um príncipe era um conto de fadas.
Na universidade, me ensinaram que um sapo
transformando-se em um príncipe era um fato!”*

RON CARLSON

AGRADECIMENTOS

- A Deus que é a causa primeira sem a qual nada que existe viria a existir, nEle vivo, me movo e existo.
- A minha esposa Anne Larisse por sua graciosa e paciente ajuda.
- A minha família, pois construíram em mim a determinação, o brio necessário para seguir em frente.
- Ao meu orientador Raimundo Nogueira da Costa Filho pelo carácter técnico e visionário em seu ensino, além, claro! Sua paciência.
- Ao meu coorientador João Philipe Macedo Braga pelas orientações práticas e constantes de onde os erros sempre apareciam.
- Aos meus velhos parceiros de estudos Rodolfo, Ricardo e Luan que nunca cansaram de serem açoitados no PES por mim... são homens resilientes. Aos meus colegas Pedro Oliveira e Wellisson Pires, pois embora de áreas diferentes compartilhamos boas ideias ao longo do mestrado.
- À Rejane Ramos Coelho por sua personalidade cordata e excelência em seu trabalho na secretaria da Pós-Graduação em Física.
- A todo recurso estrutural e logístico disponibilizado pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará.
- Ao suporte financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).
- Aqueles que nem eles sabem e nem mesmo eu sei como contribuíram para esse trabalho, mas que sabendo ou não podem ter sido importante... ou talvez não! Quem sabe?

RESUMO

Neste trabalho é discutido o operador de translação dependente da posição na formulação de Schrödinger e Heisenberg da mecânica quântica. Nas duas representações, discutimos a importância de condições suficientes para que o operador momento seja hermitiano no espaço de métrica ao qual ele é definido. Após isso, vemos que na formulação ondulatória de Schrödinger encontramos uma equação tipo equação de Schrödinger que governa a evolução temporal das funções de onda. De igual modo, na formulação matricial de Heisenberg encontramos uma equação tipo equação de Heisenberg que governa a evolução temporal dos operadores. Por fim, como aplicação do formalismo de Heisenberg calculamos a evolução temporal da incerteza no tempo e o alargamento de pacotes de onda de uma partícula em um espaço unidimensional sob potencial nulo para uma métrica euclidiana e também para uma métrica com termo de primeira ordem em sua série de potência. Por outro lado, resolvermos a partícula livre em um espaço unidimensional para métricas com primeiro e segundo termo de sua expansão em série de potência na formulação de Schrödinger.

Palavras-chave: Mecânica Quântica. Operador translação modificado. Formulação de Schrödinger. Formulação de Heisenberg.

ABSTRACT

This work discusses the position-dependent translation operator in the Schrödinger and Heisenberg formulation of quantum mechanics. In both representations, we discuss the importance of sufficient conditions for the moment operator to be hermitian in the metric space to which it is defined. After that, we see that in the Schrödinger's wave formulation we find a Schrödinger equation that governs the temporal evolution of wave functions. Likewise, in Heisenberg's matrix formulation we find a Heisenberg equation that governs the temporal evolution of the operators. Finally, as an application of the Heisenberg formalism we calculate the temporal evolution of the uncertainty in time and the broadening of wave packets of a particle in a one-dimensional space under null potential for a Euclidean metric and also for a metric with a first order term in its power series. On the other hand, we solve the one-dimensional space free particle for metrics with first and second term of its expansion in series of power in Schrödinger's formulation.

Keywords: Quantum Mechanics. Modified translation operator. Schrödinger formulation. Heisenberg formulation

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Translações sucessivas em diferentes direções. Fonte: o autor.	17
Figura 2 – Comportamento de $\xi(x)$, para valores simétricos de $\gamma = \beta = \pm 0.3$, $\gamma = \beta = \pm 0.6$ e $\gamma = \beta = \pm 0.9$	32
Figura 3 – Função de onda $\psi(x)$ para $n = 1, n = 2, n = 3$ e $n = 4$, com $\beta = \gamma = 0.3$. . .	35
Figura 4 – Energia E_n , em função dos parâmetros γ e β . Linha tracejada são valores proibidos de energia, enquanto que a contínua são valores permitidos.	37
Figura 5 – Os três primeiros estados e suas respectivas densidades de probabilidade da função de onda de uma partícula sob potencial nulo em um espaço riemanniano (linha tracejada) em comparação a uma partícula confinada a paredes de potenciais infinito em $x = -L/2$ e $x = L/2$ em um espaço cartesiano (linha contínua). Para pontos próximos a $x = 0$, os dois problemas mostram-se idênticos.	38
Figura 6 – Variação no tempo da largura do pacote de onda em comparação com sua dispersão clássica. Para t , grande Δx se aproxima da dispersão clássica δx_{cl} . Para $\gamma > 0$ a dispersão é mais rápida que no caso euclidiano. Para $\gamma < 0$ o pacote de onda se dispersa mais lentamente que no caso euclidiano.	49
Figura 7 – Evolução temporal da incerteza da partícula livre sob potencial nulo. Linha contínua $\gamma = -0.9$. Linha tracejada $\gamma = -0.2$. Linha pontilhada $\gamma = 0.0$. . .	50
Figura 8 – Curvas definidas por (3.52) para $\gamma = -1, -1/2, -1/3$. Vemos que para esses valores de γ , pontos infinitesimalmente próximos no espaço cartesiano são extremamente distante no espaço riemanniano.	51
Figura 9 – Densidade de probabilidade $ \psi_n(x) ^2$, para $n = 1, n = 2, n = 3$ e $n = 4$	59

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	FORMALISMO DE SCHRÖDINGER	13
2.1	O espaço das funções de onda.	14
2.2	Descrição de um sistema quântico	15
2.2.1	Momento Linear como gerador de translações	18
2.3	Dinâmica Quântica	24
2.3.1	Uma equação tipo de Schrödinger	25
2.3.2	Corrente de probabilidade	28
2.4	Partícula sob potencial nulo	30
2.5	Expansão da métrica: primeira ordem	31
2.6	Expansão da métrica: segunda ordem	32
3	FORMALISMO DE HEISENBERG	40
3.1	Equação de movimento de Heisenberg	41
3.2	Análogo Clássico	42
3.3	Incerteza da partícula livre unidimensional no tempo	44
3.3.1	Métrica Euclidiana	45
3.3.2	Expansão da métrica: primeira ordem	47
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	52
	REFERÊNCIAS	54
	APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES MATEMÁTICAS	56
A.1	Prova de que 2.13 satisfaz um produto escalar	56
A.2	Aditividade de $T_g(d\vec{r})$	57
A.3	Condição de Unitariedade	57
A.4	Densidade de Probabilidade	58
A.5	Valor de $[\xi, F(p_\gamma)]$	58

1 INTRODUÇÃO

A mecânica pode ser esboçada em quatro grandes campos: clássica; relativística especial; quântica e teoria quântica de campos [1]. Dentro dos dois primeiros grandes campos há grandes nomes, tais como Newton (mecânica newtoniana), Maxwell (eletrodinâmica), Einstein (relatividade restrita). Assim, pode-se dizer que essas teorias foram criadas, ou pelo menos, estruturadas em princípios fundamentais por um indivíduo que leva até hoje o seu nome. Sobre os dois últimos grandes campos não se pode dizer a mesma coisa. A mecânica quântica, por exemplo, não foi criada - nem mesmo determinada definitivamente - por um indivíduo [2]. De fato, nas três primeiras décadas do século XX, houve uma caixa de pandora de observações experimentais dos quais, com base na teoria clássica firmemente estabelecida, eram totalmente inexplicáveis [3].

Com efeito, corpos e fenômenos em uma escala muito pequena comportam-se de forma diferente daquilo que podemos ter uma experiência direta. Fenômenos como efeito fotoelétrico (1905), dispersão de elétrons (1922), ondas de matéria (1925), propriedade de ondas de elétrons (1927), não possuem um comportamento tipo onda, ou como partículas, nem como nuvens, nem como bolas de bilhar, nem mesmo como pesos em molas, ou como qualquer outra coisa que já se tenha visto [3]. Efetivamente, apenas a mecânica quântica descreve em seus detalhes o comportamento da matéria em uma escala atômica [4], [5]. Além disso, para uma escala atômica sob altas energias necessita-se da abordagem da teoria quântica de campos [6].

Possivelmente, ainda nos dias de hoje a Mecânica Quântica carrega cicatrizes de sua origem [2]. Questionamentos sobre o que realmente significa fazer uma medição são dilemas que a Física ainda está buscando resolver [7]. Por fatores como esse e entre outros não é fácil chegar a um consenso sobre o que é Mecânica Quântica, embora já se esteja consolidado o que ela faz. É conceitualmente rica e matematicamente sofisticada. Possui pelo menos nove formulações e novas vão surgindo [8], as quais diferem dramaticamente em termos matemáticos e conceituais, mas cada uma faz previsões idênticas para todos os resultados experimentais.

Dentre estas formulações encontramos a sempre popular formulação de função de onda que é padrão para resolver problemas, mas deixa a impressão conceitual incorreta de que essa função de onda é uma entidade física e não uma ferramenta matemática [9], embora carregue toda informação útil do sistema. A densidade de probabilidade pode ser totalmente determinada por meio da função de onda e por fim, sua interpretação é dada pela interpretação probabilística, um postulado da teoria [10]. Finalmente a forma como a função de onda evolui no tempo é governada pela equação de Schrödinger.

Em 2004, Quesne e Tkachuk, mostraram que há algumas conexões entre três tipos

de equações de Schrödinger que descrevem três problemas de natureza aparentemente distintas; massa dependente da posição, álgebras deformadas e espaços curvos, sempre que a função de deformação $f(x)$, a massa dependente da posição (sem dimensão) $M(x)$, e a métrica (diagonal) $g(x)$, forem conectadas através das relações $f^2(x) = 1/M(x) = 1/g(x)$, [11].

Costa Filho[12], em 2011, introduziu o conceito de deslocamento espacial dependente da posição, o que não apenas implicou em uma mudança nas relações de comutação entre posição e momento, mas também em uma equação tipo equação de Schrödinger que pode ser interpretada em termos de uma partícula com massa dependente da posição.

Estudos posteriores buscaram tornar o operador momento definido por [12], hermitiano, no entanto, com uma abordagem *ad-hoc* [13]. Já em 2013, [14], não só mostrou que o potencial de Morse emerge naturalmente da ação do operador deslocamento espacial dependente da posição, mas como define um novo espaço munido de um produto escalar a respeito do qual o momento é hermitiano.

Por fim, em 2016, um operador de translação atuando em um espaço com métrica diagonal é introduzido para descrever o movimento de uma partícula em um sistema quântico. É mostrado que o operador momento e, como consequência, a relação de incerteza dependem da posição. Também é mostrado que, esse formalismo naturalmente leva a um princípio de incerteza estendida com uma dispersão de momento mínima [15]. Muitos trabalhos foram publicados dentro desse campo de estudo, como por exemplo um novo tipo de princípio de incerteza estendida [16], ou uma Mecânica Quântica Fracionária [17], ou ainda descrição de sistemas quânticos em campos elétricos estáticos [18].

Dentro desse contexto, esse trabalho se propõe, no segundo capítulo, discutir o formalismo tridimensional do operador de translação dependente da posição em um espaço de métrica diagonal na formulação da função de onda, mostrando a necessidade e restrições suficientes para que o operador momento seja hermitiano no espaço ao qual ele é definido. Ainda nesse capítulo, fazemos duas aplicações unidimensionais ao resolver a partícula sob potencial nulo com uso do termo linear e do termo quadrático na expansão em série de potência do termo $g^{-1/2}$. No capítulo três, fazemos uma discussão semelhante ao capítulo dois, mas agora na formulação matricial de Heisenberg. Como aplicações realizamos os cálculos da evolução temporal da incerteza e do alargamento dos pacotes de onda da partícula sob potencial nulo unidimensional em um espaço em que o operador translação é dependente da posição. Por fim, fazemos uma conclusão no capítulo quatro dos resultados discutidos e mostramos algumas perspectivas futuras para esse trabalho.

2 FORMALISMO DE SCHRÖDINGER

Caracteriza-se um espaço cartesiano de N-dimensões nas coordenadas x'^k , ditas cartesianas se o quadrado da distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos $P(x')$ e $P(x' + dx')$ for dado pela fórmula Pitagórica [19],

$$ds^2 = dx'^k dx'^k, \quad (2.1)$$

Que é uma extensão do teorema de pitágoras para mais de três dimensões. Uma generalização para coordenadas genéricas x^i , as quais conectam-se as coordenadas x'^k , é obtida por meio da seguinte transformação homogênia linear [20],

$$dx'^k = \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} dx^i. \quad (2.2)$$

de modo que a equação 2.1, pode ser escrita como

$$ds^2 = \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} \frac{\partial x'^k}{\partial x^j} dx^i dx^j = g_{ij}(x) dx^i dx^j, \quad (2.3)$$

com

$$g_{ij}(x) \equiv \frac{\partial x'^k}{\partial x^i} \frac{\partial x'^k}{\partial x^j}, \quad (2.4)$$

sendo um tensor covariante simétrico de posto 2, chamado na literatura de tensor métrico ou tensor fundamental. Portanto, ds^2 é um tensor, um invariante, no caso, como era de se esperar, pois a distância entre dois pontos não deve depender das coordenadas utilizadas no seu cálculo. Na derivação do Tensor métrico, equação (2.4), exigiu-se que seja necessário existir uma transformação do tipo,

$$x'^k = x'^k(x^i) \quad (k, i = 1, 2, \dots, N). \quad (2.5)$$

Tal que, em um espaço euclidiano descrito pelas coordenadas x'^k , a métrica se reduz, em todos os pontos do espaço, à matriz identidade, $g_{ij}(x) = \delta_j^i$, de modo que

$$ds^2 = dx'^k dx'^k. \quad (2.6)$$

que é o teorema de pitágoras como conhecemos. Por outro lado, se tal transformação não existir, o Tensor métrico, tal como foi definido na equação(2.4) não faz sentido. No entanto, como mostrado em [21], podemos adotar o ponto de vista de que as quantidades g_{ij} , é *dado* e *não necessita* ser calculado fazendo referência a um sistema cartesiano por meio da equação

¹Consideremos aqui a notação de Einstein ao qual assume uma soma sobre os índices repetidos.

(2.4).

Uma vez definido o tensor métrica, podemos caracterizar um espaço riemanniano ou métrico como sendo aquele que pode ser descrito, de modo contínuo, pelo sistema de valores de suas coordenadas (x^i) , cujo o invariante tensorial ds^2 que exprime a distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos $P(x^i)$ e $P(x^i + dx^i)$ é dado pela forma quadrática dos diferenciais das coordenadas relativas dx^i

$$ds^2 = g_{ij}(x)dx^i dx^j, \quad (2.7)$$

onde x é um ponto do espaço em questão. Espaços que são caracterizados por uma métrica que não depende do espaço-tempo chama-se *espaços planos*. Por outro lado, presença de campos gravitacionais faz com que a métrica dependa dos pontos do espaço-tempo (*espaços curvos*) [22].

2.1 O espaço das funções de onda.

Uma métrica Riemanniana permite definir uma noção de volume [23], como segue

$$dV = \sqrt{g} dx^1 dx^2, \dots, dx^N, \quad (2.8)$$

onde $\{x^n\}$, $(n = 1, 2, \dots, N)$ são coordenadas genéricas e $g \equiv \det(g_{ij})$. A expressão (2.8) é invariante sobre mudança de coordenadas[23], o que nos garante escrever,

$$dV' = \sqrt{g} dx'^1 dx'^2, \dots, dx'^N, \quad (2.9)$$

com $\{x'^n\}$, $(n = 1, 2, \dots, N)$ sendo coordenadas cartesianas; e $g \equiv \det(g_{ij})$. Desse modo, igualmente a Braga[24], postula-se que o espaço das funções de onda definidas em um volume V , é o espaço de Hilbert com um peso, tal que

$$\int_V |\psi(x, y, z)|^2 \sqrt{g} dx dy dz < \infty, \quad (2.10)$$

com a seguinte métrica

$$g(x, y, z) = \begin{pmatrix} g_{xx}(x, y, z) & 0 & 0 \\ 0 & g_{yy}(x, y, z) & 0 \\ 0 & 0 & g_{zz}(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Conseqüentemente

$$ds^2 = g_{xx}(x, y, z)dx^2 + g_{yy}(x, y, z)dy^2 + g_{zz}(x, y, z)dz^2. \quad (2.12)$$

A partir da definição (2.10), definimos produto escalar

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int_V \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \sqrt{g} \, dx dy dz . \quad (2.13)$$

com $\vec{r} = (x, y, z)$. Como se pode ver no Apêndice A.1, a expressão (2.13), obedece as propriedades de produto escalar. Uma vez definido o produto escalar, os conceitos de ortogonalidade e norma podem ser definidos como segue.

$$\langle \phi | \psi \rangle = 0. \quad (2.14)$$

Por outro lado, a norma de uma função $\psi(\vec{r})$ é definida por

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle , \quad (2.15)$$

que deve ser positiva definida.

