



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

FRANCISCO ANCELMO PINHEIRO FERREIRA

**SOBRE A INTRODUÇÃO DE UM OPERADOR DE TRANSLAÇÃO
GENERALIZADO NA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA**

FORTALEZA

2019

FRANCISCO ANCELMO PINHEIRO FERREIRA

SOBRE A INTRODUÇÃO DE UM OPERADOR DE TRANSLAÇÃO GENERALIZADO
NA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA

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

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

FORTALEZA
2019

FRANCISCO ANCELMO PINHEIRO FERREIRA

SOBRE A INTRODUÇÃO DE UM OPERADOR DE TRANSLAÇÃO GENERALIZADO
NA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA

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

Aprovada em 31/01/2019.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Ilde Guedes da Silva
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Murilo Pereira de Almeida
Universidade Federal do Ceará (UFC)

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

Prof. Dr. André Mauricio Conceição de Souza
Universidade Federal de Sergipe (UFS)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca do Curso de Física

F441s Ferreira, Francisco Ancelmo Pinheiro.
SOBRE A INTRODUÇÃO DE UM OPERADOR DE TRANSLAÇÃO GENERALIZADO NA
MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA / Francisco Ancelmo Pinheiro Ferreira. – Forta-
leza, 2019.
66.:il.

Tese (doutorado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física,
Fortaleza, 2019.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

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

1. Mecânica quântica. 2. Espaço de Hilbert. 3. Massa dependente da posição. 4. Oscilador
harmônico. 5. Teoria da informação. I. Título.

CDD 530

À minha esposa Luana

e

ao meu filho Pedro Afonso

Meu fado é não entender quase tudo.
Sobre o nada, eu tenho profundidades.

Manoel de Barros

RESUMO

Neste trabalho analisamos alguns dos aspectos relacionados a introdução, na mecânica quântica não-relativística, de um operador de translação cuja ação é função do ponto de aplicação. A partir da introdução deste operador, derivamos uma relação de comutação fundamental modificada e uma representação modificada para o operador momento e mostramos que, por sua vez, tais modificações exigem uma reestruturação do espaço de Hilbert. Vemos também que o “novo” espaço de Hilbert pode ser associado ao caso de uma partícula com massa dependente da posição e também ao de uma partícula movendo-se em um espaço curvo. Ainda, comparamos o nosso formalismo com o formalismo de von Roos, analisamos o limite clássico desse formalismo, resolvemos o problema de uma partícula com massa dependente da posição em duas dimensões e terminamos analisando algumas grandezas da teoria da informação para o caso de uma partícula harmônica unidimensional.

Palavras-chave: Mecânica quântica. Espaço de Hilbert. Massa dependente da posição. Oscilador harmônico. Teoria da informação.

ABSTRACT

In this work we analyze some aspects related to the introduction, in the non-relativistic quantum mechanics, of a translation operator whose action is a function of the point of application. From the introduction of this operator, we derive a modified canonical commutation relation and a modified representation for the momentum operator and we show that such changes require a restructuring of the Hilbert space. We also see that the “new” Hilbert space can be associated with the case of a particle with position dependent mass and also that of a particle moving in a curved space. Still, we compare our formalism with the formalism of von Roos, we analyze the classical limit of this formalism, we solve the problem of a particle with position-dependent mass in two dimensions and we end up analyzing some quantities of information theory for the case of a one-dimensional harmonic particle.

Keywords: Quantum mechanics. Hilbert space. Position dependent mass. Harmonic oscillator. Information theory.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	FUNDAMENTOS DE MECÂNICA QUÂNTICA	12
2.1	Pré-requisitos Matemáticos	12
2.1.1	Espaço Vetorial	12
2.1.2	Operadores Lineares	14
2.1.3	Operadores Auto-adjuntos	15
2.1.4	Espaço de Hilbert	17
2.2	Quantização Canônica	18
2.2.1	Axiomas da Quantização Canônica	18
2.2.2	Representação de Heisenberg <i>Versus</i> Representação de Schrödinger	21
2.2.3	Funções de Onda nas Bases de Posição e Momento	22
3	FORMALISMO	26
3.1	Formalismo Unidimensional	26
3.1.1	O Operador de Translação Generalizado	26
3.1.2	Relação de Comutação Fundamental	27
3.1.3	Produto Interno	29
3.1.4	A Equação de Schrödinger	34
3.2	Formalismo N -dimensional	36
3.2.1	Construção da Representação de Coordenadas	36
3.2.2	A Equação de Schrödinger N -dimensional	38
3.2.3	Conexão com o Formalismo de von Roos	39
4	APLICAÇÕES	43
4.1	Equação de Schrödinger em Coordenadas Polares	43
4.2	Limite Clássico	46
4.3	Medidas de Informação para o Oscilador Harmônico Imerso em um Campo Elétrico Uniforme	51
4.3.1	Definição das Medidas de Interesse	51
4.3.2	Oscilador Harmônico em um Campo Elétrico Fixo	53
4.3.3	Análise das Medidas de Informação	57
5	CONCLUSÃO	60
	APÊNDICE A - GRUPO DAS TRANSLAÇÕES DEPENDENTES DA POSIÇÃO	61

APÊNDICE B - DEMOSTRAÇÃO DE ALGUMAS DAS PROPRIEDADES DO PARÊNTESES DE POISSON GENERALIZADO	63
REFERÊNCIAS	64

1 INTRODUÇÃO

Em 2011, R. N. Costa Filho *et al.* [1] propuseram o operador de translação

$$\hat{T}_\gamma(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon(1 + \gamma x)\rangle, \quad (1.1)$$

o qual é não-aditivo e possui como gerador o momento

$$\hat{p}_\gamma = (1 + \gamma \hat{x})\hat{p}, \quad (1.2)$$

sendo \hat{x} e \hat{p} os operadores posição e momento, respectivamente, tradicionais. Tais modificações implicam numa equação de Schrödinger do tipo massa dependente da posição:

$$\frac{1}{2m(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2m(x)} \right) \frac{d\psi(x)}{dx} + E\psi(x) = 0, \quad (1.3)$$

com $m(x) \equiv 1/(1 + \gamma x)^2$ sendo a massa efetiva da partícula. Essa proposta teve boa aceitação no meio científico e a partir dela se originaram vários trabalhos (veja, por exemplo, [2–14]).

Recentemente, R. N. Costa Filho e J. P. M. Braga [15] mostraram que o operador de translação generalizado é adequado para descrever partículas que trafegam em certos espaços com métrica não-euclidiana. Mais ainda, mostraram que nesses espaços a métrica produz uma incerteza mínima no operador momento.

Do que foi exposto acima, torna-se patente que o operador de translação generalizado possui um caráter dual, podendo ser usado na descrição tanto de uma partícula com massa dependente da posição quanto na de uma partícula viajando em um espaço curvo. Apresentar esse formalismo de forma unificada e explicar alguns pormenores desta abordagem é o primeiro propósito desta tese. O segundo propósito deste trabalho é apresentar uma extensão do formalismo para N dimensões euclidianas. O terceiro propósito é estabelecer um paralelo com o formalismo de von Roos [16]. O quarto objetivo é examinar o limite clássico. Por último, objetivamos também a resolução de alguns problemas tradicionais da mecânica quântica e da mecânica clássica, agora postos sob a ótica do formalismo de operador de translação generalizado.

No capítulo 2 apresentamos uma revisão dos fundamentos da mecânica quântica. Pré-requisitos matemáticos presentes na álgebra linear e análise funcional são revisitados, também relembremos os postulados da quantização canônica e as representações de Heisenberg e de Schrödinger. No capítulo 3, inicialmente mostramos o conceito de translação dependente da posição. A partir desta definição, derivamos uma relação de comutação fundamental modificada. Para satisfazer esta relação de comutação, propomos uma “nova” forma para o operador

momento, enquanto mantemos inalterado o operador de posição. As representações desses operadores na base de coordenadas exige uma reformulação do produto interno, o que por sua vez evidencia a dualidade na interpretação do formalismo de operador de translação generalizado. Apresentamos ainda uma equação de Schrödinger diferente da tradicional e uma nova equação da continuidade. Terminamos com uma generalização do formalismo para N dimensões. O capítulo 4 é devotado as aplicações. Inicialmente, estudamos o caso do oscilador harmônico bidimensional, para o caso de uma massa dependente da posição, descrito em coordenadas polares. Também exploramos o limite clássico do formalismo e terminamos com o cálculo (numérico) de algumas grandezas da teoria da informação em mecânica quântica. A conclusão desta tese é feita no capítulo 5.

No decorrer do texto, salvo indicação explícita em contrário, faremos uso da *convenção de soma de Einstein*: se o mesmo índice aparecer duas vezes, este deve ser somado sobre todos os seus possíveis valores. Também usaremos unidades atômicas nas quais \hbar (constante de Planck dividida por 2π) = q (carga da partícula) = m (massa da partícula) = 1.

2 FUNDAMENTOS DE MECÂNICA QUÂNTICA

Este capítulo se propõe a fazer uma revisão sobre alguns tópicos de mecânica quântica, os quais são necessários para o entendimento do texto¹. Na revisão, utilizamos as referências [17–20].

2.1 Pré-requisitos Matemáticos

2.1.1 Espaço Vetorial

Um *espaço vetorial* \mathcal{V} é um conjunto de elementos, chamados *vetores*, o qual é fechado sob adição e multiplicação por *escalares*. O que significa que, se ψ e φ são vetores então $a\psi + b\varphi$ também é, sendo a e b escalares arbitrários.

Um conjunto de vetores $\{\psi_i\}$ é dito ser *linearmente independente* se

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n = 0, \quad (2.1)$$

implica que $c_i = 0$ para todo i . Se essa condição não vale, o conjunto de vetores é dito ser *linearmente dependente*.

O número máximo de vetores linearmente independentes em um espaço é chamado de *dimensão* desse espaço. Um conjunto máximo de vetores linearmente independentes forma uma *base* para o espaço. Qualquer vetor no espaço pode ser expresso como uma combinação linear de vetores de base.

Um *produto interno* (ou *produto escalar*) para um espaço vetorial associa um escalar (ψ, φ) com cada par ordenado de vetores, e deve satisfazer os seguintes axiomas:

- A1. $(\psi, \varphi) = (\varphi, \psi)^*$;
- A2. $(\psi, a\varphi_1 + b\varphi_2) = a(\psi, \varphi_1) + b(\psi, \varphi_2)$;
- A3. $(\psi, \psi) \geq 0$, com a igualdade válida se, e somente se, $\psi = 0$.

O produto interno generaliza as noções de comprimento e ângulo para espaços arbitrários. Se o produto interno de dois vetores é zero, esses vetores são ditos *ortogonais*.

A *norma* de um vetor é definida como $\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$. O produto interno e a norma

¹Aqueles que se sentirem suficientemente familiares com os fundamentos dessa teoria devem ignorar este capítulo e começar diretamente do capítulo 3.

verificam dois resultados importantes:

$$|(\psi, \varphi)|^2 \leq (\psi, \psi)(\varphi, \varphi) \quad (\text{desigualdade de Schwarz}), \quad (2.2)$$

$$\|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\| \quad (\text{desigualdade triangular}). \quad (2.3)$$

Pode-se estender o conceito de distância no \mathbb{R}^3 a qualquer espaço vetorial \mathcal{V} dotado de um produto interno, para tanto, considere dois vetores ψ e φ pertencentes a \mathcal{V} , definimos a *distância (ou métrica)* $d(\psi, \varphi)$ entre ψ e φ em \mathcal{V} por

$$d(\psi, \varphi) = \|\psi - \varphi\| \quad (2.4)$$

tal que:

- (i) $d(\psi, \varphi) = d(\varphi, \psi)$;
- (ii) $d(\psi, \psi) = 0$;
- (iii) $d(\psi, \varphi) > 0$ se $\psi \neq \varphi$, e
- (iv) $d(\psi, \varphi) \leq d(\psi, \chi) + d(\chi, \varphi)$ para quaisquer $\psi, \varphi, \chi \in \mathcal{V}$.

Diz-se que um espaço vetorial onde temos uma métrica definida é um *espaço métrico*.

Um conjunto de vetores $\{\psi_i\}$ é dito ser *ortonormal*, se esses vetores forem dois a dois ortogonais e um a um de norma unitária, ou seja,

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}. \quad (2.5)$$

Correspondentemente a qualquer espaço vetorial \mathcal{V} existe o *espaço dual* de *funcionais lineares*. Um funcional linear F associa um escalar $F(\psi)$ a cada vetor ψ pertencente a \mathcal{V} , tal que

$$F(a\psi + b\varphi) = aF(\psi) + bF(\varphi), \quad (2.6)$$

para quaisquer vetores ψ e φ , e quaisquer escalares a e b . O conjunto de funcionais lineares constitui ele próprio um espaço vetorial \mathcal{V}' se definirmos que

$$(aF_1 + bF_2)(\psi) = aF_1(\psi) + bF_2(\psi). \quad (2.7)$$

Teorema 2.1 (Riesz). *Existe uma correspondência um a um entre funcionais lineares F pertencentes a \mathcal{V}' e vetores f pertencentes a \mathcal{V} , tal que todos os funcionais lineares tem a forma*

$$F(\psi) = (f, \psi), \quad (2.8)$$

f sendo um vetor fixo e ψ um vetor arbitrário.

Notação de Dirac

Na notação de Dirac, os vetores pertencentes a \mathcal{V} são chamados de *kets* e representados como $|\psi\rangle$. Os funcionais lineares no espaço dual \mathcal{V}' são chamados de *bras* e escritos como $\langle F|$. A ação do funcional sobre o vetor é representada como

$$F(\psi) = \langle F|\psi\rangle. \quad (2.9)$$

De acordo com o teorema de Riesz, existe uma correspondência um a um entre bras e kets. Portanto, podemos usar o mesmo caractere alfabético para o funcional linear (pertencente ao espaço dual) e seu respectivo vetor (membro do espaço vetorial), deixando para a notação de bras e kets a tarefa de determinar em qual dos dois espaços estamos. A (2.8) pode então ser reescrita como

$$\langle F|\psi\rangle = (F, \psi), \quad (2.10)$$

$|F\rangle$ sendo o vetor previamente denotado por f . Note, no entanto, que o teorema de Riesz estabelece, por construção, uma correspondência *antilinear* entre bras e kets. Se $\langle F| \leftrightarrow |F\rangle$, então

$$a^* \langle F| + b^* \langle G| \leftrightarrow a|F\rangle + b|G\rangle. \quad (2.11)$$

Por conta da relação (2.10), é possível tratar o “braket” $\langle F|\psi\rangle$ como meramente outra notação para o produto interno.

2.1.2 Operadores Lineares

Um *operador* em um espaço vetorial mapeia vetores em vetores, isto é, se \hat{A} é um operador e $|\psi\rangle$ é um vetor, então $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ é outro vetor.

Um *operador linear* é aquele que satisfaz

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle. \quad (2.12)$$

Afirmar que dois operadores são iguais, $\hat{A} = \hat{B}$, significa que $\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$ para qualquer vetor $|\psi\rangle$. Assim, podemos definir a soma e o produto de operadores,

$$(\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle, \quad (2.13)$$

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle), \quad (2.14)$$

para todo $|\psi\rangle$.

Até aqui nós definimos operadores como objetos que atuam somente em kets, e pela esquerda dos mesmos. No entanto, podemos também definir a atuação de operadores em bras

(pela direita) como

$$(\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle) = \langle \varphi | (\hat{A} | \psi \rangle), \quad (2.15)$$

para quaisquer vetores $\langle \varphi |$ e $| \psi \rangle$.

O *Adjunto* \hat{A}^\dagger de um operador \hat{A} é definido como

$$\langle \varphi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle. \quad (2.16)$$

Algumas propriedades úteis que seguem diretamente da definição (2.16) são

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger, \quad (2.17)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \quad (2.18)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (2.19)$$

Em adição ao produto interno de um bra e um ket, $\langle \psi | \varphi \rangle$, o qual é um escalar, podemos definir um *produto externo*, $|\varphi\rangle\langle\psi|$. Este objeto é um operador, como pode ser visto pela sua atuação sobre um ket arbitrário:

$$(|\varphi\rangle\langle\psi|)|\lambda\rangle = |\varphi\rangle(\langle\psi|\lambda\rangle). \quad (2.20)$$

Como um operador é definido especificando sua ação sobre um ket arbitrário e tendo como resultado um outro ket, esta operação completamente caracteriza o produto externo como um operador. Da (2.16) segue que

$$(|\varphi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\varphi|. \quad (2.21)$$

Uma característica útil de um operador \hat{A} é seu *traço*, definido como

$$Tr(\hat{A}) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle, \quad (2.22)$$

onde $\{|\alpha\rangle\}$ pode ser qualquer base ortonormal.

