

# Mecânica Quântica Não-aditiva

João Philipe Macedo Braga

23 de outubro de 2015

**João Philipe Macedo Braga**

***Mecânica Quântica Não-aditiva***

Tese apresentada ao Departamento de Física da  
Universidade Federal do Ceará, como parte dos  
requisitos para a obtenção do Título de Doutor  
em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

DOUTORADO EM FÍSICA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

15 de outubro de 2015

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)

---

B794m Braga, João Philipe Macedo.

Mecânica quântica não-aditiva / João Philipe Macedo Braga. – 2015.

62 f. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2015.

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

1. Formalismo unidimensional. 2. Formalismo tridimensional. 3. Mecânica quântica não-aditiva. I. Título.

CDD 530

---

Tese de Doutorado sob o título Mecânica Quântica Não-aditiva, defendida por João Philipe Macedo Braga e aprovada em 15 de outubro de 2015, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

---

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

---

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Jorge Herbert Soares de Lira  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Célio Rodrigues Muniz  
Universidade Estadual do Ceará (UECE)

---

Prof. Dr. Makarius Oliveira Tahim  
Universidade Estadual do Ceará (UECE)

*À minha mãe, Maria Helena, e aos meus irmãos Pedro e Marina.*

*Mas eu não estou interessado*

*Em nenhuma teoria*

*Amar e mudar as coisas*

*Me interessa mais*

Belchior

# *Agradecimentos*

- Agradeço inicialmente à Deus por me conceder o dom da vida e toda a saúde e paciência necessária para realização desse trabalho.
- Agradeço à minha família por fornecer todo o apoio e carinho, especialmente nos momentos mais difíceis, e por ser minha fonte diária de motivação.
- Agradeço aos meus amigos pela amizade sincera e pelo companheirismo nessa difícil jornada.
- Agradeço aos meus professores pela orientação desde a graduação.
- Agradeço à todos os funcionários do Departamento de Física da UFC.
- Agradeço, por fim, a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização desse trabalho.
- Esse trabalho teve o suporte financeiro da CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

# *Resumo*

Nesta Tese, apresentamos a mecânica quântica não-aditiva (MQNA), uma teoria desenvolvida a partir de primeiros princípios com o intuito de entender quais são os efeitos da métrica do espaço na teoria quântica. Em espaços não-euclidianos, uma translação de comprimento  $\Delta x$  não leva necessariamente uma partícula de uma posição  $x$  para outra  $x + \Delta x$ . O resultado dessa translação depende da métrica. Esse é o ponto de partida para o desenvolvimento da MQNA. Através de uma redefinição do operador translação, obtivemos novas relações de comutação entre os operadores posição e *momentum* e uma equação tipo equação de Schrödinger que descreve a evolução temporal do estado da partícula. Mostramos que essa equação, juntamente com certas condições de contorno, pode ser vista como um problema de Sturm-Liouville, garantindo que as energias da partícula são reais e que os autoestados da hamiltoniana são ortonormais e formam uma base no espaço dos estados. Apesar dessas modificações, mostramos que continuam válidos o determinismo na evolução temporal, o princípio da superposição e a conservação local e global da probabilidade. Em contrapartida, generalizamos o teorema de Ehrenfest, mostrando que, para os valores médios das grandezas físicas, a MQNA cai na mecânica clássica em um referencial não inercial, e demonstramos a existência de uma incerteza mínima diferente de zero no *momentum*. Além disso, investigamos, tanto classicamente como quanticamente, os efeitos dinâmicos da métrica na evolução temporal de uma partícula livre. Para realizar a simulação quântica tivemos que adaptar a técnica *split operator* para resolver numericamente a nova equação de Schrödinger. Por fim, exploramos a possibilidade de mapearmos diversos problemas físicos de naturezas distintas através do surgimento de um potencial efetivo, consequência de uma simples mudança de coordenadas.

# *Abstract*

In this thesis, we study the nonadditive quantum mechanics (NAQM), which is a theory developed from first principles in order to understand the effects of the space metric in the quantum theory. In non-Euclidean spaces, the translation of length  $\Delta x$  does not necessarily take a particle from the position  $x$  to  $x + \Delta x$ . The result of this translation depends on the metric. This is the starting point for the development of the NAQM. Through a redefinition of the translation operator, we obtain new commutation relations between the position operator and the *momentum* operator, and a Schrödinger-like equation which describes the time evolution of the state of a particle. We show that this equation, with appropriate boundary conditions, can be seen as a Sturm-Liouville problem, ensuring that the energies of the particle are real and that the eigenstates of the hamiltonian are orthonormal and form a basis in the space of the states. In spite of these modifications, we show the determinism in the time evolution, the superposition principle and the local and global probability conservation remain valid. On the other hand, we generalize the Ehrenfest theorem, showing that, for the average values of the physical quantities, the NAQM is identical to the classical mechanics in a non-inertial reference frame, and we demonstrate the existence of a nonzero minimum uncertainty for the *momentum*. Besides, we investigate, classically as well as quantically, the dynamical effects of the metric in the time evolution of a free particle. In order to perform the quantum simulation, we adapt the split operator technique to solve numerically the new Schrödinger equation. Lastly, we explore the possibility of mapping of several physical problems of different nature through the arising of an effective potential which appears due to a simple change of coordinates.

# *Sumário*

<b>Lista de Figuras</b>	p. x
<b>Lista de Tabelas</b>	p. xi
<b>1 Introdução</b>	p. 12
<b>2 Formalismo Unidimensional</b>	p. 14
<b>3 Formalismo Tridimensional</b>	p. 22
<b>4 Mecânica Quântica Não-aditiva como um Problema de Sturm-Liouville</b>	p. 26
4.1 Teoria de Sturm-Liouville . . . . .	p. 26
4.2 Aplicação na MQNA . . . . .	p. 28
4.2.1 Poço de Potencial Infinito . . . . .	p. 29
<b>5 Consequências Físicas e Aplicações</b>	p. 33
5.1 Determinismo na Evolução Temporal . . . . .	p. 33
5.2 Conservação da Probabilidade . . . . .	p. 35
5.3 Teorema de Ehrenfest Generalizado . . . . .	p. 36
5.3.1 Mecânica Clássica em um Espaço Deformado . . . . .	p. 38
5.3.2 Mudanças de Coordenadas . . . . .	p. 41
5.4 Potenciais Efetivos . . . . .	p. 43
5.5 Dinâmica em um Espaço Deformado . . . . .	p. 45
5.6 Incerteza Mínima no <i>Momentum</i> . . . . .	p. 47

<i>Sumário</i>	ix
<b>6 Conclusões e Perspectivas</b>	p. 50
<b>Apêndice A – Técnica Split Operator</b>	p. 52
<b>Apêndice B – Demonstrações Matemáticas</b>	p. 58
<b>Referências Bibliográficas</b>	p. 61

## *Lista de Figuras*

- 4.1 Somas parciais da série para  $f(x) = 1$  com  $\gamma = +0.9/L$ . . . . . p. 30
- 4.2 Somas parciais da série para  $f(x) = 1$  com  $\gamma = -0.9/L$ . . . . . p. 31
- 4.3 Erro quadrático médio da aproximação  $f(x) \approx f_N(x)$ . As linhas contínuas representam o erro para  $\gamma = +0.9/L$  e as linhas tracejadas para  $\gamma = -0.9/L$ . O gráfico auxiliar apresenta o mesmo resultado numa escala logarítmica. . . . p. 32
- 5.1 Valor médio de  $X$  para a partícula livre considerando até o termo linear da expansão em série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$ . . . . . p. 46
- 5.2 Incerteza Mínima no *Momentum* quando levamos em consideração o segundo termo da série de  $g(x)^{-1/2}$ . A região sombreada representa os estados proibidos para a métrica considerada aqui. . . . . p. 49
- A.1 Discretização do espaço unidimensional e de uma função definida nele. . . . p. 55

# *Lista de Tabelas*

5.1 Potenciais efetivos  $V_{eff}(\eta)$  gerado a partir do potencial parabólico  $V(x) = x^2$   
em espaços com métricas diversas. . . . . p.45

# 1 Introdução

A mecânica quântica é a teoria responsável por estudar o comportamento da natureza em uma escala atômica [1, 2, 3]. De fato, os fenômenos que ocorrem em uma escala muito pequena só podem ser corretamente explicados sob a luz da teoria quântica [4, 5]. Por outro lado, essa teoria deve corresponder a mecânica clássica quando os objetos envolvidos se tornam macroscópicos [6, 7].

Existem pelo menos nove formulações da mecânica quântica [8], que são incrivelmente diferentes, tanto do ponto de vista matemático como conceitual, no entanto realizam as mesmas previsões em todas as situações físicas. Na versão de Dirac da mecânica quântica [9], o estado de uma partícula em um instante  $t_0$  é descrito matematicamente por um ket  $|\psi(t_0)\rangle$ , pertencente ao espaço dos estados  $\mathcal{E}$ . Além disso, qualquer grandeza física é descrita por um operador que atua em  $\mathcal{E}$  e que deve ser hermitiano e possuir autovetores que formam uma base para o espaço dos estados. Os autovalores desse operador são os únicos resultados possíveis ao se realizar uma medida da grandeza física em questão e, logo após a medida, o estado do sistema necessariamente é o autovetor associado ao autovalor medido. Por fim, a evolução temporal do sistema é governada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi\rangle . \quad (1.1)$$

Com o intuito de estudar fenômenos mais complexos, como a quebra da invariância translacional, ou a não-homogeneidade do espaço, ou ainda a possível existência de um comprimento mínimo, foram realizadas várias modificações na equação de Schrödinger. Em 2004, Quesne e Tkachuk [10] mostraram que existe uma íntima conexão entre três dessas modificações da equação de Schrödinger baseadas no uso de massa efetiva dependente da posição, de relações de comutação deformadas e de espaços curvos. Além disso, em 2011, Costa Filho *et al* [11] introduziram o conceito de deslocamento espacial não-aditivo o que implicou na obtenção de uma nova e específica relação de comutação entre os operadores posição  $\hat{x}$  e momento  $\hat{p}$ , e de uma Eq. de Schrödinger modificada que pode ser interpretada como sendo a Eq. de Schrödinger

---

de uma partícula com massa efetiva com uma dependência específica da posição. No entanto, o operador  $\hat{p}_\gamma$  obtido não é hermitiano e, conseqüentemente, o Hamiltoniano também não. Uma modificação nesse operador momento foi proposta em 2012 [12] a fim de torná-lo hermitiano, contudo essa alteração não surge a partir de primeiros princípios e trata-se de uma correção *ad-hoc*. Nesse trabalho, apresentaremos a Mecânica Quântica Não-aditiva (MQNA) que, conforme veremos, será o cenário natural de problemas que envolvem a Eq. de Schrödinger em espaços curvos, ou com massa efetiva dependente da posição, ou ainda, de problemas com relações de comutação deformadas. Todos esses problemas possuem uma origem física em comum, a translação espacial não-aditiva fruto da quebra de simetria de translação do espaço.

## 2 *Formalismo Unidimensional*

Segundo Riemann, a geometria se fundamenta nos dois seguintes fatos [13]:

1. O espaço é um contínuo tridimensional e, portanto, a multiplicidade formada pelos seus pontos pode ser descrita, de modo contínuo, pelo sistema de valores de três coordenadas  $q_1, q_2$  e  $q_3$ ;
2. O quadrado da distância  $ds^2$  de dois pontos infinitamente próximos  $P = (q_1, q_2, q_3)$  e  $P' = (q_1 + dq_1, q_2 + dq_2, q_3 + dq_3)$  é uma forma quadrática das coordenadas relativas  $dq_i$

$$ds^2 = \sum_{ij} g_{ij} dq_i dq_j \quad , \quad (2.1)$$

com  $g_{ij} = g_{ji}$ .

Dessa forma, o espaço é um contínuo métrico.

O espaço Euclideano tridimensional é um caso particular do espaço de Riemann, onde

$$g_{ij} = \delta_{ij} \quad (2.2)$$

e o quadrado da distância  $ds^2$  entre dois pontos  $P = (x, y, z)$  e  $P' = (x + dx, y + dy, z + dz)$  infinitamente próximo é

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad . \quad (2.3)$$

Inicialmente, por uma questão de simplicidade, trataremos apenas da teoria unidimensional. Assim, postulamos que o espaço das posições é o espaço de Riemann unidimensional e que, portanto, pode ser descrito de maneira contínua pelo sistema de valores de uma única coordenada  $x$ . Além disso, o quadrado da distância entre dois pontos infinitamente próximos  $P(x)$  e  $P'(x + dx)$  é dada por

$$ds^2 = g(x) dx^2 \quad . \quad (2.4)$$

Consequentemente, o espaço das funções de onda será o espaço de Hilbert com um peso, ou seja, será o espaço das funções de  $x$  definidas em um certo intervalo  $a \leq x \leq b$ , tal que

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 \sqrt{g(x)} dx < \infty , \quad (2.5)$$

dotado de um produto interno (ou escalar),

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int_a^b \phi^*(x) \psi(x) \sqrt{g(x)} dx . \quad (2.6)$$

Da definição acima, seguem as propriedades

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \quad (2.7)$$

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (2.8)$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (2.9)$$

De posse de um produto escalar, podemos definir o conceito de norma e de ortogonalidade de funções. Duas funções  $\psi(x)$  e  $\phi(x)$  são ortogonais se  $\langle \phi | \psi \rangle = 0$ . Por outro lado, a norma  $\|\psi(x)\|$  de uma função  $\psi(x)$ , é definida como

$$\|\psi(x)\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} , \quad (2.10)$$

que deve ser positiva definida.