2.2 Descrição de um sistema quântico

Em Mecânica Quântica um observável físico é representado por um operador linear hermitiano² que ao ser medido tem como resultado um autovalor real [25]. Seja, uma partícula bem localizada em torno de um ponto localizado pelo vetor \vec{r} , no espaço euclidiano em três dimensões,

$$\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}, \quad (2.16)$$

que é descrita por um ket

$$|\vec{r}\rangle \equiv |\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\rangle , \quad (2.17)$$

ao qual é autoket simultâneo dos operadores \mathbf{x}, \mathbf{y} e \mathbf{z} ³

$$\mathbf{x} |\vec{r}\rangle = x |\vec{r}\rangle , \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{y} |\vec{r}\rangle = y |\vec{r}\rangle , \quad (2.18b)$$

$$\mathbf{z} |\vec{r}\rangle = z |\vec{r}\rangle , \quad (2.18c)$$

o que leva imediatamente a,

$$[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = [\mathbf{x}, \mathbf{z}] = [\mathbf{y}, \mathbf{z}] = 0. \quad (2.19)$$

Resta-nos saber se $\{|\vec{r}\rangle\}$ forma uma base para o espaço vetorial definido pelo produto escalar da equação (2.13). Verifica-se isso como segue. Ora, de acordo com o produto escalar 2.13,

²a hermiticidade não é uma condição necessária, mas suficiente.

³nesse texto operadores serão representados por letras em negrito, sejam maiúsculas ou minúsculas.

temos que

$$\begin{aligned}\langle \phi | \psi \rangle &= \int \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \sqrt{g} \, dx dy dz \\ &= \int \langle \phi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle \sqrt{g} \, dx dy dz \\ &= \langle \phi | \left[\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \sqrt{g} \, dx dy dz \right] | \psi \rangle,\end{aligned}$$

portanto,

$$\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \sqrt{g} \, dx dy dz = 1. \quad (2.20)$$

Onde 1, é a matriz identidade. Ou seja, $\{|\vec{r}\rangle\}$ é completo. Por outro lado

$$\begin{aligned}\phi(\vec{r}') &= \langle \vec{r}' | \phi \rangle = \langle \vec{r}' | \left[\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \sqrt{g} \, dx dy dz \right] | \phi \rangle \\ \phi(\vec{r}') &= \int \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle \phi(\vec{r}) \sqrt{g} \, dx dy dz.\end{aligned} \quad (2.21)$$

Mas, segue da propriedade da função delta de Dirac[21],

$$\theta(\vec{r}') = \int \theta(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \, dx dy dz. \quad (2.22)$$

Portanto, comparando as equações (2.21) com (2.22), vemos que

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') g^{-1/2} \quad (2.23)$$

mostrando que $\{|\vec{r}\rangle\}$, são kets ortogonais entre si, mas não normalizados. Vemos aqui que os pontos no espaço não são equivalentes devido ao tensor métrica de modo que a normalização depende também de cada ponto do espaço. Portanto, um estado físico arbitrário pode ser expandido em termos de $\{|\vec{r}\rangle\}$,

$$|\psi\rangle = \int \langle \vec{r} | \psi \rangle |\vec{r}\rangle \sqrt{g} \, dx dy dz \quad (2.24)$$

Assim como fez Costa Filho[12] para uma dimensão, postularemos que o operador translação espacial infinitesimal em três dimensões $\mathbf{T}_g(\vec{dr})$, atua em um estado $|\vec{r}\rangle$ da seguinte forma [24]

$$\mathbf{T}_g(\vec{dr}) |\vec{r}\rangle = \left| x + g_{11}^{-1/2} dx, y + g_{22}^{-1/2} dy, z + g_{33}^{-1/2} dz \right\rangle, \quad (2.25)$$

com g_{11}, g_{22} e g_{33} dependem das coordenadas (x, y, z) .⁴ Segue da equação acima que

$$\mathbf{T}_g(\vec{ds}) |\vec{r}\rangle = |x + dx, y + dy, z + dz\rangle. \quad (2.26)$$

⁴Sempre será considerado que g_{11}, g_{22} e g_{33} dependendo das coordenadas (x, y, z) , a menos que se diga ao contrário no texto.

Ou seja, $\mathbf{T}_g(\vec{dr})$, é definido de forma que um deslocamento \vec{ds} , e não \vec{dr} , é necessário para levar a partícula de $|\vec{r}\rangle$ para $|\vec{r} + \vec{dr}\rangle$. Em outras palavras, o operador translação espacial é definido levando em consideração a métrica do espaço ao qual ele atua.

Duas propriedades fundamentais das translações é a adição e comutação. Sobre a primeira nos é dito que dado duas translações na mesma direção pode-se substitui-las por uma cujo o valor é soma das duas. Matematicamente,

$$\mathbf{T}_g(\delta x \hat{x}) \mathbf{T}_g(\delta x' \hat{x}) = \mathbf{T}_g((\delta x + \delta x') \hat{x}). \quad (2.27)$$

Sobre a segunda nos é dito que translações sucessivas em diferentes direções, comutam[10]. Matematicamente,

$$\mathbf{T}_g(\delta x \hat{x}) \mathbf{T}_g(\delta y \hat{y}) = \mathbf{T}_g(\delta y \hat{y}) \mathbf{T}_g(\delta x \hat{x}). \quad (2.28)$$

No entanto, uma vez definido o operador de translação de acordo com a equação (2.25), essas duas propriedades são quebradas. Para a primeira consulte o apêndice (A.2). No caso da segunda, é importante entendermos de um ponto de vista geométrico. Para isso considere a figura (1) ao qual representa translações no espaço bidimensional

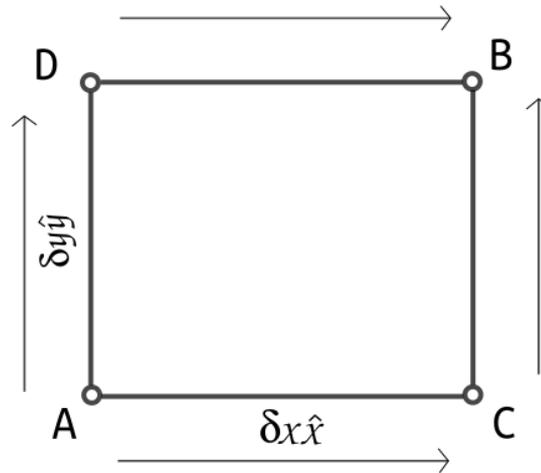


Figura 1: Translações sucessivas em diferentes direções. Fonte: o autor.

Para um deslocamento de **A** para **B**, poderia se pensar em dois trajetos: o primeiro deslocando-se de **A** para **C** e depois de **C** para **B**. O segundo deslocando-se de **A** para **D** e depois de **D** para **B**. No entanto, isso não pode acontecer, pois da forma como o operador translação é definido em (2.25), o ponto **C** e **D** deveriam necessariamente ser iguais, pois ao aplicar o operador translação em uma dada direção as outras coordenadas do ponto de onde se faz deslocamento são consideradas, pois a métrica depende de todas as coordenadas do ponto. O espaço definido pelo tensor métrico de acordo com a equação (2.73) é não homogêneo, ou seja, as propriedades do sistema físico são afetadas por um deslocamento arbitrário da origem do sistema de referencia. De fato, deslocar-se sobre uma única direção não é independente das

outras, pois os elementos do tensor métrico dependem das três coordenadas. Segue, portanto, que a ordem a qual fazemos as translações são importantes. Por outro lado é possível que as translações sejam comutativas, mesmo que a métrica não seja euclidiana, basta que cada elemento do tensor métrico seja dependente apenas de uma única coordenada x, y ou z , de modo que cada elemento da diagonal de $g(x, y, z)$ seja função exclusiva apenas de uma das três coordenadas espaciais.

A forma como essas translações se comportam permite que se faça uma relação com uma conhecida família de funções que possibilita generalizar a termodinâmica de Tsallis e suas várias aplicações relacionadas a sistemas termodinâmicos não extensivos [26–29].

2.2.1 Momento Linear como gerador de translações

Seguindo a ideia de que o momento linear é o gerador das translações no espaço, podemos escrever

$$\mathbf{T}_g(\vec{dr}) \equiv 1 - \left(\frac{i}{\hbar} \right) \mathbf{p}_g \cdot \vec{dr} , \quad (2.29)$$

com

$$\mathbf{p}_g \equiv p_{xx}\hat{x} + p_{yy}\hat{y} + p_{zz}\hat{z}. \quad (2.30)$$

Com essa definição podemos acrescentar mais alguns características de $\mathbf{T}_g(\vec{dr})$. Por exemplo, para o caso em que tomamos $g_{xx}^{-1/2} = 1 + \gamma x$, o inverso de T_g deve ser definido de tal modo que

$$\mathbf{T}_g^{-1}(dx) |x'\rangle = |x\rangle , \quad (2.31)$$

em que $x' = x + dx + \gamma x dx$. Segue portanto, que

$$x = \left| \frac{x' - dx}{1 + \gamma x} \right\rangle . \quad (2.32)$$

Dessa maneira pode-se escrever que

$$\mathbf{T}_g^{-1}(dx) |x\rangle = \left| \frac{x - dx}{1 + \gamma x} \right\rangle . \quad (2.33)$$

De fato,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_g^{-1}(dx) \mathbf{T}_g(dx) |x\rangle &= \mathbf{T}_g^{-1}(dx) |x + dx + \gamma x dx\rangle \\ &= \left| \frac{x + dx + \gamma x dx - x}{1 + \gamma x} \right\rangle \\ &= |x\rangle \\ \mathbf{T}_g^{-1}(dx) \mathbf{T}_g(dx) &= 1 \end{aligned} \quad (2.34)$$

É possível verificar com a ordem dos operadores invertida, ou seja,

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}_g(dx)\mathbf{T}_g^{-1}(dx)|x\rangle &= \mathbf{T}_g(dx)\left|\frac{x-dx}{1+\gamma x}\right\rangle \\
&= \left|\frac{x-dx}{1+\gamma x} + dx\left[1 + \gamma\left(\frac{x-dx}{1+\gamma x}\right)\right]\right\rangle \\
&= \left|\frac{x-dx + dx + \gamma dx^2 + \gamma x dx - \gamma dx^2}{1+\gamma x}\right\rangle \\
&= \left|\frac{x(1+\gamma x)}{1+\gamma x}\right\rangle \\
\mathbf{T}_g(dx)\mathbf{T}_g^{-1}(dx)|x\rangle &= |x\rangle \\
\mathbf{T}_g(dx)\mathbf{T}_g^{-1}(dx) &= 1.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

A esse ponto, é fácil notar que

$$\mathbf{T}_g^{-1}(dx) \neq \mathbf{T}_g(-dx). \tag{2.36}$$

Uma característica que para esse caso considerando $g_{xx}^{-1/2} = 1 + \gamma x$, é diferente do caso euclidiano. O que podemos ver é que ao fazer um deslocamento em uma direção oposta não é a mesma coisa que fazer a mesma translação de modo inverso. O que ocorre para o caso de uma translação no espaço euclidiano.

A extensão para traslações finitas é dado por sucessivas translações infinitesimais de comprimento $\Delta\mathbf{r}/N$, com $\Delta\mathbf{r} = (\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{z})$, e N indo para o infinito,

$$\mathbf{T}_g(\Delta\mathbf{r}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i\mathbf{p}_g \cdot \Delta\mathbf{r}}{\hbar N}\right]^N = \exp\left(-\frac{i\mathbf{p}_g \cdot \Delta\mathbf{r}}{\hbar}\right). \tag{2.37}$$

Seguimos explorando a quebra da propriedade expressa na equação (2.28), que nos leva a escrever

$$[\mathbf{T}_g(dx\hat{x}), \mathbf{T}_g(dy\hat{y})] \neq 0 \tag{2.38}$$

$$[(1 - (i\hbar)\mathbf{p}_{xx}dx), (1 - (i/\hbar)\mathbf{p}_{yy}dy)] \neq 0 \tag{2.39}$$

$$\left[\frac{(dx)(dy)}{\hbar^2}\right] [\mathbf{p}_{yy}, \mathbf{p}_{xx}] \neq 0 \tag{2.40}$$

$$[\mathbf{p}_{yy}, \mathbf{p}_{xx}] \neq 0. \tag{2.41}$$

Fazendo para as outras direções, encontramos ao todo

$$[\mathbf{p}_{xx}, \mathbf{p}_{yy}] \neq 0, \tag{2.42}$$

$$[\mathbf{p}_{xx}, \mathbf{p}_{zz}] \neq 0, \tag{2.43}$$

$$[\mathbf{p}_{yy}, \mathbf{p}_{zz}] \neq 0. \tag{2.44}$$

A não comutatividade dos momentos é consequência direta da quebra da comutatividade das

translações. Outra consequência da definição de (2.25) é que a relação de comutação entre os operadores posição e momento variam em cada ponto do espaço de acordo com a definição do tensor métrico. De fato,

$$[\mathbf{x}, \mathbf{T}_g] |x, y, z\rangle = g_{xx}^{-1/2} dx \left| x + g_{xx}^{-1/2} dx, y + g_{yy}^{-1/2} dy, z + g_{zz}^{-1/2} dz \right\rangle.$$

Fazendo um aproximação com erro em segunda ordem em $d\mathbf{x}, dy$ e dz ⁵, obtemos

$$[\mathbf{x}, \mathbf{T}_g] = g_{xx}^{-1/2} d\mathbf{x}, \quad (2.45)$$

fazendo o mesmo para os operadores \mathbf{y} e \mathbf{z}

$$[\mathbf{y}, \mathbf{T}_g] = g_{yy}^{-1/2} d\mathbf{y}, \quad (2.46)$$

$$[\mathbf{z}, \mathbf{T}_g] = g_{zz}^{-1/2} d\mathbf{z}. \quad (2.47)$$

Pondo a definição (2.29), nas equações (2.45), (2.46) e (2.47), obtemos

$$\begin{cases} \left([\mathbf{x}, \mathbf{p}_{xx}] - i\hbar g_{xx}^{-1/2} \right) dx + [\mathbf{x}, \mathbf{p}_{yy}] dy + [\mathbf{x}, \mathbf{p}_{zz}] dz = 0 \\ \left([\mathbf{y}, \mathbf{p}_{yy}] - i\hbar g_{yy}^{-1/2} \right) dy + [\mathbf{y}, \mathbf{p}_{xx}] dx + [\mathbf{y}, \mathbf{p}_{zz}] dz = 0 \\ \left([\mathbf{z}, \mathbf{p}_{zz}] - i\hbar g_{zz}^{-1/2} \right) dz + [\mathbf{z}, \mathbf{p}_{xx}] dx + [\mathbf{z}, \mathbf{p}_{yy}] dy = 0. \end{cases}$$

Se considerarmos os comutadores como variáveis desse sistema (é o que desejamos) a solução trivial nos garante,

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}_{xx}] = i\hbar g_{xx}^{-1/2}, \quad (2.48)$$

$$[\mathbf{y}, \mathbf{p}_{yy}] = i\hbar g_{yy}^{-1/2}, \quad (2.49)$$

$$[\mathbf{z}, \mathbf{p}_{zz}] = i\hbar g_{zz}^{-1/2}. \quad (2.50)$$

e também,

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}_{yy}] = [\mathbf{x}, \mathbf{p}_{zz}] = [\mathbf{y}, \mathbf{p}_{xx}] = [\mathbf{y}, \mathbf{p}_{zz}] = [\mathbf{z}, \mathbf{p}_{xx}] = [\mathbf{z}, \mathbf{p}_{yy}] = 0 \quad (2.51)$$

Como faz [24], podemos determinar o operador \mathbf{p}_g no espaço das posições. Podemos fazer para uma componente \hat{z} do momento, então estender para as outras de modo análogo. Segue da equação (2.29) que

$$\mathbf{T}_g(\delta s) |\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i\mathbf{P}_{zz}\delta s}{\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.52)$$

