

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

IVAN FRANCISCO DE SOUZA

**Osciladores Interagentes via Princípio da Ação Quântica de
Schwinger**

Poços de Caldas/MG

2025

IVAN FRANCISCO DE SOUZA

**Osciladores Interagentes via Princípio da Ação Quântica de
Schwinger**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física pelo Programa de Pós- Graduação em Física da Universidade Federal de Alfenas- Campus Poços de Caldas. Área de concentração: Física de Partículas e Campos.

Orientador: Prof. Dr. Cássius Anderson Miquele de Melo..

Poços de Caldas/MG

2025

Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas
Biblioteca Campus Poços de Caldas

Souza, Ivan Francisco de.

Osciladores Interagentes via Princípio da Ação Quântica de Schwinger /
Ivan Francisco de Souza. - Poços de Caldas, MG, 2025.

80 f. : il. -

Orientador(a): Cássius Anderson Miquele de Melo.

Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Alfenas,
Poços de Caldas, MG, 2025.

Bibliografia.

1. Símbolos de Medição. 2. Função de Transformação. 3. Princípio da
Ação Quântica. 4. Osciladores Acoplados. I. Melo, Cássius Anderson
Miquele de, orient. II. Título.

IVAN FRANCISCO DE SOUZA

OSCILADORES INTERAGENTES VIA PRINCÍPIO DA AÇÃO QUÂNTICA DE SCHWINGER

O Presidente da banca examinadora abaixo assina a aprovação da Dissertação apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Física de Partículas e Campos

Aprovada em: 11 de abril de 2025.

Prof. Dr. Alencar José de Faria
Presidente da Banca Examinadora
Instituição: Universidade Federal de Alfenas

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar
Instituição: Universidade Federal de São Paulo

Prof. Dr. Cássius Anderson Miquele de Melo
Instituição: Universidade Federal de Alfenas



Documento assinado eletronicamente por **Alencar José de Faria, Professor do Magistério Superior**, em 11/04/2025, às 16:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.unifal-mg.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1495465** e o código CRC **2176C8A2**.

Dedico este trabalho à minha mãe, por me apoiar e encorajar a seguir meus sonhos e enfrentar os desafios.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer aos meus pais, Afrânio e Nelma, e ao meu irmão Eliezer, pelo amor, carinho e apoio incondicionais durante toda a minha trajetória acadêmica. O encorajamento da minha mãe para seguir meus sonhos foi essencial para que eu desenvolvesse autoconfiança e enfrentasse os diversos desafios ao longo do caminho. Agradeço também ao meu amigo Diego, que sempre foi como um irmão mais velho, me incentivando e me ajudando nos momentos difíceis.

Expresso minha profunda gratidão e admiração ao Prof. Dr. Cássius Anderson Miquele de Melo, que foi muito mais do que um orientador para mim, sendo também um grande amigo. Ao longo dos anos sob sua orientação, tanto na iniciação científica quanto no mestrado, ele me proporcionou valiosos conhecimentos e me apresentou uma das áreas mais fascinantes da física: os princípios variacionais. Sua amizade e seus ensinamentos foram fundamentais para o meu crescimento acadêmico e pessoal.

Agradeço também a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior-Brasil (CAPES), por financiar o presente trabalho.

Agradeço a todos os professores e funcionários da UNIFAL, que, de alguma forma, me ajudaram e influenciaram positivamente na minha trajetória acadêmica, desde a graduação até o mestrado.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Poços de Caldas - MG

Março, 2025.

Ivan Francisco de Souza

“Desde que existe como ciência, a Física tem como seu objetivo mais cobiçado a solução do problema de condensar todos os fenômenos naturais num único princípio. Dentre as leis mais ou menos gerais que marcam as conquistas da ciência física durante o curso dos últimos séculos, o princípio da mínima ação é talvez aquele que, no que se refere à forma e ao conteúdo, mais se aproxima desse objetivo final da pesquisa teórica.”

- Max Planck

RESUMO

Nesta dissertação, exploramos aspectos da formulação variacional da mecânica quântica proposta por Julian Schwinger, estruturada em duas partes principais: cinemática e dinâmica. A parte cinemática trata do estudo das medições seletivas na mecânica quântica, permitindo a construção de uma álgebra de símbolos de medição. Já a dinâmica concentra-se nas variações infinitesimais unitárias das funções de transformação, nas quais Schwinger introduziu o operador ação como elemento central dessas variações, fundamentando assim o princípio da ação quântica. Demonstramos como esse princípio conduz naturalmente às formulações de Schrödinger e Heisenberg. Além disso, derivamos outras ferramentas, como as equações canônicas de Hamilton para operadores quânticos e uma versão quântica da equação de Hamilton-Jacobi. Aplicamos alguns dos métodos baseados no princípio de Schwinger para determinar as funções de transformação da partícula livre e do oscilador harmônico. Por fim, analisamos o modelo de osciladores acoplados unidimensionais, resolvendo-o por meio de técnicas de desacoplamento que transformam o sistema em osciladores independentes, representando os modos normais. Determinamos a função de transformação do sistema e suas autoenergias.