Nesse contexto, uma partícula bem localizada em torno de um ponto  $P(x)$  é descrita pelo ket  $|x\rangle$ , autoket do operador posição  $X^1$ ,

$$X|x\rangle = x|x\rangle . \quad (2.11)$$

O conjunto  $\{|x\rangle\}$  é completo. Assim, o operador identidade pode ser escrito como

$$\mathbb{1} = \int \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x| . \quad (2.12)$$

### Demonstração:

Como  $\phi^*(x) = \langle \phi | x \rangle$  e  $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ , segue da Eq. (2.6) que

---

<sup>1</sup>Nessa Tese, os operadores serão sempre representados por letras maiúsculas, enquanto que seus autovalores e demais variáveis por letras minúsculas

$$\begin{aligned}\langle \phi | \psi \rangle &= \int \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle \sqrt{g(x)} dx \\ \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \phi | \left[ \int |x\rangle \langle x| \sqrt{g(x)} dx \right] | \psi \rangle .\end{aligned}$$

Portanto,

$$\int |x\rangle \langle x| \sqrt{g(x)} dx = \mathbb{1} .$$

■

Enquanto que o produto escalar dos autokets do operador posição será

$$\langle x | x' \rangle = g(x)^{-1/2} \delta(x - x') . \quad (2.13)$$

### Demonstração:

Utilizando a Eq. (2.12),

$$\begin{aligned}\phi(x') &= \langle x' | \phi \rangle = \langle x' | \left[ \int |x\rangle \langle x| \sqrt{g(x)} dx \right] | \phi \rangle \\ &= \int \left( \sqrt{g(x)} \langle x' | x \rangle \right) \langle x | \phi \rangle dx \\ \phi(x') &= \int \left( \sqrt{g(x)} \langle x' | x \rangle \right) \phi(x) dx .\end{aligned}$$

Assim, relembando a propriedade da integral da delta de Dirac, onde

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x') dx = f(x') ,$$

se  $a < x' < b$ . Concluimos que

$$\langle x' | x \rangle = g(x)^{-1/2} \delta(x - x') .$$

■

Dessa forma, um estado físico arbitrário pode ser expandido em termos de  $\{|x\rangle\}$ ,

$$|\psi\rangle = \int \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x | \psi \rangle . \quad (2.14)$$

A partir de agora, generalizaremos a ideia de R. N. Costa Filho *et al.* [11], postulando que o operador translação espacial,  $T_g(dx)$ , atua em estado  $|x\rangle$  da seguinte forma

$$T_g(dx)|x\rangle = |x + g(x)^{-1/2}dx\rangle . \quad (2.15)$$

Nos resultados que se seguem, todas as vezes que fizermos  $g(x)^{-1/2} = 1 + \gamma x$ , recuperaremos os resultados obtidos por R. N. Costa Filho *et al.* [11], ou se considerarmos que  $g(x) = 1$ , recairemos na mecânica quântica tradicional.

Das Eqs. (2.4) e (2.15) podemos ver que

$$T_g(ds)|x\rangle = |x + dx\rangle , \quad (2.16)$$

o que mostra que nesse espaço é necessário uma translação de comprimento  $ds$  para levar um estado  $|x\rangle$  em outro estado  $|x + dx\rangle$ .

Mostraremos, agora, o caráter não-aditivo de  $T_g$ ,

$$T_g(dx')T_g(dx'') \neq T_g(dx' + dx'') . \quad (2.17)$$

### **Demonstração:**

Segue da Eq. (2.15) que

$$\begin{aligned} T_g(dx')T_g(dx'')|x\rangle &= T_g(dx')|x + g(x)^{-1/2}dx''\rangle \\ T_g(dx')T_g(dx'')|x\rangle &= |x + g(x)^{-1/2}dx'' + g(x + g(x)^{-1/2}dx'')^{-1/2}dx'\rangle . \end{aligned} \quad (2.18)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} T_g(dx' + dx'')|x\rangle &= |x + g(x)^{-1/2}(dx' + dx'')\rangle \\ T_g(dx' + dx'')|x\rangle &= |x + g(x)^{-1/2}dx'' + g(x)^{-1/2}dx'\rangle . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Como  $g(x + g(x)^{-1/2}dx'')$  não é necessariamente igual a  $g(x)$ , então podemos concluir das Eqs. (2.18) e (2.19) que  $T_g$  é, em geral, não-aditivo.

■

Outra propriedade que também segue imediatamente da definição do operador  $T_g$ , Eq. (2.15), é que

$$\lim_{dx \rightarrow 0} T_g(dx) = \mathbb{1} . \quad (2.20)$$

Além disso, segue das Eqs. (2.11) e (2.15)

$$[X, T_g] |x\rangle = g(x)^{-1/2} dx |x + g(x)^{-1/2} dx\rangle , \quad (2.21)$$

onde os colchetes representam o comutator.

A Eq. (2.21) pode ser aproximada, com um erro de segunda ordem em  $dx$ , por

$$[X, T_g] |x\rangle \simeq g(x)^{-1/2} dx |x\rangle = g(X)^{-1/2} dX |x\rangle . \quad (2.22)$$

Agora, supondo que o *momentum* generalizado  $P_g$  é o gerador de translação, ou seja, considerando que [5]

$$T_g(dx) \equiv \mathbb{1} - \frac{iP_g dx}{\hbar} , \quad (2.23)$$

obtemos das Eqs. (2.22) e (2.23), a nova relação de comutação entre os operadores posição e momentum

$$[X, P_g] = i\hbar g(X)^{-1/2} . \quad (2.24)$$

Na sequência, é possível obter a expressão de  $P_g$  no espaço das posições

$$\langle x | P_g | \psi \rangle = -i\hbar g(x)^{-1/2} \frac{d}{dx} \langle x | \psi \rangle . \quad (2.25)$$

### **Demonstração:**

Segue da Eq. (2.23) que

$$T_g(\delta s) | \psi \rangle = | \psi \rangle - \frac{iP_g \delta s}{\hbar} | \psi \rangle , \quad (2.26)$$

onde  $\delta s = \sqrt{g(x)} \delta x$  é muito pequeno.

Utilizando as Eqs. (2.4) e (2.12), podemos reescrever a Eq. (2.26) na forma

$$\int ds' T_g(\delta s) |x'\rangle \langle x' | \psi \rangle = | \psi \rangle - \frac{iP_g \delta s}{\hbar} | \psi \rangle , \quad (2.27)$$

onde  $ds' = \sqrt{g(x')} dx'$ .

Agora, se utilizarmos a propriedade expressa na Eq. (2.16), a Eq. (2.27) torna-se

$$\begin{aligned} \int ds' |x' + \delta x\rangle \langle x' | \psi \rangle &= | \psi \rangle - \frac{iP_g \delta s}{\hbar} | \psi \rangle \\ \int ds' |x'\rangle \langle x' - \delta x | \psi \rangle &= | \psi \rangle - \frac{iP_g \delta s}{\hbar} | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Por outro lado, se utilizarmos a seguinte relação aproximada

$$\langle x' - \delta x | \psi \rangle \approx \langle x' | \psi \rangle - \delta s \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle$$

na Eq. (2.28), obteremos

$$\int ds' |x'\rangle \left( \langle x' | \psi \rangle - \delta s \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle \right) = |\psi\rangle - \frac{iP_g \delta s}{\hbar} |\psi\rangle . \quad (2.29)$$

Por fim, se aplicarmos  $\langle x |$  dos dois lados da Eq. (2.29) e utilizarmos as Eqs. (2.12) e (2.13) podemos concluir

$$\begin{aligned} \int ds' \langle x | x' \rangle \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle x | P_g | \psi \rangle \\ \int dx' \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle x | P_g | \psi \rangle \\ \langle x | P_g | \psi \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \langle x | \psi \rangle \\ \langle x | P_g | \psi \rangle &= -i\hbar g(x)^{-1/2} \frac{d}{dx} \langle x | \psi \rangle . \end{aligned}$$

■

Portanto, segue da Eq. (2.25) que, no espaço das posições,  $P_g = -i\hbar D_g$ , onde

$$D_g \equiv g(x)^{-1/2} \frac{d}{dx} . \quad (2.30)$$

O operador *momentum*  $P_g$  é Hermitiano no espaço de Hilbert com um peso, definido pelas Eqs. (2.5) e (2.6).

**Demonstração:**

$$\begin{aligned} \langle \phi | P_g | \psi \rangle &= \langle \phi | \int \sqrt{g(x)} dx | x \rangle \langle x | P_g | \psi \rangle \\ &= \int \sqrt{g(x)} dx \phi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) \\ \langle \phi | P_g | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int dx \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \end{aligned} \quad (2.31)$$

A Eq. (2.31) mostra que  $P_g$  atua no espaço de Hilbert com um peso da mesma forma que  $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$  atua no espaço de Hilbert.

Realizando a integração por partes na Eq.(2.31) e supondo que  $\phi^*(x)\psi(x)$  assume o mesmo valor nos limites de integração (zero, por exemplo, se a integração for de  $-\infty$  a  $+\infty$ ), obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | P_g | \psi \rangle &= -\frac{\hbar}{i} \int dx \psi(x) \frac{d}{dx} \phi^*(x) \\
 &= \int \sqrt{g(x)} dx \psi(x) i\hbar \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \phi^*(x) \\
 &= \left[ \int \sqrt{g(x)} dx \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \phi(x) \right) \right]^* \\
 \langle \phi | P_g | \psi \rangle &= \langle \psi | P_g | \phi \rangle^* .
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

■

No espaço das posições, a Equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | H_g | \psi(t) \rangle \tag{2.33}$$

e considerando que

$$H_g = \frac{P_g^2}{2m} + V(X, t) , \tag{2.34}$$

concluimos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) D_g^2 \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t). \tag{2.35}$$

Supondo que o potencial  $V$  seja independente do tempo,  $V = V(x)$ , podemos buscar por soluções da Eq. (2.35) na forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x) T(t) . \tag{2.36}$$

Substituindo a Eq. (2.36) na Eq. (2.35),

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{d}{dt} T(t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} D_g^2 \psi(x) + V(x) . \tag{2.37}$$

O lado esquerdo da Eq. (2.37) só depende do tempo, enquanto que o lado direito só depende da posição, assim, para que essa equação seja verdadeira, é necessário que os dois lados da mesma sejam constantes, ou seja,

$$\frac{d}{dt} T(t) = \frac{E}{i\hbar} T(t) \implies T(t) = \exp \left( -\frac{iE}{\hbar} t \right) \tag{2.38}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} D_g^2 \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) , \tag{2.39}$$

ou ainda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \psi(x) \right] + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (2.40)$$

onde a constante de separação  $E$  é a energia da partícula.

A esse conjunto de resultados, que tem como caso particular,  $g(x) = 1$ , a tradicional mecânica quântica, damos o nome de mecânica quântica não-aditiva (MQNA). No Capítulo 5, estudaremos as consequências físicas dessas modificações na teoria quântica. Em particular, generalizaremos o Teorema de Ehrenfest, onde será possível realizar a conexão entre a mecânica quântica não-aditiva e a mecânica clássica. No Capítulo 4, utilizaremos a teoria de Sturm-Liouville para estudar algumas propriedades da Eq. (2.40) e, no próximo Capítulo, apresentaremos o formalismo matemático da MQNA em três dimensões.

### 3 *Formalismo Tridimensional*

Nesse capítulo, apresentaremos o formalismo matemático da MQNA em três dimensões<sup>1</sup>. Consideraremos que o espaço das posições é o espaço de Riemann tridimensional com a seguinte métrica diagonal

$$ds^2 = g_{11}(x, y, z)dx^2 + g_{22}(x, y, z)dy^2 + g_{33}(x, y, z)dz^2 \quad , \quad (3.1)$$

assim, o elemento de volume  $dV$  é dado por

$$dV = \sqrt{\text{Det}(g_{ij})}dxdydz \quad (3.2)$$

e, conseqüentemente, o espaço das funções de onda será o espaço de Hilbert com um peso, ou seja, será o espaço das funções de  $x$ ,  $y$  e  $z$  definidas em um certo volume  $V$ , tal que

$$\iiint_V |\psi(x, y, z)|^2 \sqrt{\text{Det}(g_{ij})}dxdydz < \infty \quad , \quad (3.3)$$

dotado de um produto interno (ou escalar),

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \iiint_V \phi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) \sqrt{\text{Det}(g_{ij})}dxdydz \quad . \quad (3.4)$$

Consideraremos que uma partícula bem localizada em torno de um ponto

$$\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (3.5)$$

é descrita por um ket

$$|\vec{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle \quad , \quad (3.6)$$

autoket simultâneo dos operadores  $X$ ,  $Y$  e  $Z$ ,

$$X|x, y, z\rangle = x|x, y, z\rangle \quad , \quad (3.7)$$

$$Y|x, y, z\rangle = y|x, y, z\rangle \quad (3.8)$$

---

<sup>1</sup>Dessa vez, omitiremos algumas demonstrações por serem análogas às realizadas no Capítulo 2.

e

$$Z|x, y, z\rangle = z|x, y, z\rangle . \quad (3.9)$$

Das Eqs. (3.7), (3.8) e (3.9), segue que

$$[X, Y] = [X, Z] = [Y, Z] = 0 . \quad (3.10)$$

De maneira análoga ao que foi feito no Capítulo 2, é possível mostrar que a relação de completude e o produto escalar dos autokets do operador posição são, respectivamente,

$$\mathbb{1} = \iiint \sqrt{\text{Det}(g_{ij})} dx dy dz |x, y, z\rangle \langle x, y, z| \quad (3.11)$$

e

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \text{Det}(g_{ij})^{-1/2} \delta(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (3.12)$$

Dessa forma, qualquer estado físico  $|\psi\rangle$  pode ser expandido em termos de  $\{|\vec{r}\rangle\}$  como segue

$$|\psi\rangle = \iiint \sqrt{\text{Det}(g_{ij})} dx dy dz |x, y, z\rangle \langle x, y, z | \psi \rangle . \quad (3.13)$$

Agora, postularemos que o operador translação espacial em três dimensões,  $T_g(\vec{dr})$ , atua em um estado  $|x, y, z\rangle$  da seguinte forma

$$T_g(\vec{dr})|x, y, z\rangle \equiv |x + g_{11}(x, y, z)^{-1/2} dx, y + g_{22}(x, y, z)^{-1/2} dy, z + g_{33}(x, y, z)^{-1/2} dz\rangle , \quad (3.14)$$

onde

$$\vec{dr} = dx\hat{x} + dy\hat{y} + dz\hat{z} . \quad (3.15)$$

Segue da Eq. (3.14) que

$$T_g(\vec{ds})|x, y, z\rangle = |x + dx, y + dy, z + dz\rangle , \quad (3.16)$$

onde

$$\vec{ds} \equiv \sqrt{g_{11}(x, y, z)} dx\hat{x} + \sqrt{g_{22}(x, y, z)} dy\hat{y} + \sqrt{g_{33}(x, y, z)} dz\hat{z} . \quad (3.17)$$

Além disso, é possível verificar que, no caso mais geral,

$$[T_g(dx\hat{x}), T_g(dy\hat{y})] \neq 0 , \quad (3.18)$$

$$[T_g(dx\hat{x}), T_g(dz\hat{z})] \neq 0 \quad (3.19)$$

e

$$[T_g(dy\hat{y}), T_g(dz\hat{z})] \neq 0 . \quad (3.20)$$

Isso significa que translações sucessivas em direções perpendiculares não conduzem a partícula ao mesmo estado se a ordem dessas translações é alterada. No entanto, o mesmo não ocorre no caso particular em que  $g_{11} = g_{11}(x)$ ,  $g_{22} = g_{22}(y)$ , e  $g_{33} = g_{33}(z)$ .