⁵é uma aproximação do tipo $g_{xx}^{-1}x|x + g^{-1/2}dx\rangle \approx g_{xx}^{-1}x|x\rangle$, em x, y e z .

em que aqui consideramos $\delta s = \sqrt{g_{zz}} \delta z$ muito pequeno. Utilizando a completeza, reescrevemos

$$\int ds' \mathbf{T}_g(\delta s) |z'\rangle \langle z'|\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i\mathbf{p}_{zz}\delta s}{\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.53)$$

aqui reescrevemos $\delta s' = \sqrt{g'_{zz}} \delta z'$. Adiante expressamos por meio da equação (2.26) do seguinte modo

$$\begin{aligned} \int ds' |z' + \delta z\rangle \langle z'|\psi\rangle &= |\psi\rangle - \frac{i\mathbf{p}_{zz}\delta s}{\hbar} |\psi\rangle \\ \int ds' |z\rangle \langle z' - \delta z|\psi\rangle &= |\psi\rangle - \frac{i\mathbf{p}_{zz}\delta s}{\hbar} |\psi\rangle. \end{aligned}$$

Onde fizemos uma mudança de variável e retornamos novamente a variável primeira z' . Fazendo uma aproximação em primeira ordem do tipo

$$\langle z' - \delta z|\psi\rangle \approx \langle z'|\psi\rangle - \delta s \left(\frac{\partial}{\partial s} \langle z'|\psi\rangle \right) \langle \phi|\mathbf{p}_g|\psi\rangle$$

de modo que escrevemos a equação (2.54) como

$$\int ds' |z'\rangle \left(\langle z'|\psi\rangle - \delta s \frac{\partial}{\partial s} \langle z'|\psi\rangle \right) = |\psi\rangle - \frac{i\mathbf{p}_{zz}\delta s}{\hbar} |\psi\rangle. \quad (2.54)$$

Resta-nos então, pondo pela esquerda $\langle z|$ nos dois membros

$$\int ds' \frac{\partial}{\partial s} \langle z|\psi\rangle (\delta s) \delta(z - z') g_{zz}^{-1/2} = \frac{i}{\hbar} \langle z|\mathbf{p}_{zz}|\psi\rangle \delta s,$$

sendo $ds' = \sqrt{g_{zz}} dz'$, temos

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial s} \langle z'|\psi\rangle \delta(z - z') dz' &= \frac{i}{\hbar} \langle z|\mathbf{p}_{zz}|\psi\rangle \\ \frac{\partial}{\partial s} \langle z|\psi\rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle z|\mathbf{p}_{zz}|\psi\rangle \\ \langle z|\mathbf{p}_{zz}|\psi\rangle &= -i\hbar g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \langle z|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Onde no último passo mudamos da variável s , para a variável z . Fazendo o mesmo para as demais coordenadas encontramos

$$\langle x|\mathbf{p}_{xx}|\psi\rangle = -i\hbar g_{xx}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle, \quad (2.56)$$

$$\langle y|\mathbf{p}_{yy}|\psi\rangle = -i\hbar g_{yy}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y} \langle y|\psi\rangle, \quad (2.57)$$

de modo resumido temos

$$\mathbf{p}_g = -i\hbar \left(g_{xx}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x}, g_{yy}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y}, g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.58)$$

No entanto, devemos ser cuidadosos aqui, um dos pilares que permite uma descrição física de um sistema quântico é a possibilidade de representar um observável físico por meio de um operador hermitiano[2], e daí segue as propriedades de autovetores ortogonais correspondente a diferentes autovalores reais. Outro aspecto importante da necessidade que o operador momento seja hermitiano é nossa garantia da unitariedade do operador translação (2.37) como se pode ver no apêndice (A.3). Pois, se assim não for a norma dos kets de posição não será preservada e consequentemente a densidade de probabilidade. Portanto, devemos cuidadosamente verificar se o operador (2.58), é hermitiano.⁶ Portanto, queremos mostrar se (2.58) satisfaz,

$$\langle \phi | \mathbf{p}_g | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{p}_g | \phi \rangle^*, \quad (2.59)$$

que é a condição para um dado operador ser hermitiano. Desenvolvendo o lado esquerdo da equação acima por meio da completeza do espaço das posições

$$\begin{aligned} \langle \phi | \mathbf{p}_g | \psi \rangle &= -i\hbar \int \langle \phi | \sqrt{g} dx dy dz | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \mathbf{p}_g | \psi \rangle \\ &= -i\hbar \int \langle \phi | \vec{r} \rangle \left(g_{xx}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + g_{yy}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \right) \\ &\quad \langle \vec{r} | \psi \rangle \cdot \sqrt{g} dx dy dz \\ \langle \phi | \mathbf{p}_g | \psi \rangle &= -i\hbar \hat{x} \int \phi^* \left(g_{xx}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle \sqrt{g} dx dy dz + \\ &\quad -i\hbar \hat{y} \int \phi^* \left(g_{yy}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y} \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle \sqrt{g} dx dy dz + \\ &\quad -i\hbar \hat{z} \int \phi^* \left(g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle \sqrt{g} dx dy dz. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Se cada componente do operador momento for hermitiana, então todo ele também será, de modo que podemos tratar separadamente cada componente. Seja a componente \hat{z} ,

$$\langle \phi | \mathbf{p}_{zz} | \psi \rangle = -i\hbar \hat{z} \int \phi^* \left(g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle \sqrt{g} dx dy dz \quad (2.61)$$

$$= -i\hbar \hat{z} \int \phi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \sqrt{g_{yy} g_{xx}} dx dy dz. \quad (2.62)$$

Usando uma integração por partes, do tipo

$$u = \phi^* \sqrt{g_{yy} g_{xx}} dx dy \therefore du = \left(\frac{\partial \phi^*}{\partial z} \sqrt{g_{yy} g_{xx}} + \phi^* \frac{\partial}{\partial z} \sqrt{g_{yy} g_{xx}} \right) dx dy dz \quad (2.63)$$

$$dv = \frac{\partial \psi}{\partial z} dz \therefore v = \psi \quad (2.64)$$

⁶É verdade que possa haver operadores não hermitianos que possuem autovalores reais, no entanto, isso é uma condição que deve ser analisada e não garantida, o que torna a teoria mais delicada do ponto de vista matemático.

reescrevemos, então,

$$\begin{aligned} \langle \phi | \mathbf{p}_{zz} | \psi \rangle &= i\hbar \left[\int_V \psi \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \sqrt{g_{yy}g_{xx}} dx dy dz + \int_V \psi \phi^* \frac{\partial}{\partial z} \sqrt{g_{yy}g_{xx}} dx dy dz \right] + \\ &\quad - i\hbar \int_S \phi^* \psi \sqrt{g_{yy}g_{xx}} dx dy \Big|_{-\infty}^{\infty}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

O termo de superfície vai a zero nos limites dados, pois as funções de onda nesses limites também vão, restando-nos

$$\langle \phi | \mathbf{p}_{gz} | \psi \rangle = i\hbar \left[\int_V \psi \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \sqrt{g_{yy}g_{xx}} dx dy dz + \int_V \psi \phi^* \frac{\partial}{\partial z} \sqrt{g_{yy}g_{xx}} dx dy dz \right]. \quad (2.66)$$

A primeiro termo claramente obedece a condição de hermiticidade expressa pela equação (2.59).

A última integral não permite que \mathbf{p}_{gz} , seja hermitiano. No entanto, se garantirmos que a segunda integral se anule, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial z} \sqrt{g_{yy}g_{xx}} = 0, \quad (2.67)$$

o que de modo mais geral significa que g_{11} e g_{22} , não depende da variável z . A análise para as demais componentes de \mathbf{p}_g são análogas, o que também mostra a necessidade de se ter

$$\frac{\partial}{\partial x} \sqrt{g_{yy}g_{zz}} = 0, \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \sqrt{g_{zz}g_{xx}} = 0. \quad (2.69)$$

Das equações (2.67, 2.68) e (2.69), podemos resumir

$$g_{xx} = g_{xx}(x), \quad (2.70)$$

$$g_{yy} = g_{yy}(y), \quad (2.71)$$

$$g_{zz} = g_{zz}(z). \quad (2.72)$$

É evidente que podemos montar combinações com as g_{xx} , g_{yy} e g_{zz} , de modo que as equações (2.67, 2.68) e (2.69), sejam satisfeita. No entanto, a solução mais simples é a que aqui foi posta.

Garantido isso, o momento \mathbf{p}_g será hermitiano no espaço com métrica

$$g(x, y, z) = \begin{pmatrix} g_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & g_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & g_{zz} \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

de modo que,

$$\mathbf{p}_g = -i\hbar \left(g_{xx}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x}, g_{yy}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y}, g_{zz}^{-1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.74)$$

O que podemos perceber é que se optarmos por garantia necessária e suficiente para autovalores reais bem como preservação da norma dos kets, haverá uma impossibilidade de descrever sistemas físicos em dados espaços, pois nesse espaço o momento não é hermitiano, conseqüentemente o hamiltoniano e, portanto, a energia perde o significado físico como conhecemos⁷. Outro ponto é que com a métrica (2.73), as equações 2.42, 2.43 e 2.44 não são mais válidas, valendo agora as igualdades

$$[\mathbf{p}_{xx}, \mathbf{p}_{yy}] = [\mathbf{p}_{xx}, \mathbf{p}_{zz}] = [\mathbf{p}_{yy}, \mathbf{p}_{zz}] = 0, \quad (2.75)$$

voltando as relações de comutação semelhante ao espaço cartesiano, ou seja, para essa métrica (2.73), não há quebra de comutatividade nas translações. Dito tudo isso, buscaremos agora, encontrar uma equação que governe a evolução das funções de onda no tempo.

2.3 Dinâmica Quântica

É evidente que se tivermos um sistema em t_0 representado por um ket $|\psi\rangle$, em geral em tempos posteriores não se espera que ele permaneça no mesmo estado $|\psi\rangle$. Desse modo, buscaremos descrever aqui a evolução temporal dos kets de estado via operador de evolução temporal. A forma como o operador de evolução temporal atua nos kets fazendo-os evoluir no tempo determina várias quantidades físicas importantes. De fato, veremos que a unitariedade do operador evolução temporal implica diretamente na conservação da probabilidade de se localizar a partícula.

Desse modo, nessa seção deduziremos um operador de translação temporal que conserva a norma dos kets, e por conseguinte, a densidade de probabilidade semelhantemente como faz [24]. Veremos que tal operador obedece a uma equação tipo de Schrödinger, o que imediatamente leva a uma equação tipo de Schrödinger para os kets de estado no espaço das posições.

Seja, um operador ao qual é capaz de evoluir um ket de estado de um tempo t_0 para t . Matematicamente

$$\langle \vec{r} | \mathbf{U}_g(t, t_0) | \psi(x, t_0) \rangle = \langle \vec{r} | \psi(x, t) \rangle \quad (2.76)$$

Ou seja, $\mathbf{U}_g(t, t_0)$, provoca uma evolução nos estados de $t_0 \rightarrow t$. Para um caso infinitesimal com primeira ordem em dt , postulamos semelhantemente como faz [10] para a Mecânica Quântica no espaço euclidiano que o hamiltoniano associado ao momento (2.58) definido no espaço de

⁷Embora, seja possível que um sistema apresente observáveis não hermitianos e possua energias com valores reais. Mas, o ponto é que não poderíamos garantir sempre isso.

métrica (2.73), é o gerador de evolução temporal

$$\mathbf{U}_g(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{i\mathbf{H}_g}{\hbar} dt. \quad (2.77)$$

Uma propriedade desejada de \mathbf{U}_g , é a propriedade de composição

$$\mathbf{U}_g(t_2, t_0) = \mathbf{U}_g(t_2, t_1)\mathbf{U}_g(t_1, t_0) \quad (t_2 > t_1), \quad (2.78)$$

É explorando essa propriedade da composição que podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_g(t + dt, t_0) &= \mathbf{U}_g(t + dt, t)\mathbf{U}_g(t, t_0) = 1 - \frac{i\mathbf{H}_g}{\hbar}\mathbf{U}_g(t_0, t)dt \\ \mathbf{U}_g(t + dt, t_0) - \mathbf{U}_g(t, t_0) &= -\frac{i\mathbf{H}_g}{\hbar}\mathbf{U}_g(t, t_0)dt \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{U}_g(t, t_0) &= \mathbf{H}_g\mathbf{U}_g(t, t_0). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Essa equação é uma tipo equação de Schrödinger para o operador evolução temporal. Assumindo que \mathbf{H}_g , não depende explicitamente do tempo temos a seguinte solução

$$\mathbf{U}_g(t, t_0 = 0) = \mathbf{U}_g(t) = \exp\left(-\frac{i\mathbf{H}_g t}{\hbar}\right). \quad (2.80)$$

O fato de \mathbf{H}_g ser hermitiano garante que $\mathbf{U}_g(t)$ seja unitário, de modo que, se o estado inicialmente é normalizado pela unidade, ele permanecerá normalizado pela unidade para qualquer tempo seguinte

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi(x, t_0) | \psi(x, t_0) \rangle \\ 1 &= \langle \psi(x, t_0) | \left(\mathbf{U}_g(t)^\dagger \mathbf{U}_g(t) \right) | \psi(x, t_0) \rangle \\ 1 &= \langle \psi(x, t) | \psi(x, t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Para operadores do tipo $\mathbf{O} = \exp(-i\mathbf{A})$, ao qual é o tipo dos operadores translação e evolução temporal a relação de unitariedade de \mathbf{O} , com a hermiticidade de \mathbf{A} , é demonstrada no apêndice (A.3). A condição de, se somente se, é de extrema importância, pois evidencia a necessidade de que o momento seja hermitiano no espaço ao qual ele é definido. Essa é uma garantia de que os operadores translação e evolução temporal sejam unitários.

2.3.1 Uma equação tipo de Schrödinger

Usando o seguinte hamiltoniano

$$\mathbf{H}_g = \frac{\mathbf{p}_g^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t), \quad (2.82)$$

junto com a equação (2.76), considerando $t_0 = 0$, podemos escrever (2.79), para os kets de estado no espaço das posições como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}_g \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.83)$$

Uma vez escrevendo

$$\mathbf{p}_g^2 = -\hbar^2 \mathbf{D}_g \cdot \mathbf{D}_g = -\hbar \mathbf{D}_g^2 \quad (2.84)$$

em que

$$\mathbf{D}_g = \left[\hat{x} \frac{1}{\sqrt{g_{xx}}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{1}{\sqrt{g_{yy}}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{1}{\sqrt{g_{zz}}} \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (2.85)$$

com essas definições a equação tipo de Schrödinger é escrita como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{D}_g^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.86)$$

Podemos considerar um potencial independente do tempo e pressupor uma solução para (2.86), do tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \chi(t) . \quad (2.87)$$

a qual leva-nos à

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \mathbf{D}_g^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) . \quad (2.88)$$

Para que esta equação (2.88) seja verdadeira, é necessário que os dois lados da mesma sejam constantes, ou seja,

$$\frac{d\chi(t)}{dt} = \frac{E}{i\hbar} \chi(t) \implies \chi(t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (2.89)$$

como também

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{D}_g^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) . \quad (2.90)$$

A solução geral da equação tipo de Schrödinger dependente do tempo é então,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad (2.91)$$

com as constantes c_n , determinadas pela condição inicial $\Psi(\mathbf{r}, 0)$. Se o potencial admitir estados contínuos a soma sobre os estados torna-se uma integral.

Esta é a equação de Schrödinger independente do tempo para a Mecânica Quântica que busca descrever sistemas cujo a massa depende da posição. Observe que para a métrica euclidiana $g_{ij} = \delta_j^i$, o operador \mathbf{D}_g^2 recai no laplaciano cartesiano e a equação (2.90), torna-se a equação de Schrödinger independente do tempo da Mecânica Quântica.

⁸Na verdade, é possível associar \mathbf{D}_g^2 com o operador Laplace-Beltrami.