2.1.3 Operadores Auto-adjuntos

Um operador \hat{A} que é igual ao seu adjunto \hat{A}^\dagger é chamado *auto-adjunto*. Isso significa que ele satisfaz

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle^* \quad (2.23)$$

e que o domínio de \hat{A} (*i.e.*, o conjunto de kets $|\psi\rangle$ para os quais $\hat{A}|\psi\rangle$ é bem definido) coincide com o domínio de \hat{A}^\dagger . Um operador que satisfaz somente a (2.23) é chamado *hermitiano*².

O teorema seguinte é útil na identificação de operadores hermitianos em espaços

²Na literatura matemática esses operadores são costumeiramente chamados de “simétricos”.

vetoriais complexos. A demonstração encontra-se na referência [20].

Teorema 2.2. *Se $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*$ para todo $|\psi\rangle$, então $\langle \varphi_1 | \hat{A} | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_2 | \hat{A} | \varphi_1 \rangle^*$ para todo $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, e portanto $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.*

Se um operador atuando em um certo ket produz um múltiplo escalar do mesmo ket,

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \quad (2.24)$$

chamamos o ket $|a\rangle$ de *autoket* e o escalar a de *autovalor* do operador \hat{A} . A correspondência antilinear (2.11) entre bras e kets, e a definição de operador adjunto \hat{A}^\dagger , implicam que a equação de autovalor, correspondentemente a (2.24), para os bras é

$$\langle a | \hat{A}^\dagger = a^* \langle a|. \quad (2.25)$$

O próximo teorema é bastante útil na mecânica quântica. A demonstração de tal teorema, pode ser encontrada, por exemplo, na referência [18].

Teorema 2.3. *Se \hat{A} é um operador hermitiano, então todos os seus autovalores são reais. Além disso, autokets de \hat{A} , correspondentes a diferentes autovalores, são ortogonais.*

Conjuntos completos

Um conjunto de vetores $\{|a\rangle\}$ é dito *completo* se o mesmo forma uma base para o espaço em questão, ou seja, dado um vetor $|\psi\rangle$ arbitrário, este poderá ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_a \psi_a |a\rangle. \quad (2.26)$$

Se este conjunto é também ortonormal, então pela (2.5) temos que

$$\langle a' | \psi \rangle = \sum_a \psi_a \langle a' | a \rangle = \psi_{a'} \quad (2.27)$$

E então, a (2.26) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_a \langle a | \psi \rangle |a\rangle \\ &= \left(\sum_a |a\rangle \langle a| \right) |\psi\rangle, \end{aligned}$$

que implica

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = \hat{1}. \quad (2.28)$$

Se $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ e os autokets formam um conjunto completo ortonormal, então o operador pode ser reconstruído em uma forma diagonal útil em função de seus autovalores e autovetores:

$$\hat{A} = \sum_a a|a\rangle\langle a|. \quad (2.29)$$

Pode-se usar essa forma diagonal para definir a *função de um operador*,

$$f(\hat{A}) = \sum_a f(a)|a\rangle\langle a|. \quad (2.30)$$

Conjunto de operadores compatíveis

Teorema 2.4. *Se \hat{A} e \hat{B} são operadores auto-adjuntos, cada um dos quais possuindo um conjunto completo de autokets, e se $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, então existe um conjunto completo de kets os quais são autokets simultâneas de \hat{A} e \hat{B} .*

Seja $(\hat{A}, \hat{B}, \dots)$ um conjunto de operadores mutuamente comutativos que possuem um conjunto completo de autokets simultâneos. Correspondentemente a um autovalor particular para cada operador, pode existir mais que um autoket. Se, no entanto, não existir mais que um autoket para cada conjunto de autovalores (a_n, b_m, \dots) , então diz-se que o conjunto $(\hat{A}, \hat{B}, \dots)$ forma um *conjunto completo de operadores compatíveis*.

Teorema 2.5. *Qualquer operador que comute com todos os membros de um conjunto completo de operadores compatíveis deve ser uma função dos operadores desse conjunto.*

2.1.4 Espaço de Hilbert

Para espaços vetoriais (munidos de um produto interno) de dimensão infinita é natural esperar que a expansão (2.26) seja válida trocando-se a série finita por uma infinita. Isso imediatamente levanta a questão sobre a convergência de tais séries infinitas. Com a métrica introduzida, pode-se dizer que a sequência infinita $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ de vetores num espaço vetorial \mathcal{V} tende para um limite $\varphi \in \mathcal{V}$ (ou seja, $\varphi_n \rightarrow \varphi$ quando $n \rightarrow \infty$) se, e somente se, $d(\varphi_n, \varphi) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$. Então para uma série infinita pode-se dizer que $\sum_{j=1}^{\infty} \psi_j$ converge para φ se a sequência de somas parciais definidas para $n = 1, 2, \dots$ por $\varphi_n = \sum_{j=1}^n \psi_j$ converge para φ .

Uma sequência para a qual

$$\lim_{n, m \rightarrow \infty} d(\varphi_n, \varphi_m) = 0$$

(onde m e n tendem para o infinito independentemente) é chamada de *sequência de Cauchy*.

Definição 2.1. *Um espaço de Hilbert \mathcal{H} é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos \mathbb{C} , no qual está definido um produto interno e de tal maneira que toda sequência de Cauchy converge para um elemento de \mathcal{H} .*

Definição 2.2. Um espaço de Hilbert \mathcal{H} é dito ser separável se existir um conjunto enumerável de elementos \mathcal{S} contido em \mathcal{H} tal que todo vetor $\psi \in \mathcal{H}$ possui algum elemento $\varphi \in \mathcal{S}$ arbitrariamente perto dele. Ou seja, para qualquer $\psi \in \mathcal{H}$ e qualquer $\epsilon > 0$ deve existir um $\varphi \in \mathcal{S}$ tal que $d(\varphi, \psi) < \epsilon$. O conjunto \mathcal{S} é então dito ser denso em \mathcal{H} .

Dadas as definições acima os seguintes dois teoremas são suficientes para que possamos garantir a validade de (2.26) para espaços de dimensão infinita.

Teorema 2.6. Se um espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão infinita é separável, então este espaço contém pelo menos um conjunto completo ortonormal, e todo conjunto completo ortonormal de vetores neste espaço é enumerável.

Teorema 2.7. Se o conjunto de vetores ψ_1, ψ_2, \dots forma um conjunto completo ortonormal para um espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão infinita, então qualquer vetor ψ deste espaço pode ser escrito como

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | \psi \rangle \psi_k. \quad (2.31)$$

2.2 Quantização Canônica

2.2.1 Axiomas da Quantização Canônica

Dado um sistema clássico isolado, podemos construir um sistema quântico correspondente, seguindo o conjunto de axiomas listados abaixo.

- A1. Existe um espaço de Hilbert \mathcal{H} para qualquer sistema quântico e o *estado* desse sistema é completamente descrito por um ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Mais ainda, dois kets $|\psi\rangle$ e $c|\psi\rangle$ ($c \in \mathbb{C}, c \neq 0$) descrevem o mesmo estado.
- A2. Uma variável dinâmica A em mecânica clássica é trocada por um operador hermitiano \hat{A} atuando em \mathcal{H} . O operador \hat{A} é frequentemente chamado de *observável*. O resultado de uma medida feita de A é um dos autovalores do operador \hat{A} . (A hermiticidade de \hat{A} é assumida a fim de garantir que seus autovalores sejam reais.)
- A3. O parênteses de Poisson na mecânica clássica é substituído pelo comutador

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.32)$$

multiplicado por $-i$. Sob tal prescrição, as relações de comutação fundamental são dadas por

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad \text{e} \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}, \quad (2.33)$$

enquanto que as equações de Hamilton tornam-se

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = -i[\hat{x}_i, \hat{H}] \quad \text{e} \quad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = -i[\hat{p}_i, \hat{H}]. \quad (2.34)$$

Quando um operador \hat{A} não depende explicitamente do tempo t , então vale a *equação de movimento de Heisenberg*:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -i[\hat{A}, \hat{H}]. \quad (2.35)$$

A4. Seja $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ um estado arbitrário. Suponha que preparemos muitos sistemas, cada um deles estando neste estado. A medição da variável dinâmica A nesses sistemas em um tempo t , produzirá, em geral, resultados aleatórios. O *valor esperado* desses resultados é dado por

$$\langle A \rangle_t = \frac{\langle \psi | \hat{A}(t) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (2.36)$$

A5. Para qualquer estado físico $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, existe um operador para o qual $|\psi\rangle$ é um de seus autokets.

Esses cinco axiomas são as regras fundamentais da mecânica quântica. Vamos examinar o axioma A4 mais de perto. Por simplicidade, vamos assumir que o estado $|\psi\rangle$ é normalizado, *i.e.*, $\|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle = 1$. Suponhamos, inicialmente, que o operador $\hat{A}(t)$ possua um conjunto de autovalores $\{a_n\}$ todos discretos e com autokets associados normalizados $\{|n\rangle\}$:

$$\hat{A}(t)|n\rangle = a_n|n\rangle \quad \text{e} \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \quad (2.37)$$

Dessa forma, o valor esperado de $\hat{A}(t)$ com respeito ao estado arbitrário

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle \quad (2.38)$$

é

$$\langle \psi | \hat{A}(t) | \psi \rangle = \sum_{m,n} \psi_m^* \psi_n \langle m | \hat{A}(t) | n \rangle = \sum_n a_n |\psi_n|^2. \quad (2.39)$$

Do fato de que uma medição de A no estado $|n\rangle$ ser sempre a_n , segue que a probabilidade da medida ser a_n , ou seja, a probabilidade de $|\psi\rangle$ está em $|n\rangle$, é

$$|\psi_n|^2 = |\langle n | \psi \rangle|^2. \quad (2.40)$$

O número ψ_n representa o “peso” do estado $|n\rangle$ no estado $|\psi\rangle$ e é chamado de *amplitude de probabilidade*.

Se \hat{A} têm um espectro contínuo a , o estado $|\psi\rangle$ deve ser expandido como

$$|\psi\rangle = \int da \psi(a)|a\rangle. \quad (2.41)$$

A relação de completeza toma então a forma

$$\int da |a\rangle\langle a| = \hat{1}. \quad (2.42)$$

O que por sua vez, corresponde a normalização

$$\langle a'|a\rangle = \delta(a' - a), \quad (2.43)$$

onde $\delta(a)$ é a função *delta de Dirac*. Se o estado $|\psi\rangle$ é normalizado na unidade, então devemos ter

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\left(\int da |a\rangle\langle a|\right)\left(\int da' |a'\rangle\langle a'|\right)|\psi\rangle \\ &= \int da da' \psi^*(a)\psi(a')\langle a|a'\rangle \\ &= \int da |\psi(a)|^2. \end{aligned}$$

Também segue da relação

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{A}\left(\int da |a\rangle\langle a|\right)|\psi\rangle \\ &= \int da \langle\psi|\hat{A}|a\rangle\langle a|\psi\rangle \\ &= \int a|\psi(a)|^2 da \end{aligned}$$

que a probabilidade com a qual a medida de um valor de A esteja dentro do intervalo $[a, a + da]$ é $|\psi(a)|^2 da$. Portanto, a densidade de probabilidade é dada por

$$\rho(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2. \quad (2.44)$$

Por último, vamos explicar a utilidade do axioma A5. Suponha que o sistema encontre-se em um estado $|\psi\rangle$ e assumamos que a probabilidade desse estado estar em $|\varphi\rangle$ simultaneamente é $|\langle\psi|\varphi\rangle|^2$. Isso foi mostrado logo acima, para o caso no qual $|\psi\rangle$ é autoket de algum observável. O axioma A5 garante que isso é verdade para um $|\psi\rangle$ arbitrário.

2.2.2 Representação de Heisenberg Versus Representação de Schrödinger

A solução formal da equação de Heisenberg

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -i[\hat{A}, \hat{H}]$$

é

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-i\hat{H}t}. \quad (2.45)$$

Portanto, os operadores $\hat{A}(t)$ e $\hat{A}(0)$ estão relacionados pelo operador unitário

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}. \quad (2.46)$$

Esse formalismo, no qual os operadores dependem do tempo t , enquanto que os kets não, é chamado de *representação de Heisenberg*.

É possível introduzir outro formalismo equivalente a representação de Heisenberg. Vamos escrever abaixo o valor esperado de \hat{A} com respeito ao ket $|\psi\rangle$ como

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \rangle &= \langle \psi | e^{i\hat{H}t} \hat{A}(0) e^{-i\hat{H}t} | \psi \rangle \\ &= (\langle \psi | e^{i\hat{H}t}) \hat{A}(0) (e^{-i\hat{H}t} | \psi \rangle). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Se escrevemos

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi\rangle, \quad (2.48)$$

a (2.47) passa a ser expressa como

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A}(0) | \psi(t) \rangle. \quad (2.49)$$

Assim, kets passam a depender do tempo, enquanto que os operadores são fixos. Esse formalismo é denominado *representação de Schrödinger*.

Vamos agora derivar uma equação para a dinâmica dos kets $|\psi(t)\rangle$. A fim de evitar confusão entre as representações, vamos usar o índice S para objetos na representação de Schrödinger e H para objetos na representação de Heisenberg. Assim, $|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t) |\psi\rangle_H$ e $\hat{A}_S = \hat{A}_H(0)$. Diferenciando $|\psi(t)\rangle_S$ em relação ao tempo, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \right) |\psi\rangle_H \\ &= -i\hat{H}\hat{U}(t) |\psi\rangle_H \end{aligned}$$

ou

$$i\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S = \hat{H} |\psi(t)\rangle_S. \quad (2.50)$$

A (2.50) é denominada *equação de Schrödinger*.

2.2.3 Funções de Onda nas Bases de Posição e Momento

Vamos considerar uma partícula movendo-se no eixo real \mathbb{R} e seja \hat{x} o operador posição com autovalor x e autoket correspondente $|x\rangle$: $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$. Os autokets são normalizados como $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$.

Similarmente, seja p o autovalor de \hat{p} com autoket associado $|p\rangle$: $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ tal que $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$.

Seja $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ um estado arbitrário. O produto interno

$$\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle \quad (2.51)$$

é a componente de $|\psi\rangle$ na base $|x\rangle$,

$$|\psi\rangle = \left(\int dx |x\rangle\langle x| \right) |\psi\rangle = \int dx \psi(x)|x\rangle. \quad (2.52)$$

O coeficiente $\psi(x) \in \mathbb{C}$ é chamado de *função de onda*. De acordo com os axiomas apresentados anteriormente, ele representa a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula na posição x , dado que o estado do sistema seja descrito inicialmente pelo ket $|\psi\rangle$, $|\psi(x)|^2 dx$ representa a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$. Parece então, bastante natural impor a condição de normalização

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1, \quad (2.53)$$

pois a probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar do eixo real deve ser igual a unidade.

Analogamente, $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$ é a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula no estado $|\psi\rangle$ com o momento p e a probabilidade de encontrar o momento da partícula no intervalo $[p, p + dp]$ é dada por $|\psi(p)|^2 dp$.

