



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

AUGUSTO PLÁCIDO CAVALCANTE MELO DE LIMA

ESPECTROS DE ENERGIA NA
MECÂNICA QUÂNTICA POLIMÉERICA

FORTALEZA

2016

AUGUSTO PLÁCIDO CAVALCANTE MELO DE LIMA

**ESPECTROS DE ENERGIA NA
MECÂNICA QUÂNTICA POLIMÉRICA**

Dissertação de Mestrado submetida à Co-
ordenação do Curso de Pós-Graduação em
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos
de Almeida

FORTALEZA

2016

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)

- L696e Lima, Augusto Plácido Cavalcante Melo de.
Espectros de energia na Mecânica Quântica Polimérica / Augusto Plácido Cavalcante Melo de Lima. –
2016.
56 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação
em Física, Fortaleza, 2016.
Orientação: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida.
1. Mecânica Quântica Polimérica. 2. Gravitação Quântica. 3. Comprimento Mínimo. 4. Espectros de
energia. I. Título.

CDD 530

AUGUSTO PLÁCIDO CAVALCANTE MELO DE LIMA

ESPECTROS DE ENERGIA NA MECÂNICA QUÂNTICA POLIMÉRICA

Dissertação de Mestrado submetida à Co-
ordenação do Curso de Pós-Graduação em
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Mestre em Física

Aprovada em --/--/----

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Victor Pereira do Nascimento Santos
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Rodolfo Alván Casana Sifuentes
Universidade Federal do Maranhão

*Aos Meus Pais
e
etc..*

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico(CNPq), pelo financiamento.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida por me guiar e instruir na execução trabalho, e aos demais membros da banca.

A todos os colegas e professores do Departamento de Física, que proporcionaram um ambiente propício ao crescimento de todos.

Aos meus pais, que me guiaram, incentivaram e ofereceram todas as oportunidades das quais necessitei.

Aos colegas do grupo de pesquisa por incentivarem e ajudarem no trabalho de pesquisa.

A minha namorada, Luana de Sousa Gomes, pelo amor,apoio e carinho que fizeram toda a diferença nos últimos meses.

RESUMO

A formulação e comprovação experimental de uma teoria consistente de Gravitação Quântica é um dos maiores desafios da Física atualmente. Entre as candidatas a ocupar este posto está a Gravitação Quântica de Laço, ela sugere a reinterpretação do espaço-tempo que, em escala planckiana, assume a forma de uma rede de pontos espaçados por um comprimento mínimo característico da natureza. Neste trabalho tratamos de um modelo recentemente introduzido que incorpora o conceito de comprimento mínimo e o aplica no contexto de baixas energias, a Mecânica Quântica Polimérica, discutimos a diferença entre a física deste modelo e dos modelos de incerteza mínima, em especial o Princípio de Incerteza Generalizado, onde a discretização espacial é consequência de alterações nas relações de comutação canônicas. Usamos o método perturbativo para calcular correções de primeira ordem nos espectros de energia de alguns potenciais conhecidos, observamos através de gráficos as escalas de energia envolvidas e comparamos os resultados com outras correções que surgem no contexto de altas energias.

Palavras-chave: Mecânica Quântica Polimérica. Gravitação Quântica. Comprimento mínimo. Espectros de energia.

ABSTRACT

The formulation and experimental verification of a consistent theory of Quantum Gravitation is one of the greatest challenges in Physics nowadays. Between the candidates for this post is the Loop Quantum Gravity, it suggests a reinterpretation of space-time, that in planckian scale, would assume the form of a net of points spaced by a minimal length characteristic of nature. In this work we deal with a model that incorporates this concept and applies it to the context of low energies, the Polymer Quantum Mechanics, we discuss the differences on the physics of this model an that of the model on minimal uncertainty, in special the Generalized Uncertainty principle, where the spacial discretization is a consequence of modifications in canonical commutation relations. We use the perturbative method to calculate first order corrections in the energy spectra of some known potentials, we observe through graphics the energy scales involved and compare the results with other corrections that arise in the context of high energies.

Keywords: Polymer Quantum Mechanics. Quantum Gravity. Minimal lenght. Energy spectra.

LISTA DE FIGURAS

1	Energias em função do número de excitação para o poço quadrado infinito: Schrödinger, polimérico e PIG.	p. 39
2	Energias para o potencial linear:Schrödinger e polimérico.	p. 42
3	Potencial morse	p. 43
4	Energias para o potencial Morse:Schrödinger e polimérico.	p. 45
5	Potencial Pöschl-Teller	p. 46
6	Energias para o potencial Poschl-Teller:Schrödinger e polimérico.	p. 48
7	Energias para o oscilador harmônico-Schrodinger, polimérica e aproximação relativística	p. 49

LISTA DE SIGLAS

MQ	Mecânica Quântica
RG	Relatividade Geral
GQL	Gravitação Quântica de Laço
PIG	Princípio da Incerteza Generalizado
RCC	Relações de Comutação Canônicas
MQP	Mecânica Quântica Polimérica

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 12
2	TEORIAS COM ÁLGEBRAS DEFORMADAS: MECÂNICA QUÂNTICA NÃO COMUTATIVA E PRINCÍPIO DA INCERTEZA GENERALIZADO	p. 16
2.1	Mecânica Quântica Não Comutativa	p. 16
2.1.1	O espaço não comutativo	p. 16
2.1.2	O Produto Moyal	p. 17
2.2	Princípio da Incerteza Generalizado	p. 19
2.2.1	Poço Quadrado Infinito	p. 20
3	MECÂNICA QUÂNTICA POLIMÉRICA	p. 22
3.1	Representações na mecânica quântica	p. 22
3.1.1	Espaço de Hilbert, estados quânticos e operadores	p. 22
3.1.2	Teorema de Unicidade de Stone-Von Neumann	p. 23
3.1.3	Representação de Schrödinger	p. 25
3.1.4	Representação de Heisenberg	p. 26
3.2	Representação polimérica	p. 27
3.2.1	Quantização da posição e momentum limitado	p. 27
3.2.2	Dinâmica	p. 29
3.2.3	Poço quadrado infinito de largura mínima e partículas localizadas	p. 30
4	CORREÇÕES PERTURBATIVAS PARA O ESPECTRO DE ENERGIA DEVIDO A QUANTIZAÇÃO POLIMÉRICA	p. 33

4.1	Teoria de perturbação independente do tempo- O caso não degenerado	p. 33
4.2	O potencial perturbativo no caso polimérico	p. 35
4.3	Partícula numa caixa	p. 37
	Na apresentação de Schrödinger	p. 37
	Correção polimérica	p. 37
4.4	Oscilador harmônico	p. 38
	Na representação de Schrödinger	p. 38
	Correção polimérica	p. 40
4.5	Potencial linear	p. 41
	Na representação de Schrödinger	p. 41
	Correção polimérica	p. 42
4.6	Potencial Morse	p. 43
	Na representação de Schrödinger	p. 43
	Correção polimérica	p. 44
4.7	Potencial Pöschl-Teller	p. 44
	Na representação de Schrödinger	p. 45
	Correção Polimérica	p. 47
4.8	Correção polimérica versus correção relativística	p. 47
5	CONCLUSÃO	p. 50
	Apêndice A – Transformada de Fourier discreta e polarização p	p. 52
	Apêndice B – Termo cinético e degenerescências	p. 53
	REFERÊNCIAS	p. 55

1 INTRODUÇÃO

A formulação da Mecânica Clássica por Isaac Newton data do século XVII, este evento é sem dúvida uma das maiores revoluções na história da Física. A validade das leis formuladas por Newton condizia com a escala de energia na qual os fenômenos eram observados. No entanto, estudos de alguns fenômenos específicos, como o espectro de radiação do corpo negro e trocas de referenciais no eletromagnetismo, indicavam a necessidade de se considerar modificações na descrição física de alguns sistemas, assim surgiam questionamentos sobre a validade das Leis de Newton. Problemas como estes impulsionaram a formulação da Relatividade e da Mecânica Quântica (MQ) no início do século passado, teorias que estabeleceram modificações na descrição física da natureza, a primeira em escala de altas energias e a segunda na escala de pequenos comprimentos.

O problema da radiação do corpo negro foi um dos principais precursores da MQ. O impasse inicial se deu pelo fato do tratamento estatístico do campo eletromagnético no espaço de fase clássico levar a Lei de Rayleigh-Jeans [1], que previa o “desastre ultravioleta”, isso foi resolvido através da proposição de Max Planck [2] de tratar a energia como pacotes quantizados. Tal suposição permitiu a derivação de uma distribuição adequada aos dados experimentais e iniciou o desenvolvimento da MQ.

Seguiram-se os trabalhos de Einstein no efeito foto-elétrico [3], Bohr nos modelos atômicos [4], e a dualidade onda-partícula de de Broglie [5], chegando finalmente no princípio da incerteza de Heisenberg [6], que é um dos principais fundamentos da mecânica quântica como tratamos hoje. O princípio da incerteza está intrinsecamente ligado às relações de comutação na MQ, tais relações são a base, por exemplo, do processo de quantização canônica dos campos. Em geral, ao tratar um sistema quântico usamos o potencial da mecânica clássica e o “quantizamos”, no entanto esse processo é bastante problemático quando aplicado à teorias de gravitação.

Tomando um desenvolvimento em paralelo, independente da MQ, temos a Relatividade Geral (RG) que é uma teoria essencialmente gravitacional formulada principalmente

por Einstein. O seu surgimento foi motivado inicialmente pelo fato de que as equações de Maxwell não eram invariantes sob as transformações de Galileu. Lorentz deduziu um grupo de transformações sob as quais teríamos a invariância das equações do eletromagnetismo [7], originalmente ele atribuiu essas modificações a presença do “Éter”, um fluido que permearia o universo sendo responsável pela deformação das transformações de referenciais no caso da propagação de ondas eletromagnéticas, tal teoria seria refutada mais tarde. A solução veio com os postulados de Albert Einstein do que mais tarde seria chamado de Relatividade Especial ou Restrita [8], que basicamente afirmava a invariância das Leis da Física e da velocidade da luz em todos os referenciais inerciais. Dez anos depois, Einstein viria a publicar seu trabalho sobre a Relatividade Geral [9], generalizando a Relatividade Restrita para referenciais não-inerciais ou sob ação gravitacional. De maneira bem compacta, podemos resumir que a RG descreve a dinâmica de um sistema através das modificações na geometria no espaço, ou seja, a métrica espacial que era estática no caso restrito ganha dinâmica no caso geral.

Embora a MQ e a RG tenham se desenvolvido independentemente, as duas teorias não são exclusórias do ponto de vista físico, de fato, podemos unir a MQ aos conceitos da Relatividade Especial na Teoria Quântica de Campos. Através desta teoria se estabeleceu o Modelo Padrão [10], um modelo que unifica as forças forte, fraca e eletromagnética. No entanto, o processo se torna mais complicado quando se tenta descrever a RG neste contexto, o mecanismo de quantização comum aplicado nas outras interações resulta numa teoria não renormalizável. Existe também o Problema de Hierarquia [11], que consiste na diferença enorme entre as escalas da gravitação e das outras interações. Existem várias proposições teóricas para resolver tais problemas, como modelos supersimétricos [12] e de dimensões extras [13]. Duas candidatas proeminentes a teorias completas de Gravitação Quântica são a Teoria de Cordas [14] e a Gravitação Quântica de Laço(GQL) [15]. Infelizmente, com os dados proporcionados pela tecnologia atual, as escalas de energia necessárias para testar tais teorias são, em princípio, não acessíveis, mas os estudos continuam afim de acumular previsões teóricas que possam ser testadas no futuro ou de prever experimentos que possam ser realizados com a tecnologia atual.

Essas duas teorias tem abordagens bastante diferentes do problema de Gravitação Quântica. A Teoria de Cordas compreende um modelo de unificação, que visa juntar a gravitação às outras interações, esta teoria descreve os sistemas físicos compreendidos através de partículas na nossa “realidade” como sendo descritos por cordas que vibram em um hiperespaço, argumentos desta teoria motivaram, por exemplo, o estudo de sistemas onde as relações fundamentais de comutação seriam modificadas. Já a GQL, compreende

uma teoria não perturbativa, construída a partir da quantização canônica e que compreende basicamente o conceito de quantização espacial na escala de Planck, ou seja, o espaço teria uma estrutura mínima irreduzível bem definida. A GQL não compreende uma teoria de unificação, mas sim uma teoria que visa descrever quanticamente a dinâmica do espaço-tempo. Uma característica importante em comum das duas teorias é a ideia da existência de um comprimento mínimo na natureza, característica que seria observada na escala da física planckiana, embora, como trataremos mais adiante no trabalho, a ideia é introduzida de maneiras bem distintas nos dois casos.

O aparato matemático complexo das duas teorias citadas no parágrafo anterior pode também ser usado para criar modelos mais simples, a nível de mecânica quântica não-relativística. Esses modelos são basicamente “modelos de brinquedo”, por serem montados em um formalismo simplificado e onde as escalas de energia para quais os fenômenos extras seriam observados já supera a escala onde a MQ usual de partícula é válida. No entanto, a análise destes sistemas serve como estudo introdutório para as teorias mais completas, mostra de maneira mais simples como alguns fenômenos físicos podem ser modificados e, embora de maneira menos precisa, fornece também limites teóricos para os parâmetros introduzidos na teoria à partir de dados experimentais obtidos previamente.