Por outro lado, como consequências da redefinição do operador translação, Eq. (3.14), e das Eqs. (3.7), (3.8) e (3.9), obtemos as seguintes relações de comutação com um erro de segunda ordem em  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$ , respectivamente,

$$[X, T_g] = g_{11}(X, Y, Z)^{-1/2} dX , \quad (3.21)$$

$$[Y, T_g] = g_{22}(X, Y, Z)^{-1/2} dY \quad (3.22)$$

e

$$[Z, T_g] = g_{33}(X, Y, Z)^{-1/2} dZ . \quad (3.23)$$

Seguindo a mesma linha de raciocínio do Capítulo 2, agora, se considerarmos que o *momentum*  $\vec{P}_g$  é o gerador de translação, ou seja,

$$T_g(\vec{dr}) \equiv \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{P}_g \cdot \vec{dr} , \quad (3.24)$$

onde

$$\vec{P}_g = P_x \hat{x} + P_y \hat{y} + P_z \hat{z} , \quad (3.25)$$

obtemos das Eqs. (3.21), (3.22), (3.23) e (3.24) que

$$([X, P_x] - i\hbar g_{11}(X, Y, Z)^{-1/2}) dX + [X, P_y] dY + [X, P_z] dZ = 0 , \quad (3.26)$$

$$[Y, P_x] dX + ([Y, P_y] - i\hbar g_{22}(X, Y, Z)^{-1/2}) dY + [Y, P_z] dZ = 0 \quad (3.27)$$

e

$$[Z, P_x] dX + [Z, P_y] dY + ([Z, P_z] - i\hbar g_{33}(X, Y, Z)^{-1/2}) dZ = 0 . \quad (3.28)$$

A solução trivial das Eqs. (3.26), (3.27) e (3.28) nos fornece as relações de comutação entre as componentes dos operadores posição e *momentum*

$$[X, P_x] = i\hbar g_{11}(X, Y, Z)^{-1/2} , \quad (3.29)$$

$$[X, P_y] = 0 , \quad (3.30)$$

$$[X, P_z] = 0 , \quad (3.31)$$

$$[Y, P_x] = 0 , \quad (3.32)$$

$$[Y, P_y] = i\hbar g_{22}(X, Y, Z)^{-1/2} , \quad (3.33)$$

$$[Y, P_z] = 0 \quad , \quad (3.34)$$

$$[Z, P_x] = 0 \quad , \quad (3.35)$$

$$[Z, P_y] = 0 \quad (3.36)$$

e

$$[Z, P_z] = i\hbar g_{33}(X, Y, Z)^{-1/2} \quad . \quad (3.37)$$

Na sequência, se trabalharmos com translações em cada uma das direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  separadamente, é possível obter das Eqs. (3.14) e (3.24) as expressões para cada uma das componentes de  $\vec{P}_g$  no espaço das posições

$$\langle x, y, z | P_x | \psi \rangle = -i\hbar g_{11}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x} \langle x, y, z | \psi \rangle \quad , \quad (3.38)$$

$$\langle x, y, z | P_y | \psi \rangle = -i\hbar g_{22}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial y} \langle x, y, z | \psi \rangle \quad (3.39)$$

e

$$\langle x, y, z | P_z | \psi \rangle = -i\hbar g_{33}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial z} \langle x, y, z | \psi \rangle \quad . \quad (3.40)$$

Desse modo, podemos escrever que

$$\vec{P}_g = \hat{x} \left( -i\hbar g_{11}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial x} \right) + \hat{y} \left( -i\hbar g_{22}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial y} \right) + \hat{z} \left( -i\hbar g_{33}^{-1/2}(x, y, z) \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad . \quad (3.41)$$

Por fim, a equação de Schrödinger no espaço das posições é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, y, z | \psi(t) \rangle = \langle x, y, z | H_g | \psi(t) \rangle \quad , \quad (3.42)$$

onde

$$H_g = \frac{P_g^2}{2m} + V(x, y, z, t) \quad . \quad (3.43)$$

Assim, obtemos que a equação de Schrödinger dependente do tempo para a MQNA em três dimensões será

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{-\hbar^2/2m}{\sqrt{g}} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \sqrt{g} g^{11} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \sqrt{g} g^{22} \frac{\partial}{\partial y} \Psi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \sqrt{g} g^{33} \frac{\partial}{\partial z} \Psi \right) \right] + V(x, y, z, t) \Psi \quad , \quad (3.44)$$

onde  $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ ,  $g$  é o determinante da matriz formada pelos coeficientes da métrica (tensor métrica),  $g = \text{Det}(g_{ij})$ , e  $g^{ij}$  são os elementos da inversa do tensor métrica,  $g^{ij} = (g^{-1})_{ij}$ .

## 4 *Mecânica Quântica Não-aditiva como um Problema de Sturm-Liouville*

Nesse capítulo, estudaremos as propriedades da Equação de Schrödinger obtida na MQNA em uma dimensão dentro do contexto da teoria de Sturm-Liouville. Mostraremos que a equação de Schrödinger independente do tempo obtida no Capítulo 2, Eq. (2.39), juntamente com as condições de contorno apropriadas, pode ser vista como um problema de Sturm-Liouville o que garante que os autovalores da hamiltoniana são reais, os autoestados são ortonormais e formam uma base no espaço dos estados.

Na próxima seção, anunciaremos quatro teoremas já estabelecidos para o problema de Sturm-Liouville que serão utilizados aqui.

### 4.1 Teoria de Sturm-Liouville

Consideremos o seguinte conjunto de problemas

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{dy}{dx} \right] - q(x)y + \lambda w(x)y = 0 \quad , \quad (4.1)$$

onde supomos que  $p$ ,  $dp/dx$ ,  $q$  e  $w$  são funções contínuas no intervalo  $0 \leq x \leq L$  e, além disso,  $p(x) > 0$  e  $w(x) > 0$  em todos os pontos no intervalo  $0 \leq x \leq L$ , com as seguintes condições de contorno

$$a_1 y(0) + a_2 \frac{dy}{dx}(0) = 0 \quad \text{e} \quad b_1 y(L) + b_2 \frac{dy}{dx}(L) = 0 \quad . \quad (4.2)$$

Esses tipos de problemas são conhecidos como problemas de Sturm-Liouville e possuem algumas propriedades importantes em comum. Apresentaremos essas propriedades nos quatro teoremas que seguem. As demonstrações podem ser encontradas na referência [18].

**Teorema 1:** Todos os autovalores  $\lambda$  do problema de Sturm-Liouville, Eqs. (4.1) e (4.2), são reais.

**Teorema 2:** Se  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são autofunções do problema de Sturm-Liouville, Eqs. (4.1) e (4.2), correspondentes aos autovalores  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ , respectivamente, com  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , então

$$\int_0^L w(x)\phi_1(x)\phi_2(x)dx = 0 . \quad (4.3)$$

Esse teorema expressa a propriedade de ortogonalidade das autofunções com respeito a função peso  $w(x)$ .

**Teorema 3:** Para cada autovalor existe uma única autofunção linearmente independente, determinada a menos de uma constante multiplicativa. Além disso, os autovalores formam uma sequência infinita e podem ser ordenados de forma crescente de acordo com a sua magnitude,

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots < \lambda_n < \dots , \quad (4.4)$$

onde  $\lambda_n \rightarrow \infty$  quando  $n \rightarrow \infty$ .

Podemos determinar a constante multiplicativa impondo que, para cada autofunção  $\phi_n$ , associada com o autovalor  $\lambda_n$ , seja válida a seguinte condição de normalização

$$\int_0^L w(x)\phi_n^2(x)dx = 1 , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.5)$$

Autofunções que satisfazem tal condição são ditas normalizadas e seu conjunto é dito ortonormal (com respeito a função peso  $w(x)$ ). As Eqs. (4.3) e (4.5) podem ser combinadas numa única equação como segue

$$\int_0^L w(x)\phi_m(x)\phi_n(x)dx = \delta_{mn} . \quad (4.6)$$

**Teorema 4:** Sejam  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n, \dots$  autofunções normalizadas do problema de Sturm-Liouville, Eqs. (4.1) e (4.2). Além disso, sejam  $f$  e  $df/dx$  funções contínuas por partes no intervalo  $0 \leq x \leq L$ , então a série

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) , \quad (4.7)$$

onde os coeficientes  $c_m$  são dados por

$$c_m = \int_0^L w(x)f(x)\phi_m(x)dx \quad (4.8)$$

converge para  $[f(x+) + f(x-)]/2$  em cada ponto de intervalo  $0 < x < L$ .

Esse teorema mostra que as soluções do problema de Sturm-Liouville formam uma base no espaço das funções.

Na próxima seção, mostraremos que a equação de Schrödinger independente do tempo obtida na MQNA, juntamente com condições de contorno apropriadas, pode ser vista como um problema de Sturm-Liouville.

## 4.2 Aplicação na MQNA

Em uma dimensão, obtivemos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \left[ \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \psi(x) \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (4.9)$$

A Eq. (4.9) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dx} \left[ p(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \right] - q(x)\psi(x) + \lambda w(x)\psi(x) = 0, \quad (4.10)$$

onde

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{g(x)}}, \quad (4.11)$$

$$q(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{g(x)}V(x), \quad (4.12)$$

$$w(x) = \sqrt{g(x)} \quad (4.13)$$

e

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (4.14)$$

A Eq. (4.10) juntamente com condições de contorno do tipo

$$a_1\psi(0) + a_2 \frac{d\psi}{dx}(0) = 0 \quad \text{e} \quad b_1\psi(L) + b_2 \frac{d\psi}{dx}(L) = 0, \quad (4.15)$$

formam um problema de Sturm-Liouville.

Esse resultado acarreta algumas consequências importantes:

1. Os valores de  $E$ , a energia da partícula, são reais;
2. Para cada valor de energia  $E_n$ , existe um único autoestado normalizado (com respeito a função peso  $w(x) = \sqrt{g(x)}$ )  $\psi_n$ , ou seja,

$$\int_0^L \sqrt{g(x)} \psi_n^2(x) dx = 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.16)$$

3. O conjunto dos autoestados normalizados  $\psi_n$  é ortonormal (com respeito a função peso  $w(x) = \sqrt{g(x)}$ ),

$$\int_0^L \sqrt{g(x)} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}; \quad (4.17)$$

4. O conjunto dos autoestados normalizados  $\psi_n$  formam uma base no espaço dos estados. Dessa forma, o estado mais geral de uma partícula  $\phi(x)$  pode ser escrito como

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad (4.18)$$

onde

$$c_m = \int_0^L \sqrt{g(x)} \phi(x) \psi_m(x) dx. \quad (4.19)$$

### 4.2.1 Poço de Potencial Infinito

Para ilustrar tudo isso, vejamos o caso particular do poço de potencial infinito. Nesse caso, a energia potencial será

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < x < L, \\ \infty, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.20)$$

Esse problema já foi resolvido em [11], onde mostrou-se que as energias do sistema eram dadas por

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2 \gamma^2}{2m \ln^2(1 + \gamma L)}, \quad (4.21)$$

com  $n = 1, 2, 3, \dots$ .

Assim, os níveis de energia da partícula são quantizados e seus valores claramente reais. Além disso, para cada valor de energia, dado pela Eq. (4.21), existe um único autoestado normalizado dado por

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2\gamma}{\ln(1+\gamma L)}} \sin \left[ \frac{k_n}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right], & \text{se } 0 < x < L, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.22)$$

onde

$$k_n = \frac{n\pi\gamma}{\ln(1 + \gamma L)} . \quad (4.23)$$

As autofunções apresentadas na Eq. (4.22) são ortonormais, respeitam a Eq. (4.17), e qualquer função contínua por partes  $f(x)$  definida em  $(0, L)$  pode ser escrita como uma combinação linear delas, ou seja,

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin \left[ \frac{k_n}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right] , \quad (4.24)$$

onde

$$c_n = \frac{2\gamma}{\ln(1 + \gamma L)} \int_0^L \frac{f(x)}{1 + \gamma x} \sin \left[ \frac{k_n}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right] dx . \quad (4.25)$$

A convergência da série definida pela Eq. (4.24), com coeficientes dados pela Eq. (4.25), é garantida pelo Teorema 4 e está ilustrada nas Fig. 4.1 e 4.2 para o caso particular em que  $f(x) = 1$ . Nesse caso, a Eq. (4.24) torna-se

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N(x) , \quad (4.26)$$

onde

$$f_N(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{m=1}^N \frac{1}{2m-1} \sin \left[ \frac{(2m-1)\pi}{\ln(1 + \gamma L)} \ln(1 + \gamma x) \right] \quad (4.27)$$

é a soma parcial dos  $N$  primeiros termos da série.