Para a solução de problemas envolvendo métricas distintas da euclidiana devemos usar uma mudança de coordenada ao qual nesse espaço de nova coordenada o operador momento possui a mesma forma funcional em um espaço euclidiano, daí o problema pode ser resolvido usando a equação de Schrödinger como já é conhecido. De fato, podemos escolher uma mudança de coordenadas do tipo $\xi = \xi(x)$, ao qual as distâncias infinitesimais seja calculadas semelhantemente ao caso cartesiano. De fato, é possível encontrar tal transformação, basta-nos ter a seguinte consideração

$$ds = d\xi = \sqrt{g} dx \Rightarrow \xi(x) = \int \sqrt{g} dx \quad (2.92)$$

em que $g \equiv |g|$, é o determinante métrico. No entanto, para qualquer função F , diferenciável vale a regra de leibniz

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} \quad (2.93)$$

usando a (2.92), escrevemos

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right) F = \left(\sqrt{g} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) F \quad (2.94)$$

de modo que, na coordenada ξ , a equação (2.90), no seu formato unidimensional torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(\xi)}{\partial \xi^2} + v(\xi) \psi(\xi) = E \psi(\xi) \quad (2.95)$$

em que [14] chama $v(\xi)$, de um potencial efetivo⁹. Portanto, na coordenada ξ o problema permanece sendo descrito pela equação de Schrödinger no espaço euclidiano. Ou seja, com a mudança de coordenada o problema torna-se do ponto de vista matemático semelhante aos problemas que já se tem tratado na mecânica quântica convencional. No entanto, devemos ainda sermos cuidadosos com a transformação (2.92), pois matematicamente exige uma constante para que fique unicamente definida. Não é difícil notar que essa constante é específica para cada problema que se queira solucionar, pois as condições de contorno do problema e a própria escolha da métrica serão fatores característicos que levarão a uma constante específica para o problema. Por exemplo, em [14] faz-se para $g(x) = 1/(1+x\gamma)^2$, a escolha de $\xi(0) = 0$. Nesse caso, temos a constante sendo igual a zero, de modo que é uma escolha razoável para tratar de um poço de potencial infinito com barreiras em $[0, L]$.

Como aplicação desse método, veremos em seções futuras a partícula sob potencial nulo e suas características.

⁹[15] mapeia vários desses potenciais em um potencial tipo oscilador harmônico.

2.3.2 Corrente de probabilidade

A interpretação probabilística da mecânica quântica é possibilitada pelo fato da probabilidade do sistema se encontrar em um de todos os estados possíveis ser igual a 1. Sem isso não seria possível descrever as grandezas importante dos sistemas quânticos. Porém a normalização dos estados não é suficiente, é necessário que além de ser normalizada, essa normalização precisa se preservar no tempo. Não faria sentido se tivéssemos que normalizar em cada intervalo de tempo os estados quânticos.

Desse modo, mostraremos aqui, que uma quantidade ao qual reconheceremos como densidade de probabilidade, se conserva tanto globalmente quanto localmente. O que queremos dizer com globalmente é que tomando todas as probabilidades de estados possíveis ao qual o sistema pode se encontrar é garantido que a soma dessas probabilidades seja 1. Por outro lado, localmente significa tomar uma porção de estados possíveis ao qual o sistema pode estar e somar as probabilidades do sistema colapsar em um deles e garantir que seja sempre 1, caso não, então o que ocorreu é que essa probabilidade "flui" como uma corrente de probabilidade semelhantemente ao que ocorre com um fluido em escoamento. Matematicamente, queremos mostrar que

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) \sqrt{g} dx dy dz = 0 \quad (2.96)$$

em que $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Ou seja, dado um volume V no espaço riemanniano, a quantidade $\rho(\mathbf{r}, t)$, dentro desse volume mantem-se constante. Ora, pela equação 2.86 temos que,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \mathbf{D}_g^2 \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \mathbf{D}_g^2 \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \quad (2.98)$$

de modo que,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \mathbf{D}_g^2 \Psi - \Psi \mathbf{D}_g^2 \Psi^*) \quad (2.99)$$

como \mathbf{D}_g , é um operador linear podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m} (\mathbf{D}_g \Psi^* \mathbf{D}_g \Psi + \Psi^* \mathbf{D}_g^2 \Psi - \mathbf{D}_g \Psi \mathbf{D}_g \Psi^* - \Psi \mathbf{D}_g^2 \Psi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \mathbf{D}_g (\Psi^* \mathbf{D}_g \Psi - \Psi \mathbf{D}_g \Psi^*) \\ &= \mathbf{D}_g \cdot \left[\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \mathbf{D}_g \Psi - \Psi \mathbf{D}_g \Psi^*) \right]. \end{aligned}$$

Definindo

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \mathbf{D}_g \Psi^* - \Psi^* \mathbf{D}_g \Psi) \quad (2.100)$$

como a corrente de probabilidade ao qual possui unidade de s^{-1} . Agora podemos avaliar a integral (2.96) diretamente,

$$\begin{aligned} \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \sqrt{g} dx dy dz &= \int_V \mathbf{D}_g \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \sqrt{g} dx dy dz & (2.101) \\ &= \hat{x} \int \sqrt{g_{yy} g_{zz}} \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dz + \\ &+ \hat{y} \int \sqrt{g_{xx} g_{zz}} \frac{\partial J_y}{\partial y} dx dy dz + \\ &+ \hat{z} \int \sqrt{g_{xx} g_{zz}} \frac{\partial J_z}{\partial z} dx dy dz \end{aligned}$$

Faz-se, então uma integração por partes nas três componentes onde transfere-se a derivada parcial de J para a função associada a cada componente em troca de um termo de contorno. Pondo a fronteira no infinito os termos de contorno vão a zero, pois $\Psi(\mathbf{r}, t)$ vai a zero conforme (\mathbf{r}) vai (\pm) infinito, ou de outra forma a função de onda não seria normalizada. As integrais restante são

$$\begin{aligned} \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \sqrt{g} dx dy dz &= -\hat{x} \int J \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{g_{yy} g_{zz}} dx dy dz - \\ &- \hat{y} \int J \frac{\partial}{\partial y} \sqrt{g_{xx} g_{zz}} dx dy dz - \\ &- \hat{z} \int J \frac{\partial}{\partial z} \sqrt{g_{yy} g_{xx}} dx dy dz. \end{aligned}$$

Para que essas integrais se anulem é necessário que seus integrando sejam nulos, isso só será possível se as condições já estabelecidas (2.67) (2.68) e (2.69) forem verdadeiras. Como são, então

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \sqrt{g} dx dy dz = 0. \quad (2.102)$$

Isso mostra que se a função de onda é normalizada em $t = 0$, estará normalizada para qualquer tempo no futuro. Com isso, podemos escrever a equação da continuidade de acordo com (2.101) como

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{D}_g \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (2.103)$$

Essa equação governa a taxa com que $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ “flui” através de uma dada região volumétrica. Ou seja, dado um volume a equação da continuidade diz a taxa com que a corrente de probabilidade flui através da superfície desse volume. Além disso, pudemos verificar aqui novamente as condições (2.67) (2.68) e (2.69) voltarem a ser consideradas, como se era de esperar, uma vez que a unitariedade do operador evolução temporal e, por conseguinte, a conservação da

probabilidade, depender em primeira instância do fato de o operador momento ser hermitiano (ver A.3).

2.4 Partícula sob potencial nulo

Discutiremos, a partir da teoria estabelecida, o problema da Partícula sob potencial nulo, $v(\xi) = 0$. No espaço euclidiano, temos que o potencial é nulo, de modo que, pela transformação de coordenada, o potencial será também nulo no espaço riemanniano. Assim, a equação (2.90), torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) = E \psi(\xi) , \quad (2.104)$$

cuja a solução é dada por

$$\psi(\xi) = A \exp(\pm ik\xi). \quad (2.105)$$

também escrita como

$$\psi(x) = F \sin(k\xi) + G \cos(k\xi) \quad (2.106)$$

As quais são ondas planas com número de onda dado por

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.107)$$

Como dito anteriormente a solução no espaço de variável $\{\xi\}$ apresenta a mesma forma que no espaço euclidiano. São ondas planas não normalizáveis que se deslocam com velocidade de fase constante (energia bem definida dada) por

$$v_f = \frac{\hbar |k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}.$$

Ora, uma partícula livre não pode existir em um estado estacionário, pois não há partícula livre com energia bem definida. Portanto, as soluções separáveis não representam estados fisicamente realizáveis. Porém, as sobreposições dessas ondas planas (ondas com diferentes valores de k) levam a interferência e conseqüentemente localização e normalização. De fato, usando a completeza das soluções 2.105 e tomando a variação discreta de Δk , para o contínuo dk ¹⁰, verificamos que as funções $\langle k|\phi\rangle$ obedecem a relação de completeza. De modo que podemos escrever $\Psi(\xi, t)$, por meio de uma série de Fourier dada por

$$\langle \xi|\Psi(\xi, t)\rangle = \Psi(\xi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i\left(k\xi - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk. \quad (2.108)$$

¹⁰Esse processo é denominado de “normalização de caixa”o qual faz-se a largura da caixa L , ir para o infinito.[30]

Ou seja, os coeficientes da expansão de $\Psi(\xi, t)$, são definidos pela função $\phi(k)$, de modo que tomando $\phi(k)$ de modo apropriado $\Psi(\xi, t)$ pode ser normalizada. Essas sobreposições de ondas que carregam uma superposição de ondas com número de ondas em um dado intervalo k , e portanto, de energias e velocidades recebem o nome de pacotes de ondas. O estampido de um trovão é um exemplo comum de sobreposição de ondas que conduzem a um efeito localizado no tempo[31]. A solução 2.108 exige a determinação de $\phi(k)$, para isso usamos a transformada inversa de Fourier para a função de onda em $\Psi(\xi, t = 0)$,

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\xi, 0) e^{-ik\xi} dx \quad (2.109)$$

Tudo é idêntico ao resolver os problemas comuns de mecânica quântica. No entanto, uma vez que a métrica deixa de ser euclidiana temos que lidar com a transformação 2.92, e explorar suas novas propriedades.

2.5 Expansão da métrica: primeira ordem

Consideremos, então a expansão em série de Taylor de $g^{-1/2}(x)$, até primeira ordem, de modo que a métrica torna-se

$$ds^2 = g_{xx} dx^2 \quad \therefore \quad g_{xx} = \frac{1}{(1 + \gamma x)^2}. \quad (2.110)$$

então, temos que a transformada de coordenada torna-se

$$\xi(x) = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x). \quad (2.111)$$

Logo a solução 2.105, toma a forma

$$\psi(x) = A \exp \left[\pm \frac{ik}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right], \quad (2.112)$$

em que de acordo com 2.107

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.113)$$

A solução 2.112 assim como na Mecânica Quântica tradicional não é normalizável, no entanto, não são ondas planas. Além disso, vemos então, que a energia da partícula não depende de γ . A modificação da métrica não altera o fato de a partícula ser livre o que também não modifica a dependência quadrática da energia em k .

2.6 Expansão da métrica: segunda ordem

Consideraremos, então a expansão em série de Taylor de $g^{-1/2}(x)$, até segunda ordem. Dito isso, temos de acordo com a equação (2.7) que

$$ds^2 = g(x)dx^2 ; g(x) = (1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^{-2}. \quad (2.114)$$

de modo que de acordo com as equação (2.92) escrevemos a transformação de coordenadas como

$$\xi(x) = \int (1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^{-1} dx. \quad (2.115)$$

Para a métrica (2.114), temos que garantir que a integral acima que define a transformação de coordenadas convirja para todos o domínio de $\xi(x)$, ou seja, a condição $|\gamma| < 2|\beta|$ deve ser assegurada. Para um espaço em que isso não ocorre existirá pontos (dois pontos) de divergência, ao qual acarreta problemas na convergência de (2.115). Desse modo podemos definir a forma funcional de $\xi(x)$, calculando a integral (2.115), cujo o valor é dado por

$$\xi(x) = \frac{2}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \tan^{-1} \left[\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right], \quad (2.116)$$

para quaisquer valores reais de γ , e β , que satisfaça $|\gamma| < 2|\beta|$. Podemos visualizar essas curvas para alguns valores de γ e β , conforme a figura 2, As quais ficam limitadas no intervalo definidos

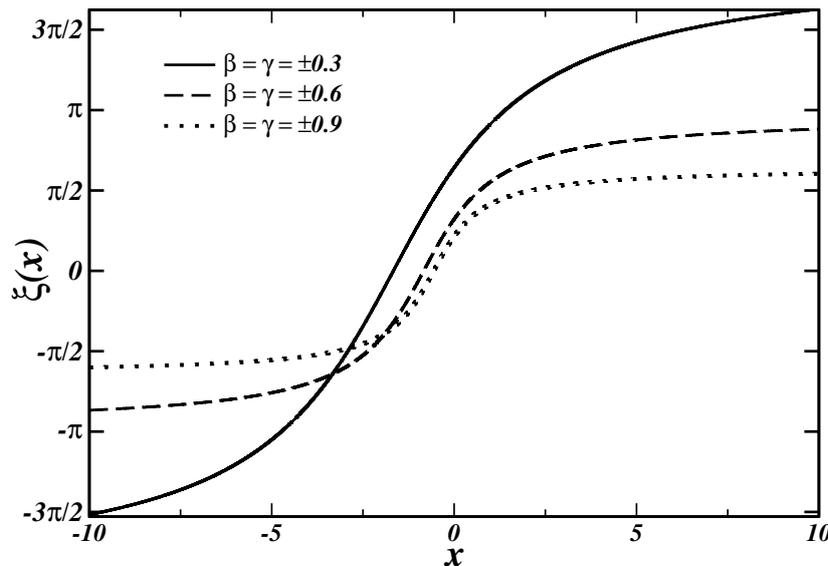


Figura 2: Comportamento de $\xi(x)$, para valores simétricos de $\gamma = \beta = \pm 0.3$, $\gamma = \beta = \pm 0.6$ e $\gamma = \beta = \pm 0.9$.

no limite em que $x \rightarrow -\infty$ e $x \rightarrow \infty$. Para analisarmos a partícula no espaço da variável ξ , devemos tomar o limite na fronteira do intervalo $[-\infty, \infty]$, ou seja,

$$\begin{aligned}\xi(x \rightarrow \infty) &= \lim_{x \rightarrow \infty} \int \frac{dx}{1 + \gamma x + \beta^2 x^2} \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left\{ \frac{2}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \tan^{-1} \left[\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right] \right\} \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\end{aligned}\quad (2.117)$$

como também, o caso $x \rightarrow -\infty$,

$$\begin{aligned}\xi(x \rightarrow -\infty) &= \lim_{x \rightarrow -\infty} \int \frac{dx}{1 + \gamma x + \beta^2 x^2} \\ &= \lim_{x \rightarrow -\infty} \left\{ \frac{2}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \tan^{-1} \left[\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right] \right\} \\ &= -\frac{\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}},\end{aligned}\quad (2.118)$$

Por outro lado, a função $\psi(\xi)$, equação (2.106), deve ir a zero, para $x \rightarrow \pm\infty$, de modo que

$$F \cos(k\xi) + G \sin(k\xi) = 0 \quad (2.119)$$

A condição de contorno é $x \rightarrow \pm\infty$. Usando os resultados de (2.117) e (2.118) obtemos

$$\psi\left(-\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = \psi\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \quad (2.120)$$

as duas condições de contorno levam ,

$$\begin{cases} F \cos\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) + G \sin\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \\ F \cos\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) - G \sin\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \end{cases} \quad (2.121)$$

Somando e subtraindo essas relações, chegamos em

$$\begin{cases} F \cos\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \\ G \sin\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \end{cases} \quad (2.122)$$

Como as constantes F e G não podem ser simultaneamente nulas, já que isto levaria $\psi(x) = 0$ para todo valor de x , as soluções possíveis para a equação (2.122) são:

$$G = 0, \quad \cos\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \quad (2.123)$$

$$F = 0, \quad \sin\left(\frac{k\pi}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right) = 0 \quad (2.124)$$

para o primeiro caso, as soluções serão dadas em cosseno, com a condição de que k deve satisfazer os valores possíveis que anulem a função cosseno, ou seja,

$$k_n = \frac{n\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}{2}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.125)$$

Portanto, as soluções associadas a cada valor de k_n :

$$\psi_n(x) = G \cos\left\{n \tan^{-1}\left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right)\right\}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.126)$$

para o segundo caso, as soluções serão dadas em senos, com a condição de que k deve satisfazer os valores possíveis que anulem a função seno, ou seja,

$$k_n = \frac{n\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}{2} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.127)$$

Portanto, as soluções associadas a cada valor de k_n para esse segundo caso são:

$$\psi_n(x) = F \sin\left\{n \tan^{-1}\left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}}\right)\right\}. \quad (2.128)$$

Para encontrar a constante de normalização F , fazemos $\rho = \sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}$, escolhendo o espaço da variável ξ ¹¹ e integramos no intervalo $[-\pi/\rho, \pi/\rho]$. Se $\psi_n(x)$ é normalizável, então:

$$\begin{aligned} G^2 \int_{-\frac{\pi}{\rho}}^{\frac{\pi}{\rho}} \sin^2(k_n \xi) d\xi &= 1 \\ G^2 (\pi/\rho) &= 1 \\ G &= (\rho/\pi^2)^{1/4} = \{(4\beta^2 - \gamma^2)/\pi^2\}^{1/4} \end{aligned}$$

¹¹No espaço da variável $\{x\}$, deveríamos incluir o determinante métrico no cálculo.