O produto interno de dois kets em termos das funções de onda é

$$\langle \psi|\varphi\rangle = \int dx \langle \psi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle = \int dx \psi^*(x)\varphi(x) \quad (2.54a)$$

$$= \int dp \langle \psi|p\rangle\langle p|\varphi\rangle = \int dp \psi^*(p)\varphi(p). \quad (2.54b)$$

Vemos assim que kets do espaço de Hilbert podem ser expressos, por exemplo, em termos de funções de onda nas bases de posição e momento. Vejamos então como podemos representar os operadores nessas bases. Primeiramente a base de posição. Da definição $\hat{x}|x\rangle =$

$x|x\rangle$, temos que $\langle x|\hat{x} = \langle x|x$, que implica

$$\langle x|\hat{x}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi(x) \quad (2.55)$$

ou, como é mais frequentemente escrita,

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \quad (2.56)$$

Para derivarmos a expressão para o momento, vamos introduzir o operador de translação infinitesimal:

$$\hat{T}(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle, \quad (2.57)$$

onde ε é um deslocamento infinitesimal fixo. Pode-se mostrar que esta relação define uma operação de simetria no espaço de Hilbert e, portanto, pode ser convenientemente escrita como um operador de simetria:

$$\hat{T}(\varepsilon) = \hat{1} - i\varepsilon\hat{p}, \quad (2.58)$$

onde estamos postulando que o momento \hat{p} é o gerador do grupo de simetria associado as translações. Se agora combinarmos as (2.57) e (2.58), obtemos

$$\hat{T}(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle = (\hat{1} - i\varepsilon\hat{p})|x\rangle.$$

Então, segue que

$$\hat{p}|x\rangle = \frac{|x + \varepsilon\rangle - |x\rangle}{-i\varepsilon} \simeq i\frac{d}{dx}|x\rangle \quad (2.59)$$

cujo dual é

$$\langle x|\hat{p} = \frac{\langle x + \varepsilon| - \langle x|}{i\varepsilon} \simeq -i\frac{d}{dx}\langle x|. \quad (2.60)$$

Portanto,

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\frac{d}{dx}\psi(x) \quad (2.61)$$

ou

$$\hat{p}\psi(x) = -i\frac{d}{dx}\psi(x). \quad (2.62)$$

Similarmente, se usarmos a base de momento $|p\rangle$, obteremos as seguintes representações para os operadores

$$\hat{x}\psi(p) = -i\frac{d}{dp}\psi(p), \quad (2.63)$$

$$\hat{p}\psi(p) = p\psi(p). \quad (2.64)$$

Podemos calcular diretamente da expressão (2.61) as autofunções do momento na

base de posição. Tomando $|\psi\rangle = |p\rangle$ na (2.61), obtemos

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle = -i\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle, \quad (2.65)$$

que implica

$$\langle x|p\rangle = Ce^{ipx}, \quad (2.66)$$

onde C é uma constante de normalização. Para encontrar essa constante, usamos o fato de que

$$\begin{aligned} \delta(x - x') &= \langle x|x'\rangle = \langle x|\left(\int dp |p\rangle\langle p|\right)|x'\rangle \\ &= C^2 \int dp e^{ip(x-x')} \\ &= C^2 2\pi\delta(x - x'), \end{aligned}$$

onde estamos escolhendo C real. Isso mostra que $C = 1/\sqrt{2\pi}$. Da (2.66), temos também que

$$\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ipx}. \quad (2.67)$$

As funções de onda nos dois formalismos podem ser relacionadas como

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ipx}\psi(x), \quad (2.68)$$

que é a *transformada de Fourier* da função $\psi(x)$.

Por último, vamos expressar a equação de Schrödinger na base de posição. Começamos aplicando o bra $\langle x|$ pela esquerda na (2.50), que fornece

$$\langle x|i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle. \quad (2.69)$$

Para um hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{x}), \quad (2.70)$$

Obtemos a *equação de Schrödinger dependente do tempo*:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) &= \langle x|\left(\frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{x})\right)|\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t), \end{aligned} \quad (2.71)$$

onde $\psi(x, t) \equiv \langle x|\psi(t)\rangle$.

Aplicando o método da separação de variáveis, ou seja, admitindo que

$$\psi(x, t) = T(t)\varphi(x) \quad (2.72)$$

e levando isso na (2.71), obtemos

$$iT'(t) = ET(t), \quad (2.73)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (2.74)$$

A solução da primeira equação é

$$T(t) = \exp(-iEt), \quad (2.75)$$

enquanto que a segunda equação é uma equação de autovalor denominada de *equação de Schrödinger independente do tempo* ou, simplesmente, *equação de Schrödinger*. Em dimensões superiores, trocamos a derivada espacial na (2.74) pelo operador nabla, tal que a equação torna-se

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (2.76)$$

3 FORMALISMO

3.1 Formalismo Unidimensional

3.1.1 O Operador de Translação Generalizado

Suponhamos que exista um espaço de Hilbert complexo \mathcal{H} , onde os estados quânticos de um sistema sejam dados pelos kets $|\psi\rangle$ ¹. Considere ainda que o conjunto de kets $|x\rangle$, autokets do *operador posição* \hat{X} , formem uma base para esse espaço. Vamos postular que seja possível realizar uma translação infinitesimal dependente da posição, sobre o sistema, de tal maneira que todas as demais propriedades físicas se mantenham inalteradas. Em nossa abordagem, esse deslocamento espacial é implementado pela ação do *operador de translação generalizado* \hat{T}_f sobre os autokets de posição:

$$\hat{T}_f(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon f(x)\rangle, \quad (3.1)$$

sendo ε um comprimento infinitesimal e $f(x)$ uma função real e infinitamente diferenciável em todos os pontos da reta real².

O ingrediente que difere o operador de translação generalizado, definido pela (3.1), do operador de translação convencional, é a presença da função $f(x)$ no ket transladado. Então, devemos esperar que esta função esteja diretamente conectada com alguma propriedade física capaz de alterar a translação do sistema de interesse. No decorrer deste trabalho, tal propriedade física será ou a massa de uma partícula ou o tensor métrico de um espaço.

Na mecânica quântica convencional, as translações formam um grupo cujos geradores são os momentos (veja, por exemplo, [21]). No apêndice A, mostramos que as translações definidas pela (3.1) mantêm a estrutura de grupo, o que nos motiva a expressar o operador de translação generalizado sob a forma de um *operador de simetria*³:

$$\hat{T}_f(\varepsilon) = \hat{1} - i\varepsilon\hat{P}, \quad (3.2)$$

onde o *operador momento* \hat{P} deve reduzir-se ao operador momento tradicional \hat{p} no limite $f(x) \rightarrow 1$.

Utilizando a relação (3.2), podemos deduzir a relação de comutação entre a posição

¹Na física, esse espaço de Hilbert é costumeiramente chamado de *espaço dos estados*.

²Restrições extras sobre a função $f(x)$ aparecerão no decorrer do texto.

³Para mais detalhes, veja o capítulo 4 da referência [18].

e translação.

$$\begin{aligned}
[\hat{X}, \hat{T}_f(\varepsilon)]|x\rangle &= [\hat{X}\hat{T}_f(\varepsilon) - \hat{T}_f(\varepsilon)\hat{X}]|x\rangle \\
&= \hat{X}|x + \varepsilon f(x)\rangle - x\hat{T}_f(\varepsilon)|x\rangle \\
&= \varepsilon f(x)|x + \varepsilon f(x)\rangle \\
&= \varepsilon f(x)\hat{T}_f(\varepsilon)|x\rangle \\
&= \varepsilon f(x)(\hat{1} - i\varepsilon\hat{P})|x\rangle \\
&\simeq \varepsilon f(x)|x\rangle,
\end{aligned}$$

que equivale a

$$[\hat{X}, \hat{T}_f(\varepsilon)] = \varepsilon f(\hat{X}), \quad (3.3)$$

sendo de segunda ordem, no infinitésimo, o erro cometido na aproximação usada.

3.1.2 Relação de Comutação Fundamental

Dada a relação de comutação entre o operador momento e o operador de translação (3.3), vemos que

$$\hat{X}(\hat{1} - i\varepsilon\hat{P}) - (\hat{1} - i\varepsilon\hat{P})\hat{X} = -i\varepsilon(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}) = \varepsilon f(\hat{X})$$

ou

$$[\hat{X}, \hat{P}] = if(\hat{X}). \quad (3.4)$$

A (3.4) é a *relação de comutação fundamental* sob a ótica do formalismo de operador de translação generalizado. Esta relação de comutação define uma estrutura algébrica conhecida como *álgebra de Heisenberg deformada*⁴, um assunto extensamente abordado na literatura (veja, por exemplo, [22–31]) desde o início da década de 90⁵. Neste ponto, acreditamos ser importante enfatizar que, no formalismo do operador de translação generalizado, a relação de comutação fundamental (3.4) é apenas uma consequência da definição (3.1), diferentemente das relações de comutação que aparecem na literatura das álgebras de Heisenberg deformadas, as quais são impostas *a priori*, funcionando como ponto de partida para tais teorias. Nestas teorias, as relações de comutação deformadas são introduzidas objetivando a reprodução na mecânica quântica de um *princípio de incerteza generalizado*, oriundo da *teoria de cordas* [33] e/ou *gravitação quântica* [34].

Agora vamos escolher uma representação para os operadores de posição e mo-

⁴Uma álgebra de Heisenberg é um caso particular de uma estrutura algébrica mais geral denominada de *álgebra de Lie*. Álgebras de Lie podem ser entendidas como espaços vetoriais dotados da operação de comutação.

⁵No entanto, o estudo das álgebras deformadas é bem mais antigo e teve início na década de 40 com o trabalho “Quantized space-time” [32], do físico estadunidense Hartland Snyder.

mento. *A priori*, esta representação não é única e qualquer combinação entre tais operadores, que satisfaça a relação de comutação (3.4), é válida. No entanto, devemos ter em mente que o formalismo presente é baseado na definição (3.1) e este vínculo deve ser satisfeito, qualquer que seja a representação adotada. Outra restrição, que devemos considerar, é de natureza axiomática: o hamiltoniano deve ser hermitiano⁶ a fim de garantir que seu espectro seja real e que a evolução temporal seja unitária.

Para satisfazer a relação de comutação fundamental (3.4) iremos realizar a seguinte escolha:

$$\hat{X} = \hat{x} \quad \text{e} \quad \hat{P} = f(\hat{x})\hat{p}, \quad (3.5)$$

onde os operadores \hat{x} e \hat{p} são a posição e o momento convencionais e, portanto, obedecem a relação de comutação $[\hat{x}, \hat{p}] = i$. É imediato mostrar que a escolha (3.5) verifica a relação de comutação (3.4):

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}] &= [\hat{x}, f(\hat{x})\hat{p}] \\ &= [\hat{x}, f(\hat{x})]\hat{p} + f(\hat{x})[\hat{x}, \hat{p}] \\ &= if(\hat{X}), \end{aligned}$$

onde usamos a relação $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.

É importante recordar que a definição (3.1) está alicerçada na conjectura de que os autokets do operador posição formam uma base para o espaço de Hilbert \mathcal{H} . Dessa forma, é possível definir o espaço das funções de onda $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, na base de posição. Neste espaço, a representação (3.5) toma a forma

$$\langle x|\hat{X}|\psi\rangle = x\psi(x) \quad \text{e} \quad \langle x|\hat{P}|\psi\rangle = -if(x)\frac{d}{dx}\psi(x). \quad (3.6)$$

Como havíamos mencionado, a representação escolhida deve satisfazer a definição de operador de translação generalizado, o que significa, mostrar que a representação (3.5) verifica o vínculo

$$(\hat{1} - i\varepsilon\hat{P})|x\rangle = |x + \varepsilon f(x)\rangle, \quad (3.7)$$

⁶O conceito de hermiticidade, depende da escolha do produto interno, de tal forma que o mesmo operador pode ser, hermitiano com respeito a um certo produto interno e não-hermitiano com respeito a outro.

imposto pelas definições (3.1) e (3.2) combinadas, tal demonstração é feita logo abaixo.

$$\begin{aligned}
 (\hat{1} - i\varepsilon\hat{P})|x\rangle &= [\hat{1} - i\varepsilon f(\hat{x})\hat{p}]|x\rangle \\
 &= |x\rangle - i\varepsilon f(x) \left(i \frac{d}{dx} \right) |x\rangle \\
 &= |x\rangle + \varepsilon f(x) \frac{d}{dx} |x\rangle \\
 &\simeq |x + \varepsilon f(x)\rangle.
 \end{aligned}$$

3.1.3 Produto Interno

A representação para o operador momento é não-hermitiana em relação ao produto interno tradicional

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_a^b dx \psi^*(x)\varphi(x). \quad (3.8)$$

Vemos assim que não é possível acomodar no mesmo formalismo: o operador de translação definido pela (3.1), a representação do operador momento dado pela (3.5) e a hermiticidade deste último em relação ao produto interno (3.8). A fim de contornar esse problema, defini-se um outro produto interno, entre as funções de onda $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ e $\varphi(x) \equiv \langle x|\varphi\rangle$, no espaço das posições:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \psi^*(x)\varphi(x). \quad (3.9)$$

A definição (3.9) encerra algumas questões fundamentais. Antes de entrarmos no mérito de tais questões, vamos mostrar primeiramente que tal definição é capaz de tornar hermitiano o operador momento generalizado. Para tanto, vamos seguir os seguintes passos: checar se a definição está de acordo com os axiomas de produto interno, apresentados no capítulo 2; derivar a relação de completeza e a relação de ortonormalidade; por último, mostrar que o momento generalizado é hermitiano em relação a este novo produto interno.

Simetria por conjugação complexa

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\varphi\rangle &= \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \psi^*(x)\varphi(x) \\
 &= \left(\int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \varphi^*(x)\psi(x) \right)^* \\
 &= \langle\varphi|\psi\rangle^*.
 \end{aligned}$$

Linearidade

$$\begin{aligned}
\langle \psi | a\varphi_1 + b\varphi_2 \rangle &= \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \psi^*(x) [a\varphi_1(x) + b\varphi_2(x)] \\
&= a \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \psi^*(x) \varphi_1(x) + b \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \psi^*(x) \varphi_2(x) \\
&= a \langle \psi | \varphi_1 \rangle + b \langle \psi | \varphi_2 \rangle.
\end{aligned}$$

Postulado da métrica positiva definida

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \psi \rangle &= \|\psi\|^2 \\
&= \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |\psi(x)|^2,
\end{aligned} \tag{3.10}$$

e vemos que esta expressão impõe que a função $f(x)$ deve ser positiva no intervalo de interesse.

Tendo mostrado que a (3.9) verifica os axiomas de produto interno, vamos derivar duas relações importantes:

Relação de completeza

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \varphi \rangle &= \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \langle \psi | x \rangle \langle x | \varphi \rangle \\
&= \langle \psi | \left(\int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x| \right) | \varphi \rangle,
\end{aligned}$$

que implica

$$\int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x| = \hat{1}; \tag{3.11}$$

Relação de ortogonalidade

$$\langle x' | \psi \rangle = \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \langle x' | x \rangle \langle x | \psi \rangle,$$

que implica

$$\langle x' | x \rangle = f(x) \delta(x' - x). \tag{3.12}$$

Agora já temos os ingredientes necessários para mostrar que o momento é hermitiano, em relação ao produto interno definido pela (3.9). Começamos escrevendo o valor esperado do momento em um estado arbitrário:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{1} \hat{P} | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \left(\int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x| \right) \hat{P} | \psi \rangle \\
&= \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{P} | \psi \rangle,
\end{aligned}$$

agora usamos a (3.6),

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle &= -i \int_a^b dx \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \\ &= -i \int_a^b \psi^* d\psi,\end{aligned}$$

integrando por partes, resulta

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle &= -i \left(\psi^*(x) \psi(x) \Big|_a^b - \int_a^b \psi d\psi^* \right) \\ &= -i \left(\psi^*(x) \psi(x) \Big|_a^b \right) + \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle^*,\end{aligned}$$

se agora impusermos as condições de contorno $\psi(a) = \psi(b) = 0$, teremos como resultado

$$\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle^*. \quad (3.13)$$

Pelo teorema 2.2, a (3.13) equivale a hermiticidade do operador momento.

Vamos voltar à definição (3.9) e examiná-la um pouco mais de perto.

O conceito de produto interno é fundamental para a mecânica quântica, pois determina a estrutura geométrica do espaço de Hilbert — um espaço de Hilbert é um espaço vetorial no qual define-se um produto interno e onde se impõe mais algumas condições sobre seus elementos (veja a definição no capítulo 2). O fato de estarmos mudando o produto interno no espaço de Hilbert, implica que estamos também mudando a norma e a métrica desse espaço. Essa mudança estrutural (induzida pela introdução do operador de translação generalizado), por sua vez, vai exigir que reinterpretemos alguns dos conceitos presentes na mecânica quântica convencional.