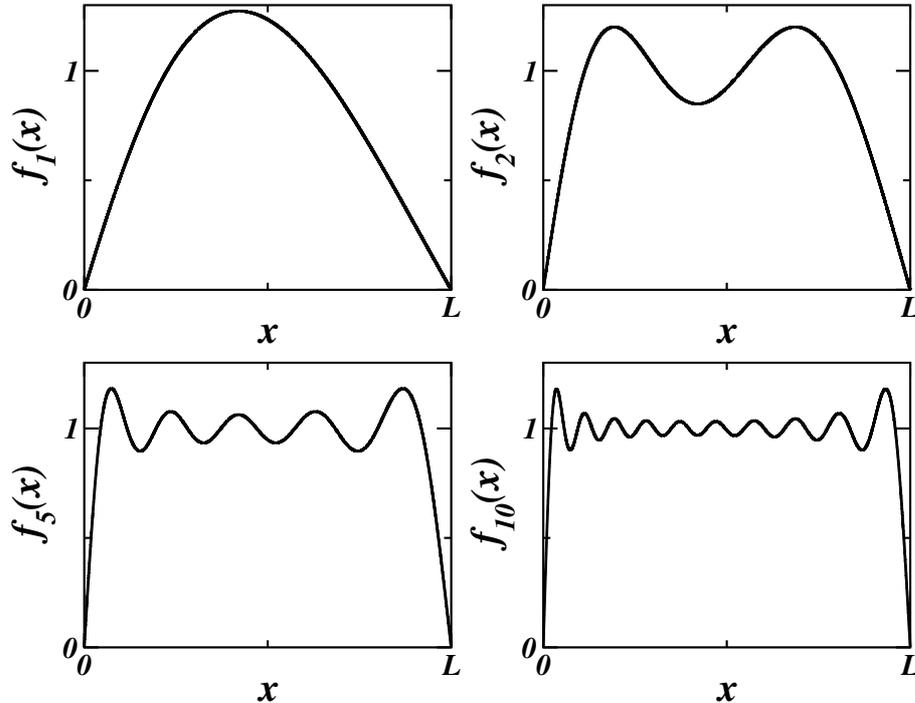


Figura 4.1: Somas parciais da série para  $f(x) = 1$  com  $\gamma = +0.9/L$ .

As Fig. 4.1 e 4.2 indicam qualitativamente que a soma parcial  $f_N(x)$  converge para  $f(x) = 1$

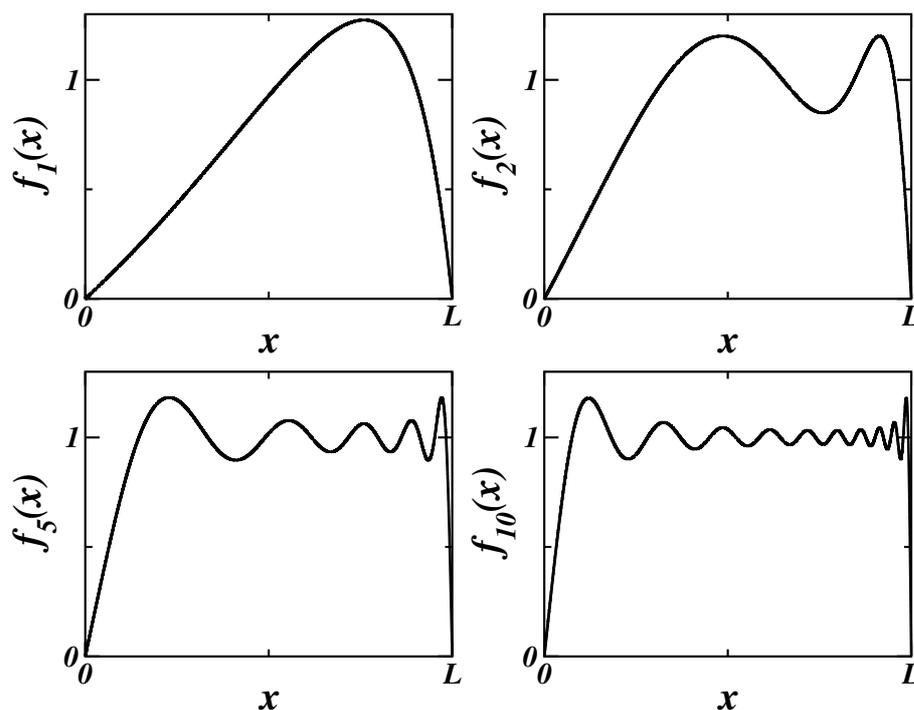


Figura 4.2: Somas parciais da série para  $f(x) = 1$  com  $\gamma = -0.9/L$ .

quando tomamos um número  $N$  grande de termos. Uma medida quantitativa desse fenômeno pode ser obtida calculando o chamado erro quadrático médio da aproximação [18], definido como

$$R(N) = \int_0^L [f(x) - f_N(x)]^2 \frac{dx}{1 + \gamma x}, \quad (4.28)$$

se  $R(N)$  tender a zero conforme  $N$  tende ao infinito, então dizemos que a série para  $f(x)$  converge na média.

A Fig. 4.3 mostra o comportamento de  $R(N)$  para  $\gamma = +0.9/L$  e  $\gamma = -0.9/L$ , onde observamos que a convergência da série obedece uma lei de potências com o mesmo coeficiente  $\alpha = -1.0$  para os dois valores de  $\gamma$ . Podemos concluir que, de fato,  $R(N)$  tende a zero quando  $N$  cresce indefinidamente. Portanto, esse resultado, obtido calculando a integral na Eq. (4.28) numericamente, mostra a convergência na média das séries.

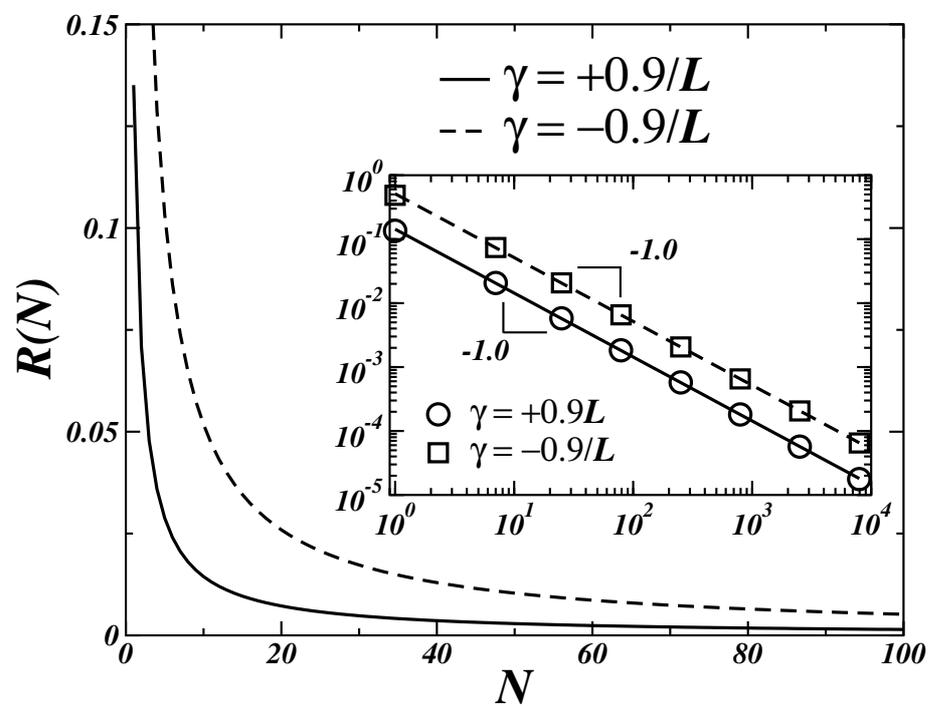


Figura 4.3: Erro quadrático médio da aproximação  $f(x) \approx f_N(x)$ . As linhas contínuas representam o erro para  $\gamma = +0.9/L$  e as linhas tracejadas para  $\gamma = -0.9/L$ . O gráfico auxiliar apresenta o mesmo resultado numa escala logarítmica.

## 5 *Consequências Físicas e Aplicações*

Nesse Capítulo, exploraremos as consequências físicas da MQNA. Em particular mostraremos que a evolução temporal é determinística, no sentido em que, se conhecermos o estado inicial  $|\psi(t_0)\rangle$  do sistema, podemos prever exatamente o estado final  $|\psi(t_f)\rangle$  para todo valor de  $t_f$ . Além disso, veremos que essa evolução temporal é unitária, ou seja, conserva a norma. Em contrapartida, o teorema de Ehrenfest, que na mecânica quântica tradicional mostra que para os valores médios dos operadores observáveis a mecânica quântica recai na mecânica clássica, será generalizado, onde demonstraremos que a MQNA cai na mecânica clássica em um referencial não-inercial para os valores médios das grandezas físicas. Em seguida, exploraremos a possibilidade aberta de mapearmos diversos problemas físicos de natureza distintas através do surgimento de um potencial efetivo oriundo de uma simples mudança de coordenadas. Por fim, mostraremos os efeitos dinâmicos do termo linear da expansão em série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$  e a existência de uma incerteza mínima diferente de zero no *momentum* quando consideramos o termo quadrático da série.

### 5.1 Determinismo na Evolução Temporal

Apesar da mudança no operador momentum, causada pela regra de translação não-aditiva, a Equação de Schrödinger, Eq. (2.35), continua de primeira ordem em  $t$ , linear e homogênea. Isso nos garante o determinismo na evolução dos sistemas físicos, ou seja, dada uma condição inicial  $|\psi(t_0)\rangle$  o estado  $|\psi(t)\rangle$  fica unicamente determinado. De fato, se  $\Psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$  é dado por

$$\Psi(x,t) = U(t,t_0)\Psi(x,t_0) \quad , \quad (5.1)$$

onde  $U(t,t_0)$  é o operador evolução temporal, e se a Hamiltoniana  $H_g$  não depender de  $t$ , então  $U(t,t_0)$  assume a forma

$$U(t,t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} H_g(t-t_0) \right] \quad . \quad (5.2)$$

**Demonstração:**

A demonstração será feita em dois passos. Inicialmente, mostraremos que  $U(t, t_0)$  satisfaz uma equação tipo equação de Schrödinger e, em seguida, mostraremos que a Eq. (5.2) é uma solução dessa equação de Schrödinger. Desse modo, substituindo a Eq. (5.1) na Eq. (2.35) e, considerando que  $V = V(x)$ , obtemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [U(t, t_0)\Psi(x, t_0)] = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} D_g^2 + V(x) \right] [U(t, t_0)\Psi(x, t_0)] . \quad (5.3)$$

Como  $\Psi(x, t_0)$  não depende do tempo  $t$ , a Eq. (5.3) pode ser reescrita como

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) \right] \Psi(x, t_0) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} D_g^2 U(t, t_0) + V(x)U(t, t_0) \right] \Psi(x, t_0) . \quad (5.4)$$

A Eq. (5.4) é válida para toda condição inicial  $\Psi(x, t_0)$ , assim

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= -\frac{\hbar^2}{2m} D_g^2 U(t, t_0) + V(x)U(t, t_0) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= H_g U(t, t_0) , \end{aligned} \quad (5.5)$$

que é a equação de Schrödinger para o operador evolução temporal.

Agora, basta mostrar que a Eq. (5.2) satisfaz a Eq. (5.5). Com esse intuito, expandindo a Eq. (5.2) em série de Taylor, obtemos

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{iH_g(t-t_0)}{\hbar} + \frac{(-i)^2}{2} \left[ \frac{H_g(t-t_0)}{\hbar} \right]^2 + \dots \quad (5.6)$$

Por fim, derivando a Eq. (5.6) com relação a  $t$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} H_g + (-i)^2 \left( \frac{H_g}{\hbar} \right)^2 (t-t_0) + \dots \\ &= -\frac{i}{\hbar} H_g \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H_g (t-t_0) + \dots \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} H_g U(t, t_0) \end{aligned} \quad (5.7)$$

■

Além disso, continua válido o princípio da superposição. Assim, se  $|\psi_1(t)\rangle$  e  $|\psi_2(t)\rangle$  forem soluções da Eq. (2.35), então  $|\psi(t)\rangle = \lambda_1|\psi_1(t)\rangle + \lambda_2|\psi_2(t)\rangle$  também será solução da Eq. (2.35).

## 5.2 Conservação da Probabilidade

Nessa seção mostraremos que, sendo  $H_g$  hermitiano, a norma de um estado físico permanece constante na evolução temporal e deduziremos uma equação da continuidade para a densidade de probabilidade  $\rho(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ .

Assim, calculemos

$$\frac{d}{dt}\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right], \quad (5.8)$$

mas da Eq. (2.33), temos que

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} H_g(t) | \psi(t) \rangle \quad (5.9)$$

e, conseqüentemente,

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H_g^\dagger(t) = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H_g(t) , \quad (5.10)$$

onde o último passo na Eq. (5.10) é válido desde que o potencial  $V(x,t)$  seja real.

Substituindo as Eqs. (5.9) e (5.10) na Eq. (5.8),

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0 . \quad (5.11)$$

Dessa forma, se um estado  $| \psi(t_0) \rangle$  está normalizado, então  $| \psi(t) \rangle$  também estará, ou seja

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1 \Rightarrow \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 . \quad (5.12)$$

Agora, derivando a densidade de probabilidade em relação ao tempo,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) = \Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) + \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x,t) \quad (5.13)$$

e utilizando as Eqs. (2.33) e (2.34),

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^*(x,t) D_g^2 \Psi(x,t) - \Psi(x,t) D_g^2 \Psi^*(x,t)] \quad (5.14)$$

Da Eq. (2.30), é fácil mostrar que

$$D_g [\phi(x) \psi(x)] = \phi(x) D_g [\psi(x)] + \psi(x) D_g [\phi(x)] . \quad (5.15)$$

Assim, podemos concluir das Eqs. (5.14) e (5.15) que

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\hbar}{2mi}D_g[\Psi^*(x,t)D_g\Psi(x,t) - \Psi(x,t)D_g\Psi^*(x,t)] = 0 . \quad (5.16)$$

Se definirmos

$$J(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}[\Psi^*(x,t)D_g\Psi(x,t) - \Psi(x,t)D_g\Psi^*(x,t)] \quad (5.17)$$

como sendo a corrente de probabilidade, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + D_gJ(x,t) = 0 , \quad (5.18)$$

que é a Equação da continuidade para a densidade de probabilidade na mecânica quântica não-aditiva e é a expressão matemática da conservação local da probabilidade.

### 5.3 Teorema de Ehrenfest Generalizado

Seja  $A$  um observável qualquer. Nessa seção, pretendemos estudar como o valor médio de  $A$ ,

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle , \quad (5.19)$$

varia com o tempo no contexto da mecânica quântica não-aditiva. É importante ressaltar que o produto escalar na Eq. (5.19) deve ser calculado conforme a definição dada na Eq. (2.6).