O processo pode ser repetido para a constante F , resultando em $F = G$. Portanto, as funções de onda normalizadas do problema pode ser dadas por

$$\psi_n(x) = [(4\beta^2 - \gamma^2) / \pi^2]^{1/4} \begin{cases} \sin \left[n \tan^{-1} \left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right) \right], & n = 2, 4, 6, \dots \\ \cos \left[n \tan^{-1} \left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right) \right], & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (2.129)$$

Podemos visualizar as quatro primeiras funções de onda conforme apresentada na figura 3, enquanto que suas densidades de probabilidade são mostradas no Apêndice (A.4), na figura 9. As funções descritas pela Equação (2.129) satisfazem $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ para n par e são, portanto, funções ímpares de x , enquanto as descritas por n ímpar satisfazem $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$ e são, portanto, funções pares de x . Pode ser mostrado que a divisão do conjunto das autofunções $\psi_n(x)$ em autofunções de paridade definida par para um primeiro grupo e ímpar para um segundo, é uma consequência direta do fato de o potencial ser simétrico em torno de $x = 0$, ou seja, $V(-x) = V(x)$. Para nosso caso temos que $V(x) = 0$, ou seja, par, de modo que a propriedade é válida.

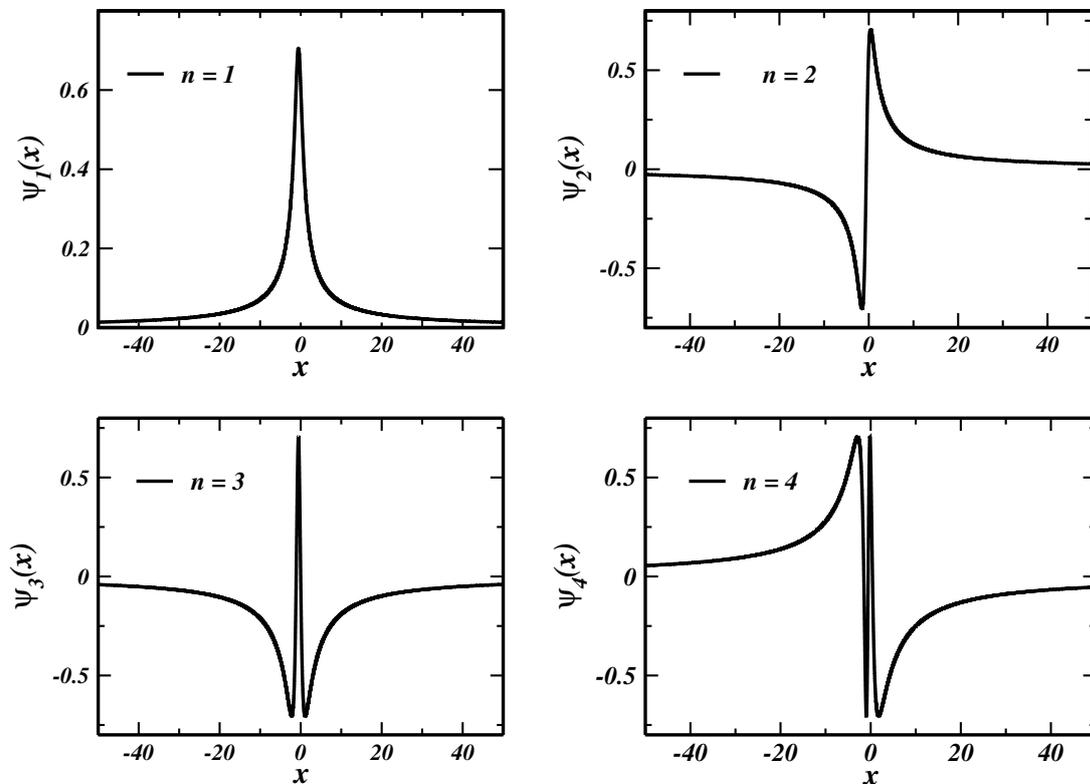


Figura 3: Função de onda $\psi(x)$ para $n = 1, n = 2, n = 3$ e $n = 4$, com $\beta = \gamma = 0.3$

Observando os dois tipos de soluções, vemos que os valores de $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ são

quantizados, já que eles são rotulados pelo número quântico n , $k_n = n\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}/2$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Outro ponto são os comprimentos de onda de de Broglie correspondentes aos quais têm os valores $\lambda_n = 2\pi/k_n = 4\pi/n\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$, ou seja, as funções de onda possíveis são apenas aquelas para as quais temos um número inteiro ou semi-inteiro de comprimentos de onda de de Broglie dentro do intervalo $[-\infty, \infty]$.

O ponto importante é justamente o intervalo ao qual a partícula está contida. Em problemas como o poço de potencial infinito a quantização da energia emerge claramente do fato da partícula estar restrita a um determinado espaço. No entanto, não é o caso aqui. A quantização da energia emerge dos efeitos métricos do problema. Embora a partícula esteja livre para se mover sobre todo o espaço esse mesmo espaço não é mais infinito como podemos ver nas equações (2.117) e (2.118). Diferente do caso da partícula livre no espaço euclidiano ao qual possui espectro de energia contínua, as energias de acordo com (2.125) são quantizadas da seguinte forma:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 (4\beta^2 - \gamma^2)}{8m}. \quad (2.130)$$

A energia da partícula definida na equação (2.130) pode assumir valores positivos ou negativos dependendo dos valores de γ e β , embora devêssemos esperar valores apenas positivos pois $V(x) = 0$. Mas, como vimos devemos garantir $|\gamma| < 2|\beta|$, o que permite energias positivas apenas. Vemos também que o espectro de energia consiste em um número infinito de níveis discretos de energia espaçados quadraticamente uns dos outros. Observa-se também que o estado de menor energia não é zero, mas $E_1 = \hbar^2(4\beta^2 - \gamma^2)/8m$. Como podemos ver, a condição $|\gamma| < 2|\beta|$ que leva a uma métrica contínua também assegura energias apenas positivas.

Na Figura 4, temos a expressão de $E(\gamma)$ e $E(\beta)$ ao qual apresenta valores positivos (linha contínua) ou negativos (linha tracejada). Mantendo-se β constante (Figura 4b)) vemos que por meio do $|\gamma|$, podemos reduzir a energia dos estados, inclusive a do estado fundamental pode ficar bastante próximo de zero o tanto quanto desejarmos, desde que a condição $|\gamma| < 2|\beta|$ não seja violada. Por outro lado, para β mantido constante vemos que a energia possui seu valor máximo para $\gamma = 0$. Mantendo γ fixo (Figura 4a)) temos que os valores de β pertencente ao intervalo $[-\gamma/2, \gamma/2]$ são proibidos, pois levam a valores negativos para a energia. Diferente do caso de β constante os valores do $|\beta|$ nunca diminuem o valor da energia do sistema. Fazendo $\gamma = 0$ a energia definido na equação (2.130) pode ser comparada a energia de um poço de potencial infinito no espaço cartesiano ao qual β equivaleria ao inverso do comprimento do poço de potencial,

$$\beta \equiv \frac{\pi}{L}. \quad (2.131)$$

O parâmetro β definiria nessa comparação a largura do poço de potencial infinito definido pela métrica (2.7) ao qual a partícula estaria confinada. De fato, podemos estender ainda mais a

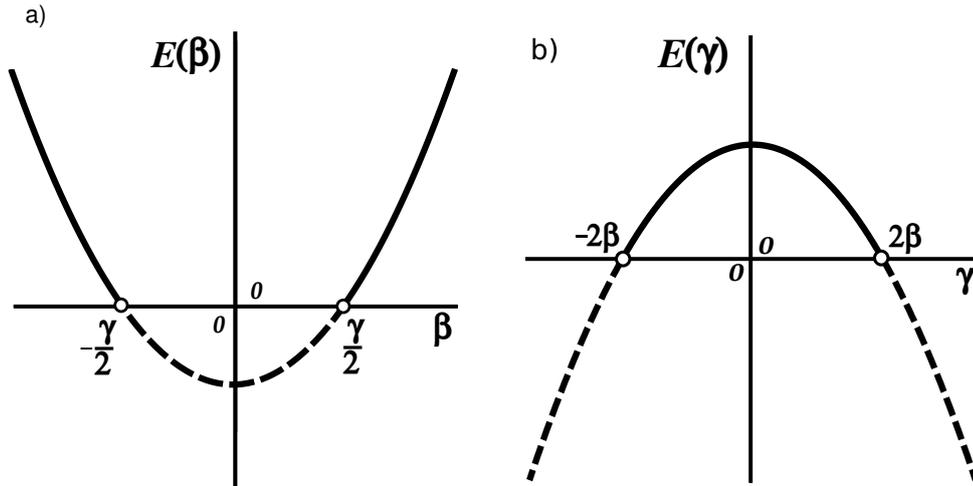


Figura 4: Energia E_n , em função dos parâmetros γ e β . Linha tracejada são valores proibidos de energia, enquanto que a contínua são valores permitidos.

comparação tomando o limite de $\gamma \rightarrow 0$ em (2.129) obtendo

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}} \begin{cases} \sin [n \tan^{-1}(\beta x)], & n = 2, 4, 6, \dots \\ \cos [n \tan^{-1}(\beta x)], & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (2.132)$$

De igual modo podemos tomar o limite de $\gamma \rightarrow 0$ em 2.115, de modo que a relação de transformação de coordenada se torna

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \xi(x) = \frac{1}{\beta} \tan^{-1}(\beta x). \quad (2.133)$$

Com essa transformação de coordenada e com a relação (2.131), as funções de onda podem ser escritas como

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{2}{L}} \begin{cases} \sin\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ \cos\left(\frac{n\pi\xi}{L}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (2.134)$$

que são as funções de ondas de um poço de potencial infinito centrado na origem $\xi = 0$, com paredes de potencial em $[-L/2, L/2]$. Ou seja, considerando $\gamma = 0$ e $\beta \equiv \pi/L$ na métrica dado pela equação (2.114) que define um espaço riemanniano, uma partícula sob ação de um potencial nulo $V(x) = 0$, se comporta como uma partícula sujeita a um potencial do tipo poço de potencial infinito no espaço cartesiano.

Uma questão geométrica a se considerar no espaço riemanniano é a região onde a métrica possui seus valores mais elevados, ou seja, pontos infinitesimalmente próximos no espaço cartesiano são extremamente distante no espaço riemanniano, conforme (2.92). Nessa região de pontos, em nosso caso $x = 0$ a partícula apresenta um comportamento semelhante ao

aprisionamento por paredes de potencial infinito conforme a Figura (5).

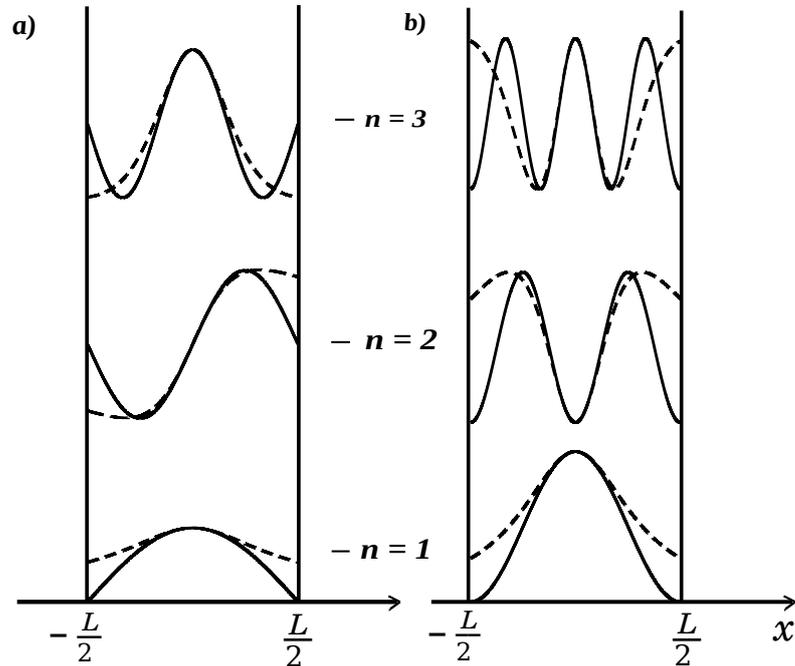


Figura 5: Os três primeiros estados e suas respectivas densidades de probabilidade da função de onda de uma partícula sob potencial nulo em um espaço riemanniano (linha tracejada) em comparação a uma partícula confinada a paredes de potenciais infinito em $x = -L/2$ e $x = L/2$ em um espaço cartesiano (linha contínua). Para pontos próximos a $x = 0$, os dois problemas mostram-se idênticos.

A medida que a partícula se afasta de $x = 0$ seu comportamento perde a semelhança a uma partícula aprisionada. Possivelmente podemos entender esse comportamento observando que nessa região a posição da partícula $\langle x \rangle$ dificilmente sofre variações consideráveis, uma vez que as distâncias entre pontos, mesmo infinitesimais são extremamente grande. Logo, é de se esperar que partículas nessa região permaneçam próximas a essa região como se estivessem confinadas.

É possível ainda, fazer uma conexão desse problema em específico com o EUP (*Extended Uncertainty Principle*) derivado justamente de um operador translação em um espaço com a métrica igual a que estamos lidando nessa secção [15]. De acordo com 2.117 e 2.118, temos o espaço aqui em questão é limitado, ou seja, há um limite máximo para Δx , de modo que, de acordo com o princípio de incerteza devemos ter um Δp mínimo. Ou seja, o Δp surge do fato de o universo nesse problema ser limitado.

O caso da partícula livre para as expansões de $g(x)^{-1/2}$ em primeira e segunda ordem são exemplos de como um sistema desse tipo se comporta no espaço sob a ação do operador translação dependente da posição (2.25). A solução da equação tipo de Schrödinger se torna mais fácil de ser encontrada se usarmos uma transformada de coordenada adequada.

No capítulo seguinte analisaremos usando o formalismo de Heisenberg ao qual possibilita o cálculo de outras quantidades de interesses.

3 FORMALISMO DE HEISENBERG

Entre outras coisas, o objetivo da mecânica clássica é encontrar as equações de movimento para um dado sistema e avaliar certas grandezas físicas, tais como posição, aceleração e momento. Nessa perspectiva, as próprias grandezas físicas evoluem no tempo. No entanto, essa não foi a ideia por trás da maneira como definimos o operador translação no capítulo anterior. O objetivo foi encontrar um operador que modifique os kets de estado preservando sua norma e que o próprio operador permaneça constante no tempo. Foi desse modo que definimos o operador translação e evolução temporal. No entanto, desenvolveremos aqui para o operador de translação modificado o formalismo de Heisenberg ao qual os operadores evoluem no tempo. Uma vantagem dessa abordagem é que leva-nos a equações semelhantes ao formalismo da mecânica clássica [5].

Sobre uma transformação unitária que modifica os kets de estado, o produto escalar definido pela equação (2.13) permanece inalterado, de modo que,

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (3.1)$$

Em que \mathbf{U} é um operador unitário. Segue portanto, que podemos escrever

$$\langle \phi | \mathbf{O} | \psi \rangle = \left(\langle \phi | \mathbf{U}^\dagger \right) \cdot \mathbf{O} \cdot (\mathbf{U} | \psi \rangle) = \langle \phi | \cdot \left(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{U} \right) \cdot | \psi \rangle, \quad (3.2)$$

De acordo com Sakurai[10], essa identidade matemática sugere duas abordagens para transformações unitárias:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\longrightarrow \mathbf{U} |\psi\rangle, && \text{com operadores inalterados} \\ \mathbf{O} &\longrightarrow \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{U}, && \text{com estados inalterados.} \end{aligned} \quad (3.3)$$

O capítulo anterior foi todo construído com a primeira abordagem, onde os kets (funções de onda no espaço das posições) mudam ao longo do tempo, desenvolvida por Schrödinger, chamada de mecânica quântica ondulatória. Por outro lado, Heisenberg calculou a evolução de representações matriciais de vários operadores (dai o nome mecânica quântica matricial) que é desenvolvida por meio da segunda abordagem.