Como vimos no capítulo 2, a interpretação física para a expressão $\langle \varphi | \psi \rangle$ é a de uma amplitude de probabilidade do sistema se encontrar simultaneamente nos estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Dessa forma, supondo os estados normalizados, temos que

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (3.14)$$

Quando estamos trabalhando no espaço das funções de onda quadrado integráveis, esta última expressão pode ser posta sob a forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1, \quad (3.15)$$

onde $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$. Como fica essa interpretação em relação ao nosso formalismo? Inicialmente, observemos que o produto interno é uma propriedade (abstrata) do espaço de estados do sistema, no entanto,

a medida utilizada no cálculo do produto interno possui um significado físico bem preciso: ela é uma diferencial do parâmetro utilizado para localizar a partícula no espaço físico que a acomoda. A partir desse ponto de vista, a resposta para a pergunta colocada acima pode ser dada de duas formas distintas. A primeira delas ocorre ao interpretarmos o produto interno (3.9) como:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_a^b \frac{dx}{f(x)} \psi^*(x) \varphi(x), \quad (3.16)$$

onde a medida

$$ds(x) \equiv \frac{dx}{f(x)} \quad (3.17)$$

pode ser encarada como o elemento de linha do espaço físico habitado pela partícula sob consideração. Tal assertiva pode ser justificada pelo fato de que o elemento de linha, de um espaço descrito pelo tensor métrico g_{ij} , pode ser descrito como [35]:

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j. \quad (3.18)$$

Em uma dimensão, essa expressão se reduz a

$$ds^2 = g_{11}(x) (dx^1)^2 \quad (3.19)$$

ou

$$ds = \sqrt{g_{11}(x)} dx^1, \quad (3.20)$$

com $dx^1 \equiv dx$. Comparando a (3.20) com a (3.17), vemos que

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{g_{11}(x)}} \quad (3.21)$$

pode ser encarada como um fator de escala, relacionando medidas de comprimento, no espaço físico ocupado pela partícula.

Se utilizarmos o comprimento

$$s(x) = \int \frac{dx}{f(x)} \quad (3.22)$$

para reparametrizar o produto interno, teremos:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{s(a)}^{s(b)} ds \psi^*(s) \varphi(s), \quad (3.23)$$

ou seja, o produto interno recupera sua forma tradicional. Dessa forma, a densidade de probabilidade será escrita como

$$\rho(s) = |\psi(s)|^2 \quad (3.24)$$

e então podemos interpretar que $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ significa que

$$\int_a^b \rho(s) ds = 1, \quad (3.25)$$

com $\rho(s)ds$ sendo a probabilidade de encontrar a partícula dentro do intervalo de comprimento infinitesimal ds . Como será mostrado mais a frente, o uso da variável s em lugar da x , permite também expressar o momento, a equação de Schrödinger e a relação de comutação fundamental em suas formas usuais, o que, efetivamente, significa que podemos utilizar um espaço de Hilbert convencional para modelar a partícula que trafega em um espaço unidimensional com métrica $g_{11}(x) = 1/f^2(x)$.

Uma outra maneira de interpretar o produto interno (3.9) é a seguinte:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_a^b dx \frac{\psi^*(x)\varphi(x)}{f(x)}. \quad (3.26)$$

Essa forma de escrever o produto interno, significa que estamos dizendo que a partícula está movendo-se em um espaço plano com elemento de comprimento dado por dx . Isso permite associar a função $f(x)$ a alguma outra propriedade física, que, como veremos mais a frente, pode ser a massa da partícula. Assim, para o caso da partícula movendo-se no espaço plano, a expressão $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ significa que

$$\int_a^b \rho_f(x) dx = 1, \quad (3.27)$$

onde

$$\rho_f(x) \equiv \frac{|\psi(x)|^2}{f(x)} \quad (3.28)$$

é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$.

Do que foi exposto acima, vemos que a introdução do produto interno (3.9) leva a duas interpretações distintas para a densidade de probabilidade no espaço das funções de onda. Se considerarmos a densidade de probabilidade em sua forma convencional $\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$, somos levados a admitir que a partícula está movendo-se em um espaço definido pelo tensor métrico $g_{11}(x)$. Por outro lado, se admitirmos que o espaço possui o elemento de linha plano dx , a densidade de probabilidade deve ser modificada de modo a incorporar o fator $1/f(x)$, ou seja, devemos ter $\rho_f(x) = \psi^*(x)\psi(x)/f(x)$. Evidentemente, as duas interpretações tornam-se a mesma no caso $f(x) = 1$.

3.1.4 A Equação de Schrödinger

A evolução temporal de um ket de estado $|\psi(t)\rangle$ é governada pela *equação de Schrödinger*

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (3.29)$$

onde

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2} + V(\hat{X}) \quad (3.30)$$

é o *operador hamiltoniano* para o sistema definido pelo potencial $V(\hat{X})$.

Para obtermos a forma da (3.29) na base de posição, basta inserir a relação de completude (3.11):

$$i \frac{d}{dt} \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x | \psi(t)\rangle = \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x | \hat{H} | \psi(t)\rangle,$$

que implica

$$i \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \partial_t \langle x | \psi(t)\rangle = \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} |x\rangle \langle x | \hat{H} | \psi(t)\rangle.$$

Agora multiplicamos pela esquerda por $\langle x' |$, obtendo

$$i \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \langle x' | x \rangle \partial_t \langle x | \psi(t)\rangle = \int_a^b dx \frac{1}{f(x)} \langle x' | x \rangle \langle x | \hat{H} | \psi(t)\rangle.$$

Agora, usamos a relação de ortogonalidade (3.12), o que fornece:

$$i \partial_t \langle x | \psi(t)\rangle = \langle x | \hat{H} | \psi(t)\rangle. \quad (3.31)$$

Para concluir, utilizamos as (3.30) e (3.6), e encontramos a forma da *equação de Schrödinger dependente do tempo na representação de coordenadas* como sendo:

$$i \partial_t \psi(x, t) = \left(-\frac{1}{2} f(x) \partial_x f(x) \partial_x + V(x) \right) \psi(x, t), \quad (3.32)$$

com $\psi(x, t) \equiv \langle x | \psi(t)\rangle$.

A seguir, vamos nos ocupar da dedução da *equação de Schrödinger independente do tempo*. Inicialmente, vamos propor uma solução sob a forma separável:

$$\psi(x, t) = T(t) \psi(x, 0). \quad (3.33)$$

Levando esta equação na (3.32), obtemos:

$$\frac{i T'(t)}{T(t)} = \frac{1}{\psi(x)} \left(-\frac{1}{2} f(x) \partial_x f(x) \partial_x + V(x) \right) \psi(x). \quad (3.34)$$

O lado esquerdo da equação acima depende somente de t enquanto que o lado direito é função

apenas da posição x , podemos então empregar a constante de separação E e obter:

$$\frac{iT'(t)}{T(t)} = E, \quad (3.35)$$

cuja solução é

$$T(t) = Ce^{-iEt}, \quad (3.36)$$

além da equação de Schrödinger

$$\left(-\frac{1}{2}f(x)\frac{d}{dx}f(x)\frac{d}{dx} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (3.37)$$

Mudando a variável independente através da (3.22), ficamos com:

$$f(x)\frac{d}{dx} = \frac{d}{ds}, \quad (3.38)$$

o que mostra que o momento \hat{P} têm a tradicional forma

$$\hat{P} = -i\frac{d}{ds}, \quad (3.39)$$

quando tratado com respeito a variável s . Ainda em relação a essa variável, a equação de Schrödinger (3.37) assume a sua tradicional forma

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{ds^2} + U(s) \right) \psi(s) = E\psi(s), \quad (3.40)$$

onde $U(s) = V(x)$ é um potencial efetivo na variável transformada.

Até aqui, vimos que a reparametrização $x \rightarrow s$ foi capaz de recuperar as formas: do produto interno, da densidade de probabilidade, do momento e da equação de Schrödinger. Disso, podemos concluir que a transformação para a variável s pode funcionar como um mapeamento entre o espaço de Hilbert deformado e o espaço de Hilbert tradicional. No entanto, devemos observar que tal mudança produz um potencial efetivo na equação de Schrödinger (3.40), os potenciais U e V são numericamente iguais para o mesmo ponto do espaço, mas são diferentes em suas formas. Por exemplo, na referência [4] os autores mostraram que uma partícula sujeita ao potencial harmônico no espaço de Hilbert deformado é mapeada em uma partícula sujeita ao potencial de Morse [36] no espaço de Hilbert tradicional.

Massa dependente da posição

Tomando

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \quad (3.41)$$

na (3.37), obtemos

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.42)$$

a qual pode ser interpretada como a equação de Schrödinger para uma partícula com massa variável $m(x)$ trafegando no espaço euclidiano. Nesse caso, a densidade de probabilidade deve ser dada por

$$\rho_m(x) = \sqrt{m(x)} |\psi(x)|^2. \quad (3.43)$$

É importante mencionar uma diferença crucial entre a abordagem por nós utilizada e a abordagem tradicional: apesar da partícula com massa dependente da posição habitar um espaço físico plano, nossa descrição é feita mediante um espaço de Hilbert “deformado”, ao contrário do que é feito comumente na literatura. Essa diferença pode ser evidenciada, por exemplo, através do operador energia cinética, que no nosso caso toma a forma:

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \frac{d}{dx}, \quad (3.44)$$

o qual só pode ser considerado hermitiano com respeito ao produto interno (3.9). Dessa maneira, não devemos esperar que os resultados obtidos para o caso tradicional sejam reproduzidos pelo nosso formalismo (e de fato não o são!). Na próxima seção retomaremos essa discussão e traçaremos um comparativo entre as duas abordagens.

3.2 Formalismo N -dimensional

Nesta seção, queremos encontrar uma generalização para o nosso formalismo de tal maneira a modelar uma partícula com massa dependente da posição trafegando em um espaço euclidiano de dimensão N .

3.2.1 Construção da Representação de Coordenadas

Vimos que a introdução do operador de translação generalizado resultou em uma modificação na forma do operador momento, a generalização desse operador para o caso N -dimensional será a forma que utilizaremos na passagem da teoria unidimensional para a multidimensional. Primeiramente, vamos construir a nossa representação de coordenadas, ou seja, vamos apontar quais as características do espaço de Hilbert onde se acomodam as funções de onda $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$. Inicialmente, para que tal espaço exista, devemos impor que os operadores de posição comutem:

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0. \quad (3.45)$$

Vamos postular também que a generalização da (3.6) nesse espaço de Hilbert será

dada por:

$$\langle x|\hat{X}_i|\psi\rangle = x_i\psi(x) \quad \text{e} \quad \langle x|\hat{P}_i|\psi\rangle = -if(x)\partial_i\psi(x), \quad (3.46)$$

onde $\{|x\rangle\}$ é o conjunto de autokets do operador posição $\hat{X} = \hat{X}_i e_i$, x_i são os possíveis autovalores para as componentes desse operador, $x = (x_1, \dots, x_N)$ é um ponto qualquer no espaço euclidiano e ∂_i é a derivada parcial com respeito a i -ésima coordenada cartesiana.

De modo a tornar o momento hermitiano, escolheremos o produto interno como sendo:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^N x \frac{\psi^*(x)\varphi(x)}{f(x)}, \quad (3.47)$$

onde $d^N x = dx_1 dx_2 \dots dx_N$ é o elemento de volume do espaço euclidiano. Analogamente ao caso unidimensional, a (3.47) implica nas

$$\int d^N x \frac{|x\rangle\langle x|}{f(x)} = \hat{1} \quad (3.48)$$

e

$$\langle x|x'\rangle = f(x)\delta^N(x-x'), \quad (3.49)$$

com $\delta^N(x-x')$ sendo a função delta de Dirac em N dimensões⁷.

Agora, vejamos como ficam as demais relações de comutação dentro do espaço de coordenadas.

Relação de comutação entre posição e momento

$$\begin{aligned} [\hat{X}_i, \hat{P}_j]\psi &= x_i[-if(x)\partial_j\psi] - [-if(x)\partial_j(x_i\psi)] \\ &= if(x)\delta_{ij}\psi \end{aligned}$$

ou

$$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = if(x)\delta_{ij}. \quad (3.50)$$

Relação de comutação entre os momentos

$$\begin{aligned} [\hat{P}_i, \hat{P}_j]\psi &= [-if(x)\partial_i][-if(x)\partial_j\psi] - [-if(x)\partial_j][-if(x)\partial_i\psi] \\ &= -if(x)[-if_i(x)\partial_j\psi - if(x)\partial_i\partial_j\psi] - if(x)[if_j(x)\partial_i\psi + if(x)\partial_j\partial_i\psi] \\ &= -i[f_i(x)\hat{P}_j - f_j(x)\hat{P}_i]\psi \end{aligned}$$

ou

$$[\hat{P}_i, \hat{P}_j] = -i[f_i(x)\hat{P}_j - f_j(x)\hat{P}_i], \quad (3.51)$$

⁷As demonstrações de que esse produto interno “hermitiza” o momento e que da origem a essas relações são inteiramente análogas aquelas feitas no caso unidimensional e serão omitidas.

onde $f_i(x) \equiv \partial_i f(x)$.

A (3.51) nos mostra que, em geral, os momentos não irão comutar, o que significa que medidas simultâneas dessas grandezas não podem ser realizadas e, portanto, não existe uma representação do espaço de Hilbert na base dos momentos.

3.2.2 A Equação de Schrödinger N -dimensional

A generalização da (3.32) para N dimensões, no caso onde o operador momento é dado por

$$\hat{P} = -if(x)\nabla, \quad (3.52)$$

pode ser escrita como:

$$i\partial_t\psi(x, t) = \left(-\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla + V(x) \right) \psi(x, t), \quad (3.53)$$

onde ∇ é o operador nabla.

Tomando $\psi(x, t) = e^{-iEt}\psi(x, 0)$ na (3.53), obtemos

$$\left(-\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.54)$$

com $\psi(x, 0) \equiv \psi(x)$.

Como estamos descrevendo uma partícula com massa dependente da posição, devemos ter:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{m(x)}}. \quad (3.55)$$

Levando essa última expressão na (3.54), obtemos

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \nabla \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \nabla + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.56)$$

que é a equação escrita explicitamente em função da massa dependente da posição. Claramente, esta equação se reduz a forma convencional no caso de termos $m(x) = 1$.

Equação da continuidade

Multiplicando a (3.53) por $\psi^*(x, t)$, obtemos:

$$i\psi^*(x, t)\partial_t\psi(x, t) = \psi^*(x, t) \left[-\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (3.57)$$

Tirando o complexo conjugado desta expressão, resulta

$$i\psi(x, t)\partial_t\psi^*(x, t) = \psi(x, t) \left[\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla - V(x) \right] \psi^*(x, t). \quad (3.58)$$

Somando as (3.57) e (3.58), ficamos com

$$\begin{aligned}
\partial_t[\psi(x, t)\psi^*(x, t)] &= \frac{1}{2i}[\psi(x, t)f(x)\partial_i(f(x)\partial_i\psi^*(x, t)) - \psi^*(x, t)f(x)\partial_i(f(x)\partial_i\psi(x, t))] \\
&= \frac{1}{2i}f(x)[\psi(x, t)\partial_i(f(x)\partial_i\psi^*(x, t)) - \psi^*(x, t)\partial_i(f(x)\partial_i\psi(x, t))] \\
&= \frac{1}{2i}f(x)\partial_i[\psi(x, t)f(x)\partial_i\psi^*(x, t) - \psi^*(x, t)f(x)\partial_i\psi(x, t)] \\
&= \frac{1}{2i}f(x)\partial_i\{f(x)[\psi(x, t)\partial_i\psi^*(x, t) - \psi^*(x, t)\partial_i\psi(x, t)]\}
\end{aligned}$$

ou

$$\partial_t\rho_m(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \vec{J}_m, \quad (3.59)$$

onde

$$\rho_m(x, t) \equiv \sqrt{m(x)}\rho(x, t) \quad (3.60)$$

é a nova *densidade de probabilidade* e

$$\vec{J}_m \equiv \frac{\vec{J}}{\sqrt{m(x)}} \quad (3.61)$$

é a nova *densidade de corrente de probabilidade*, enquanto que $\rho(x, t)$ e \vec{J} são, respectivamente, a densidade e a corrente de probabilidade tradicionais.

3.2.3 Conexão com o Formalismo de von Roos

Vimos que o nosso formalismo pode ser utilizado para descrever partículas com massa dependente da posição. É importante salientar que esta descrição é feita em um espaço de Hilbert diferente do tradicional. Na mecânica quântica convencional, o formalismo de von Roos [16] é a maneira mais geral de descrever sistemas com massa dependente da posição. Aqui, nós estabelecemos um paralelo entre o nosso formalismo e o de von Roos.

O hamiltoniano de von Roos é dado por

$$\hat{H}_{\text{vR}} = -\frac{1}{4}[m^\alpha(x)\nabla m^\beta(x)\nabla m^\gamma(x) + m^\gamma(x)\nabla m^\beta(x)\nabla m^\alpha(x)] + U(x), \quad (3.62)$$

onde $x = (x_1, x_2, x_3)$ é um ponto genérico do espaço euclidiano, $U(x)$ é um potencial qualquer e os parâmetros α, β e γ são vinculados pela condição $\alpha + \beta + \gamma = -1$.