Palavras-chave: Símbolos de Medição; Função de Transformação; Princípio da Ação Quântica; Osciladores Acoplados.

ABSTRACT

In this dissertation, we explore aspects of the variational formulation of quantum mechanics proposed by Julian Schwinger, structured into two main parts: kinematics and dynamics. The kinematic part deals with the study of selective measurements in quantum mechanics, allowing for the construction of an algebra of measurement symbols. The dynamic part focuses on infinitesimal unitary variations of transformation functions, in which Schwinger introduced the action operator as the central element of these variations, thus establishing the principle of quantum action. We demonstrate how this principle naturally leads to the Schrödinger and Heisenberg formulations. Additionally, we derive other tools, such as Hamilton's canonical equations for quantum operators and a quantum version of the Hamilton-Jacobi equation. We apply some of the methods based on Schwinger's principle to determine the transformation functions of the free particle and the harmonic oscillator. Finally, we analyze the model of one-dimensional coupled oscillators, solving it through decoupling techniques that transform the system into independent oscillators, representing the normal modes. We determine the system's transformation function and its eigenenergies.

Keywords: Measurement Symbols; Transformation Function; Principle of Quantum Action; Coupled Oscillators.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Configuração do experimento de Stern-Gerlach.	18
Figura 2 –	Seletores de feixe de átomos com spin up e spin down.	20
Figura 3 –	Medidas Seletivas Sucessivas Iguais	20
Figura 4 –	Medidas Seletivas Sucessivas Diferentes.	21
Figura 5 –	Sistema de dois osciladores acoplados por molas idênticas.	57
Figura 6 –	Sistema de N osciladores acoplados por molas idênticas.	67

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	ÁLGEBRA DE SÍMBOLOS DE MEDIÇÕES QUÂNTICA	15
2.1	SÍMBOLOS DE MEDIÇÃO	15
2.1.1	Adição	16
2.1.2	Multiplicação	17
2.2	EXPERIMENTO DE STERN-GERLACH	18
2.3	PROPRIEDADES COMPATÍVEIS E INCOMPATÍVEIS	21
2.3.1	Incompatibilidade das componentes do momento angular	23
2.4	FUNÇÃO DE TRANSFORMAÇÃO	23
2.4.1	Traço	24
2.4.2	Valor Esperado	25
2.5	INTERPRETAÇÃO PROBABILÍSTICA	26
3	FORMULAÇÃO VARIACIONAL DA MECÂNICA QUÂNTICA	28
3.1	TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS	28
3.1.1	Representação de operadores	29
3.2	TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS INFINITESIMAIS	30
3.2.1	Variações de Infinitesimais das Funções de Transformação	30
3.2.2	Transformações unitárias das funções de transformação	31
3.2.3	Transformações Unitárias para Operadores	32
3.3	PRINCÍPIO DE SCHWINGER	33
3.3.1	Operador Ação	34
3.3.2	Operador Hamiltoniano	35
3.4	DERIVAÇÕES DO PRINCÍPIO DE SCHWINGER	37
3.4.1	Versão Quântica das Equações de Hamilton	38
3.4.2	Equações de Heisenberg	41
3.4.3	Equação de Schrödinger	43
3.4.4	Operadores Ordenados	44
3.4.5	Equação de Hamilton-Jacobi	46
3.5	APLICAÇÕES	47
3.5.1	Aplicação 1: Partícula Livre	47
3.5.2	Aplicação 2: Oscilador Harmônico	50
4	OSCILADORES INTERAGENTES	56
4.1	OSCILADORES INTERAGENTES EM UMA DIMENSÃO (CASO $N=2$)	57
4.1.1	Operador Hamiltoniano	58
4.2	PROPRIEDADES DA MATRIZ DE ACOPLAMENTO	59
4.3	OPERADORES DE CRIAÇÃO E ANIQUILAÇÃO	60
4.3.1	Operadores de Estados Vestidos (DSO)	61
4.4	Operadores de Modos Normais (NMO)	62
4.5	FUNÇÃO DE TRANSFORMAÇÃO	64
4.6	ESPECTRO DE ENERGIA	65
4.7	OSCILADORES INTERAGENTES EM UMA DIMENSÃO (CASO N)	67
4.7.1	Diagonalização da Matriz de Acoplamento de dimensão N	69
4.7.2	Hamiltoniano Desacoplado	73
4.7.3	Função de Transformação	73