3.1 Equação de movimento de Heisenberg

Assim como há uma equação que governa a evolução no tempo na formulação de Schrödinger, há também uma equação de movimento para os operadores na formulação de Heisenberg a qual derivaremos aqui. Motivado pela equação (3.3), escreveremos o operador $\mathbf{O}^{(H)}$, na formulação de Heisenberg como

$$\mathbf{O}^{(H)}(t) \equiv \mathbf{U}^\dagger(t) \mathbf{O}^{(S)} \mathbf{U}(t), \quad (3.4)$$

onde consideramos o operador de evolução temporal dado pela equação (2.80). Em $t = 0$, temos

$$\mathbf{O}^{(H)}(0) = \mathbf{O}^{(S)}(0) \quad (3.5a)$$

$$|\psi(0)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S, \quad (3.5b)$$

Ou seja, em $t = 0$, as duas formulações coincidem, mas a medida que o tempo avança os operadores variam em Heisenberg, enquanto que os kets de estados é quem variam em Schrödinger. De acordo com a equação (3.4), temos que,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{O}^{(H)} &= \frac{\partial \mathbf{U}^\dagger}{\partial t} \mathbf{O}^{(S)} \mathbf{U} + \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}^{(S)} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \\ &= \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}^{(S)} \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_g \mathbf{U} \frac{1}{i\hbar} - \frac{1}{i\hbar} \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_g \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}^{(S)} \mathbf{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbf{O}^{(H)}, \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_g \mathbf{U} \right], \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde consideramos que $\mathbf{O}^{(S)}$, não depende explicitamente do tempo, o que não necessita definir $\mathbf{H}^{(H)}$ de acordo com a equação (3.4), pois

$$\mathbf{H}_g = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_g \mathbf{U}. \quad (3.7)$$

Portanto, finalmente podemos escrever

$$\frac{d}{dt} \mathbf{O}^{(H)} = \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbf{O}^{(H)}, \mathbf{H}_g \right]. \quad (3.8)$$

Essa é a equação de Heisenberg para um espaço com métrica definida pela equação (2.73). Observe que os efeitos da métrica nessa formulação de Heisenberg é mais sutil. Toda informação a respeito da métrica fica contida na construção do Hamiltoniano levando em consideração as formas que os operadores posição e momento são definidos. Nas próximas seções será explorado essa equação tipo de Heisenberg no cálculo da incerteza da evolução temporal da partícula livre unidimensional.

3.2 Análogo Clássico

No objetivo de entender melhor a equação (3.8) desenvolveremos rapidamente aqui as análogas equações clássicas que remetem ao movimento clássico de uma partícula em um espaço de métrica $g(x)$, igualmente como faz [24].

Em mecânica Analítica a lagrangiana de um sistema é definido como

$$L \equiv T - V = \frac{1}{2}mv^2 - V(x) \quad (3.9)$$

em que v é a velocidade da partícula. Uma vez que se define uma nova métrica, a forma como a partícula se desloca também muda. De fato, para uma métrica do tipo

$$ds^2 = \frac{dx^2}{(1 + \gamma x)^2} \quad (3.10)$$

a velocidade da partícula será

$$v \equiv \dot{s} = \frac{\dot{x}}{1 + \gamma x} \quad (3.11)$$

de modo que a Lagrangiana vem a ser

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} \frac{m\dot{x}^2}{(1 + \gamma x)^2} - V(x). \quad (3.12)$$

Conforme é demonstrado em [32] as equações de Lagrange mantêm sua forma funcional em um espaço deformado, ou seja,

$$\frac{dL}{dx} - \frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{x}} \right) = 0. \quad (3.13)$$

Uma vez que se pode derivar as equações de Hamilton via formalismo de Lagrange as equações de Hamilton também se mantêm invariante. Por uma transformada de Legendre obtemos o Hamiltoniano

$$H(x, p) = p\dot{x} - L(x, \dot{x}) = (1 + \gamma x)^2 \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (3.14)$$

sua diferencial, por conseguinte é

$$\begin{aligned} dH &= p d\dot{x} + \dot{x} dp - \frac{\partial L}{\partial x} dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} d\dot{x} \\ dH &= \dot{x} dp - \dot{p} dx. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Onde usamos a equação de Legendre (3.13). De outra maneira também obtemos que

$$dH = \frac{\partial H}{\partial x} dx + \frac{\partial H}{\partial p} dp \quad (3.16)$$

Comparando (3.15) com (3.16) obtemos as equações de Hamilton

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (3.17)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (3.18)$$

Ao desenvolver essas equações é possível comparar as soluções com (3.8) [24]. A equação de movimento para uma partícula na presença de um potencial nulo ou constante é

$$\ddot{x} - \dot{x}^2 \left[\frac{\gamma}{1 + \gamma x} \right] = 0. \quad (3.19)$$

Cuja a solução é

$$x(t) = \frac{1 + \gamma x_0}{\gamma} \exp\left(\frac{\gamma v_0}{1 + \gamma x_0}\right) - \frac{1}{\gamma} \quad (3.20)$$

com $x_0 = x(0)$ e $v_0 = \dot{x}(0)$. Outro ponto é que o momento da partícula p é definido como

$$p_\gamma \equiv \frac{dL}{d\dot{x}} = m \left[\frac{\dot{x}}{(1 + \gamma x)^2} \right]. \quad (3.21)$$

É possível também desenvolver o formalismo com a seguinte mudança de coordenada

$$\xi = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x). \quad (3.22)$$

De fato, a métrica com essa transformação fica

$$\frac{dx^2}{(1 + \gamma x)^2} = d\xi^2 = ds^2 \quad (3.23)$$

Então, na coordenada ξ a Lagrangiana é escrita como

$$L(\xi, \dot{\xi}) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 - V(\xi). \quad (3.24)$$

Portanto, a equações de Lagrange é

$$\frac{dL}{d\xi} - \frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{\xi}} \right) = 0, \quad (3.25)$$

para esse caso o momento da partícula é definido como

$$p_\gamma \equiv \frac{dL}{d\dot{\xi}} = m \dot{\xi}. \quad (3.26)$$

Trabalhando com as equações (3.21) e (3.22) podemos escrever p_γ como

$$p_\gamma = m \frac{d\xi}{dt} = m \frac{d\xi}{dx} \frac{dx}{dt} = m \left[\frac{\dot{x}}{1 + \gamma x} \right] = (1 + \gamma x)p. \quad (3.27)$$

Com a transformada de coordenadas (3.22) as equações retornam a sua forma comum. Assim como no caso da mecânica ondulatória a mudança de coordenadas será útil na solução de problemas.

3.3 Incerteza da partícula livre unidimensional no tempo

Para um partícula livre de massa m , em um espaço de métrica $ds^2 = g(x)dx^2$, com $g^{-1/2}(x) = 1 + \gamma x$, temos o seguinte Hamiltoniano¹

$$H_\gamma = \frac{p_\gamma^2}{2m} = (1 + \gamma x)^2 \frac{p^2}{2m}. \quad (3.28)$$

A equação de Heisenberg possui seu análogo clássico com as equações de Hamilton quando se usa os parênteses de Poisson. Podemos escrever a equação de Heisenberg para operadores canonicamente conjugados. De fato, nos operadores ξ , p_γ as equações clássicas de Hamilton mantêm sua forma canônica, pois as transformações de coordenadas

$$\begin{cases} \xi = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \\ p_\gamma = (1 + \gamma x)p \end{cases} \quad (3.29)$$

são canônicas, visto que

$$\{\xi, p_\gamma\} \equiv \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial p_\gamma} p_\gamma - \frac{\partial}{\partial p_\gamma} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} p_\gamma = 1. \quad (3.30)$$

Portanto, podemos trabalhar nos operadores ξ e p_γ e ao final fazermos a mudança de coordenada para encontrar as quantidades de interesse. Para o operador p_γ , temos que a equação de Heisenberg torna-se

$$\frac{dp_\gamma}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_\gamma, H_\gamma], \quad (3.31)$$

Como p_γ comuta com H_γ temos que

$$\frac{dp_\gamma}{dt} = 0 \quad \therefore \quad p_\gamma(t) = p_\gamma(0). \quad (3.32)$$

Por outro lado, temos que

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\xi, H_\gamma]. \quad (3.33)$$

Se invocarmos a relação (A.16), rapidamente chegamos a

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\xi, H_\gamma] = \frac{p_\gamma}{m}. \quad (3.34)$$

¹nessa seção está claro que o problema é unidimensional e que, portanto, não há necessidade de especificar os operadores com letras em negrito.

cujo a solução é

$$\xi(t) = \xi(0) + \frac{p\gamma}{m}t \quad (3.35)$$

Essa equação fornece a evolução temporal do operador posição ξ , ou seja, no espaço cartesiano. Uma vez que os operadores ξ e x , estão conectados pela métrica do espaço, é possível descrever o problema no espaço de variável ξ e fazer posteriormente a mudança de coordenada para a variável x .

3.3.1 Métrica Euclidiana

Para o caso euclidiano temos $g(x)^{-1/2} = 1$, de modo que $p_g = p$, ao passo que a solução da equação (3.35), torna-se

$$x(t) = x_0 + \left(\frac{p}{m}\right)t, \quad (3.36a)$$

$$p(t) = p_0. \quad (3.36b)$$

Dessas duas equações podemos analisar via formalismo de Heisenberg três aspectos de um pacote de onda de qualquer formato que poderia ser representado por grupo de partícula com velocidade de dispersão constante no domínio clássico [33]. O primeiro é que o valor esperado da posição do pacote de onda se desloca obedecendo as equações clássicas, pois

$$\langle x \rangle_t = \langle x_0 \rangle + \frac{\langle p_0 \rangle}{m}t. \quad (3.37)$$

o segundo ponto é saber a evolução do alargamento dos pacotes no tempo. Ora, quanto ao momento é óbvio que a dispersão permanece constante, pois

$$\langle p^2 \rangle_t = \langle p_0^2 \rangle, \quad (3.38)$$

de maneira que

$$(\Delta p)_t = \sqrt{\langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2} = (\Delta p)_0. \quad (3.39)$$

No espaço das posições $\{x\}$, o desvio-padrão Δp (o quão p , se dispersa em relação a p_0) não muda com o tempo, ou seja, ao tomarmos uma precisão do valor de p_0 , essa informação não ficará incerta a medida que o tempo passar. Quanto a posição

$$\langle x^2 \rangle_t = \left\langle \left(x_0 + \frac{p_0}{m}t \right)^2 \right\rangle \quad (3.40)$$

$$= \left\langle x_0^2 + \frac{p_0^2}{m^2}t^2 + \frac{t}{m}(x_0 p_0 + p_0 x_0) \right\rangle \quad (3.41)$$

$$= \langle x_0^2 \rangle + \frac{t^2}{m^2} \langle p_0^2 \rangle + \frac{t}{m} \langle (x_0 p_0 + p_0 x_0) \rangle. \quad (3.42)$$

Enquanto que,

$$\langle x \rangle_t^2 = \left(\langle x_0 \rangle + \frac{t}{m} \langle p_0 \rangle \right) \left(\langle x_0 \rangle + \frac{t}{m} \langle p_0 \rangle \right) \quad (3.43)$$

$$= \langle x_0 \rangle^2 + \frac{2t}{m} \langle x_0 \rangle \langle p_0 \rangle + \frac{t^2}{m^2} \langle p_0 \rangle^2, \quad (3.44)$$

segue, então,

$$(\Delta x)_t^2 = \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 \quad (3.45)$$

$$= \langle x_0^2 \rangle - \langle x_0 \rangle^2 + \frac{t^2}{m^2} \left(\langle p_0^2 \rangle - \langle p_0 \rangle^2 \right) \quad (3.46)$$

$$+ \frac{t}{m} (\langle x_0 p_0 + p_0 x_0 \rangle - 2 \langle x_0 \rangle \langle p_0 \rangle)$$

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p)_0^2 + \frac{t}{m} [\langle x_0 p_0 + p_0 x_0 \rangle - 2 \langle x_0 \rangle \langle p_0 \rangle]. \quad (3.47)$$

Essa expressão contempla três contribuições para o alargamento do pacote. O primeiro termo é a largura inicial ao qual pode ser tomada tão precisa quanto o princípio de Heisenberg permita, o segundo é a contribuição devido a incerteza do momento e um terceiro termo de origem puramente quântica, pois em geral $\langle x_0 p_0 + p_0 x_0 \rangle - 2 \langle x_0 \rangle \langle p_0 \rangle$, não é nulo, justamente devido a não comutatividade dos operadores momento e posição. Em particular, para tempos muito grandes o termo quadrático em t , é responsável por quase toda contribuição do alargamento. De modo que podemos escrever

$$(\Delta x)_t \simeq \frac{t}{m} (\Delta p)_0 \simeq t \Delta v_0, \quad (3.48)$$

que condiz com o resultado comumente encontrado para pacotes de onda gaussianos[5]. A terceira característica que podemos observar das equações 3.36 é o quanto a incerteza da partícula varia no tempo. Para esta ocasião, avaliamos primeiro o seguinte comutador

$$[x(t), x(0)] = \left[\frac{p}{m} t, x(0) \right] = \frac{-i\hbar t}{m}. \quad (3.49)$$

Então, pela relação de incerteza,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2, \quad (3.50)$$

em que $\sigma_Q^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$. Usando o valor do comutador calculado acima concluímos que

$$\sigma_{x_t}^2 \sigma_{x_0}^2 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}. \quad (3.51)$$

Entre outras coisas, essa relação implica que mesmo que a partícula seja bem localizada em $t = 0$, a posição torna-se mais e mais incerta (dispersa de sua posição inicial) com o tempo, resultado que também pode ser obtido por meio do estudo da evolução de um pacote de onda

na mecânica ondulatória. Mas, diferente desta última esse resultado independe do formato do pacote de onda. Outro ponto, é o fato de que uma incerteza infinita é permitida, ou seja, para $t \rightarrow \infty$, a partícula terá incerteza infinita em sua posição.

3.3.2 Expansão da métrica: primeira ordem

Acrescentaremos o termo linear a $g(x)^{-1/2}$, de modo que lidaremos agora com uma métrica do tipo

$$ds^2 = g(x)dx^2 = \frac{dx^2}{(1 + \gamma x)^2}. \quad (3.52)$$

Para esse caso a transformada de coordenada da variável ξ para a variável x , na equação (3.35), leva-nos

$$x(t) = x(\xi(t)) = \frac{1}{\gamma} \left[\exp \left(\gamma \xi_0 + \frac{p_\gamma \gamma t}{m} \right) - 1 \right] \quad (3.53)$$

$$= \frac{1}{\gamma} \left[\exp \left(\frac{\gamma \ln(1 + \gamma x_0)}{\gamma} + \frac{p_\gamma \gamma t}{m} \right) - 1 \right] \quad (3.54)$$

$$= \frac{1 + \gamma x_0}{\gamma} \exp \left(\frac{\gamma p_\gamma t}{m} \right) - \frac{1}{\gamma}. \quad (3.55)$$

Se usarmos a equação (3.27), ou seja, tomando o análogo clássico do momento linear, a solução quântica condiz com seu análogo clássico derivado das equações de Euler-Lagrange (3.20).