Entre tais modelos, um ramo que ganhou destaque, inferido principalmente a partir da Teoria de Cordas, foi o estudo de sistemas quânticos com deformações nas Relações Canônicas de Comutação (RCC), entre esses modelos podemos citar a Mecânica Quântica Não Comutativa e o Princípio da Incerteza Generalizado (PIG). Temos então uma modificação nas relações de incerteza que implica na impossibilidade de localizar as partículas com precisão superior a um certo limite. Assim, temos um conceito de célula espacial mínima ou de medida mínima de comprimento, em geral, nestes modelos continuamos tratando o espaço como um contínuo, mas agora as medidas não podem ser reduzidas indefinidamente, o conceito de distância passa a perder o sentido físico depois da escala de Planck.

Outro modelo básico, que consistirá no tema central deste trabalho, é a Mecânica Quântica Polimérica (MQP), este modelo incorpora o conceito de quantização espacial da GQL. Aqui preservamos as relações de comutação e o conceito de comprimento mínimo é inserido diretamente na estrutura espacial, onde o operador de posição assume um espectro discreto. Ao contrário de uma teoria com incerteza mínima, estamos falando de um espaço na forma de uma rede de pontos onde as partículas podem ser totalmente localizadas. Por simplicidade, a MQP costuma ser formulada em uma dimensão, assim,

a grande maioria da teoria apresentada neste trabalho será dada em apenas um grau de liberdade, embora seja possível generalizar para mais dimensões.

Neste trabalho analisaremos correções energéticas em sistemas quânticos com estados ligados, para isso aplicaremos o método perturbativo para relacionar a equação discreta de estado da MQP à equação diferencial da MQ usual. Calcularemos as correções e ilustraremos com gráficos para observar em que escalas de energia estas modificações se tornam relevantes, além de compararmos em alguns casos com outros tipos de correções energéticas.

A estrutura deste trabalho é dada em cinco capítulos. Este primeiro capítulo apresenta uma breve introdução histórica e motivacional dos modelos trabalhados. No segundo capítulo mostraremos dois exemplos de teorias com relações de incerteza modificadas. O terceiro capítulo consiste numa introdução teórica simplificada da MQP. No quarto capítulo mostraremos nossos resultados mencionados no parágrafo anterior. Por fim, no quinto capítulo apresentaremos nossas conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

2 TEORIAS COM ÁLGEBRAS DEFORMADAS: MECÂNICA QUÂNTICA NÃO COMUTATIVA E PRINCÍPIO DA INCERTEZA GENERALIZADO

Neste capítulo faremos uma análise superficial sobre a Mecânica Quântica Não Comutativa e o PIG, duas teorias já amplamente estudadas na literatura. Nos dois casos a ideia de comprimento mínimo está ligada à modificações na álgebra de Heisenberg. Nestes modelos tal ideia de é inserida à partir de modificações nas relações de comutação, que geram incertezas mínimas nas medidas de posição, logo temos a noção de partículas não localizáveis. Essa impossibilidade de localizar, ou seja, realizar medidas espaciais menores que um certo comprimento ou região do espaço infere a existência de um comprimento ou célula espacial mínima.

2.1 Mecânica Quântica Não Comutativa

2.1.1 O espaço não comutativo

Um modelo simples inferido da Teoria de Cordas [16], consiste em considerar um comutador não nulo entre os operadores das coordenadas espaciais. Na MQ usual temos as Relações Canônicas de Comutação:

$$\begin{cases} (i) & [x_i, x_j] = 0 \\ (ii) & [p_i, p_j] = 0 \\ (iii) & [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{cases} \quad (2.1)$$

O modelo proposto muda a primeira das três relações:

$$\left\{ \begin{array}{l} (i) \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\Theta_{ij} \\ (ii) \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \\ (iii) \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{array} \right. \quad (2.2)$$

Onde Θ_{ij} são os termos de uma matriz assimétrica constante. Essas novas relações de comutação definem o espaço não comutativo. Os comutadores de posição e momentum permanecem intactos, no entanto a modificação dos comutadores entre as componentes de posição gera modificações na representação destes operadores no espaço de funções.

Para enxergarmos os efeitos físicos da não comutatividade de coordenadas recorreremos a um mapeamento, relacionando os operadores $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ do espaço não comutativo com os operadores do espaço comutativo. Podemos propor um sistema de equações do tipo:

$$\begin{aligned} \hat{x}_i &= \sum_n [a_{in}x_n + b_{in}p_n] \\ \hat{p}_i &= \sum_n [c_{in}x_n + d_{in}p_n] \end{aligned} \quad (2.3)$$

Usando as relações [2.1] e [2.2] como vínculos. Uma possível solução é:

$$\begin{aligned} (i) \quad \hat{x}_i &\equiv x_i + \sum_j \theta_{ij}p_j \\ (ii) \quad \hat{p}_i &\equiv p_i \end{aligned} \quad (2.4)$$

As relações [2.4] são comumente chamadas de *Bopp's Shift* e representam o mapeamento entre os espaços comutativo e não comutativo. Assim, para enxergar os possíveis efeitos da não comutatividade trabalharemos relacionando os dois espaços através de uma troca de argumento no Hamiltoniano do sistema:

$$H(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) \equiv H(\mathbf{x} - \boldsymbol{\Theta} \cdot \mathbf{p}, \mathbf{p}) \quad (2.5)$$

Existem na literatura outros exemplos de não comutatividade, como o espaço de fase não comutativo [17] onde é considerada também não comutatividade entre os momenta ou espaços onde os elementos de Θ são funções da posição [18].

2.1.2 O Produto Moyal

A relação de equivalência (2.5) pode ser expressa através de um produto específico pertencente a uma classe de produtos denominada Produto Estrela ou Produto Moyal

[19]. Consideremos o produto entre duas funções de x e p representado pelo caractere \star :

$$f \star g(x, p) = f(x, p) \exp \left[\frac{i\hbar\Theta_{ij}}{2} \left(\overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} \right) \right] g(x, p) \quad (2.6)$$

Com somatório implícito nos índices i e j , as setas sobre as derivadas indicam qual função devemos derivar. Demonstraremos a seguir, como mostrado em [20], que a substituição do produto usual de funções pelo produto estrela é equivalente ao mapeamento (2.4). Expandindo (2.6) em série de potências temos:

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2} \right)^n \frac{\partial}{\partial x_{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_n}} f \frac{\partial}{\partial x_{j_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{j_n}} g \Theta_{i_1 j_1} \cdots \Theta_{i_n j_n} \quad (2.7)$$

Usando a correspondência:

$$p_i \equiv = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

Temos:

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2} \right)^n \frac{\partial}{\partial x_{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_n}} f p_{j_1} p_{j_2} g \Theta_{i_1 j_1} \cdots \Theta_{i_n j_n} \quad (2.9)$$

E expressando f através de sua transformada de Fourier:

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \left(-\frac{1}{2} \right)^n \frac{\partial}{\partial x_{i_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_n}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} F(\mathbf{k}) d^D k \right] p_{j_1} p_{j_2} g \Theta_{i_1 j_1} \cdots \Theta_{i_n j_n} \quad (2.10)$$

Aplicando as derivadas:

$$\begin{aligned} f \star g &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \left(-\frac{1}{2} \right)^n \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} F(\mathbf{k}) (k_{i_m} \Theta_{i_m j_l} p_{j_l})^n d^D k \right] g \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \frac{1}{2}\Theta\cdot\mathbf{p})] F(\mathbf{k}) g d^D k \end{aligned} \quad (2.11)$$

Assim:

$$f \star g(x) = f(\mathbf{x} - \frac{1}{2}\Theta\cdot\mathbf{p})g(\mathbf{x}) \quad (2.12)$$

O produto Moyal dá uma forma de tratamento alternativa às equações (2.4), sendo mais útil para o tratamento dos problemas quando estendemos este modelo para a TQC. A forma das transformações (2.4) mostra que o modelo não gera modificações na teoria para uma dimensão, o conceito de “geometria sem ponto” introduzido requer pelo menos um plano para ser definido, ou seja não temos um comprimento mínimo, mas sim regiões mínimas do espaço. Um caso interessante estudado na literatura são as correções gradadas nas fases geométricas [21][22].

2.2 Princípio da Incerteza Generalizado

Na Mecânica Quântica, sejam A e B duas observáveis, o produto de incerteza entre elas obedece a relação:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |[A, B]| \quad (2.13)$$

Onde $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$. Quando A e B são posição e momentum temos o famoso princípio da incerteza de Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.14)$$

No contexto de teorias de comprimento mínimo, surgiram alguns modelos propondo modificações na relação de comutação entre posição e momentum, um modelo bastante utilizado é o do PIG:

$$[x, p] = i\hbar(1 + \epsilon p^2) \quad (2.15)$$

Que resulta na relação de incerteza:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \langle 1 + \epsilon p^2 \rangle \quad (2.16)$$

Suponhamos, por exemplo, um sistema com potencial simétrico, sabemos que as soluções da equação de Schrödinger para um potencial simétrico são simétricas ou assimétricas, de modo que $|\Psi(x)|^2 = |\Psi(-x)|^2$, assim as médias x e p são nulas, temos então que $\langle x^2 \rangle = \Delta x^2$ e $\langle p^2 \rangle = \Delta p^2$. A equação acima pode então ser reescrita como:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\Delta p} + \epsilon \Delta p \right) \quad (2.17)$$

O que implica um valor mínimo para a incerteza na posição. Temos a equação:

$$\Delta x' = \frac{\hbar}{2} \left(-\frac{1}{\Delta p^2} + \epsilon \right) = 0 \quad (2.18)$$

Com raiz positiva $\Delta p = \epsilon^{-1/2}$. Assim:

$$\Delta x_{min} = \hbar \sqrt{\epsilon} \quad (2.19)$$

De modo semelhante à Mecânica Quântica Não Comutativa, faremos o mapeamento deste espaço para um espaço onde as RCC sejam obedecidas até primeira ordem em ϵ . Vale o ansatz:

$$x = x' \quad ; \quad p = p' + \epsilon \frac{p'^3}{3} \quad (2.20)$$

Onde $[x', p'] = i\hbar$. Substituição direta mostra que:

$$\begin{aligned} [x, p] &= [x', p'(1 + \epsilon p'^2/3)] \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \left(p' + \epsilon \frac{p'^3}{3} \right) \\ &= i\hbar(1 + \epsilon p'^2) \end{aligned}$$

Mas em primeira ordem $\epsilon p^2 = \epsilon p'^2$. Assim (2.15) é válida para (2.20). Portanto, a equação de Schrödinger independente do tempo fica:

$$\begin{aligned} H(\hat{x}, \hat{p})\Psi(\hat{x}) &\equiv H(x, p)\Psi(x) \\ &= \left[\frac{1}{2m} \left(p + \epsilon \frac{p^3}{3} \right)^2 + V(x) \right] \Psi(x) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\epsilon \hbar^4}{3m} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Que mostra que o modelo do PIG insere uma perturbação de momentum quártico na equação de Schrödinger.

2.2.1 Poço Quadrado Infinito

Este é um dos exemplos mais simples resolvidos na literatura [23], mais adiante trataremos novamente este problema para o caso da MQP e compararemos os resultados. Consideremos um poço infinito de largura a :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } 0 < x < a \\ +\infty & \text{se } x \geq a \end{cases} \quad (2.22)$$

Queremos calcular as correções no espectro de energia devido as modificações do PIG. Propondo uma solução da forma: $\Psi = \text{sen}(kx)$, onde $k = n\pi/a$ e substituindo em (2.21) geramos a equação biquadrática:

$$2\epsilon \hbar^4 k^4 + 3\hbar^2 k^2 - 6mE = 0 \quad (2.23)$$

Que resulta em:

$$k^2 = \frac{-3 + \sqrt{9 + 48m\epsilon E}}{4\epsilon \hbar^2} \quad (2.24)$$

Invertendo a relação e usando a condição de periodicidade, temos para a energia corrigida até primeira ordem em ϵ :

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\epsilon n^4\pi^4\hbar^4}{3ma^4} \quad (2.25)$$

Temos uma correção positiva definida, mais tarde veremos que no PIG, do ponto de vista perturbativo, isto é válido para qualquer potencial em estado ligado. Voltaremos a discutir este resultado e seu significado físico na seção 4.3 quando formos compará-lo com o resultado para o caso da MQP.

Estes dois modelos trabalhados no capítulo inserem a ideia de comprimento mínimo ou de uma célula mínima espacial à partir das relações de incerteza. Em escalas suficientemente pequenas o espaço se tornaria algo indefinido, “borrado”, necessitando de uma nova descrição física, ou simplesmente perderia o sentido, mas fora desta escala a noção de momentum, por exemplo, permanece similar ao que conhecemos, o que não acontece quando discretizamos propriamente o espaço. As modificações nos casos propostos também não geram limites nos valores medidos para posição e momentum.