Quando estamos descrevendo uma partícula com massa dependente da posição, vimos que

$$m(x) = \frac{1}{f^2(x)}. \quad (3.63)$$

Levando a (3.63) no hamiltoniano de von Roos, obtemos:

$$\hat{H}_{\text{vR}} = -\frac{1}{4}[f^\delta(x)\nabla f^\epsilon(x)\nabla f^\phi(x) + f^\phi(x)\nabla f^\epsilon(x)\nabla f^\delta(x)] + U(x), \quad (3.64)$$

onde $\delta + \epsilon + \phi = 2$. Segue então que

$$\begin{aligned}
& f^\delta(x) \nabla f^\epsilon(x) \nabla f^\phi(x) \psi \\
&= f^\delta \partial_i (f^\epsilon \partial_i f^\phi) \psi \\
&= f^\delta \partial_i (f^{2-\delta-\phi} \partial_i f^\phi) \psi \\
&= f^\delta [\partial_i (f^{2-\delta-\phi}) \partial_i f^\phi + f^{2-\delta-\phi} \partial_i \partial_i f^\phi] \psi \\
&= f^\delta [(2-\delta-\phi) f^{1-\delta-\phi} f_i (\phi f^{\phi-1} f_i + f^\phi \partial_i) + f^{2-\delta-\phi} \partial_i (\phi f^{\phi-1} f_i + f^\phi \partial_i)] \psi \\
&= (2-\delta-\phi) (\phi f_i f_i + f f_i \partial_i) \psi + f^{2-\phi} \{ \phi [(\phi-1) f^{\phi-2} f_i f_i + f^{\phi-1} \partial_i f_i] + \phi f^{\phi-1} f_i \partial_i + f^\phi \partial_i \partial_i \} \psi \\
&= (2-\delta-\phi) (\phi f_i f_i + f f_i \partial_i) \psi + [\phi(\phi-1) f_i f_i + \phi f (f_{ii} + f_i \partial_i) + \phi f f_i \partial_i + f^2 \partial_i \partial_i] \psi \\
&= [f \partial_i (f \partial_i) + (1-\delta+\phi) f f_i \partial_i + (1-\delta) \phi f_i f_i + \phi f f_{ii}] \psi. \tag{3.65}
\end{aligned}$$

Permutando δ e ϕ , encontramos que

$$f^\phi(x) \nabla f^\epsilon(x) \nabla f^\delta(x) = f \partial_i (f \partial_i) + (1-\phi+\delta) f f_i \partial_i + (1-\phi) \delta f_i f_i + \delta f f_{ii}. \tag{3.66}$$

Agora somamos as (3.65) e (3.66), resultando em

$$\begin{aligned}
& f^\delta(x) \nabla f^\epsilon(x) \nabla f^\phi(x) + f^\phi(x) \nabla f^\epsilon(x) \nabla f^\delta(x) \\
&= 2f(x) \nabla f(x) \nabla + 2f(x) (\nabla f(x)) \cdot \nabla + (\delta + \phi - 2\delta\phi) (\nabla f(x))^2 + (\delta + \phi) f(x) \nabla^2 f(x). \tag{3.67}
\end{aligned}$$

Dessa forma, o hamiltoniano (3.64) fica

$$\hat{H}_{\text{VR}} = -\frac{1}{2} [f(x) \nabla f(x) \nabla + f(x) (\nabla f(x)) \cdot \nabla] + U'(x), \tag{3.68}$$

onde

$$U'(x) = U(x) - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\delta + \phi}{2} - \delta\phi \right) (\nabla f(x))^2 + \frac{1}{2} (\delta + \phi) f(x) \nabla^2 f(x) \right]. \tag{3.69}$$

A equação de Schrödinger oriunda do hamiltoniano (3.68) é dada por

$$\left\{ -\frac{1}{2} [f(x) \nabla f(x) \nabla + f(x) (\nabla f(x)) \cdot \nabla] + U'(x) \right\} \tilde{\psi}(x) = E \tilde{\psi}(x). \tag{3.70}$$

Vamos agora eliminar o segundo termo do operador energia cinética que aparece na equação acima. Para conseguir isso, vamos escrever:

$$\tilde{\psi}(x) = f^{-1/2}(x) \psi(x) \tag{3.71}$$

e então

$$\begin{aligned}
& [f(x)\nabla f(x)\nabla + f(x)(\nabla f(x)) \cdot \nabla]f^{-1/2}(x)\psi(x) \\
&= [f\partial_i(f\partial_i f^{-1/2}) + f f_i \partial_i f^{-1/2}]\psi \\
&= \left[f\partial_i \left(-\frac{1}{2}f^{-1/2}f_i + f^{1/2}\partial_i \right) + f_i \left(-\frac{1}{2}f^{-1/2}f_i + f^{1/2}\partial_i \right) \right] \psi \\
&= f^{-1/2} \left[f^{3/2} \left(\frac{1}{4}f^{-3/2}f_i f_i - \frac{1}{2}f^{-1/2}\partial_i f_i + \frac{1}{2}f^{-1/2}f_i \partial_i + f^{1/2}\partial_i \partial_i \right) + \left(-\frac{1}{2}f_i f_i + f f_i \partial_i \right) \right] \psi \\
&= f^{-1/2} \left(f\partial_i f\partial_i - \frac{1}{4}f_i f_i - \frac{1}{2}f f_{ii} \right) \psi. \tag{3.72}
\end{aligned}$$

Finalmente, levando as expressões (3.71) e (3.72) na equação (3.70), resulta

$$\left[-\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \tag{3.73}$$

onde

$$V(x) = U(x) + \frac{1}{2} \left[\left(\delta\phi - \frac{\delta + \phi}{2} + \frac{1}{4} \right) (\nabla f(x))^2 - \frac{1}{2}(\delta + \phi - 1)f(x)\nabla^2 f(x) \right]. \tag{3.74}$$

A (3.73) é a nossa equação de Schrödinger, a qual foi obtida diretamente da equação proposta por von Roos, logo, existe uma íntima relação entre o nosso formalismo — o qual descreve uma partícula com massa dependente da posição por meio de um espaço de Hilbert “deformado” — e o de von Roos — onde a descrição é feita via espaço de Hilbert convencional. É importante observar que os parâmetros que aparecem no hamiltoniano de von Roos são incorporados no potencial de nossa equação, eles não foram escolhidos e portanto ainda continuam arbitrários, logo, nossa equação pode ser encarada como uma outra forma da equação proposta por von Roos e não um caso particular desta. Notemos ainda que o raciocínio acima pode ser invertido: podemos partir da nossa equação e chegar na de von Roos.

Exemplo: formalismo de BenDaniel-Duke

Escolhendo $\alpha = \gamma = 0$ e $\beta = -1$ no hamiltoniano (3.62), este assume a forma

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla \frac{1}{m(x)}\nabla + U(x), \tag{3.75}$$

que é o hamiltoniano de BenDaniel-Duke [37]. Usando a (3.63), o hamiltoniano acima torna-se

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla f^2(x)\nabla + U(x), \tag{3.76}$$

que por sua vez, corresponde a escolher $\delta = \phi = 0$ e $\epsilon = 2$ em (3.64). O hamiltoniano (3.76)

da origem a equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla f^2(x)\nabla + U(x) \right] \tilde{\psi}(x) = E\tilde{\psi}(x), \quad (3.77)$$

que é traduzida para o nosso formalismo como

$$\left[-\frac{1}{2}f(x)\nabla f(x)\nabla + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.78)$$

com

$$V(x) = U(x) + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{4}(\nabla f(x))^2 + \frac{1}{2}f(x)\nabla^2 f(x) \right] \quad (3.79)$$

e

$$\psi(x) = \sqrt{f(x)}\tilde{\psi}(x). \quad (3.80)$$

4 APLICAÇÕES

Neste capítulo analisamos algumas aplicações do formalismo do capítulo 3.

4.1 Equação de Schrödinger em Coordenadas Polares

Nesta seção vamos resolver a equação de Schrödinger (3.54) em duas dimensões. Começamos explicitando a forma desta equação em coordenadas cartesianas:

$$\left\{ -\frac{1}{2} [f^2(x)\partial_1^2 + f^2(x)\partial_2^2 + f_1(x)f(x)\partial_1 + f_2(x)f(x)\partial_2] + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.1)$$

lembrando que

$$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \quad \text{e} \quad f_i(x) = \partial_i f(x) \quad (i = 1, 2).$$

Agora vamos empregar coordenadas polares (r, ϑ) , as equações de transformação são:

$$x_1 = r \cos \vartheta, \quad (4.2)$$

$$x_2 = r \sin \vartheta. \quad (4.3)$$

Substituindo essas expressões na (4.1), obtemos¹

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[f^2(x)\partial_r^2 + \frac{f^2(x)}{r^2}\partial_\vartheta^2 + \left(\frac{f^2(x)}{r} + f_r(x)f(x) \right) \partial_r + \frac{f_\vartheta(x)f(x)}{r^2}\partial_\vartheta \right] + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.4)$$

Vamos nos concentrar no caso especial onde tanto a função f quanto o potencial V possuem simetria radial, ou seja, dependam somente da distância r à origem. Para este caso, $f_\vartheta = 0$ e a equação (4.4) toma a forma

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[f^2(r)\partial_r^2 + \frac{f^2(r)}{r^2}\partial_\vartheta^2 + \left(\frac{f^2(r)}{r} + f'(r)f(r) \right) \partial_r \right] + V(r) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (4.5)$$

ou

$$\left\{ \partial_r^2 + \frac{1}{r^2}\partial_\vartheta^2 + \left[\frac{1}{r} + \frac{f'(r)}{f(r)} \right] \partial_r + \frac{2[E - V(r)]}{f^2(r)} \right\} \psi(x) = 0. \quad (4.6)$$

Apliquemos agora o método da separação de variáveis, ou seja, tomemos

$$\psi(x) = R(r)S(\vartheta). \quad (4.7)$$

¹ x é um ponto qualquer do plano, que pode ser representado tanto por coordenadas cartesianas quanto por coordenadas polares: $x = (x_1, x_2)$ ou $x = (r, \vartheta)$.

Sob a transformação acima, a (4.6) torna-se

$$\frac{r^2}{R(r)} \frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{1}{S(\vartheta)} \frac{d^2}{d\vartheta^2} S(\vartheta) + \left[r + \frac{f'(r)r^2}{f(r)} \right] \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} R(r) + \frac{2[E - V(r)]r^2}{f^2(r)} = 0. \quad (4.8)$$

façamos agora

$$\frac{1}{S(\vartheta)} \frac{d^2}{d\vartheta^2} S(\vartheta) = \nu, \quad (4.9)$$

isto implica que

$$S(\vartheta) = N e^{\sqrt{\nu}\vartheta}, \quad (4.10)$$

onde N é uma constante de normalização. Devemos ainda impor a condição de que $S(\vartheta+2\pi) = S(\vartheta)$, que implica:

$$\sqrt{\nu} = im, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2... \quad (4.11)$$

A equação radial fica:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{1}{r} + \frac{f'(r)}{f(r)} \right] \frac{dR}{dr} + \left\{ -\frac{m^2}{r^2} + \frac{2[E - V(r)]}{f^2(r)} \right\} R = 0. \quad (4.12)$$

Vamos estudar o oscilador harmônico isotrópico, cujo potencial é dado por

$$V(r) = \frac{r^2}{2}, \quad (4.13)$$

em um cenário onde a massa da partícula é

$$m(r) = \frac{1}{(1 + \gamma r^2)^2}, \quad (4.14)$$

com γ sendo um parâmetro real não-negativo com unidade de inverso de comprimento ao quadrado. Nesse caso, $f(r)$ assume a forma

$$f(r) = 1 + \gamma r^2. \quad (4.15)$$

Levando as (4.13) e (4.15) na equação (4.12), obtemos

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left(\frac{1}{r} + \frac{2\gamma r}{1 + \gamma r^2} \right) \frac{dR}{dr} + \left[-\frac{m^2}{r^2} + \frac{2E - r^2}{(1 + \gamma r^2)^2} \right] R = 0. \quad (4.16)$$

Para resolvermos a (4.16), vamos introduzir a mudança de variável

$$\varrho = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \tan^{-1} \sqrt{\gamma} r, \quad (4.17)$$

que mapeia o intervalo $0 < r < \infty$ no intervalo $0 < \varrho < \pi/2\sqrt{\gamma}$, transformando a equação

(4.16) em

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \left(\frac{\sqrt{\gamma}}{\tan \sqrt{\gamma}\rho} + \sqrt{\gamma} \tan \sqrt{\gamma}\rho \right) \frac{dR}{d\rho} \\ + \left[-2m^2\gamma + 2E - \frac{m^2\gamma}{\tan^2 \sqrt{\gamma}\rho} - \left(m^2\gamma + \frac{1}{\gamma} \right) \tan^2 \sqrt{\gamma}\rho \right] R = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Introduzindo os parâmetros

$$\kappa = \sqrt{\gamma} \quad \text{e} \quad \varepsilon = 2E, \quad (4.19)$$

obtemos:

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \left(\frac{c}{s} + \frac{s}{c} \right) \frac{1}{\kappa} \frac{dR}{d\rho} + \left[-2m^2 + \frac{\varepsilon}{\kappa^2} - m^2 \frac{c^2}{s^2} - \left(m^2 + \frac{1}{\kappa^4} \right) \frac{s^2}{c^2} \right] R = 0, \quad (4.20)$$

onde

$$c = \cos \kappa\rho \quad \text{e} \quad s = \sin \kappa\rho. \quad (4.21)$$

Façamos agora a mudança

$$R(\rho) = c^\lambda W(s), \quad (4.22)$$

que transforma (4.20) em

$$\begin{aligned} (1-s^2)W''(s) + \left[-(2\lambda+1)s + \frac{1}{s} \right] W'(s) \\ + \left[\left(\frac{\varepsilon}{\kappa^2} - m^2 - 2\lambda \right) - \frac{m^2}{s^2} + \left(\lambda^2 - 2\lambda - m^2 - \frac{1}{\kappa^4} \right) \frac{s^2}{c^2} \right] W(s) = 0. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Agora escolhemos λ de tal forma a cancelar o termo na tangente quadrada:

$$\lambda^2 - 2\lambda - m^2 - \frac{1}{\kappa^4} = 0, \quad (4.24)$$

cujas raízes são

$$\lambda_{\pm} = 1 \pm \sqrt{1 + m^2 + \frac{1}{\kappa^4}}. \quad (4.25)$$

Tomemos a raiz positiva. Dessa forma, ficamos com

$$(1-s^2)W''(s) + \left[-(2\lambda_+ + 1)s + \frac{1}{s} \right] W'(s) + \left[\left(\frac{\varepsilon}{\kappa^2} - m^2 - 2\lambda_+ \right) - \frac{m^2}{s^2} \right] W(s) = 0. \quad (4.26)$$

Agora tomamos

$$W(s) = s^{|m|} Z(s), \quad (4.27)$$

obtendo

$$(1-s^2)Z''(s) + \left[-(2\lambda_+ + 2|m|+1)s + \frac{2|m|+1}{s} \right] Z'(s) + \left[\frac{\varepsilon}{\kappa^2} - 2m^2 - 2(|m|+1)\lambda_+ \right] Z(s) = 0. \quad (4.28)$$

Façamos então outra mudança de variável

$$z = 2s^2 - 1, \quad (4.29)$$

que mapeia o intervalo $0 < s < 1$ no intervalo $-1 < z < 1$ e implica

$$(1-z^2)Z''(z) + [(\beta-\alpha) - (\alpha+\beta+2)z]Z'(z) + \frac{1}{4} \left[\frac{\varepsilon}{\kappa^2} - 2m^2 - 2(|m|+1)\lambda_+ \right] Z(z) = 0, \quad (4.30)$$

onde

$$\alpha = \sqrt{1 + m^2 + \frac{1}{\kappa^4}} \quad \text{e} \quad \beta = |m|. \quad (4.31)$$

Nós queremos que nossa função de onda $Z(z)$ seja regular nos extremos $z = \pm 1$, tal exigência impõe que devamos tomar

$$\frac{1}{4} \left[\frac{\varepsilon}{\kappa^2} - 2m^2 - 2(|m|+1)\lambda_+ \right] = n(n + \alpha + \beta + 1), \quad (4.32)$$

onde n é um inteiro não-negativo [38]. Dessa forma, (4.30) torna-se

$$(1-z^2)Z''(z) + [(\beta-\alpha) - (\alpha+\beta+2)z]Z'(z) + n(n + \alpha + \beta + 1)Z(z) = 0, \quad (4.33)$$

cujas soluções são os polinômios de Jacobi [38]:

$$Z(z) = P_n^{(\alpha,\beta)}(z). \quad (4.34)$$

Das relações (4.19), (4.25), (4.31) e (4.32), seguem as auto-energias:

$$E_{n,m,\gamma} = (2n + |m|+1)\sqrt{1 + (m^2 + 1)\gamma^2} + [(2n + |m|+1)^2 + m^2 + 1] \frac{\gamma}{2}. \quad (4.35)$$

4.2 Limite Clássico

Nesta seção, procuramos identificar possíveis efeitos na mecânica clássica oriundos da nossa introdução, na mecânica quântica, do operador de translação generalizado. O caminho escolhido para a exploração do domínio clássico é a conhecida analogia entre parênteses de Poisson e comutadores.