Derivando a Eq. (5.19) em relação ao tempo, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle &= \left[ \frac{d}{dt}\langle \psi(t) | \right] A | \psi(t) \rangle + \\ &\langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \\ &\langle \psi(t) | A \left[ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] . \end{aligned} \quad (5.20)$$

Substituindo as Eqs. (5.9) e (5.10) na Eq. (5.20),

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H_g] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle . \quad (5.21)$$

Agora, aplicaremos a fórmula geral acima para os operadores  $X$  e  $P$ . Dessa forma, como  $X$

não depende explicitamente de  $t$ ,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\langle X \rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle [X, H_g] \rangle \\
 &= \frac{1}{2i\hbar m}\langle [X, P_g^2] \rangle \\
 &= \frac{1}{2i\hbar m}\langle [X, P_g]P_g + P_g[X, P_g] \rangle \\
 \frac{d}{dt}\langle X \rangle &= \frac{1}{2m}\langle \{g(X)^{-1/2}, P_g\} \rangle ,
 \end{aligned} \tag{5.22}$$

onde utilizamos a primeira identidade do Apêndice B, Eq. (B.1), e a Eq. (2.24).

Supondo que  $g(x)^{-1/2}$  possua uma série de Taylor, então

$$g(x)^{-1/2} = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n , \tag{5.23}$$

consequentemente, segue da Eq. (5.22) que

$$\frac{d}{dt}\langle X \rangle = \frac{a_0}{m}\langle P_g \rangle + \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \langle \{X^n, P_g\} \rangle . \tag{5.24}$$

Por outro lado, para  $A = P_g$ , a Eq. (5.21) torna-se

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\langle P_g \rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle [P_g, H_g] \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar}\langle [P_g, V(X)] \rangle \\
 \frac{d}{dt}\langle P_g \rangle &= -\langle D_g[V(X)] \rangle ,
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

onde utilizamos a terceira identidade do Apêndice B, Eq. (B.3).

As Eqs. (5.24) e (5.25) generalizam o teorema de Ehrenfest para a mecânica quântica não-aditiva.

Agora, derivando a Eq. (5.24) em relação ao tempo e utilizando a Eq. (5.25), obtemos

$$\frac{m}{a_0} \frac{d^2}{dt^2}\langle X \rangle = -\langle D_g[V(X)] \rangle + \frac{1}{2a_0} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{d}{dt}\langle \{X^n, P_g\} \rangle . \tag{5.26}$$

A Eq. (5.26) relembra a 2ª lei de Newton em referenciais não-inerciais, onde o primeiro termo do lado direito da Equação representa a força real que atua sobre a partícula, enquanto que segundo termo, do mesmo lado da Equação, faria o papel da força de inércia, cuja origem é a métrica não-euclidiana do espaço. Assim, para os valores médios das grandezas físicas, a Mecânica Quântica não-aditiva cai na Mecânica Clássica em um Referencial não-inercial.

No caso particular em que  $a_0 = 1$ ,  $a_1 = \gamma$  e  $a_{n \geq 2} = 0$ , as Eqs. (5.24) e (5.25) tornam-se, respectivamente,

$$\frac{d}{dt}\langle X \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} + \frac{\gamma}{m}\langle XP \rangle + \frac{\gamma}{2m}\langle \{X, P\} \rangle + \frac{\gamma^2}{2m}\langle \{X, XP\} \rangle . \quad (5.27)$$

e

$$\frac{d}{dt}\langle P \rangle = -\left\langle \frac{d}{dx}[V(X)] \right\rangle - \gamma \langle X \frac{d}{dx}[V(X)] \rangle - \gamma \frac{d}{dt}\langle XP \rangle , \quad (5.28)$$

onde  $P$  é o operador *momentum* no espaço euclídeano e, portanto,

$$P_g = g(X)^{-1/2}P = (1 + \gamma X)P , \quad (5.29)$$

nesse caso particular.

Dessa forma, fica mais fácil ver que quando fazemos  $\gamma = 0$  nas Eqs. (5.27) e (5.28) recuperaremos o teorema de Ehrenfest tradicional, cuja forma recorda as equações clássicas de movimento de Hamilton-Jacobi.

Por fim, derivando a Eq. (5.27) em relação ao tempo e utilizando a Eq. (5.28), obtemos

$$m \frac{d^2}{dt^2}\langle X \rangle = -\left\langle \frac{d}{dx}[V(X)] \right\rangle - \gamma \langle X \frac{d}{dx}[V(X)] \rangle + \frac{\gamma}{2} \frac{d}{dt}\langle \{X, P\} \rangle + \frac{\gamma^2}{2} \frac{d}{dt}\langle \{X, XP\} \rangle , \quad (5.30)$$

cuja forma claramente nos lembra a segunda lei de Newton quando  $\gamma = 0$ .

Na próxima sub-seção, utilizaremos os formalismos lagrangiano e hamiltoniano para obter as equações clássicas correspondentes às Eqs. (5.27), (5.28) e (5.30).

### 5.3.1 Mecânica Clássica em um Espaço Deformado

Nessa sub-seção, vamos obter as equações de movimento para uma partícula clássica em um espaço unidimensional deformado com a seguinte métrica

$$ds^2 = \frac{1}{(1 + \gamma x)^2} dx^2 . \quad (5.31)$$

Nesse caso, a Lagrangiana do sistema será

$$L \equiv T - V = \frac{1}{2}mv^2 - V(x) , \quad (5.32)$$

onde a velocidade  $v$  é dada por

$$v \equiv \frac{ds}{dt} = \frac{\dot{x}}{1 + \gamma x} . \quad (5.33)$$

Substituindo a Eq. (5.33) na Eq. (5.32), obtemos que

$$L = \frac{1}{2} \frac{m\dot{x}^2}{(1 + \gamma x)^2} - V(x) . \quad (5.34)$$

Conforme é demonstrado em [14] partindo da segunda lei de Newton, as equações de Lagrange mantêm sua forma em um espaço deformado, ou seja,

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = 0 . \quad (5.35)$$

Portanto, substituindo a Eq. (5.34) na Eq. (5.35), chegamos a equação de movimento para a partícula no formalismo lagrangiano

$$\frac{m\ddot{x}}{(1 + \gamma x)^2} - \frac{m\gamma\dot{x}^2}{(1 + \gamma x)^3} = -\frac{dV}{dx} . \quad (5.36)$$

O momento  $p$  da partícula é definido como

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{m\dot{x}}{(1 + \gamma x)^2} . \quad (5.37)$$

Observe que, mesmo quando o potencial  $V(x)$  é identicamente nulo, o momento  $p$  não se conserva. Isso já era esperado, pois o espaço não possui simetria por translação em  $x$ .

Podemos, ainda, obter a Hamiltoniana do sistema via transformada de Legendre da Lagrangiana, como segue

$$H = H(x, p) \equiv p\dot{x} - L(x, \dot{x}) \quad (5.38)$$

$$H = \frac{(1 + \gamma x)^2}{2m} p^2 + V(x) . \quad (5.39)$$

Diferenciando a Eq. (5.38), obtemos

$$dH = p d\dot{x} + \dot{x} dp - \frac{\partial L}{\partial x} dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} d\dot{x} , \quad (5.40)$$

que, utilizando as Eqs. (5.35) e (5.37), se reduz a

$$dH = \dot{x} dp - p dx . \quad (5.41)$$

Por outro lado, temos que

$$dH = \frac{\partial H}{\partial x} dx + \frac{\partial H}{\partial p} dp . \quad (5.42)$$

Assim, comparando as Eqs. (5.41) e (5.42), concluímos que

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (5.43)$$

e

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} , \quad (5.44)$$

que são as equações canônicas de Hamilton.

Das Eqs. (5.39), (5.43) e (5.44), obtemos as equações de movimento para a partícula na formulação de Hamilton

$$\dot{x} = \frac{(1 + \gamma x)^2}{m} p \quad (5.45)$$

e

$$\dot{p} = -\frac{(1 + \gamma x)\gamma p^2}{m} - \frac{d}{dx}V(x) . \quad (5.46)$$

As Eqs. (5.45) e (5.46), que são equivalentes a Eq. (5.36) obtida na formulação Lagrangiana, podem ser reescritas, respectivamente, como

$$\dot{x} = \frac{p}{m} + \frac{\gamma}{m}xp + \frac{\gamma}{2m}(xp + px) + \frac{\gamma^2}{2m}(xxp + xpx) \quad (5.47)$$

e

$$\dot{p} = -\gamma \frac{d}{dt}(xp) - \frac{d}{dx}V(x) - \gamma x \frac{d}{dx}V(x) . \quad (5.48)$$

Agora, podemos ver que as Eqs. (5.47) e (5.48) são as equivalentes clássicas das Eqs. (5.27) e (5.28).

Para finalizar, podemos derivar a Eq. (2.78) em relação ao tempo para obter

$$m\ddot{x} = \dot{p} + \gamma \frac{d}{dt}(xp) + \frac{\gamma}{2} \frac{d}{dt}(xp + px) + \frac{\gamma^2}{2} \frac{d}{dt}(xxp + xpx) . \quad (5.49)$$

Utilizando a Eq. (5.48) a Eq. (5.49) torna-se

$$m\ddot{x} = -\frac{d}{dx}V(x) - \gamma x \frac{d}{dx}V(x) + \frac{\gamma}{2} \frac{d}{dt}(xp + px) + \frac{\gamma^2}{2} \frac{d}{dt}(xxp + xpx). \quad (5.50)$$

A Eq. (5.50) é a equivalente clássica da Eq. (5.30) e é a expressão para segunda lei de Newton nesse espaço deformado.

### 5.3.2 Mudanças de Coordenadas

Através de uma simples mudança de coordenada o problema anterior pode ser incrivelmente simplificado. Assim, seja<sup>1</sup>

$$\eta = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) . \quad (5.51)$$

Segue das Eqs. (5.31) e (5.51) que

$$ds^2 = d\eta^2 . \quad (5.52)$$

Desse modo, a Lagrangiana apresentada na Eq. (5.34) pode ser reescrita em termos de  $\eta$  e  $\dot{\eta}$  como segue

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\eta}^2 - V(\eta) . \quad (5.53)$$

Agora, a equação de movimento para a partícula será

$$\frac{\partial L}{\partial \eta} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}} \right) = 0 \quad (5.54)$$

$$m \ddot{\eta} = - \frac{d}{d\eta} V(\eta) . \quad (5.55)$$

O momento  $p_g$  da partícula é definido como

$$p_g \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}} = m \dot{\eta} . \quad (5.56)$$

Utilizando as Eqs. (5.37) e (5.51), o momento  $p_g$  pode ser escrito em termos de  $x$  e  $p$ ,

$$p_g = (1 + \gamma x) p . \quad (5.57)$$

Observe que, agora, quando o potencial  $V(\eta)$  é identicamente nulo, o momento  $p_g$ , canonicamente conjugado a  $\eta$ , se conserva, diferente do que ocorria com o momento  $p$ .

Novamente, através da transformada de Legendre da Lagrangiana podemos obter a Hamiltoniana do sistema

$$H = H(\eta, p_g) \equiv p_g \dot{\eta} - L(\eta, \dot{\eta}) \quad (5.58)$$

$$H = \frac{p_g^2}{2m} + V(\eta) . \quad (5.59)$$

De maneira análoga ao que foi feito anteriormente, podemos obter as equações canônicas

---

<sup>1</sup>A variável  $\eta$  é o comprimento de arco no espaço deformado com a métrica dada pela Eq.(5.31).

de Hamilton nas variáveis  $\eta$  e  $p_g$

$$\dot{\eta} = \frac{\partial H}{\partial p_g} \quad (5.60)$$

e

$$\dot{p}_g = -\frac{\partial H}{\partial \eta} . \quad (5.61)$$

É importante ressaltar que nas variáveis  $\eta$  e  $p_g$  as equações de Hamilton mantêm sua forma canônica. Isso já era esperado, porque a mudança de coordenadas

$$\begin{cases} \eta &= \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \\ p_g &= (1 + \gamma x)p \end{cases} \quad (5.62)$$

é canônica, pois

$$\{\eta, p_g\} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \eta \frac{\partial}{\partial p} p_g - \frac{\partial}{\partial p} \eta \frac{\partial}{\partial x} p_g = 1 . \quad (5.63)$$

Das Eqs. (5.59), (5.60) e (5.61), obtemos as equações de movimento para a partícula na formulação de Hamilton

$$\dot{\eta} = \frac{p_g}{m} \quad (5.64)$$

e

$$\dot{p}_g = -\frac{\partial}{\partial \eta} V(\eta) . \quad (5.65)$$

Podemos, ainda, estudar como ficam as Eqs. (5.43) e (5.44), quando realizamos a seguinte transformação de coordenadas

$$\begin{cases} x &= x \\ p_g &= (1 + \gamma x)p . \end{cases} \quad (5.66)$$

Essa transformação de coordenadas, por sua vez, não é canônica e, portanto, não preserva a forma das Equações de Hamilton. De fato,

$$\{x, p_g\} \equiv \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial p} p_g - \frac{\partial}{\partial p} x \frac{\partial}{\partial x} p_g = 1 + \gamma x \neq 1 . \quad (5.67)$$

Nesse caso, a Hamiltoniana, Eq. (5.39), torna-se

$$H = \frac{p_g^2}{2m} + V(x) \quad (5.68)$$

e as Eqs. de Hamilton serão dadas por

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_g} + \gamma x \frac{\partial H}{\partial p_g} \quad (5.69)$$

e

$$\dot{p}_g = -\frac{\partial H}{\partial x} + \gamma p_g \frac{\partial H}{\partial p_g} - \gamma x \frac{\partial H}{\partial x} . \quad (5.70)$$

Substituindo a Eq. (5.68) na Eq. (5.69), obtemos

$$\dot{x} = (1 + \gamma x) \frac{p_g}{m} = \frac{p_g}{m} + \frac{\gamma}{2m} (xp_g + p_g x) . \quad (5.71)$$

Por outro lado, das Eqs. (5.66), (5.68) e (5.70), temos que

$$\dot{p}_g = -(1 + \gamma x) \frac{d}{dx} V(x) . \quad (5.72)$$

Por fim, derivando a Eq. (5.71) em relação ao tempo e utilizando a Eq. (5.72), concluímos

$$m\ddot{x} = -(1 + \gamma x) \frac{d}{dx} V(x) + \frac{\gamma}{2m} \frac{d}{dt} (xp_g + p_g x) . \quad (5.73)$$

Trabalhando com as equações (5.24), (5.25) e (5.26), é também possível obter as equações quânticas correspondentes às equações (5.64), (5.65), (5.71), (5.72) e (5.73).