3 MECÂNICA QUÂNTICA POLIMÉRICA

Nas seções a seguir trataremos aspectos gerais da MQ, falaremos de algumas propriedades do espaço de Hilbert, dos operadores e estados quânticos. Trataremos do teorema de Stone-Von Neumann numa abordagem menos formal. Após isso apresentaremos a MQP e discutiremos seus aspectos principais, assim como suas diferenças em relação as teorias mostradas no capítulo anterior.

Uma análise completa de todos os aspectos citados contém bastante profundidade e sutileza matemática, neste trabalho nos ateremos apenas aos fatores mais práticos, dando uma abordagem bem direta e simplificada da MQ e MQP.

3.1 Representações na mecânica quântica

3.1.1 Espaço de Hilbert, estados quânticos e operadores

Define-se como um espaço de Hilbert um espaço completo com produto escalar definido. Isto é, um espaço onde qualquer sequência convergente de seus elementos resulta num elemento também pertencente a este espaço, e onde podemos definir um produto escalar tal que esses elementos tenham norma definida. Um exemplo de espaço de Hilbert é o espaço das funções quadrado-integráveis no domínio dos reais $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$:

$$|f|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)f(x)dx < \infty \quad (3.1)$$

Neste caso o produto escalar entre duas funções g e h é:

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x)dx \quad (3.2)$$

De modo que a norma converge. Sabemos que é neste espaço que se localizam as funções de onda, ou analogamente, os estados quânticos estão contidos num espaço de Hilbert.

Associamos operadores às grandezas físicas, tais que os autovalores desses operadores representam os possíveis valores obteníveis numa medida daquela observável, podendo seu espectro ser discreto ou contínuo. Como falaremos mais adiante, nas representações usuais da MQ, os espectros de posição e momentum são contínuos e ilimitados, e seus auto-estados não representam estados físicos por terem norma divergente.

De fundamental importância na MQ são as relações de comutação, no capítulo anterior vimos dois exemplos de modelos com RCC modificadas, a física descrita nestes modelos obviamente é inequivalente à dos modelos usuais, no entanto veremos adiante que é possível gerar outros modelos inequivalentes sem alterar os princípios dinâmicos ou as relações de comutação.

No princípio de sua formulação, haviam duas vertentes principais que descreviam os fenômenos quânticos, a mecânica ondulatória de Schrödinger e a mecânica matricial de Heisenberg, e não era claro se as duas eram equivalentes. O fechamento da questão da equivalência entre essas representações veio com o teorema de Stone-Von-Neumann, que trataremos na subseção seguinte. A partir deste teorema poderemos discutir a Mecânica Quântica Polimérica e mostrar que ela é não equivalente MQ usual, embora seja construída de maneira análoga e preserve as RCC.

3.1.2 Teorema de Unicidade de Stone-Von Neumann

O teorema atribuído a Marshall Stone e John von Neumann é de grande importância histórica por mostrar a equivalência das mecânicas ondulatória e matricial de Schrödinger e Heisenberg, respectivamente, dado que, em seus anos iniciais o aparato matemático formal da MQ ainda não tinha sido estabelecido.

Sejam os operadores exponenciais de Weyl dados por:

$$U(\nu) = e^{i\nu Q} \quad V(\mu) = e^{\frac{i\mu P}{\hbar}} \quad (3.3)$$

Onde μ e ν são constantes, e Q e P são operadores que obedecem as RCC, tais relações

podem ser reescritas em termos de U e V como:

$$\begin{aligned} (i) \quad V(\mu_1)V(\mu_2) &= V(\mu_1 + \mu_2) \\ (ii) \quad U(\nu_1)U(\nu_2) &= U(\mu_1 + \mu_2) \\ (iii) \quad U(\nu)V(\mu) &= e^{-i\mu\nu}V(\mu)U(\nu) \end{aligned} \tag{3.4}$$

O teorema possui algumas formulações mais técnicas, usaremos uma formulação simples baseada naquela usada em [24]: *Dada uma representação irredutível¹ dos operadores Q e P , com $U(\nu)$ e $V(\mu)$ fracamente contínuos² em (μ, ν) obedecendo as relações (3.4), esta representação será unitariamente equivalente a representação de Schrödinger, com Q e P sendo equivalentes aos operadores de posição e momentum.*

Deste modo, em um grau de liberdade, sejam Q e P operadores hermitianos tais que:

$$[Q, P] = i\hbar \tag{3.5}$$

O teorema garante que existe um operador unitário A tal que:

$$A^\dagger Q A = x \quad A^\dagger P A = p \tag{3.6}$$

Onde x e p são operadores de posição e momentum da representação de Schrödinger. Assim, a representação nos operadores Q e P é unitariamente equivalente a representação de Schrödinger. Deste modo, podemos mapear uma na outra com transformações unitárias, sendo assim, as duas preveem os mesmos resultados.

Suponhamos agora uma transformação unitária sobre o operador de posição da forma

$$\begin{aligned} T(x) &= e^{\frac{i\mu p}{\hbar}} x e^{-\frac{i\mu p}{\hbar}} \\ &= x + e^{\frac{i\mu p}{\hbar}} [x, e^{-\frac{i\mu p}{\hbar}}] \\ &= x + I\mu \end{aligned} \tag{3.7}$$

O operador x é equivalente a $x + I\mu$. O operador de momentum é invariante sobre esta mesma transformação. O que nos indica que o espectro de x deve compreender toda a

¹Uma representação irredutível num espaço de Hilbert é aquela na qual os únicos subespaços invariantes sobre os operadores em questão são o próprio espaço e $\{0\}$. No caso de operadores hermitianos, os elementos invariantes, ou seus autovetores, formam uma base, assim, cobrem todo o espaço. A equação de autovalores também admite solução trivial (autovetor nulo). Deste modo, os operadores usuais de posição e momentum, por exemplo, agem irredutivelmente no espaço de Hilbert.

²Os elementos de matrizes dos dois operadores são todos contínuos nos dois parâmetros.

linha dos reais. Analogamente:

$$\begin{aligned}
 R(p) &= e^{-i\nu x} p e^{i\nu x} \\
 &= p + e^{-i\nu x} [p, e^{i\nu x}] \\
 &= p + I\nu
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

Desta vez x é invariante sob a transformação e p equivale a $p + I\nu$. Desta maneira, temos que em qualquer das representações usuais da MQ, os espectros de posição e momentum são ilimitados. Este não é o caso da MQP, como veremos na próxima seção.

3.1.3 Representação de Schrödinger

A representação de Schrödinger descreve um sistema quântico através da evolução temporal dos estados, com os operadores permanecendo constantes. Em geral, na MQ, uma transformação infinitesimal $W(d\epsilon)$ é dada por:

$$W(d\epsilon) = 1 - \frac{iGd\epsilon}{\hbar} \tag{3.9}$$

Onde G é o gerador da transformação, no limite finito temos:

$$W(\epsilon - \epsilon_0) = e^{-\frac{iG(\epsilon - \epsilon_0)}{\hbar}} \tag{3.10}$$

Sabemos da mecânica clássica que o Hamiltoniano é o gerador de evoluções temporais. Desta maneira, a evolução temporal de um estado $|\Psi_0\rangle$ para o estado $|\Psi\rangle$ é dada por:

$$|\Psi\rangle = e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} |\Psi_0\rangle \tag{3.11}$$

Onde $U = e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}}$ é o operador de evolução temporal. Temos para este operador:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{iHU}{\hbar} \tag{3.12}$$

Rearranjando e usando (3.11) temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \tag{3.13}$$

Seja $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} - V(\hat{x})$ (no resto deste capítulo nos referiremos aos operadores de posição como \hat{x} e \hat{p} , afim de evitar confusão com seus autovalores x e p), aplicando a polarização de posição (inserindo $\langle x|$ a esquerda) temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \tag{3.14}$$

Que é a equação de onda para $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$, com:

$$\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.15)$$

Podemos trabalhar nesta polarização para encontrar autofunções de momentum:

$$\hat{p}\Psi_p \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\Psi_p = p\Psi_p \quad (3.16)$$

Cuja solução é:

$$\Psi_p = Ce^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (3.17)$$

Que é não normalizável, analogamente podemos trabalhar na polarização de momentum para concluir que auto-funções de posição também são não normalizáveis. Portanto na mecânica quântica usual os auto-estados de posição e momentum não compreendem estados físicos.

3.1.4 Representação de Heisenberg

Ao contrário da representação de Schrödinger, na abordagem de Heisenberg os estados são constantes temporais enquanto os operadores variam. A dinâmica desses operadores é dada pela equação:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H] \quad (3.18)$$

Análoga a relação clássica envolvendo os parênteses de Poisson. Seja A_H um operador desta representação e $|\Psi_H\rangle$ um estado, podemos relacioná-los com seus equivalentes na representação de Schrödinger por:

$$A_H = e^{\frac{iHt}{\hbar}} A_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \quad (3.19)$$

$$|\Psi_H\rangle = e^{\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi_S\rangle \quad (3.20)$$

Como previsto pelo teorema de Stone-von Neumann as duas representações são unitariamente equivalentes, sendo o mapeamento entre as duas feito pelo operador de evolução temporal. A dinâmica nos dois casos é inferida à partir de conceitos da mecânica clássica. Temos operadores de momentum e posição com espectros contínuos e ilimitados, cujos auto-estados não são fisicamente realizáveis.

Como é facilmente verificado, todos os valores esperados calculados nesta abordagem são idênticos aos calculados na abordagem de Schrödinger. As duas são idênticas fisicamente como mostrado por Stone e von Neumann. Temos ainda um outro exemplo que não abordaremos neste trabalho, a Representação de Interação, muito usada em proble-

mas perturbativos. Ainda segundo o teorema, é possível montar infinitas representações equivalentes via transformação unitária.

3.2 Representação polimérica

Entraremos agora no assunto principal, esta seção é dedicada a dar uma descrição básica e objetiva da representação polimérica, destacando suas diferenças em relação a MQ usual e as teorias abordadas no capítulo dois.

3.2.1 Quantização da posição e momentum limitado

Primeiramente, consideraremos que as relações (3.4) são conservadas. De maneira objetiva, consideraremos que o espectro de posição é discreto e formado por pontos igualmente espaçados numa rede:

$$\hat{x}|x\rangle = n\mu|x\rangle \quad (3.21)$$

Tal que n é inteiro e μ é um comprimento característico.

Construiremos nossas equações de movimento usando como base a equação de Schrödinger. Como mostraremos adiante, no MQP não há um operador auto-adjunto de momentum bem definido, o que está ligado diretamente a discreticidade da posição, o momentum é originalmente, na MC, um gerador de deslocamento, com a nossa imposição sobre os autovalores de posição, a noção de um gerador de deslocamento infinitesimal perde sentido e deve ser substituída por uma versão associada ao deslocamento finito. Levando isto em consideração não é possível inferir uma relação do tipo (3.15). Em vez disso trabalharemos inicialmente em polarização de autofunções com autovalor p (apêndice A), ligadas ao operador de momentum polimérico que definiremos depois. Com isso, dada a validade de (3.4) ainda podemos usar a relação:

$$\hat{x}\phi(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\phi(p) \quad (3.22)$$

Assim, a equação para as autofunções de posição fica:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\phi_x(p) = m\mu\phi_x(p), \quad m \in \mathbb{Z} \quad (3.23)$$

As soluções são da forma:

$$\phi_m = \exp\left(\frac{im\mu p}{\hbar}\right) \quad (3.24)$$

No espaço de Hilbert usual, onde o espectro de posição é contínuo, a condição de ortogo-

nalidade é dada por:

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1^* \phi_2 dp = \delta(x_1 - x_2) \quad (3.25)$$

No entanto, o conjunto de autoestados de posição forma um conjunto discreto, tal que o delta de Dirac deve ser substituído por um delta de Kronecker. Assim temos para o espaço da MQP:

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \int_{-L}^{+L} \exp\left(-\frac{im\mu p}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{in\mu p}{\hbar}\right) dp = \delta_{m,n} \quad (3.26)$$

De modo que a largura $2L$ do intervalo seja igual a um múltiplo inteiro do período das autofunções, essa análise nos mostra que o menor intervalo que satisfaz a equação acima é dado para $L = \pi\hbar/\mu$. Desta maneira temos um momentum limitado:

$$-\frac{\pi\hbar}{\mu} \leq p \leq \frac{\pi\hbar}{\mu} \quad (3.27)$$

O que sugere a inequivalência da representação polimérica em relação a de Schrödinger. De fato, se calcularmos um elemento de matriz para o operador $V(\mu) = e^{\frac{i\mu p}{\hbar}}$ na base dos autoestados de posição (agora normalizáveis), temos uma descontinuidade em $\mu = 0$:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \langle \phi_m | V(\mu) | \phi_n \rangle = \lim_{\mu \rightarrow 0} \langle \phi_{m+1} | \phi_n \rangle \quad (3.28)$$

Independente do valor de μ , se $n \neq m + 1$ então o elemento de matriz é nulo. Enquanto $V(\mu = 0) = I$, assim temos uma descontinuidade e logo V não é fracamente contínuo em μ , portanto a MQP é inequivalente a MQ de Schrödinger ou Heisenberg.