4.7.4	Espectro de Energia	74
5	CONCLUSÃO	76
	REFERÊNCIAS	78

1 INTRODUÇÃO

Os princípios variacionais desempenham um papel fundamental na física, pois englobam diversas ferramentas matemáticas e princípios físicos. Na mecânica clássica, destaca-se o princípio da mínima ação de Hamilton, que estabelece que a evolução de um sistema físico ocorre de modo a tornar a ação mínima (ou, mais geralmente, estacionária). A partir desse princípio, é possível derivar as equações de Euler-Lagrange, as equações canônicas de Hamilton e a formulação de Hamilton-Jacobi, além de demonstrar o princípio de Noether e o teorema do virial (LAGRANGE, 1887; HAMILTON, 1834; NOETHER, 1918; CLAUSIUS, 1862). Os princípios variacionais representam uma das ferramentas matemáticas mais próximas de um princípio unificador das leis da física (LEMOS, 2013; MARION, 2013).

Inspirado nessa concepção, o físico estadunidense Julian Schwinger desenvolveu uma formulação variacional da mecânica quântica, conhecida como princípio da ação quântica. A formulação de Schwinger é uma das mais abrangentes da mecânica quântica e está em paralelo com a formulação de integrais de caminho de Feynman (SCHWINGER, 1960; FEYNMAN, 1948; FEYNMAN; HIBBS, 1965). Ambas têm raízes nas tentativas de Dirac de estabelecer uma conexão entre a função de transformação quântica e a ação clássica (DIRAC, 1933). O princípio da ação quântica é construído a partir das variações infinitesimais da função de transformação e da definição do operador ação quântico, que governa essas variações.

A formulação de Schwinger é dividida em dois aspectos principais: cinemática e dinâmica. No contexto da cinemática, ela envolve um estudo detalhado dos processos de medida na mecânica quântica. Um experimento de medida na mecânica quântica consiste em preparar um sistema em um estado quântico que, ao interagir com um aparato experimental destinado a medir uma quantidade física, é selecionado para um novo estado quântico. Schwinger chamou esse processo de *medida seletiva*. Esse conceito permitiu atribuir um significado matemático preciso aos projetores quânticos, associando-os a processos de medidas seletivas. Tais objetos foram denominados por Schwinger de *símbolos de medição*. Com base nisso, ele construiu uma álgebra para esses símbolos de medição (SCHWINGER, 1955; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011).

No contexto dinâmico, o princípio da ação quântica é formulado a partir da definição do operador ação quântico, cujas variações infinitesimais induzem transformações unitárias nas funções de transformação. A partir desse princípio, pode-se derivar ferramentas matemáticas

fundamentais, como a equação de Schrödinger e as equações de Heisenberg, que permitem obter as funções de transformação dos sistemas quânticos (SCHRÖDINGER, 1926; HEISENBERG, 1985). Além disso, é possível extrair uma versão quântica das equações canônica de Hamilton e também da equação de Hamilton-Jacobi. A importância da formulação de Schwinger reside em sua capacidade de unificar diversas ferramentas e princípios fundamentais da mecânica quântica. Além de trazer novas técnicas para resolução dos sistemas quânticos, podendo adaptar várias ideias do princípio da ação clássica para o princípio da ação quântica (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013).

Nesta dissertação, aplicamos a formulação de Schwinger para determinar a função de transformação e os níveis de energia de uma rede linear de osciladores acoplados. Escolhemos esse modelo devido à sua relevância na física do estado sólido, especialmente na descrição de fenômenos vibracionais em materiais.

Neste contexto, dentre os fenômenos associados a essas vibrações, destaca-se o *par de Cooper*, um dos aspectos mais intrigantes da supercondutividade. Esse fenômeno ocorre em materiais supercondutores a temperaturas extremamente baixas, onde dois elétrons, que normalmente se repeliriam devido à carga negativa, passam a se atrair indiretamente, formando um par, por meio da interação com as vibrações da rede cristalina, causada por partículas conhecidas como fônons (BARDEEN; COOPER; SCHRIEFFER, 1957).

Esse acoplamento dá origem aos chamados pares de Cooper, cuja formação é essencial para o surgimento do estado supercondutor, permitindo a condução elétrica sem resistência. Esse mecanismo desempenha um papel crucial na determinação das propriedades eletrônicas do material e influencia sua resposta a campos externos, sendo um dos pilares fundamentais para a compreensão da supercondutividade.

O modelo que tratamos nessa dissertação é uma simplificação, pois assumimos osciladores idênticos e restrito a uma única dimensão. No entanto, acreditamos que as técnicas empregadas na resolução desse sistema possam ser estendidas para configurações mais gerais em duas ou três dimensões, incorporando osciladores com diferentes propriedades (massas e constantes de molas). Demonstramos que o sistema pode ser descrito por meio de uma transformação que leva a um conjunto de osciladores desacoplados, cada um correspondente a um modo normal de vibração.