## 5.4 Potenciais Efetivos

Anteriormente, vimos que a escolha da métrica

$$ds^2 = g(x) dx^2 \quad (5.74)$$

nos conduz a seguinte Eq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} D_g^2 \Psi(x,t) + V(x,t) \Psi(x,t), \quad (5.75)$$

onde  $D_g \equiv g(x)^{-1/2} d/dx$ .

Inspirados pela Eq. (5.51), se realizarmos a seguinte mudança de coordenadas

$$\eta(x) \equiv \int \sqrt{g(x)} dx , \quad (5.76)$$

a Eq. (5.75) se reduz a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\eta,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\eta^2} \Psi(\eta,t) + V_{eff}(\eta,t) \Psi(\eta,t) . \quad (5.77)$$

que é formalmente idêntica a equação de Schrödinger dependente do tempo para o espaço euclidiano. Assim, uma partícula sujeita a um potencial  $V(x,t)$  no espaço riemanniano com

métrica dada pela Eq. (5.74) se comporta como uma partícula sujeita a um potencial  $V_{eff}(\eta, t)$  no espaço euclidiano. Isso nos permite realizar uma série de mapeamentos entre diversos problemas físicos, como foi feito em [15] no caso particular em que  $g(x)^{-1/2} = 1 + \gamma x$  e  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , onde foi mostrado a existência de uma conexão entre o potencial de Morse[16] e o potencial harmônico.

Nessa seção, mostraremos qual é o potencial efetivo  $V_{eff}(\eta)$  gerado a partir do potencial parabólico  $V(x) = x^2$  em espaços com métricas diversas.

1. Se  $g(x) = a^2 = \text{constante}$ , então segue da Eq. (5.76) que

$$\eta(x) = ax \quad \Rightarrow \quad x = \frac{\eta}{a} , \quad (5.78)$$

assim se  $V(x) = x^2$ , teremos que

$$V_{eff}(\eta) = \frac{\eta^2}{a^2} , \quad (5.79)$$

ou seja, em  $\eta$ , o potencial continua parabólico, mas a concavidade do potencial é reescalada.

2. Se  $g(x) = 4x^2$ , então segue da Eq. (5.76) que

$$\eta(x) = x^2 , \quad (5.80)$$

assim se  $V(x) = x^2$ , teremos que

$$V_{eff}(\eta) = \eta , \quad (5.81)$$

ou seja, um oscilador em um espaço com métrica  $ds^2 = 4x^2 dx^2$  se comporta como uma partícula livre na presença de um campo elétrico constante em um espaço com métrica  $ds^2 = d\eta^2$ .

3. Se  $g(x) = 4/x^6$ , então segue da Eq. (5.76) que

$$\eta(x) = -\frac{1}{x^2} , \quad (5.82)$$

assim se  $V(x) = x^2$ , teremos que

$$V_{eff}(\eta) = -\frac{1}{\eta} , \quad (5.83)$$

ou seja, um potencial parabólico em um espaço com métrica  $g(x) = 4/x^6$  é equivalente a um potencial Coulombiano em um espaço com métrica  $ds^2 = d\eta^2$ .

Esses resultados, somado ao resultado já conhecido do potencial de Morse[15], estão resumidos na tabela abaixo.

$V(x)$	$V_{eff}(\eta)$	$g(x)$
$x^2$	$\eta^2/a^2$	$a^2$
$x^2$	$\eta$	$4x^2$
$x^2$	$-1/\eta$	$4/x^6$
$x^2$	$(e^{\gamma\eta} - 1)^2/\gamma^2$	$1/(1 + \gamma x)^2$

Tabela 5.1: Potenciais efetivos  $V_{eff}(\eta)$  gerado a partir do potencial parabólico  $V(x) = x^2$  em espaços com métricas diversas.

## 5.5 Dinâmica em um Espaço Deformado

Nessa seção, analisaremos os efeitos dinâmicos do termo linear na expansão em série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$  na evolução temporal de uma partícula de massa  $m$ .

Classicamente, resolvemos esse problema encontrando a solução da Eq. (5.36) que, para  $V(x) = 0$ , é dada por

$$x = \frac{1 + \gamma x_0}{\gamma} \exp\left(\frac{\gamma v_0}{1 + \gamma x_0} t\right) - \frac{1}{\gamma}, \quad (5.84)$$

onde  $x_0 = x(t = 0)$  e  $v_0 = \dot{x}(t = 0)$ .

Para  $\gamma$  muito pequeno, segue da Eq. (5.84) que

$$x \approx x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} \frac{\gamma v_0^2}{1 + \gamma x_0} t^2, \quad (5.85)$$

ou seja, para pequenos valores de  $\gamma$ , o movimento da partícula é uniformemente acelerado, assim, nesse caso particular, a partícula livre sente uma força de origem puramente geométrica dada por

$$F = \frac{m\gamma v_0^2}{1 + \gamma x_0}. \quad (5.86)$$

Observe que para  $\gamma = 0$ , a Eq. (5.85) torna-se

$$x = x_0 + v_0 t. \quad (5.87)$$

Assim, recuperamos o resultado já esperado no espaço euclidiano. A saber, uma partícula livre em um referencial inercial se move em movimento retilíneo uniforme.

Na Figura 5.1, plotamos<sup>2</sup> a Eq. (5.84) para  $\gamma = 0,9/L$ ,  $\gamma = 0,0/L$  e  $\gamma = -0,9/L$  (curvas tracejada, contínua e pontilhada, respectivamente), onde consideramos  $L = 100a_0$ ,  $x_0 = 50a_0$  e  $v_0 = 10a_0/\tau_0$ .

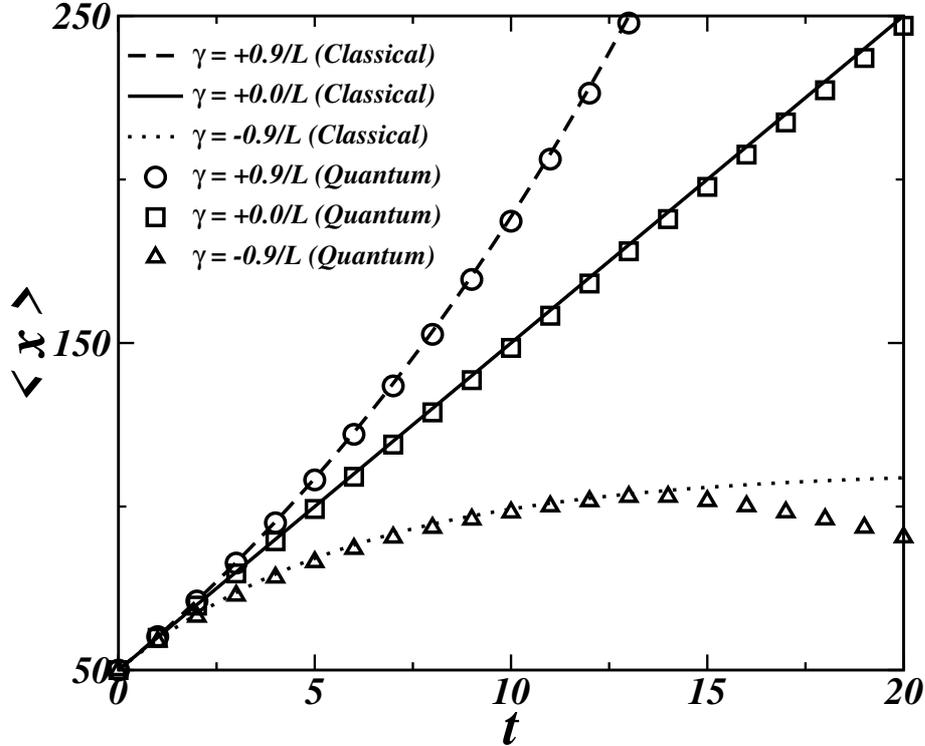


Figura 5.1: Valor médio de  $X$  para a partícula livre considerando até o termo linear da expansão em série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$ .

Para realizarmos a mesma análise do ponto de vista quântico, adaptamos a técnica *Split Operator* (os detalhes da técnica encontram-se no apêndice A) para resolver numericamente a Eq. (2.35), onde consideramos que

$$g(x)^{-1/2} = 1 + \gamma x . \quad (5.88)$$

Investigamos a evolução temporal de um pacote de ondas inicialmente gaussiano dado por

$$\Psi(x, 0) = A \exp(ik_0\eta) \exp \left[ - \left( \frac{\eta - \eta_0}{\sigma} \right)^2 \right] , \quad (5.89)$$

onde  $\eta = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x)$ ,  $\eta_0 = \eta(t = 0) = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x_0)$ ,  $\sigma = 2a_0$ ,  $k_0 = \frac{m}{\hbar} \frac{v_0}{1 + \gamma x_0}$  e  $A$  é uma constante de normalização.

Na Figura 5.1, apresentamos o resultado para  $\langle X \rangle$  em função do tempo dessa simulação para

<sup>2</sup>Todos os resultados apresentados estão no sistema atômico de unidades [17], onde a unidade de comprimento é o raio de Bohr  $a_0 \cong 5.29 \times 10^{-11}m$  e a unidade de tempo é  $\tau_0 \cong 2.42 \times 10^{-17}s$ .

$\gamma = 0,9/L$ ,  $\gamma = 0,0/L$  e  $\gamma = -0,9/L$  (círculos, quadrados e triângulos, respectivamente), onde, novamente consideramos  $L = 100a_0$ ,  $x_0 = 50a_0$  e  $v_0 = 10a_0/\tau_0$ . Dessa figura, podemos ver que para valores positivos de  $\gamma$  a partícula sofre uma aceleração positiva. Por outro lado, para valores negativos de  $\gamma$ , a partícula é desacelerada. Observe que as curvas clássicas e quânticas se sobrepõe quase perfeitamente. O pequeno desacordo entre as curvas para  $\gamma = -0,9/L$  ocorre devido a imposição de condições de contorno finitas na simulação quântica.

## 5.6 Incerteza Mínima no Momentum

Na mecânica quântica em um espaço euclideo, o princípio da incerteza de Heisenberg afirma que a incerteza no *momentum* pode se tornar arbitrariamente pequena, contanto que a incerteza na posição tenda a infinito e vice-versa. Nessa seção, mostraremos que quando levamos em consideração o segundo termo da série de  $g(x)^{-1/2}$ , Eq. (5.23), obtemos uma incerteza mínima no *momentum* diferente de zero.

Assim, sejam  $A$  e  $B$  dois observáveis quaisquer, então para qualquer estado  $|\psi\rangle$  é válida a seguinte desigualdade [5]

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| , \quad (5.90)$$

onde

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (5.91)$$

é o desvio padrão de  $A$  e

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle . \quad (5.92)$$

Por outro lado, conforme mostramos no Capítulo 2, a escolha da métrica

$$ds^2 = \frac{1}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2} dx^2 , \quad (5.93)$$

onde  $\gamma^2 < 4\beta^2$  para que a métrica seja finita, nos conduz a seguinte redefinição do operador translação

$$T_g(dx)|x\rangle \equiv |x + (1 + \gamma x + \beta^2 x^2)dx\rangle . \quad (5.94)$$

Uma das consequências da Eq. (5.88) é a seguinte relação de comutação entre  $X$  e  $P_g$

$$[X, P_g] = i\hbar(1 + \gamma X + \beta^2 X^2) . \quad (5.95)$$

Das Eqs. (5.85), (5.86) e (5.90), obtemos

$$\Delta X \Delta P_g \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \gamma \langle X \rangle + \beta^2 \langle X \rangle^2 + \beta^2 (\Delta X)^2] . \quad (5.96)$$

Considerando a igualdade na Eq. (5.91),

$$\Delta P_g = \frac{\hbar}{2} (1 + \gamma \langle X \rangle + \beta^2 \langle X \rangle^2) \frac{1}{\Delta X} + \frac{\hbar \beta^2}{2} \Delta X . \quad (5.97)$$

Derivando a Eq. (5.92) em relação a  $\Delta X$ ,

$$\frac{d\Delta P_g}{d(\Delta X)} = \frac{\hbar \beta^2}{2} - \frac{\hbar}{2} (1 + \gamma \langle X \rangle + \beta^2 \langle X \rangle^2) \frac{1}{(\Delta X)^2} . \quad (5.98)$$

Impondo que  $\frac{d\Delta P_g}{d(\Delta X)} = 0$ , obtemos o valor de  $\Delta X$  que minimiza  $\Delta P_g$ ,

$$\Delta X_0 = \frac{1}{\beta} \sqrt{1 + \gamma \langle X \rangle + \beta^2 \langle X \rangle^2} . \quad (5.99)$$

Assim, das Eqs. (5.92) e (5.94), concluimos que

$$\Delta P_{g_{min}} = \Delta P_g(\Delta X_0) = \hbar \beta \sqrt{1 + \gamma \langle X \rangle + \beta^2 \langle X \rangle^2} . \quad (5.100)$$

Como  $\gamma < 4\beta^2$ , podemos concluir da Eq. (5.95) que, para  $\beta \neq 0$ ,  $\Delta P_{g_{min}}$  é sempre real e maior que zero. A Figura 5.5 ilustra isso para o caso particular em que  $\langle X \rangle = 0$ , onde a região hachurada representa os estados que seriam permitidos no espaço euclidiano, mas que são proibidos no espaço riemanniano.