Parênteses de Poisson generalizado

Como a mecânica clássica, no formalismo de Hamilton, pode ser posta quase que totalmente em função dos parênteses de Poisson, vamos utilizar a ideia introduzida por Dirac, segundo a qual o parênteses de Poisson da mecânica clássica e o comutador da mecânica quântica estão conectados via [39]

$$-i[\hat{A}, \hat{B}] \rightarrow \{A, B\}, \quad (4.36)$$

para passar do formalismo quântico para o clássico. Então, no limite clássico, as relações (3.50), (3.45) e (3.51) tornam-se:

$$\{x_i, p_j\} = f(x)\delta_{ij}, \quad (4.37)$$

$$\{x_i, x_j\} = 0, \quad (4.38)$$

$$\{p_i, p_j\} = p_i f_j(x) - p_j f_i(x). \quad (4.39)$$

Para que a (4.36) faça sentido, precisamos que o parênteses de Poisson $\{\cdot, \cdot\}$ possua as mesmas propriedades do comutador quântico $[\cdot, \cdot]$:

$$\{\alpha A + B, C\} = \alpha\{A, C\} + \{B, C\}, \quad (\text{linearidade}) \quad (4.40a)$$

$$\{A, B\} = -\{B, A\}, \quad (\text{anticomutatividade}) \quad (4.40b)$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0. \quad (\text{identidade de Jacobi}) \quad (4.40c)$$

Estas propriedades podem ser garantidas através da definição do *parênteses de Poisson generalizado* [40, 41]:

$$\{A, B\} = \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_j} \right) \{x_i, p_j\} + \frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial x_j} \{x_i, x_j\} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} \{p_i, p_j\}. \quad (4.41)$$

Para o nosso caso, a definição acima torna-se:

$$\{A, B\} = \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) f(x) + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)], \quad (4.42)$$

onde $f_i(x) = \partial f(x)/\partial x_i$.

Como sabemos, a evolução temporal de uma variável dinâmica F é dada por [42]

$$\dot{F} = \{F, H\} + \partial_t F, \quad (4.43)$$

dessa forma, as *equações de Hamilton* escritas em função do parênteses de Poisson (4.42) são:

$$\dot{x}_i = \{x_i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i} f(x), \quad (4.44)$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} f(x) + \frac{\partial H}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)]. \quad (4.45)$$

A seguir, vamos aplicar esse formalismo a dois problemas conhecidos.

Exemplo 1: partícula livre

Vamos estudar a partícula livre unidimensional, cuja hamiltoniana é

$$H = \frac{p^2}{2}. \quad (4.46)$$

As equações de Hamilton ficam

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} f(x) = p f(x), \quad (4.47)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} f(x) = 0. \quad (4.48)$$

Da equação (4.48), vemos que o momento é, assim como no caso convencional, uma constante de movimento:

$$p = c_1. \quad (4.49)$$

Dessa forma a (4.47) torna-se:

$$\frac{dx}{f(x)} = c_1 dt \quad (4.50)$$

ou

$$\int \frac{dx}{f(x)} = c_1 \int dt. \quad (4.51)$$

Vamos estudar o caso no qual a massa dependente da posição seja dada por

$$m(x) = \frac{1}{(1 + \gamma x)^2}, \quad (4.52)$$

que equivale a considerar a expansão até primeira ordem em x da função $f(x)$, ou seja,

$$f(x) = 1 + \gamma x. \quad (4.53)$$

Dessa forma, a equação (4.51) torna-se

$$\int \frac{dx}{1 + \gamma x} = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) = c_1 t + c_2 \quad (4.54)$$

ou

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} \{ \exp [\gamma(c_1 t + c_2)] - 1 \}. \quad (4.55)$$

A constante c_1 está vinculada ao momento da partícula, que por sua vez está relacionado com a energia E do sistema através da (4.46). Considerando que a partícula deva ir ao infinito em um tempo suficientemente longo, podemos reescrever a (4.55) como:

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} \{ \exp [\gamma(\sqrt{2Et} + c_2)] - 1 \}. \quad (4.56)$$

A constante c_2 pode ser colocada, por exemplo, em função da posição inicial x_0 da partícula. Para tanto, podemos tomar $t = 0$ na (4.56), resultando em

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \{ \exp (\gamma c_2) - 1 \} &= x_0 \\ \Rightarrow c_2 &= \frac{1}{\gamma} \ln (1 + \gamma x_0). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Dessa forma, a (4.55) torna-se:

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} [(1 + \gamma x_0) \exp(\gamma \sqrt{2Et}) - 1]. \quad (4.58)$$

É importante ressaltar que no limite $\gamma \rightarrow 0$, que equivale a tomarmos a massa da partícula como constante, a solução (4.58) torna-se

$$x(t) = x_0 + \sqrt{2Et}, \quad (4.59)$$

que é a solução para o caso convencional.

Exemplo 2: partícula em campo uniforme

A hamiltoniana para uma partícula sujeita a um campo elétrico uniforme \mathcal{E} é:

$$H = \frac{p^2}{2} - \mathcal{E}x. \quad (4.60)$$

Logo, as equações canônicas de Hamilton ficam

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} f(x) = pf(x), \quad (4.61)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} f(x) = \mathcal{E}f(x). \quad (4.62)$$

Estas equações podem ser desacopladas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \ddot{p} &= \mathcal{E} \dot{f}(x) \\ &= \mathcal{E} f'(x) \dot{x} \\ &= \mathcal{E} f'(x) pf(x) \\ &= f'(x) p \dot{p}. \end{aligned}$$

Novamente vamos estudar o caso $m(x) = 1/(1 + \gamma x)^2$ ou $f(x) = 1 + \gamma x$, dessa forma:

$$\ddot{p} = \gamma p \dot{p}. \quad (4.63)$$

Esta equação pode ser integrada diretamente:

$$\begin{aligned}
 \ddot{p} &= \frac{d\dot{p}}{dp} \frac{dp}{dt} = \gamma p \dot{p} \\
 \Rightarrow \frac{d\dot{p}}{dp} &= \gamma p \\
 \Rightarrow \dot{p} &= \frac{\gamma p^2}{2} + c_1 \\
 \Rightarrow \int \frac{dp}{\frac{\gamma p^2}{2} + c_1} &= \int dt \\
 \Rightarrow \sqrt{\frac{2}{\gamma c_1}} \arctan \left(\sqrt{\frac{\gamma}{2c_1}} p \right) &= t + c_2
 \end{aligned}$$

ou

$$p(t) = \sqrt{\frac{2c_1}{\gamma}} \tan \left[\sqrt{\frac{\gamma c_1}{2}} (t + c_2) \right]. \quad (4.64)$$

Agora empregamos a (4.62) e obtemos

$$\begin{aligned}
 \dot{p} &= c_1 \sec^2 \left[\sqrt{\frac{\gamma c_1}{2}} (t + c_2) \right] \\
 &= \mathcal{E} (1 + \gamma x)
 \end{aligned}$$

ou

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} \left\{ \frac{c_1}{\mathcal{E}} \sec^2 \left[\sqrt{\frac{\gamma c_1}{2}} (t + c_2) \right] - 1 \right\}. \quad (4.65)$$

Novamente aqui, iremos utilizar parâmetros físicos para caracterizar as constantes de integração. Primeiramente, observemos que a energia do sistema é uma constante, dada pela (4.60). Levando as (4.65) e (4.64) nesta última, obtemos:

$$E = \frac{c_1}{\gamma} \tan^2 \left[\sqrt{\frac{\gamma c_1}{2}} (t + c_2) \right] - \frac{c_1}{\gamma} \sec^2 \left[\sqrt{\frac{\gamma c_1}{2}} (t + c_2) \right] + \frac{\mathcal{E}}{\gamma}$$

ou

$$c_1 = \mathcal{E} - \gamma E. \quad (4.66)$$

Levando esta última expressão na (4.64), encontramos:

$$p(t) = \sqrt{\frac{2(\mathcal{E} - \gamma E)}{\gamma}} \tan \left[\sqrt{\frac{\gamma(\mathcal{E} - \gamma E)}{2}} (t + c_2) \right]. \quad (4.67)$$

Dada a equação acima, podemos expressar a constante c_2 em função do valor inicial p_0 do momento como

$$c_2 = \sqrt{\frac{2}{\gamma(\mathcal{E} - \gamma E)}} \arctan \left(\sqrt{\frac{\gamma}{2(\mathcal{E} - \gamma E)}} p_0 \right), \quad (4.68)$$

dessa forma, a solução para o momento pode ser posta em sua forma final como:

$$p(t) = \sqrt{\frac{2(\mathcal{E} - \gamma E)}{\gamma}} \tan \left[\sqrt{\frac{\gamma(\mathcal{E} - \gamma E)}{2}} t + \arctan \left(\sqrt{\frac{\gamma}{2(\mathcal{E} - \gamma E)}} p_0 \right) \right]. \quad (4.69)$$

Passando ao limite $\gamma \rightarrow 0$, obtemos:

$$p(t) = p_0 + \mathcal{E}t, \quad (4.70)$$

que é a expressão convencional para a partícula imersa em um campo elétrico uniforme.

4.3 Medidas de Informação para o Oscilador Harmônico Imerso em um Campo Elétrico Uniforme

4.3.1 Definição das Medidas de Interesse

Nos últimos anos houve um crescente interesse no trato com a *teoria da informação* em mecânica quântica (e.g., [43–52]). Os pilares dessa teoria são a *informação de Fisher* [53, 54] e a *entropia de Shannon* [55], as quais medem, de maneira diferente e complementar, o conteúdo de informação da densidade de probabilidade $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ do sistema sob consideração. A entropia de Shannon é definida a partir de um funcional logarítmico da densidade de probabilidade, e pode ser escrita como:

$$S_x = - \int \rho(x) \ln \rho(x) dx. \quad (4.71)$$

Por outro lado, a informação de Fisher é definida em termos de um funcional gradiente da densidade de probabilidade:

$$F_x = \int \rho(x) \left[\frac{d}{dx} \ln \rho(x) \right]^2 dx = \int \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \rho(x) \right]^2 dx. \quad (4.72)$$

A entropia de Shannon (4.71) é uma medida de informação de caráter *global*, pois seus valores quantificam o conteúdo de informação da densidade considerada como um todo, levando em conta o domínio completo, sendo muito pouco sensível a grandes mudanças dentro de uma região de tamanho pequeno. Inversamente, a informação de Fisher (4.72) possui uma derivada (mais geralmente, um gradiente) da densidade em seu integrando, o que torna essa medida de informação extremamente sensível a grandes mudanças pontuais e dessa forma sendo considerada uma medida de informação de caráter *local*. Em geral, quanto maior é a informação de Fisher, mais localizada é a densidade, menor é a incerteza e maior é a precisão na previsão da localização da partícula.

Na presente seção temos por objetivo calcular a informação de Fisher e a entropia de Shannon para o caso de uma partícula habitando um espaço curvo, sujeita a um potencial

harmônico e interagindo com um campo elétrico uniforme. Devemos primeiramente observar que as definições (4.71) e (4.72) devem ser modificadas, pois estas foram definidas, e são válidas, apenas no espaço de Hilbert tradicional. Isso posto, surge imediatamente a seguinte questão: como deve ser a forma das medidas de informação no novo espaço de Hilbert? Para responder a esta pergunta, vamos empregar a interpretação correspondente a espaço curvo, que seja: a densidade de probabilidade é dada por

$$\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x) \quad (4.73)$$

associada ao elemento de comprimento

$$ds = \sqrt{g_{11}(x)}dx, \quad (4.74)$$

sendo $g_{11}(x)$ o tensor métrico unidimensional. Mediante as definições acima, a entropia de Shannon será dada por

$$S_x = - \int \rho(x) \ln \rho(x) \sqrt{g_{11}(x)} dx \quad (4.75)$$

e a informação de Fisher por

$$F_x = \int \frac{\rho(x)}{\sqrt{g_{11}(x)}} \left[\frac{d}{dx} \ln \rho(x) \right]^2 dx. \quad (4.76)$$

Para nossos propósitos, será conveniente a reparametrização $x \rightarrow s$. Dessa forma, as expressões acima tornam-se:

$$S_x = - \int |\psi(s)|^2 \ln |\psi(s)|^2 ds \quad (4.77)$$

e

$$F_x = \int |\psi(s)|^2 \left[\frac{d}{ds} \ln |\psi(s)|^2 \right]^2 ds. \quad (4.78)$$

Novamente, como era de se esperar, as expressões possuem as suas formas originais.

Na presente seção, vamos utilizar o tensor métrico

$$g_{11}(x) = \frac{1}{(1 + \gamma x)^2}, \quad (4.79)$$

que é equivalente a tomar a expansão até a primeira ordem, em x , da função $f(x)$ e isto por sua vez possibilita a existência da representação de momento².

Como vimos no capítulo 2, quando expresso em termos da variável s , o momento possui a sua forma original, ou seja,

$$\hat{P} = -i \frac{d}{ds}. \quad (4.80)$$

²Uma prova para isso pode ser encontrada na referência [5].

Dessa forma, a solução da equação de autovalor para o momento

$$\hat{P}u_p(s) = pu_p(s), \quad (4.81)$$

será

$$u_p(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ips}. \quad (4.82)$$

Como essas funções devem formar uma base para o espaço dos momentos, as funções de onda podem ser expressas como

$$\psi(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(p) e^{ips} dp. \quad (4.83)$$

Essa expressão pode ser invertida através de uma transformada de Fourier e tal processo leva a

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(s) e^{-ips} ds. \quad (4.84)$$

Uma vez que as funções de onda de posição e momento estão conectadas por uma transformada de Fourier, podemos definir a entropia de Shannon e a informação de Fisher no espaço dos momentos como:

$$S_p = - \int |\phi(p)|^2 \ln |\phi(p)|^2 dp, \quad (4.85)$$

$$F_p = \int |\phi(p)|^2 \left[\frac{d}{dp} \ln |\phi(p)|^2 \right]^2 dp. \quad (4.86)$$

4.3.2 Oscilador Harmônico em um Campo Elétrico Fixo

Agora vamos estudar, sob o ponto de vista do nosso formalismo, alguns aspectos de uma partícula sujeita ao potencial

$$V(x) = \frac{x^2}{2} - \mathcal{E}x, \quad (4.87)$$

o qual é a soma do potencial harmônico mais um potencial associado a um campo elétrico externo de magnitude fixa \mathcal{E} . Vale ressaltar que no presente estudo a frequência não representa um parâmetro de interesse e será omitida ($\omega = 1$).

A equação de Schrödinger associada ao potencial (4.87) é

$$\left(-\frac{1}{2} f(x) \frac{d}{dx} f(x) \frac{d}{dx} + \frac{x^2}{2} - \mathcal{E}x \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.88)$$

que pode ser reescrita sob a forma

$$\left[-\frac{1}{2} \left(f^2(x) \frac{d^2}{dx^2} + f'(x) f(x) \frac{d}{dx} \right) + \frac{x^2}{2} - \mathcal{E}x \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.89)$$

com $f^2(x) = f(x)f(x)$ e $f'(x) = df(x)/dx$.

O tensor métrico dado pela (4.79) é equivalente a considerar

$$f(x) = 1 + \gamma x. \quad (4.90)$$

Vimos que a nossa definição de produto interno (3.9) impõe que a função f seja positiva definida, logo, o intervalo de valores que a variável x pode assumir, uma vez que assumamos $\gamma \geq 0$, é $-1/\gamma < x < \infty$.