Estamos interessados agora em construir um operador Hamiltoniano neste formalismo, para isso precisamos de um operador substituto para o momentum canônico. O fato de que $V(\mu)$ é descontínuo implica na não existência de um operador momentum bem definido na MQP, no entanto o operador $V(\mu)$ ainda é bem definido e podemos formular um operador \hat{p}_μ tal que:

$$\hat{p}_\mu \phi(p) = p\phi(p) + F(\mu, p) \quad (3.29)$$

De modo que no limite $\mu \rightarrow 0$ os resultados reproduzam a MQ usual. Se analisarmos a ação do operador de momentum numa função de onda em polarização de posição no espaço usual temos:

$$\hat{p}\Psi(x) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = -i\hbar \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\Psi(x+h) - \Psi(x-h)}{2h} \quad (3.30)$$

No caso polimérico não há sentido em derivadas espaciais, no entanto podemos tomar

uma forma que lembra o limite finito:

$$\hat{p}_\mu \Psi(x) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\Psi(x + \mu) - \Psi(x - \mu)}{2\mu} \quad (3.31)$$

Que é satisfeita para:

$$\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{2i\mu} [V(\mu) - V(-\mu)] = \frac{\hbar}{2i\mu} [e^{\frac{i\mu p}{\hbar}} - e^{-\frac{i\mu p}{\hbar}}] \quad (3.32)$$

O uso da forma (3.30) para a derivada é justificado pelo fato de que um \hat{p}_μ do tipo:

$$\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{i\mu} [V(\mu) - I] = \frac{\hbar}{i\mu} [e^{\frac{i\mu p}{\hbar}} - I] \quad (3.33)$$

É não hermitiano. Em representação de momentum temos:

$$\hat{p}_\mu \phi(p) = \frac{\hbar}{\mu} \frac{e^{\frac{i\mu p}{\hbar}} - e^{-\frac{i\mu p}{\hbar}}}{2i} \phi(p) = \frac{1}{\mu} \text{sen}(\mu p/\hbar) \phi(p) \quad (3.34)$$

3.2.2 Dinâmica

Agora estamos interessados na equação tipo Schrödinger nesta representação, primeiro, analisemos a ação do momentum polimérico quadrado numa autofunção de posição:

$$\hat{p}_\mu^2 \Psi(x) = -\hbar^2 \frac{\Psi(x + 2\mu) + \Psi(x - 2\mu) - 2\Psi(x)}{4\mu^2} \quad (3.35)$$

Façamos a troca de escala:

$$\mu \rightarrow \mu/2$$

Desta maneira a equação de autovalor para o operador hamiltoniano polimérico:

$$H_\mu = \hat{p}_\mu^2/2m + V(\hat{x}) \quad (3.36)$$

É dada por

$$H\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m\mu^2} [\Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) - 2\Psi(x)] + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.37)$$

Rearranjando os termos temos:

$$\Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) = 2 \left[1 - \frac{m\mu^2}{\hbar^2} (E - V) \right] \Psi(x) \quad (3.38)$$

Ou em polarização de momentum:

$$\frac{2\hbar^2}{m\mu^2} \text{sen}^2 \left(\frac{\mu p}{2\hbar} \right) \phi(p) + V(i\hbar\partial/\partial x)\phi(p) = E\phi(p) \quad (3.39)$$

Ou

$$\frac{\hbar^2}{m\mu^2}[1 - \cos(\mu p/\hbar)]\phi(p) + V(i\hbar\partial/\partial p)\phi(p) = E\phi(p) \quad (3.40)$$

Como consideramos uma troca de escala no momentum polimérico, a princípio os pontos da rede espacial seriam os múltiplos inteiros de $\mu/2$, no entanto ao analisarmos a forma das equações (3.38), onde os coeficientes $\Psi(n\mu)$ se tornam independentes para n pares e ímpares, e (3.40), onde o período do termo cinético é metade do intervalo de integração em p , temos nessa interpretação a geração de estados extras com degenerescências. Esperamos que o modelo polimérico reproduza os resultados da MQ usual quando $\mu \rightarrow 0$, assim deve ser introduzida uma modificação a mais para evitar o aparecimentos destas degenerescências. Para melhor visualização do problema consultar apêndice B.

Como apontado em [24], a definição do termo cinético é problemática no formalismo polimérico, devemos considerar então que não apenas o momentum, mas sua relação com a energia cinética é modificada, uma outra estrutura da MQP que se torna invisível no limite contínuo. Deste modo consideraremos a troca de escala apenas na energia cinética, que terá o mesmo período de p_μ , e a interpretação de μ como comprimento fundamental permanece intacta.

3.2.3 Poço quadrado infinito de largura mínima e partículas localizadas

Um caso interessante para analisarmos é o do poço quadrado infinito de largura 2μ . O potencial é dado por:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{se } x \neq \mu \\ 0 & \text{se } x = \mu \end{cases} \quad (3.41)$$

Que descreve basicamente uma partícula presa na posição $x = \mu$. Usando a equação (3.38), temos:

$$2 \left[1 - \frac{m\mu^2}{\hbar^2}(E - V) \right] \Psi(\mu) = 0 \quad (3.42)$$

Se esta é a única posição permitida então:

$$\Psi(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x = \mu \\ 0 & \text{se } x \neq \mu \end{cases} \quad (3.43)$$

Ou

$$\Psi(n\mu) = \delta_{n,1} \quad (3.44)$$

Assim temos dispersão nula em posição:

$$\langle x \rangle = \mu \sum_n n [\Psi(n\mu)]^2 = \mu \quad (3.45)$$

$$\langle x^2 \rangle = \mu^2 \sum_n n^2 [\Psi(n\mu)]^2 = \mu^2 \quad (3.46)$$

$$\langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle \Rightarrow \Delta x = 0 \quad (3.47)$$

A única energia permitida é:

$$E = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \quad (3.48)$$

A média do momento polimérico neste caso é:

$$\langle p_\mu^2 \rangle = \sum_n \langle \Psi(n\mu) | p_\mu^2 | \Psi(n\mu) \rangle = \frac{2\hbar^2}{\mu^2} \quad (3.49)$$

E $\langle \hat{p}_\mu \rangle = 0$. Assim $\Delta p_\mu = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{\mu^2}}$.

Na MQP as RCC são preservadas na forma (3.4), assim podemos calcular o comutador entre \hat{x} e \hat{p}_μ :

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_\mu] &= \frac{i\hbar^2}{\mu} \frac{\partial}{\partial \hat{p}} \left[\text{sen} \left(\frac{\mu \hat{p}}{\hbar} \right) \right] \\ &= i\hbar \cos \left(\frac{\mu \hat{p}}{\hbar} \right) \\ &= i\hbar \frac{V(\mu) + V(-\mu)}{2} \end{aligned} \quad (3.50)$$

De modo que:

$$|\langle [\hat{x}, \hat{p}_\mu] \rangle| = 0 \quad (3.51)$$

Usando o valor obtido anteriormente para Δp_μ temos:

$$\Delta x \Delta p_\mu \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}_\mu] \rangle| = 0 \quad (3.52)$$

O produto da incerteza generalizado para x e p_μ permite valor nulo como esperado.

Este caso particular ilustra a possibilidade de se localizar completamente uma partícula na MPQ sem obter desvio divergente na medida de momentum, num caso de menores energias temos:

$$\Delta x \Delta p_\mu \geq \frac{\hbar}{2} \left\langle \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\mu p_\mu}{\hbar} \right)^2 + \Theta(\mu^4) \right) \right\rangle \simeq \frac{\hbar}{2} \left(1 - \frac{\mu^2 \langle p_\mu^2 \rangle}{2\hbar^2} \dots \right) \quad (3.53)$$

O que demonstra o fato de que na MQP, estamos gerando menor incerteza, ao contrário

do PIG, por exemplo, onde o produto de incerteza aumenta. Isto está de acordo com o conceito básico das duas teorias, embora as duas estejam ligadas a ideia de discretização espacial, a MQP propõe a localização, a quantização do espaço em uma rede de pontos, que é diferente do conceito de incerteza mínima.

4 CORREÇÕES PERTURBATIVAS PARA O ESPECTRO DE ENERGIA DEVIDO A QUANTIZAÇÃO POLIMÉRICA

Neste capítulo apresentaremos um modo alternativo para encontrar correções energéticas em problemas de estados ligados na MQP. Nosso método consiste em correlacionar a equação de Schrödinger no espaço de Hilbert usual e no espaço polimérico, embora as estruturas dos espaços sejam diferentes, as condições de contorno usadas para definir as energias permitidas podem ser aproveitadas.

Uma vez definida a correlação através de um termo extra no Hamiltoniano, podemos usar a Teoria de Perturbação para definir as correções. Faremos isto para os problemas da partícula numa caixa e oscilador harmônico, já resolvidos na literatura, e encontraremos correções inéditas para os potenciais linear, Morse e Pöschl-Teller, por último faremos uma comparação entre correções poliméricas e relativísticas. Por simplicidade, iremos nos limitar a interpretações unidimensionais dos potenciais. Iniciaremos o capítulo com uma breve revisão sobre o método perturbativo no espaço de Hilbert usual.

4.1 Teoria de perturbação independente do tempo- O caso não degenerado

Como trabalharemos a seguir apenas com problemas unidimensionais sem degenerescências, podemos nos restringir ao caso não degenerado. Suponhamos um sistema com Hamiltoniano $H^{(0)}$ cujos estados e energias já conhecemos. Em representação de posição

temos:

$$H^{(0)}\Psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}(x) \quad (4.1)$$

Consideremos agora uma pequena perturbação $\lambda H'$ no Hamiltoniano do sistema:

$$H = H^{(0)} + \lambda H' \quad (4.2)$$

Quais os auto-estados e auto-energias de H ? Para encontrar uma solução aproximada expandiremos esses estados e energias em função de λ :

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} \dots \quad (4.3)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} \dots \quad (4.4)$$

Substituindo na equação de Schrödinger temos:

$$(H^{(0)} + \lambda H')\Psi_n = E_n \Psi_n \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} H^{(0)}\Psi_n^{(0)} + \lambda(H^{(0)}\Psi_n^{(1)} + H'\Psi_n^{(0)}) + \lambda^2(H^{(0)}\Psi_n^{(2)} + H'\Psi_n^{(1)}) \dots = \\ H^{(0)}\Psi_n^{(0)} + \lambda(E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)}) + \lambda^2(E_n^{(0)}\Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)}) \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

Igualando as ordens em λ :

$$\left\{ \begin{array}{l} (i) \quad H^{(0)}\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)} \\ (ii) \quad H^{(0)}\Psi_n^{(1)} + H'\Psi_n^{(0)} = E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} \\ (iii) \quad H^{(0)}\Psi_n^{(2)} + H'\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)} \\ \dots \end{array} \right. \quad (4.7)$$

Em (i), temos a equação de Schrödinger para o sistema original. Multiplicando (ii) pela esquerda por $[\Psi_n^{(0)}]^*$ temos:

$$[\Psi_n^{(0)}]^*(E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + H'\Psi_n^{(0)}) = [\Psi_n^{(0)}]^*(E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)}) \quad (4.8)$$

O que equivale a:

$$[\Psi_n^{(0)}]^* H' \Psi_n^{(0)} = E_n^{(1)} [\Psi_n^{(0)}]^* \Psi_n^{(0)} \quad (4.9)$$

Ou:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | H' | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (4.10)$$

Na prática esse é um dos resultados mais importantes da Mecânica Quântica e é suficiente para calcularmos as correções energéticas nos sistemas a seguir.