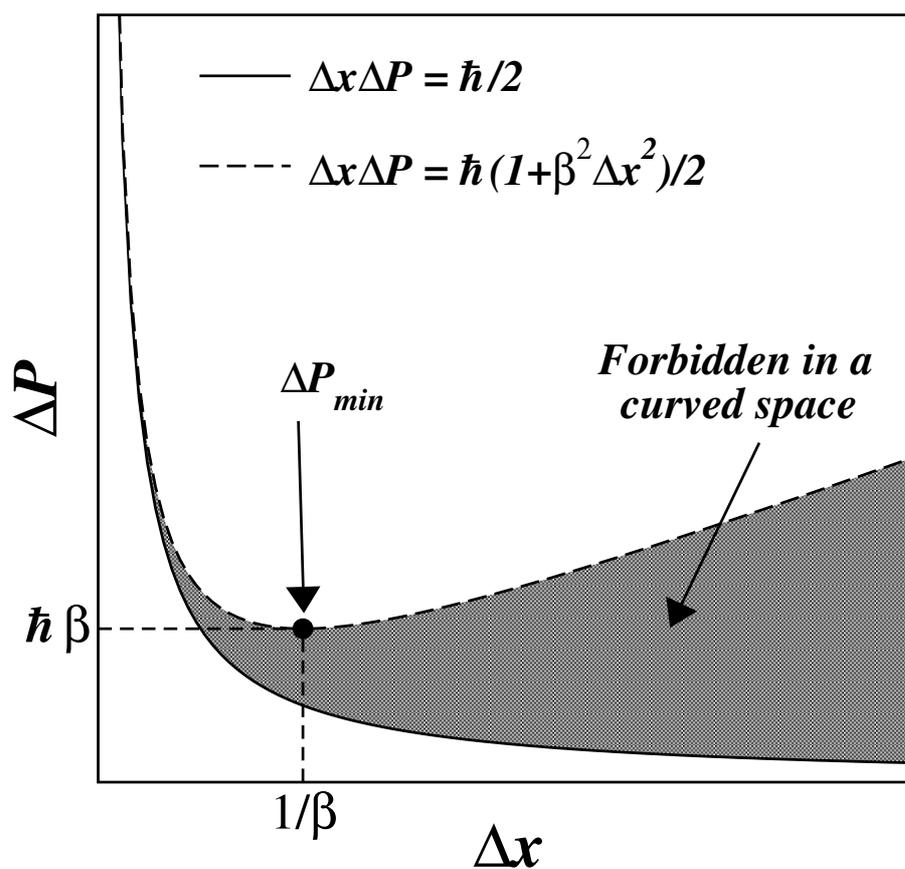


Figura 5.2: Incerteza Mínima no *Momentum* quando levamos em consideração o segundo termo da série de  $g(x)^{-1/2}$ . A região sombreada representa os estados proibidos para a métrica considerada aqui.

## 6 *Conclusões e Perspectivas*

Nesse trabalho, apresentamos a mecânica quântica não-aditiva, uma teoria desenvolvida a partir de primeiros princípios com o objetivo de entender quais são os efeitos da métrica do espaço na teoria quântica.

Nos Capítulos 2 e 3, desenvolvemos detalhadamente o formalismo matemático da teoria. Inicialmente, com o intuito de adaptar a teoria quântica para o espaço de Riemann, tivemos que redefinir o produto escalar entre funções de onda. Desse modo, o espaço das funções de onda passou a ser um espaço de Hilbert com um peso. Como consequências disso, as relações de completude e ortonormalização dos autoestados do operador posição foram modificadas. Além disso, redefinimos a atuação do operador translação sobre o estado de uma partícula bem localizada em torno de certa região do espaço. Essa última modificação tornou os deslocamentos espaciais não-aditivos e deu origem a uma nova relação de comutação entre os operadores posição e *momentum* que, em um caso particular, torna-se a relação de comutação da teoria EUP (*extended uncertainty principle*). Essa é a primeira vez que tal relação surge a partir de primeiros princípios. Ademais, uma nova equação tipo equação de Schrödinger foi obtida para a evolução temporal do estado da partícula.

No Capítulo 4, estudamos as propriedades da equação de Schrödinger independente do tempo obtida na MQNA em uma dimensão dentro do contexto da teoria de Sturm-Liouville, onde mostramos que os autovalores da hamiltoniana são reais, os autoestados são ortonormais e formam uma base no espaço dos estados. Como uma aplicação, investigamos a convergência da série de Fourier formada pelos autoestados do poço de potencial infinito, onde observamos que a série converge na média respeitando uma lei de potências com coeficiente  $\alpha = -1$ .

No Capítulo 5, exploramos as consequências físicas da MQNA e realizamos algumas aplicações da teoria. Mostramos que, apesar das modificações na teoria quântica tradicional, continuam válidos o determinismo na evolução temporal (obtendo a forma do operador evolução temporal), o princípio da superposição (consequência da linearidade da nova equação de Schrödinger) e a conservação local e global da probabilidade (calculando uma equação da continuidade para

a densidade de probabilidade e demonstrando que a evolução temporal é unitária, respectivamente). Por outro lado, generalizamos o teorema de Ehrenfest, garantindo que a MQNA se reduz à mecânica clássica em um referencial não-inercial para os valores médios das grandezas físicas. Na sequência, exploramos a possibilidade de mapearmos diversos problemas físicos de naturezas distintas, onde mostramos que potenciais físicos bem conhecidos como, por exemplo, o que descreve uma partícula em um campo elétrico constante, ou um potencial coulombiano, podem ser vistos como osciladores harmônicos em espaços com métricas não-euclidianas. Além disso, mostramos, tanto classicamente como quanticamente, os efeitos dinâmicos do termo linear da expansão em série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$  sobre a trajetória de uma partícula livre, onde verificamos a existência de uma força de origem puramente geométrica agindo sobre a partícula. Finalmente, demonstramos que quando consideramos o termo quadrático da série de Taylor de  $g(x)^{-1/2}$ , existe uma incerteza mínima diferente de zero no *momentum*.

Como perspectivas para trabalhos futuros, pretendemos obter a relação de comutação da teoria GUP (*generalized uncertainty principle*) a partir de primeiros princípios, desenvolvendo uma teoria análoga a MQNA no espaço recíproco dos *momenta* e investigar os efeitos do termo quadrático da expansão de  $g(x)^{-1/2}$  na dinâmica de uma partícula. Além disso, com o intuito de ter uma nova forma de ver a teoria, tentaremos obter os mesmos resultados da MQNA a partir de uma abordagem via integrais de caminho.

## APÊNDICE A – Técnica Split Operator

A técnica *split operator* é um método numérico de solução da equação de Schrödinger e vem sendo utilizada com sucesso em várias áreas da física. Ela consiste, basicamente, na implementação do operador evolução temporal utilizando formas aproximadas para a exponencial da soma de operadores que não comutam (no caso, o operador energia cinética e o operador energia potencial). Foi inicialmente idealizada por M. D. Feit, J. A. Fleck e A. Steiger [19] e aplicada, por exemplo, no estudo dos níveis de energia de moléculas triatômicas [20] e no estudo do caos quântico [21]. Na sua forma original, a técnica utilizava transformada de Fourier para calcular o resultado da aplicação do operador  $\exp\left[\frac{i\Delta t}{4m}\nabla^2\right]$ , fato este que impõe condições de contorno periódicas sobre o sistema. Para evitar isso, M. H. Degani modificou o método utilizando a fórmula aproximada  $\exp[\varepsilon\hat{A}] \cong \left[1 - \frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right]^{-1} \left[1 + \frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right]$  ao invés da transformada de Fourier, permitindo, assim, a aplicação do método a sistemas em que a invariância translacional é quebrada [22]. Essa forma da técnica vem sendo utilizada com sucesso no estudo das propriedades de estruturas semicondutoras em diversos trabalhos [22, 23, 24, 25, 26]. Uma adaptação da técnica para se estudar problemas descritos em coordenadas esféricas com simetria axial foi feita por M.R. Hermann e J.A. Fleck [27]. Outra adaptação mais recente foi realizada por Andrey Chaves. Ele estendeu a técnica para sistemas que envolvem spin e a aplicou no estudo de grafenos [28]. Por fim, essa técnica foi ampliada pelo autor desse trabalho para qualquer sistema de coordenadas [29], permitindo sua aplicação em problemas de partículas confinadas em curvas ou superfícies. Nesse apêndice, adaptaremos a técnica *split operator* para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo obtida no Capítulo 2 dessa Tese, Eq. (2.35), no caso particular em que  $g(x)^{-1/2} = 1 + \gamma x$ .

Conforme demonstramos no Capítulo 5, o operador evolução temporal  $U(t, t_0)$  é dado por

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_g(t - t_0)\right] . \quad (\text{A.1})$$

Assim, para  $g(x)^{-1/2} = 1 + \gamma x$ , temos que

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \exp \left[ \Delta t \left( \frac{-i}{2m\hbar} P_\gamma^2 - \frac{i}{\hbar} V(x) \right) \right] \Psi(x, t) , \quad (\text{A.2})$$

onde, no espaço das posições,

$$P_\gamma = -i\hbar(1 + \gamma x) \frac{d}{dx} . \quad (\text{A.3})$$

A Eq.(A.2) pode ser reescrita como

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \exp[\varepsilon (A_1 + A_2)] \Psi(x, t) , \quad (\text{A.4})$$

onde  $\varepsilon = \Delta t$ ,  $A_1 = \frac{-i}{2m\hbar} P_\gamma^2$  e  $A_2 = -\frac{i}{\hbar} V(x)$ , e portanto,

$$[A_1, A_2] \neq 0 .$$

Para resolver a Eq. (A.4) é preciso saber como calcular a exponencial da soma de dois operadores que não comutam. Uma solução para esse problema foi dada por Masuo Suzuki em [30], onde o autor apresenta uma forma aproximada para o cálculo da exponencial de uma combinação linear de operadores. Em particular, é mostrado que

$$\exp[\varepsilon (A_1 + A_2)] = \exp \left[ \frac{\varepsilon}{2} A_2 \right] \exp[\varepsilon A_1] \exp \left[ \frac{\varepsilon}{2} A_2 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) , \quad (\text{A.5})$$

onde o erro da ordem de  $\varepsilon^3$  é devido a não comutatividade dos operadores  $A_1$  e  $A_2$ .

Dessa forma, para  $\Delta t$  muito pequeno, a Eq. (A.2) torna-se

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(x) \right] \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2m\hbar} P_\gamma^2 \right] \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(x) \right] \Psi(x, t) . \quad (\text{A.6})$$

Calcularemos  $\Psi(x, t + \Delta t)$  em três passos, cada um correspondendo à aplicação de um dos operadores exponenciais na Eq. (A.6):

i) Calcularemos  $\xi(x, t + \Delta t)$ , resultado da aplicação do primeiro operador exponencial, ou seja,

$$\xi(x, t + \Delta t) = \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(x) \right] \Psi(x, t) . \quad (\text{A.7})$$

A aplicação do operador exponencial acima não passa de uma simples multiplicação. Assim, substituindo a Eq. (A.7) na Eq. (A.6), obtemos

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(x) \right] \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2m\hbar} P_\gamma^2 \right] \xi(x, t + \Delta t) . \quad (\text{A.8})$$

ii) Calcularemos, agora,  $\eta(x, t + \Delta t)$ , resultado da aplicação do segundo operador exponencial, isto é,

$$\eta(x, t + \Delta t) = \exp \left[ \frac{-i\Delta t}{2m\hbar} P_\gamma^2 \right] \xi(x, t + \Delta t). \quad (\text{A.9})$$

Para isso, utilizaremos a seguinte fórmula aproximada

$$\exp(\varepsilon A) = \left[ \mathbb{1} - \frac{\varepsilon A}{2} \right]^{-1} \left[ \mathbb{1} + \frac{\varepsilon A}{2} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^4), \quad (\text{A.10})$$

cuja demonstração pode ser encontrada em [29].

Assim, utilizando a Eq. (A.10) e supondo que  $\Delta t$  é muito pequeno, a Eq. (A.9) torna-se

$$\eta(x, t + \Delta t) = \left[ \mathbb{1} + \frac{i\Delta t}{4m\hbar} P_\gamma^2 \right]^{-1} \left[ \mathbb{1} - \frac{i\Delta t}{4m\hbar} P_\gamma^2 \right]. \quad (\text{A.11})$$

Aplicando o operador  $\left[ \mathbb{1} + \frac{i\Delta t}{4m\hbar} P_\gamma^2 \right]$  pela esquerda dos dois lados da Eq. (A.11), segue que

$$\left[ \mathbb{1} + \frac{i\Delta t}{4m\hbar} P_\gamma^2 \right] \eta(x, t + \Delta t) = \left[ \mathbb{1} - \frac{i\Delta t}{4m\hbar} P_\gamma^2 \right] \xi(x, t + \Delta t). \quad (\text{A.12})$$

Por outro lado, temos da Eq. (A.3) que no espaço das posições

$$P_\gamma^2 = -\hbar^2 \left[ (1 + \gamma x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \gamma(1 + \gamma x) \frac{\partial}{\partial x} \right]. \quad (\text{A.13})$$

Substituindo a Eq. (A.13) na Eq. (A.12),

$$\begin{aligned} \eta(x, t + \Delta t) - \kappa(1 + \gamma x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \eta(x, t + \Delta t) - \kappa\gamma(1 + \gamma x) \frac{\partial}{\partial x} \eta(x, t + \Delta t) = \\ \xi(x, t + \Delta t) + \kappa(1 + \gamma x)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \xi(x, t + \Delta t) + \kappa\gamma(1 + \gamma x) \frac{\partial}{\partial x} \xi(x, t + \Delta t), \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

onde

$$\kappa = \frac{i\hbar\Delta t}{4m}. \quad (\text{A.15})$$

O nosso objetivo, agora, é resolver numericamente a equação diferencial (A.14) acima, lembrando que  $\xi(x, t + \Delta t)$ , dado pela Eq. (A.7), é conhecido e queremos encontrar  $\eta(x, t + \Delta t)$ .

Para isso, vamos supor que o nosso sistema esteja definido no intervalo  $0 \leq x \leq L$ . Discretizando esse intervalo em  $N$  pontos igualmente espaçados, teremos que a distância entre um ponto e seus vizinhos mais próximos será  $\Delta x = L/N$  e, naturalmente, uma função  $f = f(x)$  definida em  $[0, L]$  também será discretizada em  $N$  pontos  $f(x_j)$ , ou simplesmente  $f_j$ , onde  $j = 1, 2, \dots, N$ .

A Fig. A.1 ilustra esse processo de discretização do espaço unidimensional e de uma função definida nele.