Levando a (4.90) na (4.89), obtemos

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[(1 + \gamma x)^2 \frac{d^2}{dx^2} + \gamma(1 + \gamma x) \frac{d}{dx} \right] + \frac{x^2}{2} - \mathcal{E}x \right\} \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.91)$$

Agora fazemos a mudança de variável

$$r = \frac{2}{\gamma^2}(1 + \gamma x), \quad (4.92)$$

que mapeia o intervalo $-1/\gamma < x < \infty$ no intervalo $0 < r < \infty$ e leva a (4.91), após algumas manipulações simples, na

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} \psi(r) + r \frac{d}{dr} \psi(r) + \left[-\frac{r^2}{4} + \left(\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \right) r + \left(\frac{2E}{\gamma^2} - \frac{2\mathcal{E}}{\gamma^3} - \frac{1}{\gamma^4} \right) \right] \psi(r) = 0. \quad (4.93)$$

Agora mudamos a variável dependente através da definição:

$$\psi(r) = r^\alpha \varphi(r). \quad (4.94)$$

Esta mudança transforma a (4.93) na

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} \varphi(r) + (2\alpha + 1)r \frac{d}{dr} \varphi(r) + \left[-\frac{r^2}{4} + \left(\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \right) r + \left(\alpha^2 + \frac{2E}{\gamma^2} - \frac{2\mathcal{E}}{\gamma^3} - \frac{1}{\gamma^4} \right) \right] \varphi(r) = 0. \quad (4.95)$$

Vamos escolher

$$\alpha^2 = -\frac{2E}{\gamma^2} + \frac{2\mathcal{E}}{\gamma^3} + \frac{1}{\gamma^4}. \quad (4.96)$$

Tal escolha implica na

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} \varphi(r) + (2\alpha + 1)r \frac{d}{dr} \varphi(r) + \left[-\frac{r^2}{4} + \left(\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \right) r \right] \varphi(r) = 0. \quad (4.97)$$

Façamos agora mais uma mudança na variável dependente:

$$\varphi(r) = e^{-\beta r} \mu(r). \quad (4.98)$$

Esta mudança transforma a (4.97) na

$$r \frac{d^2}{dr^2} \mu(r) + (2\alpha + 1 - 2\beta r) \frac{d}{dr} \mu(r) + \left[\left(\beta^2 - \frac{1}{4} \right) r + \left(\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} - (2\alpha + 1)\beta \right) \right] \mu(r) = 0. \quad (4.99)$$

Agora vamos escolher

$$\beta = \frac{1}{2}, \quad (4.100)$$

o que leva a (4.99) na:

$$r \frac{d^2}{dr^2} \mu(r) + (2\alpha + 1 - r) \frac{d}{dr} \mu(r) + \left[\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} - \frac{(2\alpha + 1)}{2} \right] \mu(r) = 0. \quad (4.101)$$

Queremos que a nossa função de onda seja um polinômio, isso pode ser alcançado através da imposição

$$\frac{\mathcal{E}}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} - \frac{(2\alpha + 1)}{2} = n, \quad (4.102)$$

onde n é um número natural [38]. Dessa forma, a (4.101) torna-se

$$r \frac{d^2}{dr^2} \mu(r) + (2\alpha + 1 - r) \frac{d}{dr} \mu(r) + n\mu(r) = 0, \quad (4.103)$$

cujas soluções são os *polinômios de Laguerre generalizados* [38]:

$$\mu(r) = L_n^{2\alpha}(r). \quad (4.104)$$

Utilizando esta expressão e mais as (4.100) e (4.98), a função de onda (4.94) pode ser escrita como:

$$\psi(r) = r^\alpha e^{-r/2} L_n^{2\alpha}(r), \quad (4.105)$$

onde

$$r = 2e^{\gamma s} / \gamma^2 \quad (4.106)$$

e

$$s = \int^x \frac{dx'}{1 + \gamma x'}. \quad (4.107)$$

Comparando a (4.102) com a (4.96), vemos que as auto-energias são dadas por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \left[1 + \gamma \mathcal{E} - \frac{\gamma^2}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{\mathcal{E}^2}{2}. \quad (4.108)$$

Ao tomarmos o parâmetro $\gamma \rightarrow 0$ no espectro acima — o que equivale a considerar a partícula em um espaço plano — obtemos:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\mathcal{E}^2}{2}, \quad (4.109)$$

que são as auto-energias tradicionais para o oscilador em um campo uniforme [17]. Por outro

lado, desligando o campo elétrico, as auto-energias tornam-se

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \frac{\gamma^2}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right)\right], \quad (4.110)$$

que são as energias associadas ao potencial de Morse [36]. Portanto, considerar uma partícula sujeita ao potencial harmônico no caso desta está movendo-se em um espaço curvo unidimensional definido pelo tensor métrico dado pela (4.79) é equivalente, do ponto de vista energético, a considerar uma partícula no espaço euclidiano sujeita a um potencial de Morse.

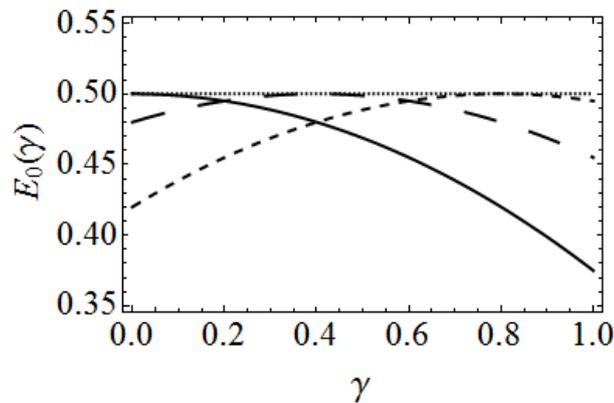


Figura 1: Plots de $E_0(\gamma)$ para $\mathcal{E} = 0$ (linha contínua), $\mathcal{E} = 0, 2$ (linha tracejada longa) e $\mathcal{E} = 0, 4$ (linha tracejada). A linha pontilhada corresponde a energia do estado fundamental do oscilador harmônico em um espaço plano.

A energia do estado fundamental é:

$$E_0 = \frac{1}{2} \left(1 + \gamma\mathcal{E} - \mathcal{E}^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right). \quad (4.111)$$

Tomando a derivada com respeito a γ e igualando a zero:

$$\frac{\partial E_0}{\partial \gamma} = 0, \quad (4.112)$$

obtemos

$$\gamma = 2\mathcal{E}, \quad (4.113)$$

que é o valor de γ para o qual a energia do estado fundamental assume seu máximo valor. Substituindo esta expressão na (4.111), obtemos:

$$E_0 = 1/2, \quad (4.114)$$

que é a energia do estado fundamental de uma partícula sujeita a um potencial harmônico no espaço euclidiano. Na figura 1, plotamos algumas possíveis curvas para o estado fundamental em função do parâmetro γ , para alguns valores do campo elétrico. Como adiantado, vemos do

gráfico que o valor $E_0 = 1/2$ é um valor limite para a energia fundamental. Portanto, o campo elétrico \mathcal{E} e o γ podem ser escolhidos de tal forma a anularem um ao outro. Esse processo pode ser repetido para cada um dos níveis de energia e, de forma geral, tomando

$$\gamma = \frac{\mathcal{E}}{\left(n + \frac{1}{2}\right)}, \quad (4.115)$$

implica que a n -ésima máxima energia será dada pela fórmula tradicional:

$$E_n = n + \frac{1}{2}. \quad (4.116)$$

4.3.3 Análise das Medidas de Informação

Agora vamos analisar como as medidas de informação são afetadas pela geometria (dada em função do parâmetro γ) e pelo campo elétrico.

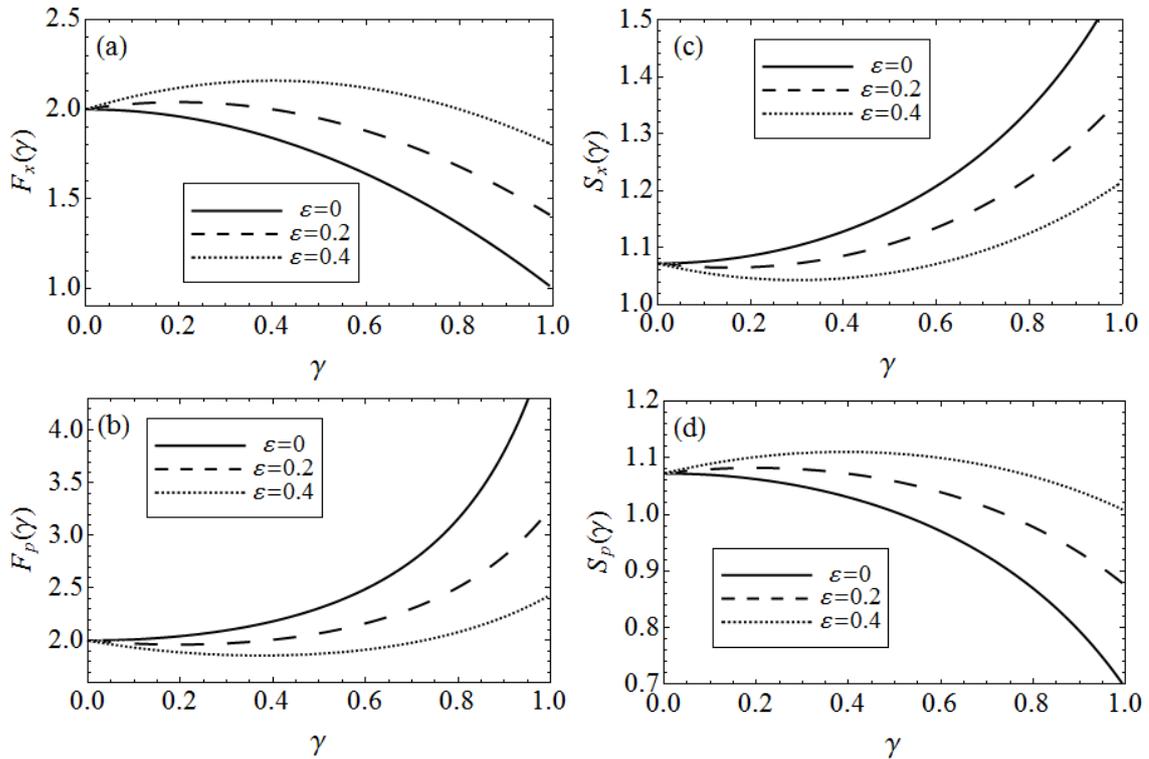


Figura 2: Plots da a) informação de Fisher para posição F_x , b) informação de Fisher para o momento F_p , c) entropia de Shannon para posição S_x e d) entropia de Shannon para o momento S_p , em função do parâmetro γ , para três valores distintos do campo elétrico \mathcal{E} .

Plots da entropia de Shannon e da Informação de Fisher em função do parâmetro γ são mostrados na figura 2. A partir destes, vemos que para $\mathcal{E} = 0$, F_x (S_x) decresce (cresce) com o aumento de γ , o que pode ser interpretado como um decréscimo de precisão na previsão de localização da partícula. Para $\mathcal{E} = 0, 2$ a situação é análoga, no entanto, a perda de informação é menor. Aumentando o campo elétrico para $\mathcal{E} = 0, 4$ a precisão na previsão de localização da

partícula é ainda maior que para $\mathcal{E} = 0, 2$ e ainda apresenta o comportamento de decrescer com γ .

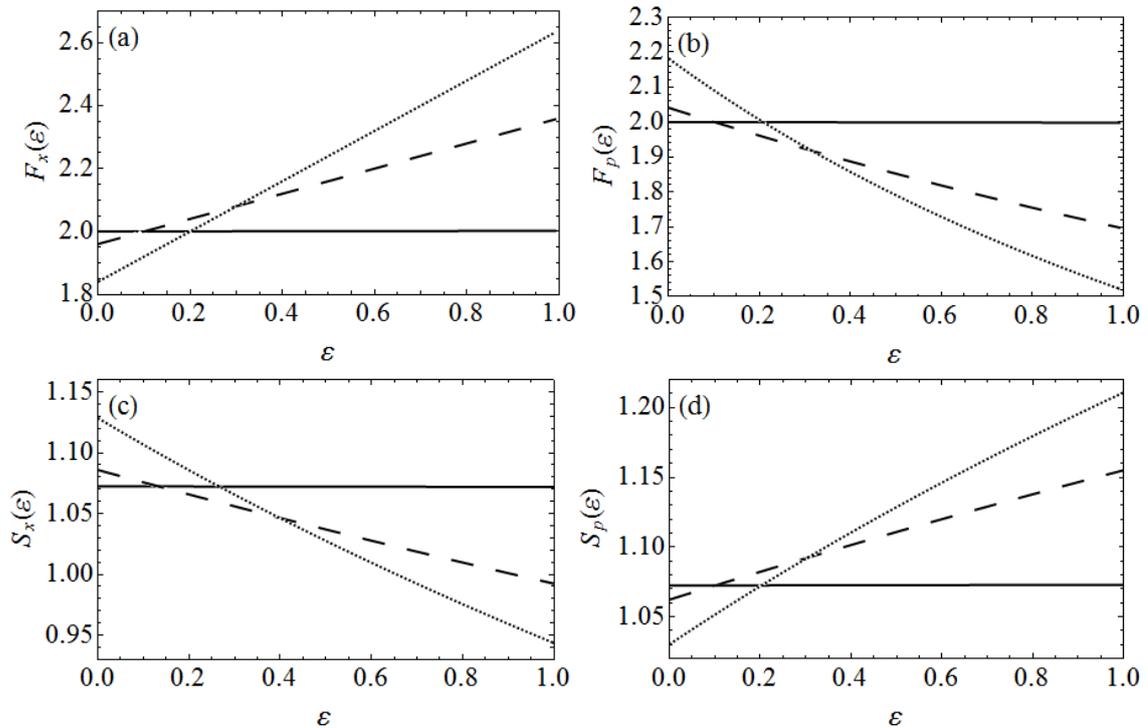


Figura 3: Plots da a) informação de Fisher para posição F_x , b) informação de Fisher para o momento F_p , c) entropia de Shannon para posição S_x e d) entropia de Shannon para o momento S_p , em função do campo elétrico \mathcal{E} para $\gamma = 0$ (linha contínua), $\gamma = 0, 2$ (linha tracejada) e $\gamma = 0, 4$ (linha pontilhada).

Na figura 3 plotamos novamente a informação de Fisher e a entropia de Shannon, agora em função do campo elétrico aplicado e para alguns valores fixos do parâmetro de deformação γ . Os gráficos mostram que para o caso euclidiano ($\gamma = 0$) as medidas de informação são independentes do campo elétrico aplicado. Isso pode ser explicado pelo fato de que no caso euclidiano o campo elétrico não altera as funções de onda do oscilador harmônico, tendo como único efeito um “shift” na energia deste sistema. Para $\gamma \neq 0$, podemos ver, a partir da expressão para as energias (4.108), que o campo elétrico se acopla com o parâmetro γ para formar um termo de energia que depende do estado considerado, o que mostra que o campo elétrico interfere de forma efetiva na física do sistema. Os plots mostram ainda que a informação de posição F_x aumenta, enquanto a entropia S_x diminui, com o aumento do campo. O processo inverso ocorre com as medidas de momento, a informação de Fisher F_p diminui enquanto a entropia de Shannon aumenta, quando o campo elétrico \mathcal{E} cresce, indicando que a precisão nas previsões de momento diminui.

Ainda, na figura 4 plotamos os gráficos das somas das entropias $S = S_x + S_p$, contra γ e contra \mathcal{E} . Os gráficos mostram que as somas em ambos os casos respeitam a relação

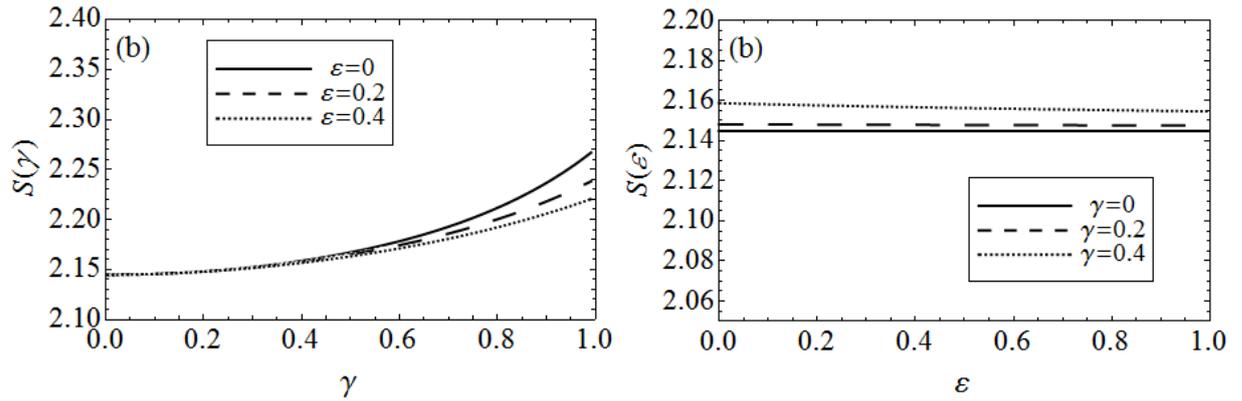


Figura 4: Plots de a) $S = S_x(\gamma) + S_p(\gamma)$ e b) $S = S_x(\varepsilon) + S_p(\varepsilon)$.

de incerteza entrópica [56, 57]:

$$S_x + S_p \geq 1 + \ln \pi. \quad (4.117)$$

Para finalizar, gostaríamos de mencionar que o trabalho desta seção serviu como base para a publicação [58].