4.2 O potencial perturbativo no caso polimérico

Em representação de posição, a equação para a função de onda $\Psi_\mu = \Psi(n\mu)$ é dada por:

$$\Psi_{\mu+1} + \Psi_{\mu-1} = 2 \left[1 - \frac{m\mu^2}{\hbar^2}(E - V) \right] \Psi_\mu \quad (4.11)$$

Em geral, uma solução analítica pode ser de difícil obtenção, portanto usaremos o método perturbativo para obter correções no espectro de energia. Consideremos uma solução da equação de Schrödinger $\Psi(x)$, temos que, para um parâmetro finito μ :

$$\begin{cases} (i) & \Psi(x + \mu) = \Psi(x) + \mu\psi'(x) + \frac{\mu^2}{2}\Psi''(x) + \frac{\mu^3}{6}\Psi'''(x) + \frac{\mu^4}{24}\Psi''''(x)\dots \\ (ii) & \Psi(x - \mu) = \Psi(x) - \mu\psi'(x) + \frac{\mu^2}{2}\Psi''(x) - \frac{\mu^3}{6}\Psi'''(x) + \frac{\mu^4}{24}\Psi''''(x)\dots \end{cases} \quad (4.12)$$

Somando (i) e (ii) em (4.12) temos:

$$\Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) = 2 \left[\Psi(x) + \frac{\mu^2}{2}\Psi''(x) + \frac{\mu^4}{24}\Psi''''(x) \right] \quad (4.13)$$

Os termos de derivadas podem ser expressos através da relação:

$$\Psi''(x) = -p^2 \frac{\Psi(x)}{\hbar^2} \quad (4.14)$$

Assim:

$$\begin{aligned} \Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) &= 2 \left[\Psi(x) - \frac{\mu^2}{2\hbar^2}p^2\Psi(x) + \frac{\mu^4}{24\hbar^4}p^4\Psi(x) \right] \\ &= 2 \left[\Psi(x) - \frac{\mu^2 m}{\hbar^2}(E - V)\Psi(x) + \frac{\mu^4}{24\hbar^4}p^4\Psi(x) \right] \end{aligned}$$

Ou seja:

$$\Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) = 2 \left\{ 1 - \frac{\mu^2 m}{\hbar^2} \left[E - \left(V + \frac{\mu^2 p^4}{24m\hbar^2} \right) \right] \right\} \Psi(x) \quad (4.15)$$

Esta relação nos diz que, em segunda ordem no parâmetro μ , a equação para a função de onda polimérica em um potencial V pode ser mapeada numa equação de Schrödinger para um potencial $V - \frac{\mu^2 p^4}{24m\hbar^2}$. Devido a discretização do argumento, a normalização é diferente, no entanto as correções de energia independem disto, assim poderemos encontrá-las usando teoria de perturbação na representação de Schrödinger, onde o potencial perturbativo é sempre dado por:

$$V_\mu = -\frac{\mu^2 p^4}{24m\hbar^2} \quad (4.16)$$

Ou seja:

$$E_\mu = -\langle \Psi | \frac{\mu^2 p^4}{24m\hbar^2} | \Psi \rangle = -\frac{\mu^2 \hbar^2}{24m} \int \Psi^* \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} dx \quad (4.17)$$

A expressão pode ser simplificada usando:

$$\begin{aligned} \frac{d^4}{dx^4} \Psi &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi \right) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \left[-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right] \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \left[-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Psi - 2 \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)^2 \Psi \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

Assim, a correção é dada por:

$$E_\mu = \frac{\mu^2}{12} \int \Psi^* \left[-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Psi - 2 \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)^2 \Psi \right] dx \quad (4.19)$$

Calculando separadamente o termo:

$$\int_a^b \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = |\Psi|^2 \frac{\partial V}{\partial x} \Big|_a^b - \int_a^b \Psi \left(\Psi^* \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx \quad (4.20)$$

Se Ψ é real, o que normalmente é verdadeiro para estados ligados, e o termo fora da integral é nulo nos limites de integração, temos:

$$2 \int_a^b \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = - \int_a^b \Psi^* \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Psi dx \quad (4.21)$$

Assim:

$$E_\mu = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \langle (E - V)^2 \rangle \quad (4.22)$$

É interessante notar que o potencial perturbativo explícito em (4.16) nada mais é do que a segunda ordem omitida na aproximação para p_μ^2 :

$$\frac{p_\mu^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \left[1 - \cos \left(\frac{\mu p}{\hbar} \right) \right] \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{\mu^2 p^4}{24m\hbar^2} \quad (4.23)$$

E poderia ser obtida mais facilmente em polarização de momentum, no entanto é interessante ver como a solução para a função de argumento discreto da MQP se relaciona com a solução contínua da equação de Schrödinger trabalhando em polarização de posição.

Um fato importante é de que a correção energética é negativa definida, poderíamos usar o mesmo método para obter uma expressão semelhante no caso do PIG, mas neste

caso teríamos uma correção positiva definida, em geral:

$$\frac{E_\mu}{E_\epsilon} = -\frac{\mu^2}{8\hbar^2\epsilon} \quad (4.24)$$

outro fator que ilustra que as duas teorias são basicamente opostas.

Nas seções seguintes calcularemos as correções de energia para alguns potenciais conhecidos e analisaremos as dependências nos parâmetros do sistema. Em geral, os parâmetros utilizados não são praticamente realizáveis na MQ de partícula, o que é esperado dada que os efeitos da PQM só se manifestariam numa escala de altíssimas energias. Esta escala também pode variar muito com o valor de μ , segundo a referência [25], com os dados experimentais da época, o comprimento mínimo da natureza poderia estar entre a ordem da escala de Planck ($10^{-35}m$) e $10^{-19}m$.

4.3 Partícula numa caixa

Na apresentação de Schrödinger

Consideremos o novamente o potencial (2.22). A equação de Schrödinger para a região $0 < x < a$ é:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi \quad (4.25)$$

As soluções que respeitam as condições de contorno são do tipo

$$\Psi(x) = N \text{sen}(kx) \quad (4.26)$$

Onde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e N é o fator de normalização. Com a condição de periodicidade:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a} \quad (4.27)$$

Obtemos os possíveis valores de energia:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (4.28)$$

Correção polimérica

No caso polimérico, a equação se torna:

$$\Psi(x + \mu) + \Psi(x - \mu) = 2 \left[1 - \frac{m\mu^2 E}{\hbar^2} \right] \Psi(x) \quad (4.29)$$

Sugerindo uma solução do tipo (4.26) temos:

$$\text{sen}[k(x + \mu)] + \text{sen}[k(x - \mu)] = 2 \left(1 - \frac{m\mu^2 E}{\hbar^2} \right) \text{sen}(kx) \quad (4.30)$$

O que nos dá:

$$\cos(k\mu) = 1 - \frac{m\mu^2 E}{\hbar^2} \quad (4.31)$$

Onde novamente $k = \frac{n\pi}{a}$, assim:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \left[1 - \cos \left(\frac{n\pi\mu}{a} \right) \right] \quad (4.32)$$

Expandindo o cosseno em série de potências temos:

$$E_n \simeq \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \left(\frac{n^2\pi^2\mu^2}{2a^2} - \frac{n^4\pi^4\mu^4}{24a^4} \right) = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 n^4 \pi^4 \mu^2}{24ma^4} \quad (4.33)$$

Obtemos finalmente a correção polimérica

$$E_\mu = -\frac{\hbar^2 n^4 \pi^4 \mu^2}{24ma^4} \quad (4.34)$$

Neste caso, devido a simplicidade do potencial, a correção analítica é de fácil obtenção. No entanto, podemos usar o método perturbativo para encontrá-la de modo ainda mais simples, usando (4.22) temos:

$$E_\mu = -\frac{m\mu^2}{6\hbar^2} E_n^2 = -\frac{\hbar^2 n^4 \pi^4 \mu^2}{24ma^4} \quad (4.35)$$

De acordo com o resultado já encontrado analiticamente e exibido também na referência [26].

A figura 1 mostra a energia em função do número de excitação para MQ usual, MQP e FIG. As correções só se tornam perceptíveis para uma escala altíssima de energia, da ordem de $10^{-3}J$.

4.4 Oscilador harmônico

Na representação de Schrödinger

A equação de Schrödinger para um potencial harmônico é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi = E \Psi \quad (4.36)$$

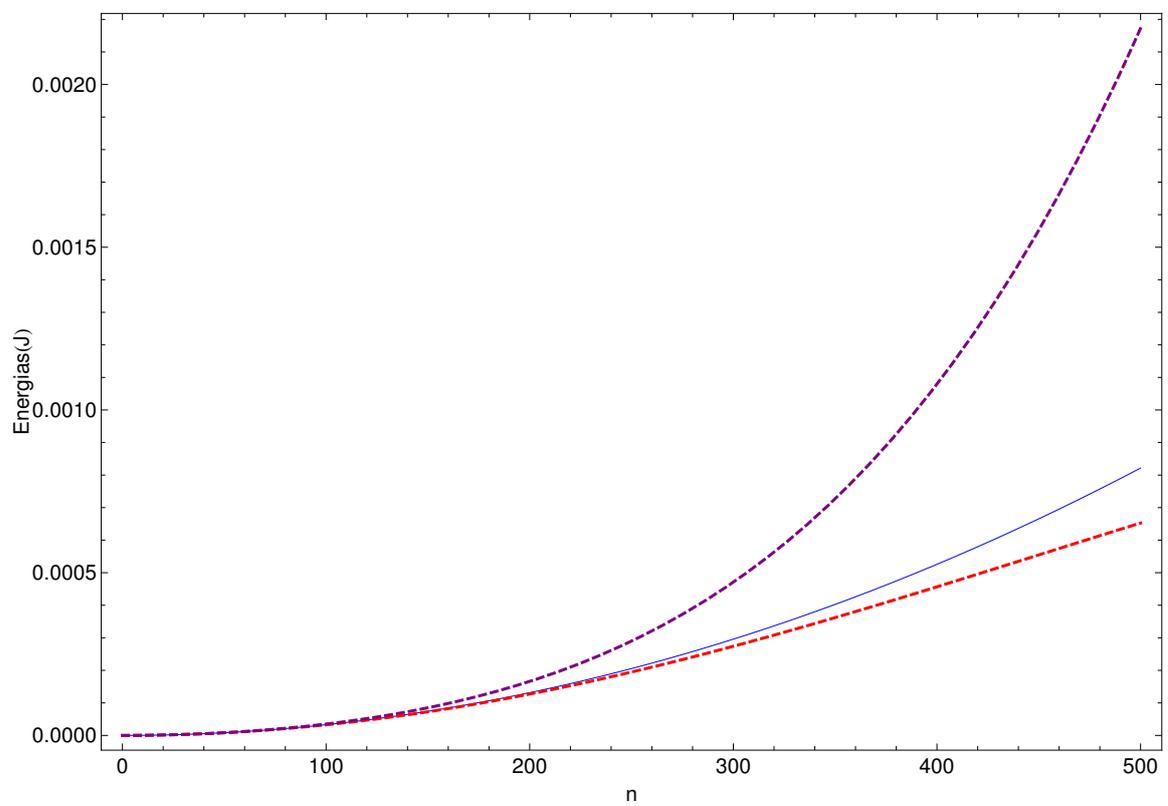


Figura 1: Energias para o poço quadrado infinito. Schrödinger (Azul), Polimérico (Vermelho), PIG (Roxo). Para largura do poço $10^{-16}m$, massa de um próton e $\mu = \hbar\epsilon^{1/2} = 10^{-19}m$.

Definindo o novo parâmetro adimensional: $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, temos:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - \left[y^2 - \frac{2E}{\hbar\omega} \right] \Psi = 0 \quad (4.37)$$

Para valores muito altos de y temos o comportamento assintótico: $\Psi'' - y^2\Psi = 0$ que admite soluções do tipo: $\Psi = Ce^{\pm\frac{1}{2}y^2}$, o caso com expoente positivo é não normalizável, assim consideraremos apenas o caso $\Psi = Ce^{-\frac{1}{2}y^2}$. Fatorando o termo assintótico, ou seja, fazendo:

$$\Psi = \Phi e^{-\frac{1}{2}y^2} \quad (4.38)$$

A nossa equação diferencial se reduz à:

$$\Phi'' - 2y\Phi' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) \Phi = 0 \quad (4.39)$$

Que é a equação diferencial de Hermite com $\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) = 2n$, temos assim o espectro de energia do oscilador harmônico:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.40)$$

E as funções de onda normalizadas são:

$$\Psi_n(x) = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (4.41)$$

Correção polimérica

Soluções analíticas no caso polimérico são apresentadas nas referências [24] e [27] usando a representação de momentum. Na nossa abordagem perturbativa temos:

$$E_\mu = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \langle (E - V)^2 \rangle = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \left\langle \left(E^2 - m\omega^2 x^2 E + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 x^4 \right) \right\rangle \quad (4.42)$$

Usando os valores conhecidos da literatura para o OHS:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n + 1/2)$$

$$\langle x^4 \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} (n + n^2 + 1/2)$$

E a energia (4.40), temos:

$$E_\mu = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \left[\frac{3}{8} \hbar^2 \omega^2 (n + n^2 + 1/2) \right] = -\frac{m\omega^2 \mu^2}{32} (2n + 2n^2 + 1) \quad (4.43)$$

De acordo com a referência [24].