Nesse caso, a evolução do operador x , não é mais linear no tempo, mas cresce exponencialmente, o que obviamente seu valor esperado também. Podemos buscar descrever a largura do pacote de onda nessa ocasião, no entanto a tarefa se encontra mais complicada. A partir de agora com o objetivo de reduzir o trabalho mecânico, usaremos uma aproximação para $x(t)$, considerando γ pequeno o suficiente para que a série de Taylor seja truncada a partir do termos de segunda ordem em γ . Ou seja,

$$x(t) \approx x_0 + (1 + \gamma x_0) \frac{p_\gamma t}{m}. \quad (3.56)$$

com essa aproximação, temos

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_t &\approx \left\langle \left(x + \frac{p_\gamma t}{m} + \frac{\gamma x p_\gamma t}{m} \right)^2 \right\rangle \\ &\approx \langle x^2 \rangle + \frac{t}{m} \langle x p_\gamma \rangle_0 + \frac{t \gamma}{m} \langle x^2 p_\gamma \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p_\gamma x \rangle_0 \\ &+ \frac{t^2}{m^2} \langle p_\gamma^2 \rangle_0 + \frac{\gamma t^2}{m^2} \langle p_\gamma x p_\gamma \rangle_0 + \frac{\gamma t}{m} \langle x p_\gamma x \rangle_0 + \frac{\gamma t^2}{m^2} \langle x p_\gamma^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.57)$$

enquanto que,

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle_t^2 &\approx \left(\langle x \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p_\gamma \rangle_0 + \frac{\gamma t}{m} \langle xp_\gamma \rangle_0 \right) \left(\langle x \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p_\gamma \rangle_0 + \frac{\gamma t}{m} \langle xp_\gamma \rangle_0 \right) \\
&\approx \langle x \rangle_0^2 + \frac{t}{m} \left(\langle x \rangle_0 \langle p_\gamma \rangle_0 + \gamma \langle xp_\gamma \rangle_0 \langle x \rangle_0 + \gamma \langle x \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle x \rangle_0 \langle p_\gamma \rangle_0 \right) \\
&+ \frac{t^2}{m^2} \left(\langle p_\gamma \rangle_0^2 + \gamma \langle p_\gamma \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0 + \gamma \langle p_\gamma \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0 \right).
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
(\Delta x)_t^2 &\approx (\Delta x)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p)_0^2 + \frac{t}{m} [\langle \{x, p_\gamma\} \rangle_0 - 2 \langle x \rangle_0 \langle p_\gamma \rangle_0] \\
&+ \frac{\gamma t}{m} [\langle \{x, xp_\gamma\} \rangle_0 - 2 \langle x \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0] \\
&+ \frac{\gamma t^2}{m^2} [\langle \{p_\gamma, xp_\gamma\} \rangle_0 - 2 \langle p_\gamma \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0].
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Recaímos no mesmo resultado para a métrica euclidiana quando fazemos $\gamma \rightarrow 0$. Por outro lado, os dois termos de contribuição em γ , são primeiramente efeitos quânticos, pois necessitam das relações de comutação entre os operadores para existirem (no caso clássico esses termos seriam zero). Além disso, para tempos grandes há agora dois termos que

$$(\Delta x)_t \approx \frac{|t|}{m} \sqrt{(\Delta p_\gamma)_0^2 + \gamma a}. \tag{3.60}$$

em que $a = [\langle \{p_\gamma, xp_\gamma\} \rangle_0 - 2 \langle p_\gamma \rangle_0 \langle xp_\gamma \rangle_0]$ é uma constante. Mesmo com o incremento do termo linear em γ na métrica a largura do pacote de onda $(\Delta x)_t$, continua alargar-se linearmente com t , mas há agora um termo que dependendo de γ , contribui ou retarda o alargamento de $(\Delta x)_t$. O fato de haver uma dispersão no momento significa que a velocidade da partícula é apenas conhecida dentro dos limites $\Delta v_{\gamma_0} = \Delta p_{\gamma_0}/m$. Uma forma de pensar sobre isso é fazer uma analogia clássica, onde se imagina um grupo de partículas clássicas começando em $t = 0$, a partir de $x = 0$, com velocidade de dispersão dado por Δv_γ . Para um tempo t depois a dispersão de suas posições será $\delta x_{cl} = \Delta v_\gamma t$. podemos dizer que para t grande existe uma interpretação quasi-clássica da largura Δx [5]. Como podemos ver no esboço da Figura (6) a região com t pequeno vemos que mais e mais Δx , difere de δx_{cl} , claramente devido a necessidade da partícula quântica obedece a incerteza de Heisemberg $\sigma_x^2 \sigma_{p_\gamma}^2 \geq \hbar^2 (1 + \gamma \langle x \rangle)^2 / 4$, pois desde que se fixa Δp_{γ_0} , você impõe um valor mínimo para Δx , o que não existe para o caso clássico. Além disso, de acordo com a equação (3.60), para fins de análise podemos considerarmos a constante a positiva e, então perceber que para $\gamma = 0$, temos a dispersão no espaço cartesiano. Para $\gamma > 0$ temos que o pacote de onda se dispersa mais rápido que no caso cartesiano, enquanto para $\gamma < 0$ o pacote se dispersa mais lentamente.

Como no caso euclidiano, consideraremos agora a evolução da incerteza dos pacotes

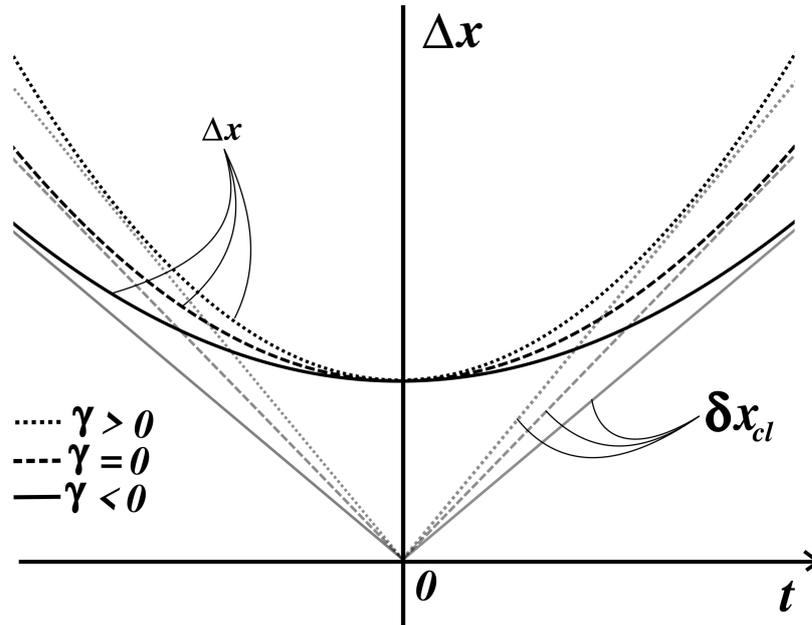


Figura 6: Variação no tempo da largura do pacote de onda em comparação com sua dispersão clássica. Para t , grande Δx se aproxima da dispersão clássica δx_{cl} . Para $\gamma > 0$ a dispersão é mais rápida que no caso euclidiano. Para $\gamma < 0$ o pacote de onda se dispersa mais lentamente que no caso euclidiano.

de onda. Para isso consideraremos o seguinte comutador.

$$\begin{aligned} [x(t), x_0] &= [x, x_0] + \frac{t}{m} [p_\gamma, x_0] + \frac{\gamma t}{m} [x_0 p_\gamma, x_0] \\ &= -\frac{i\hbar t}{m} (1 + \gamma x_0) - \frac{\gamma t}{m} \{x_0 [p_\gamma, x_0] + [x_0, x_0] p_\gamma\} \end{aligned} \quad (3.61)$$

$$= -\frac{i\hbar t}{m} (1 + \gamma x_0) - \frac{i\hbar \gamma t}{m} [x_0 (1 + \gamma x_0)] \quad (3.62)$$

$$= -\frac{i\hbar t}{m} [1 + 2\gamma x_0 + \gamma^2 x_0^2] \quad (3.63)$$

$$= -\frac{i\hbar t}{m} (1 + x_0 \gamma)^2. \quad (3.64)$$

Portanto, a evolução da incerteza da posição da partícula pode ser dada por

$$\begin{aligned} \sigma_{x_t}^2 \sigma_{x_0}^2 &\geq \frac{1}{4} \left| \left\langle -\frac{i\hbar t}{m} (1 + x_0 \gamma)^2 \right\rangle \right|^2 \\ \sigma_{x_t}^2 \sigma_{x_0}^2 &\geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} (1 + \gamma \langle x_0 \rangle)^4. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Os resultado de métrica euclidiana são recuperados quando fazemos $\gamma \rightarrow 0$ e de modo análogo, esse resultado permite uma incerteza infinita no limite em que $t \rightarrow \infty$. No entanto, esse resultado é diferente do caso euclidiano em dois pontos: o primeiro ponto é que a incerteza aqui depende da posição inicial da partícula. O segundo é que, dependendo da posição inicial da

partícula, a incerteza cresce rapidamente no tempo ou o contrário. Sobre o primeiro ponto vemos que a dependência da incerteza na posição é em decorrência da quebra de homogeneidade do espaço ao qual é caracterizado pela nova definição do operador translação (2.25). A incerteza na posição depende do ponto do espaço onde a partícula está em $t = 0$, pois cada ponto sendo distinto um do outro no espaço produzirá uma evolução temporal de modo distinto também. De modo a complementar o primeiro, o segundo ponto traz uma noção quantitativa de como a incerteza dependendo da posição inicial da partícula pode crescer rapidamente ou lentamente com o tempo. Para $\langle x_0 \rangle \rightarrow -1/\gamma$ a incerteza na posição da partícula é expressivamente pequena comparada a outras posições. Na figura (7) estão plotados a incerteza na posição para três valores de γ considerando $\langle x_0 \rangle = 1^2$

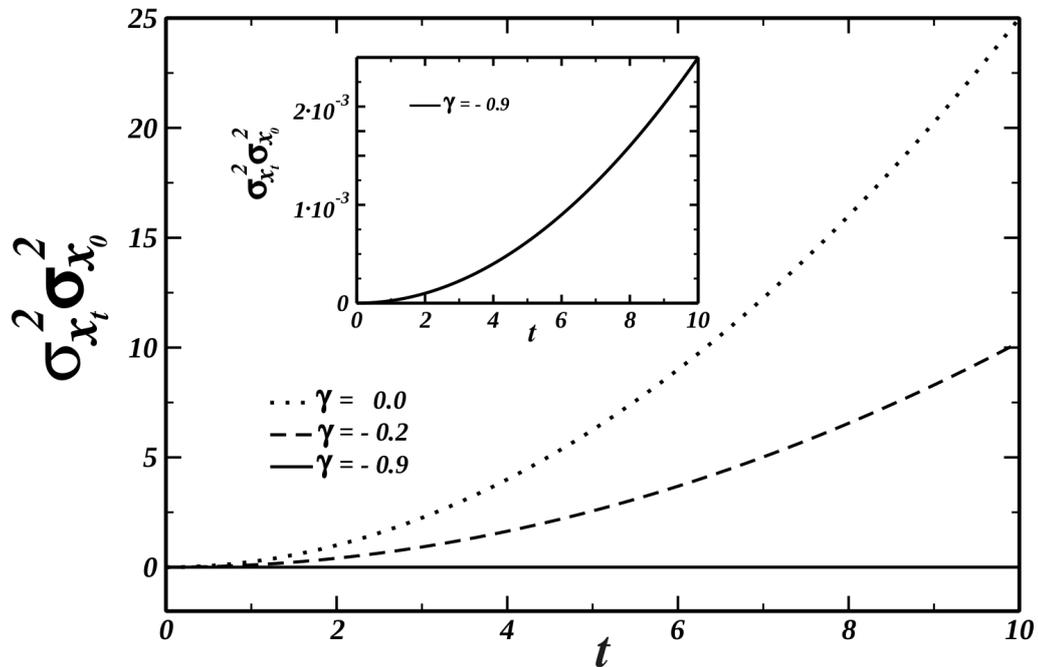


Figura 7: Evolução temporal da incerteza da partícula livre sob potencial nulo. Linha contínua $\gamma = -0.9$. Linha tracejada $\gamma = -0.2$. Linha pontilhada $\gamma = 0.0$

Perceba que para $\gamma = -0.9$, ou seja, $\langle x_0 \rangle$ muito próximo de $-1/\gamma$ a variação da incerteza no tempo é quase desprezível quando comparada a $\gamma = 0$. Podemos dizer que decorrido um intervalo de tempo Δt após uma medida na posição da partícula em $x = x_0$ a probabilidade de realizar uma nova medida e encontrar $\langle x \rangle = \langle x_0 \rangle$ é maior para regiões em que $\langle x \rangle \rightarrow -1/\gamma$. Essa interpretação corrobora com o princípio da incerteza $\sigma_x^2 \cdot \sigma_{p_\gamma}^2 \geq \hbar^2 (1 + \gamma \langle x \rangle)^2 / 4$, definido em 12. Pois, fixado uma incerteza no momento a incerteza na posição torna-se menor para regiões onde $\langle x \rangle \rightarrow -1/\gamma$.

É possível ainda baseado na geometria definido pela métrica 3.52 entendermos o

²As grandezas $\hbar = m_e = a_0$ estão em unidades atômicas, bem como suas unidades derivadas.

porque de a incerteza em pontos próximos a $-1/\gamma$ variar tão lentamente no tempo. Considere por exemplo o caso da métrica $g(x)$ para $\gamma = 0.5$ expressa na figura (8) Para regiões próximas de

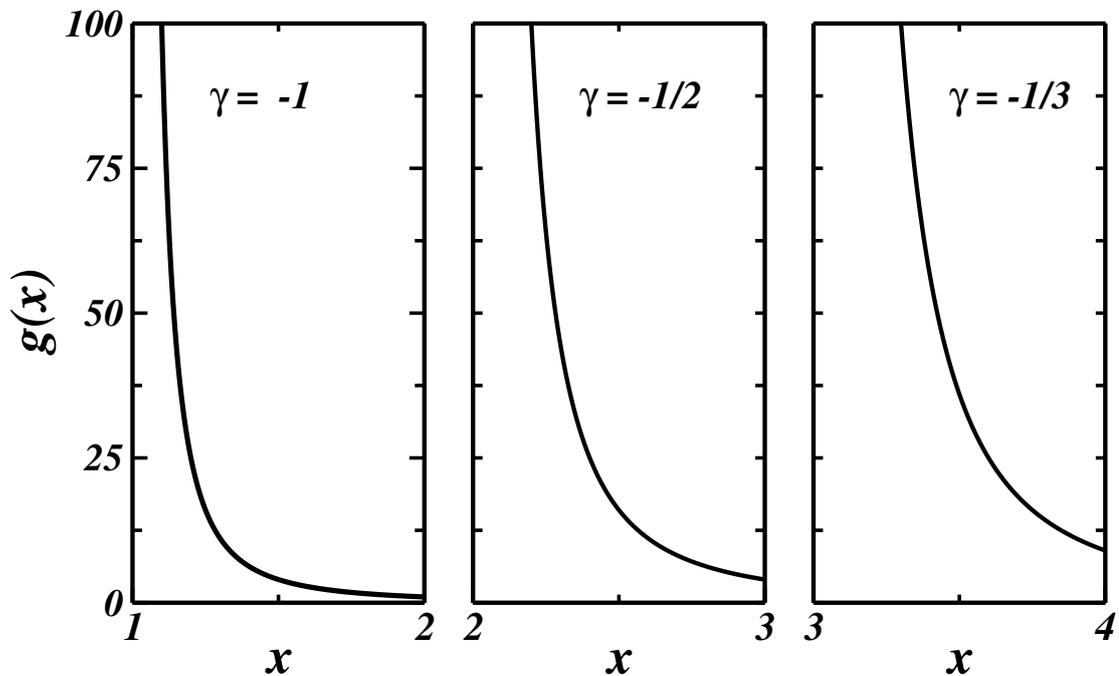


Figura 8: Curvas definidas por (3.52) para $\gamma = -1, -1/2, -1/3$. Vemos que para esses valores de γ , pontos infinitesimalmente próximos no espaço cartesiano são extremamente distante no espaço riemanniano.

$-1/\gamma$, pontos que seriam infinitesimalmente próximos no espaço cartesiano são absolutamente distantes nesse espaço riemanniano. Desse modo, $\langle(\Delta x)^2\rangle = \sigma_x^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$ leva muito mais tempo para sofrer uma variação considerável comparado ao espaço cartesiano.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Esse trabalho foi dividido em três capítulos. No primeiro capítulo, fizemos uma contextualização do assunto principal de todo esse texto e como ele se conecta dentro do campo mais abrangente da Mecânica Quântica. Traçamos um breve histórico de alguns trabalhos que foram importantes no desenvolvimento da teoria [11, 12, 14, 15].

No capítulo dois, fizemos todo o desenvolvimento do formalismo matemático e suas implicações físicas. Definimos o espaço riemanniano e o operador traslação modificado que atua nos kets de posição nesse espaço. Após calcularmos a relação de comutação modificada, encontramos a expressão para o operador momento no espaço de posição. Nesse ponto, verificamos que o momento só se mostrava hermitiano se o tensor métrica obedecesse algumas restrições em seus elementos diagonais. A teoria é encerrada com a definição de uma equação tipo de Schrödinger que governa os kets de posição no tempo.

Ainda no capítulo dois, fizemos uma aplicação resolvendo o problema da partícula sob potencial nulo. Tratamos esse problema no contexto de uma métrica com termo linear e termo quadrático de $g(x)^{-1/2}$. Para o caso linear verificamos que as soluções continuam não normalizáveis, mas não são mais ondas planas como são em um espaço cartesiano, embora as energias do sistema permaneçam iguais. Foi visto também que as soluções no espaço dos momentos se conectam com as soluções no espaço de posição, no entanto, não mais por meio de uma transformação de Fourier. Para o caso com termo quadrático mostramos que a solução é normalizável e apresenta energias quantizadas. Além disso, é possível estabelecer uma relação entre uma partícula sob potencial nulo em um espaço riemanniano com uma partícula confinada em um poço de potencial infinito no espaço cartesiano.