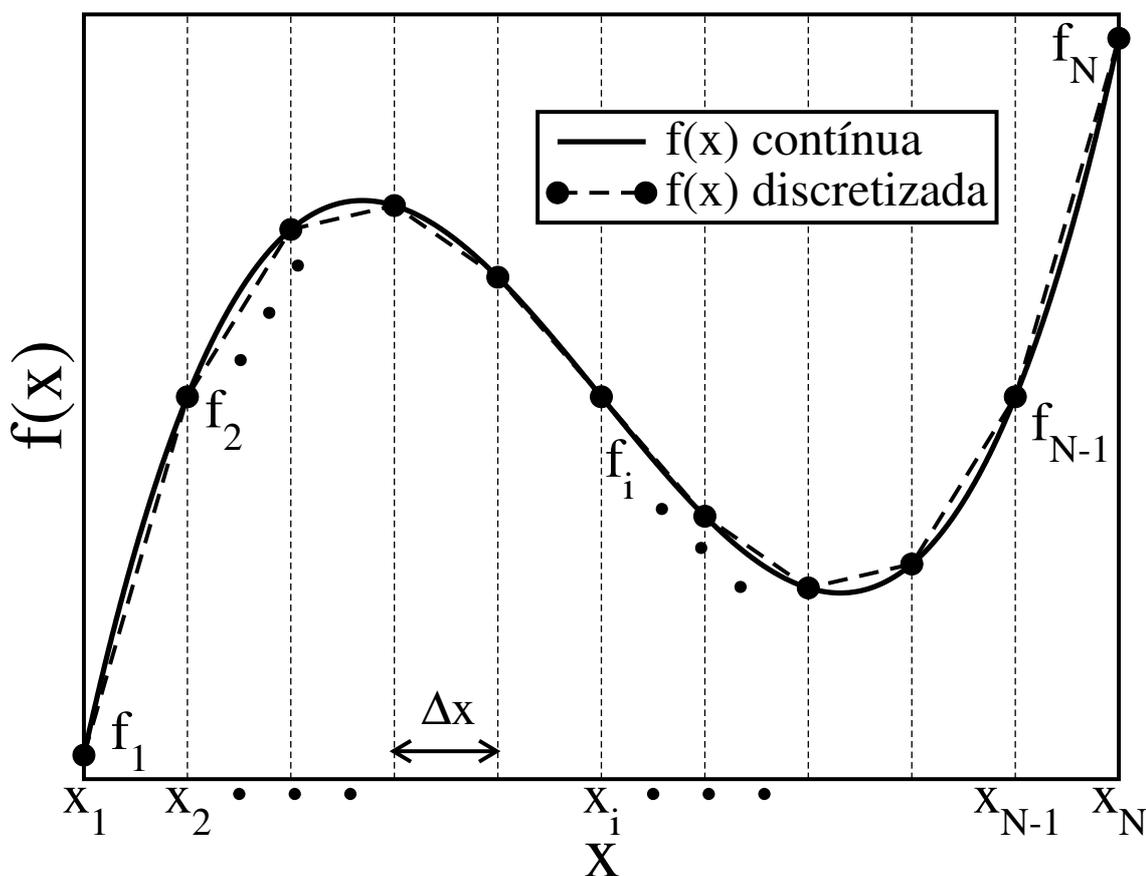


Figura A.1: Discretização do espaço unidimensional e de uma função definida nele.

Assim, da teoria das diferenças finitas [31, 32], podemos escrever as derivadas de  $f_j$  como

$$\frac{d}{dx}f_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (\text{A.16})$$

e

$$\frac{d^2}{dx^2}f_j = \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (\text{A.17})$$

Utilizando as Eqs. (A.16) e (A.17), a Eq. (A.14) pode ser escrita na sua forma discretizada como

$$A_j \eta_{j-1} + B_j \eta_j + C_j \eta_{j+1} = A'_j \xi_{j-1} + B'_j \xi_j + C'_j \xi_{j+1} \quad (\text{A.18})$$

onde

$$A_j = \frac{\kappa\gamma}{2\Delta x}(1 + \gamma x_j) - \frac{\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2 \quad ,$$

$$B_j = 1 + \frac{2\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2 \quad ,$$

$$\begin{aligned}
 C_j &= -\frac{\kappa\gamma}{2\Delta x}(1 + \gamma x_j) - \frac{\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2 , \\
 A'_j = -A_j &= -\frac{\kappa\gamma}{2\Delta x}(1 + \gamma x_j) + \frac{\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2 , \\
 B'_j = 2 - B_j &= 1 - \frac{2\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2
 \end{aligned}$$

e

$$C'_j = -C_j = \frac{\kappa\gamma}{2\Delta x}(1 + \gamma x_j) + \frac{\kappa}{\Delta x^2}(1 + \gamma x_j)^2 .$$

Finalmente, devemos aplicar as condições de contorno do problema. Supondo que as condições de contorno sejam finitas,  $\Psi(x \leq 0) = 0$  e  $\Psi(x \geq L) = 0$ , teremos que

$$\eta_0 = \eta_{N+1} = 0 \quad \text{e} \quad \xi_0 = \xi_{N+1} = 0 . \quad (\text{A.19})$$

Assim, para  $j = 1$ , a Eq. (A.18) torna-se

$$B_1\eta_1 + C_1\eta_2 = B'_1\xi_1 + C'_1\xi_2 \quad (\text{A.20})$$

e, para  $j = N$ ,

$$A_N\eta_{N-1} + B_N\eta_N = A'_N\xi_{N-1} + B'_N\xi_N . \quad (\text{A.21})$$

As Eqs. (A.18), (A.20) e (A.21) podem ser escritas na seguinte forma matricial

$$\begin{pmatrix}
 B_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & A_3 & B_3 & C_3 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
 \vdots & \ddots & & & & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \dots & A_N & B_N
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \eta_1 \\
 \eta_2 \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \eta_{N-1} \\
 \eta_N
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 B'_1 & C'_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 A'_2 & B'_2 & C'_2 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & A'_3 & B'_3 & C'_3 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
 \vdots & \ddots & & & & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \dots & A'_N & B'_N
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \xi_1 \\
 \xi_2 \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \xi_{N-1} \\
 \xi_N
 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.22})$$

Portanto, para obtermos  $\eta(x, t + \Delta t)$ , devemos resolver o sistema tridiagonal de  $N$  equações e  $N$  incógnitas representado pela Eq. (A.22). Nesse caso, podemos utilizar a subrotina TRIDAG

do *Numerical Recipes* [33].

iii) Nesse último passo, finalizamos o cálculo de  $\Psi(x, t + \Delta t)$  aplicando a última exponencial

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \exp \left[ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} V(x) \right] \eta(x, t + \Delta t) . \quad (\text{A.23})$$

Realizando todo esse processo várias vezes em um *loop*, obtemos a evolução temporal da função de onda para qualquer intervalo de tempo. Desse modo, conseguimos resumir o problema de resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo ao problema de solucionar sistemas de equações lineares tridiagonais, que podem ser rapidamente resolvidos por um computador. Além disso, podemos utilizar essa mesma técnica para calcular os autoestados da Hamiltoniana, bastando trocar a evolução no tempo real pela evolução no tempo imaginário e o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt [29].

## *APÊNDICE B – Demonstrações Matemáticas*

Por uma questão de completeza, nesse Apêndice, apresentamos as demonstrações de algumas fórmulas importantes utilizadas nessa Tese.

i) Queremos demonstrar a seguinte fórmula

$$[A, B^n] = [A, B]B^n + B[A, B^{n-1}] \quad , \quad (\text{B.1})$$

onde  $A$  e  $B$  são operadores e  $n$  um número inteiro.

**Demonstração:**

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

■

ii) Queremos demonstrar a seguinte fórmula

$$[P_g, X^n] = -i\hbar g(X)^{-1/2} nX^{n-1} \quad . \quad (\text{B.2})$$

**Demonstração:**

Utilizando as Eqs. (B.1) e (2.24) seguidas vezes,

$$\begin{aligned}
 [P_g, X^n] &= [P_g, X]X^{n-1} + X [P_g, X^{n-1}] \\
 &= -i\hbar g(X)^{-1/2}X^{n-1} + X ([P_g, X]X^{n-2} + X [P_g, X^{n-2}]) \\
 &= -2i\hbar g(X)^{-1/2}X^{n-1} + X^2 ([P_g, X]X^{n-3} + X [P_g, X^{n-3}]) \\
 &= -3i\hbar g(X)^{-1/2}X^{n-1} + X^3 ([P_g, X]X^{n-4} + X [P_g, X^{n-4}]) \\
 &= \vdots \\
 [P_g, X^n] &= -ni\hbar g(X)^{-1/2}X^{n-1} .
 \end{aligned}$$

■

iii) Queremos demonstrar a seguinte fórmula

$$[P_g, f(X)] = -i\hbar D_g f(X) . \quad (\text{B.3})$$

**Demonstração:**

Supondo que  $f(z)$  possua uma série de Taylor, ou seja, se

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n ,$$

então a correspondente função de um operador  $A$ ,  $f(A)$ , é definida como[3]

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n .$$

Desse modo,

$$\begin{aligned}
 [P_g, f(X)] &= \left[ P_g, \sum_{n=0}^{\infty} f_n X^n \right] \\
 [P_g, f(X)] &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n [P_g, X^n] .
 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Por fim, substituindo a Eq. (B.2) na Eq. (B.4),

$$\begin{aligned}
 [P_g, f(X)] &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n \left[ -i\hbar g(X)^{-1/2} n X^{n-1} \right] \\
 &= -i\hbar g(X)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} f_n n X^{n-1} \\
 [P_g, f(X)] &= -i\hbar D_g f(X) ,
 \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

onde utilizamos a Eq. (2.26).



## *Referências Bibliográficas*

- [1] R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, The Feynman Lectures on Physics Vol. III: Quantum Mechanics (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1965).
- [2] E. H. Wichmann, Berkeley Physics Course, Vol. 4: Quantum Physics, preliminary edition (McGraw-Hill, New York, 1967).
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, Quantum Mechanics, Vol.1 (Hermann e John Wiley & Sons, Paris, 1977).
- [4] W. Heisenberg, The Physical Principles of the Quantum Theory (Dover Publications, New York, 1949).
- [5] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1994).
- [6] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (MacGraw-Hill Book Company, New York, 1965).
- [7] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics (Plenum Press, New York, 1994).
- [8] D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker, M. R. Burns, C. E. Dudley, S. T. Forth, J. S. Gaumer, M. A. Kramer, D. C. Oertel, L. H. Park, M. T. Rinkoski, C. T. Smith and T. D. Wotherspoon, Nine Formulations of Quantum Mechanics, *Am. J. Phys.* **70** (3), March 2002.
- [9] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (Oxford University Press, Oxford, 1958).
- [10] C. Quesne e V. M. Tkachuk, Deformed algebras, position-dependent effective masses and curves spaces: an exactly solvable Coulomb problem, *J. Phys. A.: Math. Gen.* **37**, 4267-4281 (2004).
- [11] R. N. Costa Filho, M. P. Almeida, G. A. Farias e J. S. Andrade Jr., Displacement Operator for Quantum Systems with Position-dependent Mass, *Phys. Rev. A* **84**, 050102-1 - 050102-4 (2011).
- [12] S. H. Mazharimousavi, Revisiting the displacement operator for quantum systems with position-dependent mass, *Phys. Rev. A* **85**, 034102-1 - 034102-4.
- [13] H. A. Lorentz, A. Einstein e H. Minkowski, O Princípio da Relatividade (Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2001).
- [14] I. S. Sokolnikoff, Tensor Analysis, John Wiley & Sons, New York(1964).
- [15] R. N. Costa Filho, G. Alencar, B. Skagerstam and J. S. Andrade Jr., Morse potential derived from first principles *EPL* **101**, 10009-p1 - 10009-p4 (2013).

- [16] P. M. Morse, *Phys. Rev.*, **34** 57-?? (1929).
- [17] H. Shull e G. G. Hall, *Atomic Units*, *Nature* **184**, 1559-1560 (1959).
- [18] W. E. Boyce e R. C. DiPrima, *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno* (LTC, Rio de Janeiro, 2012).
- [19] M. D. Feit, J. A. Fleck e A. Steiger, *Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method*, *J. Comput. Phys.* **47** 412-433 (1982).
- [20] M. D. Feit, J. A. Fleck, *Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method II: Vibrational energy levels of triatomic molecules*, *J. Chem. Phys.* **78** 301-308 (1983).
- [21] M. D. Feit, J. A. Fleck, *Wave Packet Dynamics and Chaos in the Hénon-Heiles system*, *J. Chem. Phys.* **80** 2578-2584 (1984).
- [22] M. H. Degani, *Stark Ladders in Strongly coupled GaAs-AlAs superlattices*, *Appl. Phys. Lett.* **59** 57-59 (1991).
- [23] M. H. Degani e J. P. Leburton, *Single-electron States and Conductance in Lateral-surface Superlattices*, *Phys. Rev. B* **44** 10901-10904 (1991).
- [24] M. H. Degani, *Competition Between Shallow-impurity and T-shaped Quantum-wire states*, *Phys. Rev. B* **66** 233306-1 - 233306-4 (2002).
- [25] C. L. N. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, G. A. Farias, V. N. Freire e M. H. Degani, *Lifetime of Quasi-Bound States in Open Semiconductor Quantum Structures*, *Phys. Stat. Sol. (c)* **2**, No.8 3031-3034 (2005).
- [26] G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire, J. C. Silva e R. Ferreira, *Impurities and Geometrical Effects on the Electron Energy Spectrum of Quantum Rings*, *Phys. Rev. B* **77** 085316-1 - 085316-9 (2008).
- [27] M. R. Hermann e J. A. Fleck, *Split-Operator Spectral Method for Solving the Time-dependent Schrödinger Equation in Spherical Coordinates*, *Phys. Rev. A* **38** 6000-6012 (1988).
- [28] J. M. Pereira, F. M. Peeters, A. Chaves e G. A. Farias, *Klein Tunneling in Single and Multiple Barriers in Graphene*, *Semicond. Sci. Technol.* **25** 1-9 (2010).
- [29] J. P. M. Braga, *Técnica Split Operator em Coordenadas Generalizadas*, *Dissertação de Mestrado*, Programa de Pós-graduação do Departamento de Física da UFC, 2010.
- [30] M. Suzuki, *Fractal Decomposition of Exponential Operators with applications to many-body theories and Monte Carlo Simulations*, *Phys. Lett. A* **146** 319-323 (1990).
- [31] P. L. DeVries, *A First Course in Computational Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1994).
- [32] W. A. Strauss, *Partial Differential Equations* (John Wiley & Sons, New York, 1992).
- [33] W. A. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).