4.5 Potencial linear

Na representação de Schrödinger

Consideremos o problema do tipo *bouncing ball*, um potencial linear com uma barreira infinita na origem:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x \leq 0 \\ kx, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

A equação de Schrödinger é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + kx\Psi = E\Psi \quad (4.45)$$

Introduzindo os fatores adimensionais $y = x \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}$ e $u = \frac{E}{k} \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}$ temos:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - 2(y - u)\Psi = 0 \quad (4.46)$$

Com a mudança de variável $z = 2^{1/3}(y - u)$ temos:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - z\Psi = 0 \quad (4.47)$$

Que corresponde a equação de Airy, as soluções são do tipo:

$$\Psi(x) = C \times \text{Ai} \left[\left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E}{k}\right) \right] \quad (4.48)$$

As energias são dadas pela condição de contorno $\Psi(0) = 0$, a energia do estado fundamental é:

$$E_1 = 1,856 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m^2}\right)^{1/3} \quad (4.49)$$

A função de onda normalizada é aproximadamente:

$$\Psi_1(x) = 1,600 \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/6} \times \text{Ai} \left[\left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E_1}{k}\right) \right] \quad (4.50)$$

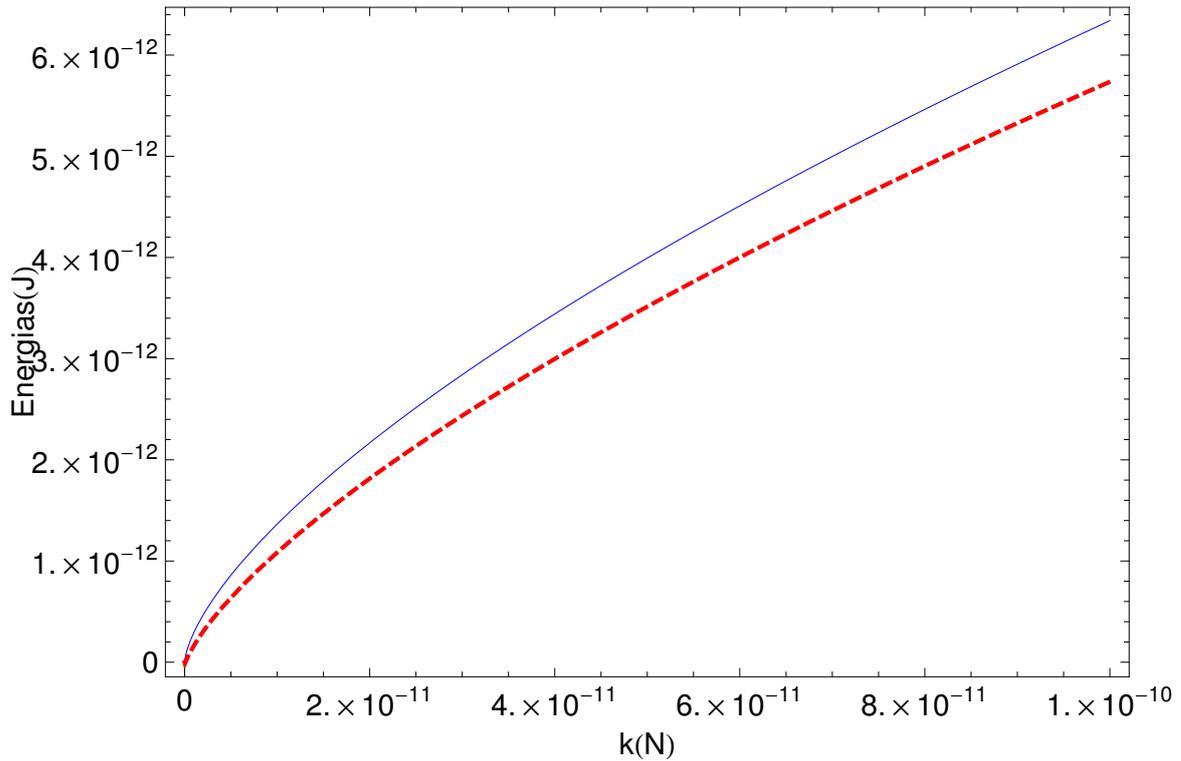


Figura 2: Energias para o potencial linear em função de k . MQ usual (azul) e caso polimérico (vermelho). Massa de um próton e $\mu = 10^{-29}m$

Correção polimérica

Os valores esperados de interesse são:

$$\langle x \rangle = 1,236 \left(\frac{\hbar^2}{mk} \right)^{1/3} \quad (4.51)$$

$$\langle x^2 \rangle = 1,835 \left(\frac{\hbar^2}{mk} \right)^{2/3} \quad (4.52)$$

$$\langle (E - V)^2 \rangle = E^2 - 2Ek\langle x \rangle + k^2\langle x^2 \rangle = 0,692 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m^2} \right)^{2/3} \quad (4.53)$$

A correção polimérica é então:

$$E_\mu = -0,692 \frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m^2} \right)^{2/3} \quad (4.54)$$

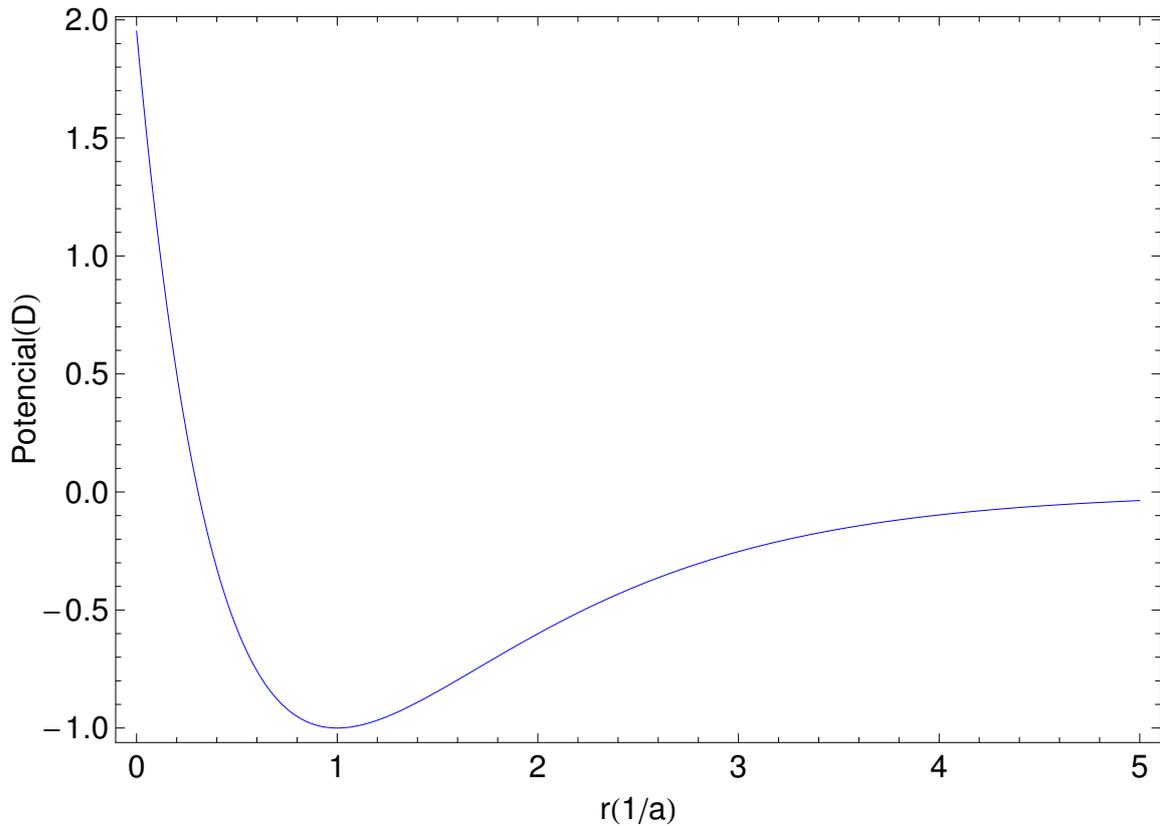


Figura 3: Curva do potencial Morse, $r_0 = 1/a$.

4.6 Potencial Morse

O potencial Morse compreende um modelo aproximativo para interações dentro de uma molécula diatômica [28]. Possui três parâmetros para ajuste experimental e constitui uma aproximação melhor que o oscilador harmônico simples. Por ser um potencial já de caráter aproximativo, este não seria um potencial adequado para detectar correções, no entanto, ele possui solução analítica e o usaremos como mais um exemplo para observar o comportamento das correções poliméricas.

Na representação de Schrödinger

O potencial Morse é dado por:

$$V(x) = D(e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)})^2 \quad (4.55)$$

As funções de onda normalizadas são dadas por [29]:

$$\Psi_n(z) = N_n z^{\lambda-n-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}z} L_n^{2\lambda-2n-1}(z) \quad (4.56)$$

Onde $z = 2\lambda e^{-(x-x_0)}$; $N_n = \left[\frac{n!(2\lambda-2n-1)}{\Gamma(2\lambda-n)} \right]^{1/2}$; $x = ar$; $x_0 = ar_0$; $\lambda = \frac{\sqrt{2mD}}{a\hbar}$. As energias são:

$$E_n = \left[1 - \frac{1}{\lambda^2} \left(\lambda - n - \frac{1}{2} \right)^2 \right] \frac{a^2 \hbar^2}{2m} \quad (4.57)$$

Correção polimérica

Para o valor esperado em (4.22) temos:

$$\begin{aligned} \langle (E - V)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} N_n^2 z^{2\lambda-2n-1} e^{-z} [L_n^{2\lambda-2n-1}(z)]^2 [E - V(x)]^2 dx \\ &= - \int_{\infty}^0 N_n^2 z^{2\lambda-2n-2} e^{-z} [L_n^{2\lambda-2n-1}(z)]^2 [E - V(z)]^2 dz \end{aligned} \quad (4.58)$$

Onde $V(z) = D \left(\frac{z^2}{4\lambda^2} - \frac{z}{\lambda} \right)$. Tomando por simplicidade $\lambda = 1$ ($\frac{a^2 \hbar^2}{2m} = D$) e $n = 0$ (estado fundamental) temos:

$$\langle V \rangle = - \int_{\infty}^0 e^{-z} D \left(\frac{z^2}{4} - z \right) dz = -D/2 \quad (4.59)$$

$$\langle V^2 \rangle = - \int_{\infty}^0 e^{-z} D^2 \left(\frac{z^2}{4} - z \right)^2 dz = D^2/2 \quad (4.60)$$

A correção fica então:

$$E_m u = - \frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} (E^2 - 2E\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle) = - \frac{29\mu^2 m D^2}{96\hbar^2} \quad (4.61)$$

4.7 Potencial Pöschl-Teller

Os potenciais do tipo Pöschl-Teller [30] compreendem uma classe de potenciais unidimensionais com soluções analíticas, assim como o potencial Morse, pode ser usado para aproximar interações atrativas. Usaremos também este potencial para análise das correções.

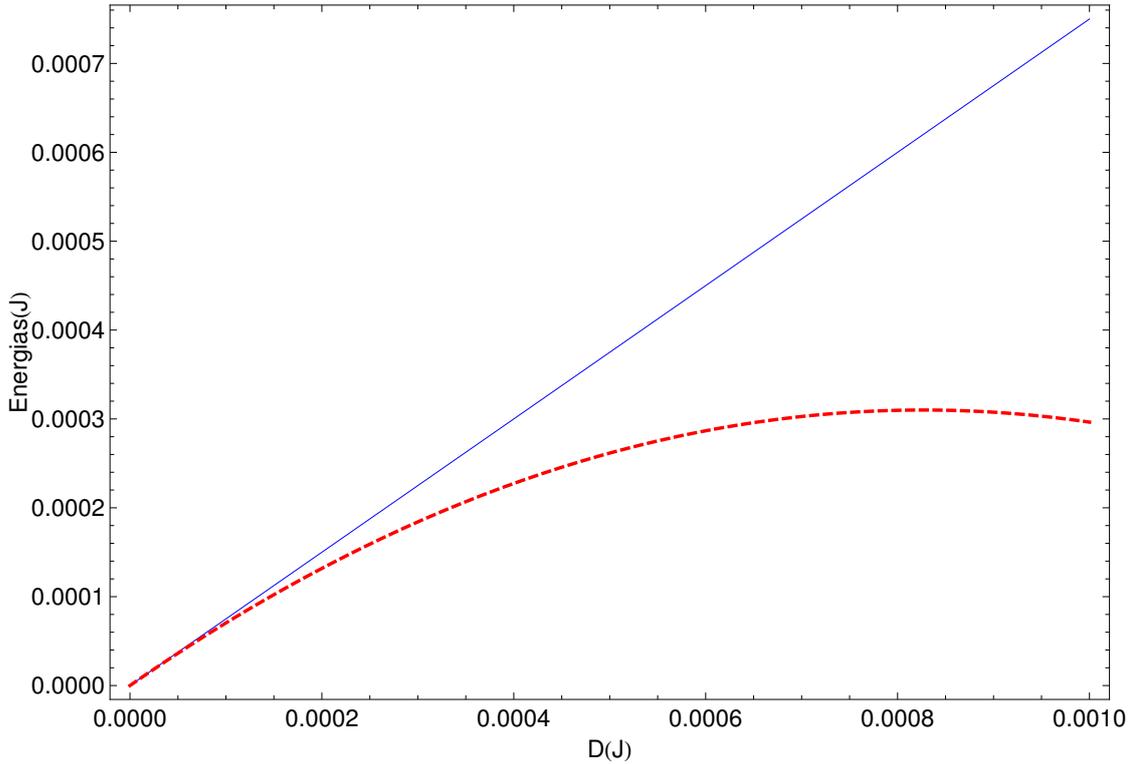


Figura 4: Energias para o potencial Morse em função no fator D . Caso usual (azul) e polimérico (vermelho). Massa de um próton e $\mu = 10^{-19}m$

Na representação de Schrödinger

Uma forma simplificada do potencial Poschl-Teller é dada por:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{\lambda(\lambda + 1)}{2} \operatorname{sech}^2(kx) \quad (4.62)$$

A equação de Schrödinger para esse potencial pode ser resolvida mais facilmente com a troca de variável $u = \operatorname{tgh}(kx)$. Temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= \frac{\partial \Psi}{\partial u} k \operatorname{sech}^2(kx) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial u} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial u} k(1 - u^2) \right] k \operatorname{sech}^2(kx) \\ &= \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial u^2} - 2ku \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right] k(1 - u^2) \end{aligned}$$