No capítulo três, desenvolvemos o formalismo da teoria na representação de Heisenberg. Nela encontramos uma equação tipo de Heisenberg que governam os operadores no tempo. Mostramos também que no caso clássico as equações de Hamilton em um espaço deformado são semelhantes a equação tipo de Heisenberg na Mecânica Quântica.

Como aplicação da representação de Heisenberg, calculamos a evolução da incerteza no tempo e o alargamento de pacotes de onda para o caso em que γ é pequeno. Verificamos que os pacotes de ondas dependendo do valor de γ se alargam mais rápido ou mais lentamente do que no caso cartesiano. Além disso, o cálculo da incerteza no tempo mostra que dependendo da posição inicial da partícula a incerteza pode crescer rapidamente ou extremamente lenta a medida que o tempo avança, um resultado semelhante ao encontrado em [34] para uma partícula em espaço-tempo estático.

Como perspectiva futura em novos trabalhos, pretendemos estabelecer uma relação

mais completa da teoria com as q -exponenciais, aplicando por exemplo os conhecimentos das q -transformações de Fourier na solução da partícula sob potencial nulo. Além disso, buscaremos estabelecer o formalismo para uma métrica que define o espaço de Minkowski, que seria uma tentativa de trazer aspectos relativísticos a teoria. O grupo de Lorentz é o grupo de todas as transformações de Lorentz do espaço-tempo de Minkowski o qual é o cenário clássico e quântico para todos os fenômenos físicos (não gravitacionais). Desse modo, estabelecer o formalismo aqui apresentado nesse espaço pode trazer aspectos relativísticos. Embora, pareça que a métrica cujo usamos nesse trabalho não remeta a um espaço plano (o espaço de Minkowski é desse tipo) podemos trabalhar em um contexto envolvendo regiões pequenas o suficiente do espaço-tempo onde as variações gravitacionais são desprezíveis, nesse cenário as leis físicas são invariantes de Lorentz da mesma maneira que o são na física da relatividade especial. Sendo assim, pode haver uma possibilidade por este caminho. Além disso, buscaremos uma segunda tentativa de relativizar a teoria reescrevendo o Hamiltoniano a partir da nossa definição de momento e buscar chegar em uma equação tipo de Dirac.

REFERÊNCIAS

- [1] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to electrodynamics; 4th ed.* Boston, MA: Pearson, 2013. Re-published by Cambridge University Press in 2017.
- [2] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics; 3rd edition.* Reed College, Oregon: Cambridge University Press, 2018.
- [3] LIBOFF, R. *Introductory quantum mechanics.* [S.l.]: Addison-Wesley Longman, Incorporated, 1980. ISBN 9780201122213.
- [4] FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.; SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. III: The New Millennium Edition: Quantum Mechanics.* [S.l.]: Basic Books, 2011. (Jeff borrow list). ISBN 9780465025015.
- [5] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics.* [S.l.]: Wiley, 1991. (Quantum Mechanics, v. 1). ISBN 9780471164333.
- [6] PESKIN, M.; SCHROEDER, D. *An Introduction To Quantum Field Theory.* [S.l.]: Avalon Publishing, 1995. (Frontiers in Physics). ISBN 9780813345437.
- [7] PROIETTI, M. et al. Experimental rejection of observer-independence in the quantum world. 02 2019.
- [8] YANG, J. M. A relational formulation of quantum mechanics. v. 8. ISSN 2045-2322.
- [9] STYER, D. F. et al. Nine formulations of quantum mechanics. *American Journal of Physics*, v. 70, n. 3, p. 288–297, 2002.
- [10] SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Reading, MA: Addison-Wesley, 1994.
- [11] QUESNE, C.; TKACHUK, V. M. Deformed algebras, position-dependent effective masses and curved spaces: an exactly solvable coulomb problem. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 37, n. 14, p. 4267–4281, mar 2004.
- [12] FILHO, R. C. et al. Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. *Physical Review A*, 10 2011.
- [13] MAZHARIMOUSAVI, S. Revisiting the displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. *Physical Review A*, v. 85, 03 2012.
- [14] FILHO, R. C. et al. Morse potential derived from first principles. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 101, p. 10009, 01 2013.
- [15] FILHO, R. C. et al. Extended uncertainty from first principles. *Physics Letters B*, v. 755, 02 2016.
- [16] CHUNG, W. The new type of extended uncertainty principle and some applications in deformed quantum mechanics. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 58, 08 2019.

- [17] EL-NABULSI, R. Some implications of position-dependent mass quantum fractional hamiltonian in quantum mechanics. *The European Physical Journal Plus*, v. 134, 05 2019.
- [18] NASCIMENTO, J. P. G. et al. Information measures of a deformed harmonic oscillator in a static electric field. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 499, 02 2018.
- [19] LIMA, E. *Espaços métricos*. [S.l.]: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, 1977. (Projeto Euclides).
- [20] D'INVERNO, R.; D'INVERNO, L. *Introducing Einstein's Relativity*. [S.l.]: Clarendon Press, 1992. (Comparative Pathobiology - Studies in the Postmodern Theory of Education). ISBN 9780198596868.
- [21] BUTKOV, E. *Mathematical physics*. [S.l.]: Addison-Wesley Pub. Co., 1968. (Addison-Wesley series in advanced physics).
- [22] NETO, J. B. *Teoria De Campos e a Natureza*. 1. ed. [S.l.]: Livraria da Física, 2017. ISBN 978-8578614911.
- [23] CARMO, M. do. *Geometria Riemanniana*. [S.l.]: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 1988. (Projeto Euclides). ISBN 9788524400360.
- [24] BRAGA, J. P. M. *Mecânica quântica não-aditiva*. Dissertação (Tese (Doutorado em Física)) — Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2015.
- [25] DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. [S.l.]: Clarendon Press, 1930.
- [26] NOBRE, F. D.; REGO-MONTEIRO, M. A.; TSALLIS, C. Nonlinear relativistic and quantum equations with a common type of solution. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 106, p. 140601, Apr 2011.
- [27] ADIB, A. B. et al. Tsallis thermostatics for finite systems: a hamiltonian approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 322, p. 276 – 284, 2003. ISSN 0378-4371.
- [28] ANDRADE, J. S. et al. Extended phase-space dynamics for the generalized nonextensive thermostatics. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 65, p. 036121, Feb 2002.
- [29] HASEGAWA, H. Bose-einstein and fermi-dirac distributions in nonextensive quantum statistics: Exact and interpolation approaches. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 80, p. 011126, Jul 2009.
- [30] DESAI, B. R. *Quantum Mechanics with Basic Field Theory*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- [31] GASIOROWICZ, S. G. *Quantum physics*. New York, NY: Wiley, 1974.
- [32] SOKOLNIKOFF, I. S. *Tensor Analysis*. New York: John Wiley and Sons, 1964.
- [33] FERNANDO, P. J. Usando a representação de heisenberg. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 17, 06 1995.
- [34] Khorrami, M. Position, momentum, and wave spreading in curved space. *International Journal of Modern Physics A*, v. 36, p. 2150065, mar. 2021.

APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES MATEMÁTICAS

Segue algumas demonstrações matemáticas que são necessárias ao longo do texto, mas que se adequam melhor fora dele.

A.1 Prova de que 2.13 satisfaz um produto escalar

Provamos aqui que 2.13 satisfaz um produto escalar.

Para que a equação (2.13) seja um produto escalar temos que garantir as seguintes propriedades:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \quad (\text{A.1})$$

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (\text{A.2})$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (\text{A.3})$$

Prova da equação A.1:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \int_a^b \{ \psi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \sqrt{g} \}^* dx dy dz \\ \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle^* \end{aligned}$$

Prova da equação (A.2)

$$\begin{aligned} \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \int_a^b \phi^*(\vec{r}) \{ \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \} \sqrt{g} dx dy dz \\ \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \lambda_1 \int_a^b \phi^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) \sqrt{g} dx dy dz + \lambda_2 \int_a^b \phi^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) \sqrt{g} dx dy dz \\ \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

Prova da equação A.3

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle &= \int_a^b \{ \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 \}^* \psi(\vec{r}) \sqrt{g} dx dy dz \\ \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle &= \lambda_1^* \int_a^b \phi_1^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \sqrt{g} dx dy dz + \lambda_2^* \int_a^b \phi_2^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \sqrt{g} dx dy dz \\ \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle &= \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \end{aligned}$$

A.2 Aditividade de $\mathbf{T}_g(d\vec{r})$

Prova de que o operador T_g , não é aditivo. Consideraremos uma translação apenas em um direção de modo que fica simples a não aditividade. Ora, sabemos que de acordo com a definição de \mathbf{T}_g , podemos escrever

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_g(dx')\mathbf{T}_g(dx'')|x,y,z\rangle &= \mathbf{T}_g(dx')\left|x+g(x)^{-1/2}dx'',y,z\right\rangle \\ &= \left|x+g(x)^{-1/2}dx''+g\left(x+g(x)^{-1/2}dx''\right)^{-1/2}dx',y,z\right\rangle\end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_g(dx'+dx'')|x,y,z\rangle &= \left|x+(dx'+dx'')g(x)^{-1/2},y,z\right\rangle \\ &= \left|x+g(x)^{-1/2}dx'+g(x)^{-1/2}dx'',y,z\right\rangle\end{aligned}$$

Comparando essas duas expressões vemos que, deveríamos garantir que

$$g(x) = g\left(x+g(x)^{-1/2}dx''\right)$$

seja sempre verdade. Como no geral não o é, então \mathbf{T}_g , é não aditivo.

A.3 Condição de Unitariedade

Queremos demonstrar a seguinte proposição:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \iff \mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{-1} \quad (\text{A.4})$$

sendo

$$\mathbf{O} = \exp(-i\mathbf{A}). \quad (\text{A.5})$$

Prova: provemos primeiro a ida. Ou seja, se $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$, então $\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{-1}$. Seja \mathbf{O}^{-1} , o inverso do operador \mathbf{O} , e \mathbf{O}^\dagger seu conjugado hermitiano. Ora,

$$\mathbf{O}\mathbf{O}^{-1} = 1 \quad (\text{A.6})$$

e

$$\mathbf{O}^\dagger = (\mathbf{O}^T)^* = \exp\left(i\mathbf{A}^\dagger\right) \quad (\text{A.7})$$

de modo que pela hipótese $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$,

$$\mathbf{O}^\dagger\mathbf{O} = \exp\left(i\mathbf{A}^\dagger\right)\exp(-i\mathbf{A}) = 1 \quad (\text{A.8})$$

Comparando as equações (A.6) com (A.8) concluímos

$$\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{-1} \quad (\text{A.9})$$

Provemos agora a volta: a hipótese é que

$$\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{-1} \quad (\text{A.10})$$

segue, portanto,

$$\begin{aligned} \mathbf{O}^\dagger &= \mathbf{O}^{-1} \\ \mathbf{O}^\dagger \mathbf{O} &= \mathbf{O}^{-1} \mathbf{O} = 1 \\ \mathbf{O}^\dagger \mathbf{O} &= 1 \\ \exp(i\mathbf{A}^\dagger) \exp(-i\mathbf{A}) &= 1 \\ -i\mathbf{A}^\dagger + i\mathbf{A} &= 0 \\ \mathbf{A} &= \mathbf{A}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Assim sendo concluímos que

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \iff \mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{-1} \quad (\text{A.12})$$

A.4 Densidade de Probabilidade

As densidade de probabilidade é dado por $\rho(x) = |\psi_n(x)|^2$. Portanto, de acordo com 2.10, temos

$$\rho(x) = [(4\beta^2 - \gamma^2) / \pi^2]^{1/2} \begin{cases} \sin^2 \left[n \tan^{-1} \left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right) \right], & n = (2, 4, 6, \dots) \\ \cos^2 \left[n \tan^{-1} \left(\frac{\gamma + 2\beta^2 x}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right) \right], & n = (1, 3, 5, \dots) \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Segue na figura 9 o *plots* dos quatro primeiros estados

A.5 Valor de $[\xi, F(p_\gamma)]$

Queremos demonstrar a seguinte relação

$$[\xi, F(\mathbf{p}_g)] = i\hbar \quad (\text{A.14})$$

Supondo que $F(\xi)$ possua uma série de Taylor, ou seja, se

$$F(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n \xi^n ,$$

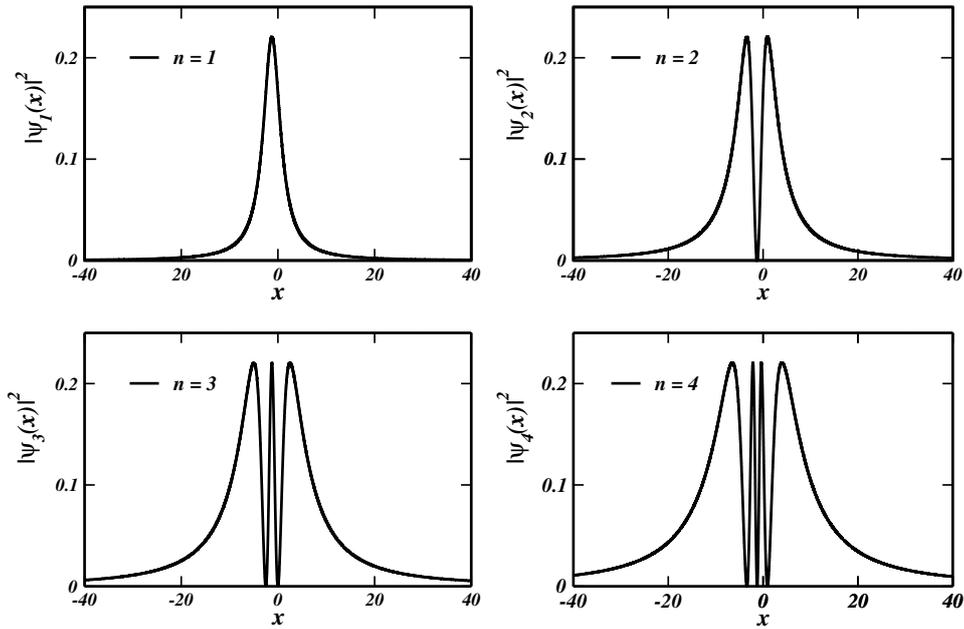


Figura 9: Densidade de probabilidade $|\psi_n(x)|^2$, para $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ e $n = 4$.

Por conseguinte, a correspondente função de um operador A , $F(A)$, é definida como

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n A^n .$$

Desse modo,

$$\begin{aligned} [\xi, F(P_g)] &= \left[\xi, \sum_{n=0}^{\infty} F_n P_g^n \right] \\ [\xi, F(P_g)] &= \sum_{n=0}^{\infty} F_n [\xi, P_g^n] . \end{aligned} \tag{A.15}$$

ainda pode-se mostrar que

$$\begin{aligned} [A, B^n] &= ABB^{n-1} - BB^{n-1}A \\ &= ABB^{n-1} - BAB^{n-1} + BAB^{n-1} - BB^{n-1}A \\ [A, B^n] &= [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] . \end{aligned}$$

Usando essa relação podemos desenvolver (A.15) como segue

$$\begin{aligned}
 [\xi, p_g^n] &= [\xi, p_g] p_g^{n-1} + p_g [\xi, p_g^{n-1}] \\
 &= i\hbar p_g^{n-1} + p_g \{ [\xi, p_g] p_g^{n-2} + p_g [\xi, p_g^{n-2}] \} \\
 &= -2i\hbar p_g^{n-1} + p_g^2 \{ [\xi, p_g] p_g^{n-3} + p_g [\xi, p_g^{n-3}] \} \\
 &= -3i\hbar p_g^{n-1} + p_g^3 \{ [\xi, p_g] p_g^{n-4} + p_g [\xi, p_g^{n-4}] \} \\
 &= \quad \vdots \\
 [\xi, p_g^n] &= -ni\hbar p_g^{n-1} .
 \end{aligned}$$

Usando na equação (A.15), temos

$$\begin{aligned}
 [\xi, F(p_g)] &= \sum_{n=0}^{\infty} F_n [i\hbar n p_g^{n-1}] \\
 &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} F_n n p_g^{n-1} \\
 [\xi, F(p_g)] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_g} F(p_g) ,
 \end{aligned} \tag{A.16}$$