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, revisitamos o formalismo de operador de translação generalizado. A partir da definição (3.1), obtivemos uma relação de comutação fundamental modificada. A realização da álgebra de Heisenberg, no espaço de coordenadas, proveniente dessa relação de comutação modificada, nos levou a uma expressão para o momento que é não-hermitiana. Isto, por sua vez, exigiu a redefinição do produto interno do espaço de Hilbert associado a partícula em questão. A partir dessa redefinição para o produto interno, vimos que o esse formalismo pode ser utilizado tanto na descrição de uma partícula com massa dependente da posição quanto na descrição de uma partícula movendo-se em um espaço unidimensional deformado (ou curvo). Cada uma dessas interpretações possuindo uma densidade de probabilidade própria. Mostramos também a equação de Schrödinger que governa a evolução temporal do sistema e a equação de autovalor associada a mesma (equação de Schrödinger independente do tempo). Terminamos com a generalização para N dimensões euclidianas pro caso da partícula com massa dependente da posição, o que possibilitou uma comparação com o formalismo de von Roos em 3 dimensões.

No quesito aplicações, primeiramente investigamos o problema de uma partícula em duas dimensões sujeita a um potencial harmônico isotrópico. Também estudamos o limite clássico desse formalismo, que foi alcançando explorando a conexão entre comutadores e parêntese de Poisson, o que possibilitou a solução de dois problemas simples: a partícula livre e a partícula em um campo uniforme. Por fim, exploramos os recentes estudos da aplicação da teoria da informação em mecânica quântica, calculamos (numericamente) a informação de Fisher e a entropia de Shannon para o problema de um oscilador harmônico imerso em um campo elétrico uniforme e interpretamos os resultados.

Como perspectiva futura para este trabalho, podemos vislumbrar uma passagem da mecânica quântica não-relativística para a relativística, por exemplo, através da introdução do operador momento generalizado na equação de Dirac e/ou na equação de Klein-Gordon. Também podemos investigar, dentro do formalismo, outros problemas já existentes na literatura para o caso da massa dependente da posição. No momento, estamos prestes a lançar um trabalho sobre as medidas de informação relacionadas com o problema do oscilador bidimensional aqui presente.

APÊNDICE A - GRUPO DAS TRANSLAÇÕES DEPENDENTES DA POSIÇÃO

Neste apêndice, mostramos que as translações definidas pela (3.1) verificam os axiomas de grupo [59].

Fechamento

$$\begin{aligned}\hat{T}(\varepsilon')\hat{T}(\varepsilon)|x\rangle &= \hat{T}(\varepsilon')|x + \varepsilon f(x)\rangle \\ &= |x + \varepsilon f(x) + \varepsilon' f[x + \varepsilon f(x)]\rangle,\end{aligned}$$

expandindo $f[x + \varepsilon f(x)]$ em torno de x , obtemos

$$f[x + \varepsilon f(x)] = f(x) + f'(x)\varepsilon f(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

logo

$$\begin{aligned}|x + \varepsilon f(x) + \varepsilon' f[x + \varepsilon f(x)]\rangle &= |x + \varepsilon f(x) + \varepsilon'[f(x) + f'(x)\varepsilon f(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)]\rangle \\ &\simeq |x + (\varepsilon + \varepsilon')f(x)\rangle \\ &= \hat{T}(\varepsilon + \varepsilon')|x\rangle,\end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{T}(\varepsilon')\hat{T}(\varepsilon) = \hat{T}(\varepsilon + \varepsilon'). \quad (\text{A.1})$$

Onde desprezamos termos de segunda ordem nos infinitésimos.

Associatividade

Pela (A.1), temos:

$$\begin{aligned}\hat{T}(\varepsilon'')[\hat{T}(\varepsilon')\hat{T}(\varepsilon)] &= \hat{T}(\varepsilon'')\hat{T}(\varepsilon + \varepsilon') \\ &= \hat{T}(\varepsilon + \varepsilon' + \varepsilon'') \\ &= \hat{T}(\varepsilon' + \varepsilon'')\hat{T}(\varepsilon) \\ &= [\hat{T}(\varepsilon'')\hat{T}(\varepsilon')]\hat{T}(\varepsilon).\end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Existência do elemento neutro

É trivial, basta tomar $\varepsilon = 0$ na (3.1).

Existência do elemento inverso

Fazendo $\varepsilon' = -\varepsilon$ na (A.1), temos

$$\hat{T}(-\varepsilon)\hat{T}(\varepsilon) = \hat{T}(0) = \hat{T}(\varepsilon)\hat{T}(-\varepsilon),$$

logo

$$\hat{T}^{-1}(\varepsilon) = \hat{T}(-\varepsilon). \tag{A.3}$$

Portanto, as translações definidas pela (3.1) formam um grupo no espaço de Hilbert.

**APÊNDICE B - DEMOSTRAÇÃO DE ALGUMAS DAS PROPRIEDADES DO
PARÊNTESES DE POISSON GENERALIZADO**

Linearidade

$$\begin{aligned}
\{\alpha A + B, C\} &= \left[\frac{\partial(\alpha A + B)}{\partial x_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial x_i} \frac{\partial(\alpha A + B)}{\partial p_i} \right] f(x) + \frac{\partial(\alpha A + B)}{\partial p_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \\
&= \left[\left(\alpha \frac{\partial A}{\partial x_i} + \frac{\partial B}{\partial x_i} \right) \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial x_i} \left(\alpha \frac{\partial A}{\partial p_i} + \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \right] f(x) \\
&\quad + \left(\alpha \frac{\partial A}{\partial p_i} + \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \frac{\partial C}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \\
&= \alpha \left\{ \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) f(x) + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \right\} \\
&\quad + \left(\frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial C}{\partial p_i} - \frac{\partial C}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) f(x) + \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial C}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \\
&= \alpha \{A, C\} + \{B, C\}.
\end{aligned} \tag{B.1}$$

Anticomutatividade

$$\begin{aligned}
\{A, B\} &= \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) f(x) + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \\
&= - \left(\frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) f(x) + \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial p_i} [p_j f_i(x) - p_i f_j(x)] \\
&= - \left(\frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) f(x) - \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial p_j} [p_i f_j(x) - p_j f_i(x)] \\
&= -\{B, A\}.
\end{aligned} \tag{B.2}$$

REFERÊNCIAS

- [1] FILHO, R. C. et al. Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. *Physical Review A*, APS, v. 84, n. 5, p. 050102, 2011.
- [2] NOBRE, F.; REGO-MONTEIRO, M.; TSALLIS, C. A generalized nonlinear schroedinger equation: Classical field-theoretic approach. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 97, n. 4, p. 41001, 2012.
- [3] REGO-MONTEIRO, M.; NOBRE, F. Classical field theory for a non-hermitian schroedinger equation with position-dependent masses. *Physical Review A*, APS, v. 88, n. 3, p. 032105, 2013.
- [4] FILHO, R. N. C. et al. Morse potential derived from first principles. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 101, n. 1, p. 10009, 2013.
- [5] FERREIRA, F. A. P. *Álgebra de Heisenberg Deformada via Modificação no Operador de Translação*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, 2014.
- [6] BARBAGIOVANNI, E.; FILHO, R. C. Quantum confinement in nonadditive space with a spatially dependent effective mass for si and ge quantum wells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 63, p. 14–20, 2014.
- [7] VUBANGSI, M.; TCHOFFO, M.; FAI, L. Position-dependent effective mass system in a variable potential: displacement operator method. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 89, n. 2, p. 025101, 2014.
- [8] COSTA, B. G. da; BORGES, E. P. Generalized space and linear momentum operators in quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, AIP, v. 55, n. 6, p. 062105, 2014.
- [9] VUBANGSI, M.; TCHOFFO, M.; FAI, L. New kinetic energy operator for variable mass systems. *The European Physical Journal Plus*, Springer, v. 129, n. 6, p. 105, 2014.
- [10] TCHOFFO, M.; VUBANGSI, M.; FAI, L. Quantum harmonic oscillator with position-dependent mass in the displacement operator formalism. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 89, n. 10, p. 105201, 2014.
- [11] VUBANGSI, M. et al. Supersymmetry and coherent states for the displacement-operator-derived effective mass system. *The European Physical Journal Plus*, Springer, v. 130, n. 1, p. 7, 2015.
- [12] PLASTINO, A. R.; VIGNAT, C.; PLASTINO, A. Variational principle for a schrödinger equation with non-hermitian hamiltonian and position-dependent mass. *Communications in Theoretical Physics*, Iop Publishing, v. 63, n. 3, p. 275, 2015.
- [13] BRAGA, J. P.; FILHO, R. N. C. Nonadditive quantum mechanics as a sturm–liouville problem. *International Journal of Modern Physics C*, World Scientific, v. 27, n. 04, p. 1650047, 2016.

- [14] COSTA, B. G. da; BORGES, E. P. A position-dependent mass harmonic oscillator and deformed space. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing, v. 59, n. 4, p. 042101, 2018.
- [15] FILHO, R. N. C. et al. Extended uncertainty from first principles. *Physics Letters B*, Elsevier, v. 755, p. 367–370, 2016.
- [16] ROOS, O. von. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. *Physical Review B*, APS, v. 27, n. 12, p. 7547, 1983.
- [17] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics: Volume 1*. [S.l.]: Wiley-VCH, 1991.
- [18] SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica Quântica Moderna*. [S.l.]: bookman, 2013.
- [19] NAKAHARA, M. *Geometry, topology and physics*. [S.l.]: CRC Press, 2003.
- [20] BALLENTINE, L. E. *Quantum Mechanics: A Modern Development Second Edition*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2014.
- [21] GREINER, W.; MÜLLER, B. *Quantum mechanics: symmetries*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- [22] KEMPF, A.; MANGANO, G.; MANN, R. B. Hilbert space representation of the minimal length uncertainty relation. *Physical Review D*, APS, v. 52, n. 2, p. 1108, 1995.
- [23] KEMPF, A. Noncommutative geometric regularization. *Physical Review D*, APS, v. 54, n. 8, p. 5174, 1996.
- [24] KEMPF, A. Non-pointlike particles in harmonic oscillators. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 30, n. 6, p. 2093, 1997.
- [25] QUESNE, C.; TKACHUK, V. Harmonic oscillator with nonzero minimal uncertainties in both position and momentum in a susyqm framework. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 36, n. 41, p. 10373, 2003.
- [26] STETSKO, M.; TKACHUK, V. Orbital magnetic moment of the electron in the hydrogen atom in a deformed space with minimal length. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 372, n. 31, p. 5126–5130, 2008.
- [27] DAS, S.; VAGENAS, E. C. Universality of quantum gravity corrections. *Physical review letters*, APS, v. 101, n. 22, p. 221301, 2008.
- [28] ALI, A. F.; DAS, S.; VAGENAS, E. C. Discreteness of space from the generalized uncertainty principle. *Physics Letters B*, Elsevier, v. 678, n. 5, p. 497–499, 2009.
- [29] QUESNE, C.; TKACHUK, V. Composite system in deformed space with minimal length. *Physical Review A*, APS, v. 81, n. 1, p. 012106, 2010.
- [30] MASŁOWSKI, T.; NOWICKI, A.; TKACHUK, V. Deformed heisenberg algebra and minimal length. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 45, n. 7, p. 075309, 2012.

- [31] DEY, S.; FRING, A.; KHANTOUL, B. Hermitian versus non-hermitian representations for minimal length uncertainty relations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 46, n. 33, p. 335304, 2013.
- [32] SNYDER, H. S. Quantized space-time. *Physical Review*, APS, v. 71, n. 1, p. 38, 1947.
- [33] GROSS, D. J.; MENDE, P. F. String theory beyond the planck scale. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 303, n. 3, p. 407–454, 1988.
- [34] GARAY, L. J. Quantum gravity and minimum length. *International Journal of Modern Physics A*, World Scientific, v. 10, n. 02, p. 145–165, 1995.
- [35] PADMANABHAN, T. *Gravitation: foundations and frontiers*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [36] MORSE, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Physical Review*, APS, v. 34, n. 1, p. 57, 1929.
- [37] BENDANIEL, D.; DUKE, C. Space-charge effects on electron tunneling. *Physical review*, APS, v. 152, n. 2, p. 683, 1966.
- [38] OLVER, F. W. et al. *NIST handbook of mathematical functions*. [S.l.]: Washington, DC, 2010.
- [39] DIRAC, P. A. M. The fundamental equations of quantum mechanics. *Proc. R. Soc. Lond. A*, The Royal Society, v. 109, n. 752, p. 642–653, 1925.
- [40] BENCZIK, S. et al. Short distance versus long distance physics: The classical limit of the minimal length uncertainty relation. *Physical Review D*, APS, v. 66, n. 2, p. 026003, 2002.
- [41] FRYDRYSZAK, A. M.; TKACHUK, V. M. Aspects of pre-quantum description of deformed theories. *Czechoslovak journal of physics*, Springer, v. 53, n. 11, p. 1035–1040, 2003.
- [42] GOLDSTEIN, H. *Classical mechanics*. [S.l.]: Pearson Education India, 2011.
- [43] ROMERA, E.; SÁNCHEZ-MORENO, P.; DEHESA, J. The fisher information of single-particle systems with a central potential. *Chemical physics letters*, Elsevier, v. 414, n. 4-6, p. 468–472, 2005.
- [44] DEHESA, J.; MARTÍNEZ-FINKELSHTEIN, A.; SOROKIN, V. Information-theoretic measures for morse and pöschl–teller potentials. *Molecular Physics*, Taylor & Francis, v. 104, n. 4, p. 613–622, 2006.
- [45] LIU, S. On the relationship between densities of shannon entropy and fisher information for atoms and molecules. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, v. 126, p. 191107, 2007.
- [46] AYDINER, E.; ORTA, C.; SEVER, R. Quantum information entropies of the eigenstates of the morse potential. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 22, n. 03, p. 231–237, 2008.
- [47] MARTÍN, A.; ANGULO, J.; ANTOLÍN, J. Fisher-like atomic divergences: Mathematical grounds and physical applications. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 392, n. 21, p. 5552–5563, 2013.

- [48] SUN, G.-H.; DONG, S.-H.; SAAD, N. Quantum information entropies for an asymmetric trigonometric rosen–morse potential. *Annalen der Physik*, Wiley Online Library, v. 525, n. 12, p. 934–943, 2013.
- [49] YANEZ-NAVARRO, G. et al. Quantum information entropies for position-dependent mass schrödinger problem. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 348, p. 153–160, 2014.
- [50] SONG, X.-D.; SUN, G.-H.; DONG, S.-H. Shannon information entropy for an infinite circular well. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 379, n. 22-23, p. 1402–1408, 2015.
- [51] AGUIAR, V.; GUEDES, I. Entropy and information of a spinless charged particle in time-varying magnetic fields. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing, v. 57, n. 9, p. 092103, 2016.
- [52] NASCIMENTO, J.; AGUIAR, V.; GUEDES, I. Entropy and information of a harmonic oscillator in a time-varying electric field in 2d and 3d noncommutative spaces. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 477, p. 65–77, 2017.
- [53] FISHER, R. A. Theory of statistical estimation. In: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. [S.l.], 1925. v. 22, n. 5, p. 700–725.
- [54] FRIEDEN, B. R. *Science from Fisher information: a unification*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004.
- [55] SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. *Bell system technical journal*, Wiley Online Library, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948.
- [56] BECKNER, W. Inequalities in fourier analysis. *Annals of Mathematics*, JSTOR, p. 159–182, 1975.
- [57] BIAŁYNICKI-BIRULA, I.; MYCIELSKI, J. Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics. *Communications in Mathematical Physics*, Springer, v. 44, n. 2, p. 129–132, 1975.
- [58] NASCIMENTO, J. et al. Information measures of a deformed harmonic oscillator in a static electric field. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 499, p. 250–257, 2018.
- [59] CORNWELL, J. F. *Group theory in physics: An introduction*. [S.l.]: Academic press, 1997.