Inserindo na equação de Schrödinger:

$$(1 - u^2) \left\{ -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\partial}{\partial u} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial u} (1 - u^2) \right] - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{\lambda(\lambda + 1)}{2} \Psi \right\} = E \Psi \quad (4.63)$$

Ou

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\partial}{\partial u} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial u} (1 - u^2) \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{\lambda(\lambda + 1)}{2} \Psi + \frac{\epsilon}{1 - u^2} \Psi = 0 \quad (4.64)$$

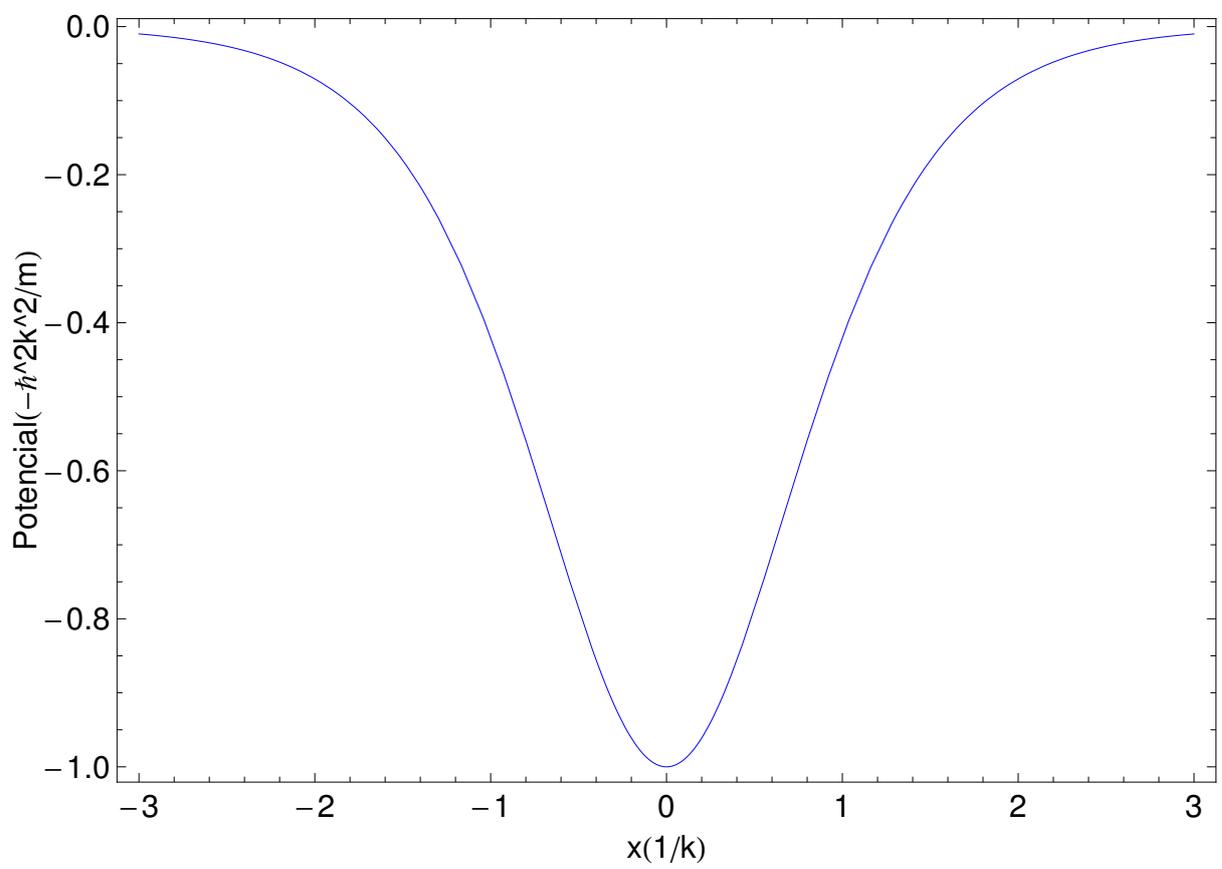


Figura 5: Curva do potencial Pöschl-Teller.

Onde $\epsilon = \frac{2Em}{\hbar^2 k^2} = -n^2$. As funções de onda e as energias são respectivamente:

$$\Psi = C \times P_\lambda^n[\text{tgh}(kx)] \quad (4.65)$$

E:

$$E = -\frac{n^2 k^2 \hbar^2}{2m} \quad (4.66)$$

Para $n, \lambda = 1$ a função de onda normalizada é:

$$\Psi = \sqrt{\frac{k}{2}} \text{sech}(kx) \quad (4.67)$$

Correção Polimérica

Para os valores esperados:

$$\langle V \rangle = -\frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{k}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{sech}^4(kx) dx = \frac{-2\hbar^2 k^2}{3m} \quad (4.68)$$

$$\langle V^2 \rangle = \frac{\hbar^4 k^4}{m^2} \frac{k}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{sech}^6(kx) dx = \frac{8\hbar^4 k^4}{15m^2} \quad (4.69)$$

Assim, a correção polimérica é dada por:

$$E_\mu = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} (E^2 - 2E\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle) = -\frac{\mu^2 m}{6\hbar^2} \frac{\hbar^4 k^4}{m^2} \left(\frac{1}{4} - \frac{2}{3} + \frac{8}{15} \right) \quad (4.70)$$

$$E_\mu = -\frac{7}{360} \mu^2 \hbar^2 k^4 \quad (4.71)$$

Na figura 6 temos o gráfico das energias, neste caso temos um efeito curioso, a correção relativa é maior para menores energias. Este engano aparente se dá pelo fato de que o potencial é um poço com ponto de mínimo negativo proporcional a $-k^2$ (diferentemente do potencial Morse onde o ponto de mínimo é linear com D), assim as energias decrescem rapidamente quando aumentamos a profundidade do poço. Se redefiníssemos o potencial tal que o ponto de mínimo estivesse fixo na origem (somando $\hbar^2 k^2/m$ ao potencial, ver figura 5) obteríamos uma curva de energia crescente no fator k .

4.8 Correção polimérica versus correção relativística

Nas seções anteriores calculamos correções poliméricas nos espectros em sistemas de baixa energia, mas em geral essas correções são muito pequenas. Nesta seção comparare-

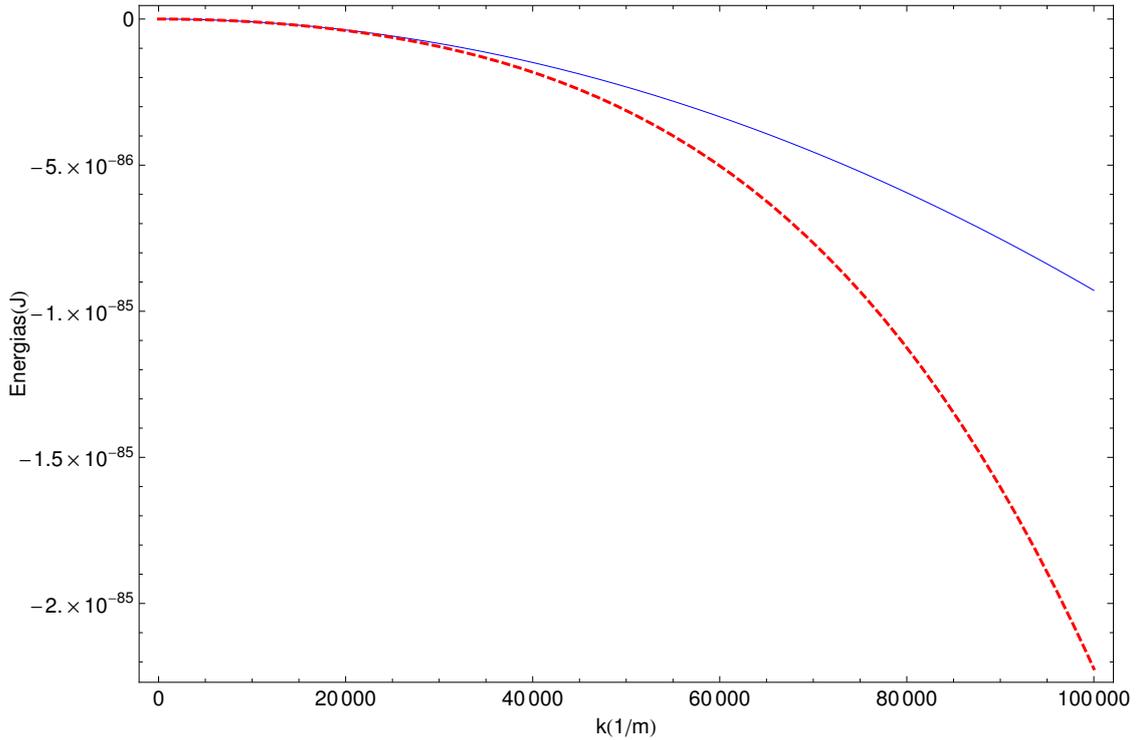


Figura 6: Energias para o potencial de Poschl-Teller em função de k . Caso usual (azul) e polimérico (vermelho). Massa de um próton e $\mu = 10^{-27}m$.

mos as influências de correções relativísticas e poliméricas.

Vimos anteriormente que o potencial perturbativo polimérico é proporcional ao operador p^4 , para o caso de correções relativísticas isto também é verdade, na Relatividade Especial a energia cinética é dada por:

$$E_c = mc^2 - m_0c^2 = \sqrt{p^2c^2 - m_0^2c^4} - m_0c^2 \simeq \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} \quad (4.72)$$

Assim a razão entre as perturbações relativística e polimérica é:

$$\frac{E_{rel}}{E_{poly}} = \frac{3\hbar^2}{m^2c^2\mu^2} \quad (4.73)$$

Para a massa de um próton e $\mu = 10^{-19}m$, por exemplo, a razão entre as correções é da ordem de 10^7 . A massa necessária para obtermos uma razão próxima da unidade é grande demais para ser considerada em sistemas quânticos de baixa energia, ou seja, os fenômenos poliméricos que esperamos que surjam da física na escala de Planck se manifestam numa ordem de energia muito maior que a Relatividade Restrita.

Na figura 7 temos a comparação entre as energias do modelo usual, polimérico e relativístico de primeira ordem para o sistema utópico de um oscilador harmônico simples com

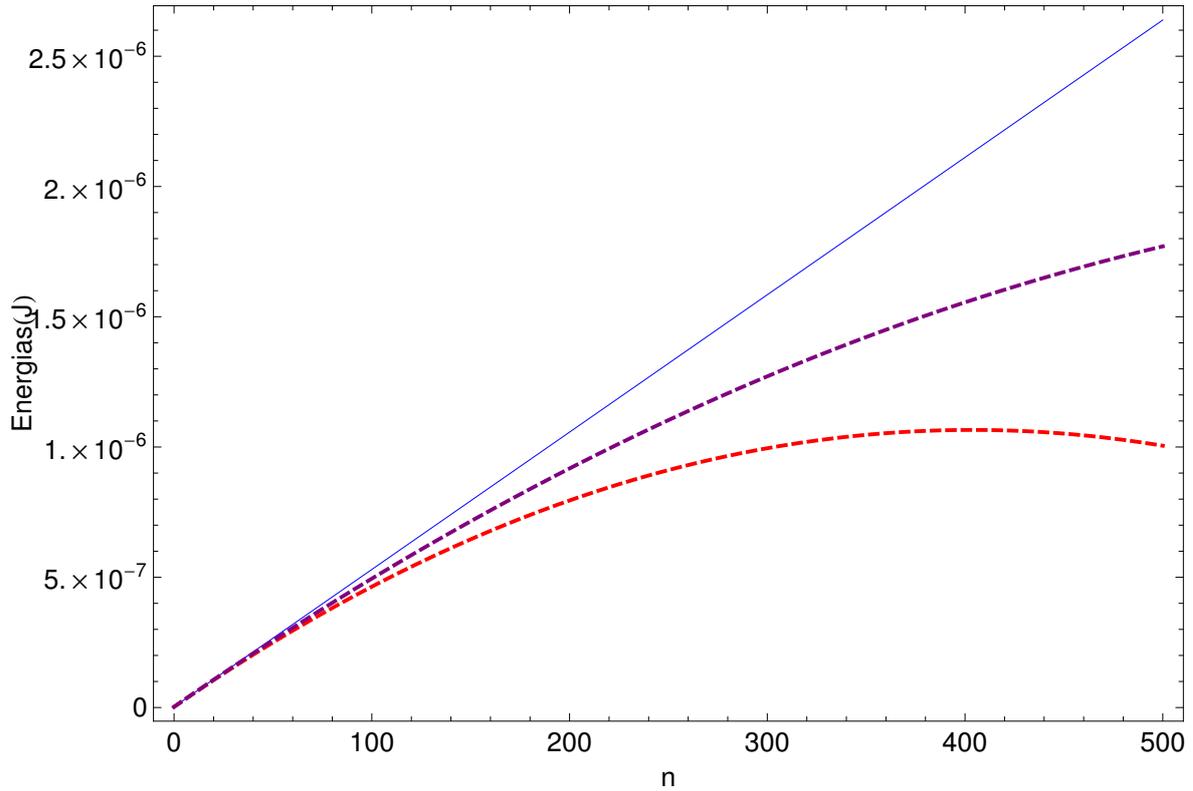


Figura 7: Energias para o oscilador harmônico: Caso usual (azul), polimérico (vermelho), aproximação relativística (roxo). Para massa de 10000 prótons, $\omega = 5 \times 10^{25} s^{-1}$ e $\mu = 5 \times 10^{-20} m$

massa equivalente a de dez mil prótons, ilustrando que a correção polimérica se tornaria mais significativa que a relativística num sistema muito massivo. O modelo polimérico em baixas energias compreende basicamente um *toy model*, as correções energéticas observadas neste trabalho possuem um valor conceitual, não sendo realmente aplicáveis fenomenologicamente. Tais efeitos de sistemas extremamente massivos e energéticos é algo que esperamos encontrar, por exemplo, na física de buracos negros, onde um modelo de MQ de uma partícula não é aplicável.

5 CONCLUSÃO

No decorrer deste trabalho revisamos alguns aspectos gerais envolvendo teorias ligadas a ideia da existência de um comprimento mínimo na natureza. Revisamos também a construção da Mecânica Quântica usual, a fim de tratar o modelo da Mecânica Quântica Polimérica e tentar mostrar que tipo de consequências essa quantização traz na física em um formalismo unidimensional não relativístico, tal como suas diferenças em relação ao modelo conhecido do Princípio da Incerteza Generalizado.

Vimos que o conceito polimérico de estrutura espacial quantizada gera uma interpretação física essencialmente oposta ao modelo de incerteza mínima. Em tal modelo as medidas de posição perdem sentido quando tentamos obter uma precisão superior a escala de Planck (na ordem de $10^{-35}m$), já no modelo polimérico, o efeito é a possibilidade de localização total em um determinado ponto da “rede espacial”. O conceito de momentum como conhecemos deixa de existir nesta escala e o substituímos por um análogo que representa uma combinação de translações discretas dentro dessa rede, além de agora, possuir espectro limitado.

Derivamos a partir da teoria de perturbação uma equação simples para calcular as correções poliméricas no espectro de energia para potenciais com estados ligados. Vimos que o potencial perturbativo é do tipo momentum quártico, assim como no modelo de incerteza mínima e das correções relativísticas em primeira ordem. Do mesmo modo que no caso relativístico, a correção polimérica gera energias menores, o que em geral implica em sistemas físicos mais estáveis, em oposição ao Princípio de Incerteza Generalizado, que aumenta a energia do sistema.

Aplicamos o nosso método para dois casos já contidos na literatura, onde as soluções são obtidas resolvendo diretamente a equação de estado, mostrando que o resultado obtido é o mesmo. Usamos o método em outros três potenciais conhecidos na Mecânica Quântica. Obtivemos gráficos destas correções como função de certos parâmetros do sistema para analisar a escala de energia das correções. Em todos os casos, as escalas de energia

envolvidas são muito maiores em magnitude do que, por exemplo, a energia de ionização do estado fundamental do átomo de hidrogênio (da ordem de $10^{-18}J$), um problema conhecido da Mecânica Quântica.

Em geral, o estudo deste modelo simplificado nos permitiu entender o conceito básico e fazer uma pequena análise qualitativa antes de estudar uma teoria bem mais complexa. Como perspectivas futuras podemos analisar alguns aspectos ainda no ramo de baixas energias, como explorar, por exemplo, propriedades termodinâmicas em sistemas específicos ou estender o método perturbativo para potenciais com soluções numéricas. Esperamos também no futuro ampliar os estudos no modelo de baixa energia à uma teoria mais completa de Gravitação Quântica.

APÊNDICE A – Transformada de Fourier discreta e polarização p

Na MQ usual alternamos entre as polarizações de momentum e posição através de transformadas de Fourier. Podemos fazer um análogo para o caso polimérico. Seja a função $\phi(k)$, onde k é um número real, dada por:

$$\phi(k) = \sum_x \Psi(x) e^{\frac{-ikx}{\hbar}} \quad (\text{A.1})$$

Com $x = n\mu$. Consideremos a equação (3.38), somando em todos os valores de x e rearranjando os termos temos:

$$\frac{2\hbar^2}{m\mu^2} \text{sen}^2\left(\frac{\mu k}{2\hbar}\right) \phi(k) + V(i\hbar\partial/\partial k)\phi(k) = E\phi(k) \quad (\text{A.2})$$

Que corresponde a equação (3.40). Embora k seja um número real qualquer, a periodicidade de $\phi(k)$ implícita em (A.1) condiz com a condição (3.27).

A noção de polarização de momentum não é trivial no caso polimérico pois não há um operador hermitiano \hat{p} definido. No entanto, podemos gerar um espaço de funções análogo, que justifica (3.22).

Um tratamento diferente é aplicado em [27], onde é definida a polarização de p_μ , e demonstra-se que o espaço de funções gerado é unitariamente equivalente à polarização p .

APÊNDICE B – Termo cinético e degenerescências

Como comentado na seção 3.2.2 a escolha do termo cinético do hamiltoniano na MQP não é análoga ao caso clássico. Analisemos inicialmente a periodicidade do momentum polimérico e de seu quadrado:

$$\hat{p}_\mu = \frac{\hbar}{\mu} \operatorname{sen} \left(\frac{\mu \hat{p}}{\hbar} \right) \quad (\text{B.1})$$

$$\hat{p}_\mu^2 = \frac{\hbar^2}{\mu^2} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\mu \hat{p}}{\hbar} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu^2} \left[1 - \cos \left(\frac{2\mu \hat{p}}{\hbar} \right) \right] \quad (\text{B.3})$$

Assim, um termo cinético proporcional a \hat{p}_μ^2 tem um período que é apenas metade do intervalo indicado em (3.27). Esta disparidade gera um conjunto de soluções redundantes, repetindo os autovalores já encontrados.

Outra maneira de enxergar é analisando a equação (3.38). Onde fizemos a mudança de escala $\mu \rightarrow \mu/2$ no termo cinético. Desfazer esta mudança é equivalente a considerar autovalores de posição múltiplos de $\mu/2$ na mesma equação. Vimos que os autoestados de posição compreendem agora estados discretos, ortogonais e normalizáveis, assim, podemos representar um estado do sistema como:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |n\mu\rangle \quad (\text{B.4})$$

De modo que os conjuntos de autoestados de H e \hat{x} tem mesma dimensionalidade. Assim a escolha dos valores de posição como múltiplos inteiros ou inteiros e semi-inteiros de $n\mu$ influi no número de estados do sistema (mesmo como dimensão infinita ainda temos uma correspondência um-a-um no número de estados, o que indica que se dobrarmos os autovetores de posição, dobraremos os de energia também).

Um caso onde podemos enxergar isto de forma mais simples é a solução para partícula

numa caixa da seção 4.3, onde a dimensão é finita. As energias exatas dadas pela equação (4.32) são periódicas em n , os valores são únicos apenas para:

$$\frac{n\mu}{a} \leq 1 \quad (\text{B.5})$$

Para $a \gg \mu$ o número de estados possíveis é $n_{max} \simeq a/\mu$. Se no entanto considerássemos também autovalores múltiplos semi-inteiros de μ para a posição, teríamos $n_{max} \simeq 2a/\mu$, quebrando a condição de não-degeneração (B.5).

Como discutido em [24], escolher μ muito pequeno não é suficiente para recuperarmos os resultados da MQ usual no limite contínuo, dado que estamos alterando de maneira mais significativa a estrutura do espaço. A necessidade de se escolher um termo cinético:

$$H_k = \frac{\hbar^2}{m\mu^2} \left[1 - \cos\left(\frac{\mu\hat{p}}{\hbar}\right) \right] \neq \frac{\hat{p}_\mu^2}{2m} \quad (\text{B.6})$$

Aparece como uma característica extra intrínseca do modelo polimérico e invisível classicamente.

A abordagem perturbativa usada no capítulo 4 é insensível a escolha do termo cinético, já que ainda estamos trabalhando no espaço de Hilbert usual, e a única condição a ser satisfeita é a convergência das séries perturbativas.

REFERÊNCIAS

- [1] JEANS, J. H. On the Laws of Radiation. **Proceedings of the Royal Society of London**, **A** v. 76, n. 513, p. 545–52, dez. 1905.
- [2] PLANCK, M. Über eine Verbesserung der Wien'schen Spectralgleichung. **Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft** v. 2, p. 202–204, 1900.
- [3] EINSTEIN, A. Concerning an Heuristic Point of View Toward the Emission and Transformation of Light. **Annalen Phys.** , v. 17, p. 132-148, mar. 1905.
- [4] BOHR, N. On the Constitution of Atoms and Molecules. **Philosophical Magazine**, v. 26, n. 151, p. 1–25, jul. 1913.
- [5] BROGLIE, Louis de. XXXV. A tentative theory of light quanta. **Philosophical Magazine Series 6**, v. 47, n. 278, p. 446-458, 1924.
- [6] HEISENBERG, W. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. **Zeitschrift für Physik** , v. 43, n. 3, p. 172-198, 1927.
- [7] LORENTZ, H. A. Eletromagnetic Phenomena in a System Moving with any Velocity Smaller than that of Light. **Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences**, v. 6, p. 809-831, 1904.
- [8] EINSTEIN, A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. **Annalen Phys.**, v. 17, p. 891-921, jun. 1905.
- [9] EINSTEIN, A. Die Feldgleichungen der Gravitation. **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin**, p. 844–847, 1915.
- [10] The Standard Model. Disponível em <<https://home.cern/about/physics/standard-model>>. Acesso em 06 de julho de 2016.
- [11] The Greatest Unsolved Problem in Theoretical physics. Disponível em <<https://medium.com/starts-with-a-bang/the-greatest-unsolved-problem-in-theoretical-physics-383edf6b014c#.hdzgm685j>>. Acesso em 06 de julho de 2016.
- [12] MARTIN, S. P. A supersymmetry Primer.(arXiv:hep-ph/9709356v7)
- [13] Extra dimensions, gravitons, and tiny black holes. Disponível em <<https://home.cern/about/physics/extra-dimensions-gravitons-and-tiny-black-holes>>. Acesso em: 06 de julho de 2016.
- [14] BECKER, B., BECKER, M., Schwarz, J. **String theory and M-theory: A modern introduction**. Cambridge: Cambridge University Press, 15 jan. 2007. 739 p.
- [15] ROVELLI, C. Loop quantum gravity. **Living Rev. Rel**, v. 1, n. 1, p. 41-135, 1998.

- [16] SEIBERG, N.; WITTEN, E. String theory and noncommutative geometry. **Journal of High Energy Physics**, v. 1999, n. 09, p. 032, 1999.
- [17] KANG, L., WANG, J., CHEN, C. Representation of Noncommutative Phase Space. **Mod. Phys. Lett.**, v. A20, p. 2165-2174, 2005.
- [18] GAYRAL, V., GRACIA-BONDÍA, J. M., RUIZ, F. R.. Position-dependent noncommutative products: classical construction and field theory. **Nucl. Phys.**, v. B727, p. 513-516, 2005.
- [19] GROENEWOLD, H. J. On the Principles of elementary quantum mechanics. **Physica**, v 12 p. 405-460, 1946.
- [20] Mezincescu, L. Star Operation in Quantum Mechanics. (arXiv:hep-th/0007046)
- [21] MIRZA, B., NARIMANI, R., ZAREI, M. Aharonov-Casher effect for spin one particles in a noncommutative space. **Eur. Phys. J.**, v. C48, p. 641-645, 2006.
- [22] LI, K., DULAT, S. The Aharonov-Bohm effect in noncommutative quantum mechanics. **Eur. Phys. J.**, v C46, p. 825-828, 2006.
- [23] BLADO, G., OWENS, C., MEYERS, V., Quantum wells and the generalized uncertainty principle. **European Journal of Physics**, v. 35, n. 6, p. 065011, 2014.
- [24] ASHTEKAR, A., FAIRHURST, S., WILIS, J. L. Quantum gravity, shadow estates, and quantum mechanics. **Class. Quant. Grav.**, v. 20, p. 1031-1062, 2002.
- [25] MARTIN, S.; PIERO, N.; MARCUS, B. Physics on Smallest-An Introduction to Minimal Length Phenomenology. arXiv preprint Arxiv:1202.1500, 2012.
- [26] CHACON-ACOSTA, G., MANRIQUE, E., DAGDUG, L., MORALES-TECOTL, H. A., Statistical thermodynamics of polymer quantum systems. **SIGMA**, v. 7, p. 110-132, 2011.
- [27] GORJI, M. A., NOZARI, K., VAKILI, B. Polymer quantization versus the Snyder noncommutative space. **Class. Quant. Grav.**, v. 32, n. 15, p. 155007, 2015.
- [28] MORSE, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. **Phys. Rev.** **34**, p. 57-64, 1929.
- [29] DAHL, J. P., SPRINGBORG, M. The Morse Oscillator in Position Space, Momentum Space, and Phase Space. **J. Chem. Phys.** v. 88, p. 4535, 1988.
- [30] PÖSCH, G., TELLER, E. Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators. **Zeitschrift für Physik**, V. 83 p. 143-151, 1933.