No Capítulo 2, apresentamos alguns aspectos da teoria algébrica dos símbolos de medição, culminando na interpretação probabilística da função de transformação, um dos elementos

centrais da formulação de Schwinger. No Capítulo 3, discutimos as variações infinitesimais unitárias das funções de transformação e sua relação com a variação da ação quântica. Além disso, derivamos algumas ferramentas do princípio da ação quântica úteis para a determinação da função de transformação em sistemas quânticos, finalizando o capítulo com a resolução dos casos da partícula livre e do oscilador harmônico. No Capítulo 4, determinamos a função de transformação e o espectro de energia na descrição dos modos normais de dois osciladores acoplados, e, por fim, generalizamos os resultados para o caso de N osciladores.

2 ÁLGEBRA DE SÍMBOLOS DE MEDIÇÕES QUÂNTICA

A formulação variacional da mecânica quântica desenvolvida por Julian Seymour Schwinger provém de um estudo extenso de uma análise alternativa dos processos de medidas associados à cinemática da mecânica quântica. Em 1955, na conferência de *Les Houches*, expôs suas ideias sobre a construção de uma álgebra partindo dos resultados de medidas de um sistema quântico (SCHWINGER, 1955; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011).

Neste estudo, Schwinger reconheceu que o ato de medir está intimamente relacionado à preparação de um sistema em um estado quântico específico, o qual, ao interagir com o aparato experimental, é selecionado para um novo estado quântico. Dentro dessa concepção, ele atribui um significado aos operadores de projeção, que ele chama de *símbolos de medição* (SCHWINGER, 1955; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001). Como veremos neste capítulo, um símbolo de medição é um objeto matemático associado ao processo de medida, responsável por aceitar ou rejeitar sistemas com determinados estados quânticos.

Neste capítulo, exploraremos alguns aspectos da álgebra dos símbolos de medição, que Schwinger chama de *cinemática* (SCHWINGER, 1955; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001). Para ilustrar a relação entre símbolo de medição e o processo de medida, utilizaremos o experimento de Stern-Gerlach como exemplo. Supomos que o leitor já esteja familiarizado com os postulados da mecânica quântica e com a notação de Dirac (DIRAC, 1981).

2.1 SÍMBOLOS DE MEDIÇÃO

Considere uma quantidade física A com um conjunto de autovalores $\{a_i\}_{i=1}^N$, a equação de autoestados dessa quantidade é dada por

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (i = 1, \dots, N), \quad (2.1)$$

no qual o conjunto de autoestados $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^N$ forma uma base ortonormal ($\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$). O operador \hat{A} representado na própria base é

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N a_i |a_i\rangle \langle a_i|. \quad (2.2)$$

Schwinger chama o *ket-bra* da Eq. (2.2) de *símbolo de medição*, o qual denotaremos por

$$\hat{M}_{a_i} \equiv |a_i\rangle \langle a_i|, \quad (2.3)$$

esse símbolo está associado ao processo de medida que seleciona sistemas que estejam apenas no estado $|a_i\rangle$ e, rejeita aqueles que estão em outros estados diferentes. Tal processo é chamado de *medida seletiva*.

2.1.1 Adição

A adição de dois símbolos de medição é representada por

$$\hat{M}_{a_i} + \hat{M}_{a_j}, \quad (2.4)$$

que é um novo símbolo de medição que aceita sistemas apenas no estado $|a_i\rangle$ ou $|a_j\rangle$. A soma de todos os símbolos associado ao observável A obedece à *relação de completude*:

$$\sum_{i=1}^N \hat{M}_{a_i} = \hat{1}, \quad (2.5)$$

sendo que $\hat{1}$ é o símbolo de medição que aceita sistemas em qualquer estado do observável A , chamamos-o de *símbolo identidade*.

2.1.2 Multiplicação

A multiplicação de dois símbolos de medição é representada por

$$\hat{M}_{a_i} \hat{M}_{a_j}, \quad (2.6)$$

que pode ser entendida como *medidas seletivas sucessiva*. A leitura da ordem sequencial da multiplicação de símbolos de medição é feita da direita para esquerda*. No caso da Eq (2.6), primeiro é realizado uma medida seletiva do estado $|a_j\rangle$ e, em seguida, é realizado uma medida seletiva do estado $|a_i\rangle$. Se $i = j$, temos que

$$\hat{M}_{a_i} \hat{M}_{a_i} = \hat{M}_{a_i} \quad (2.7)$$

expressa o fato de que fazer duas medidas seletivas consecutivas do mesmo estado é equivalente à fazer uma única medida desse estado.

Por outro lado, se $i \neq j$, então temos

$$\hat{M}_{a_i} \hat{M}_{a_j} = \hat{0}, \quad (2.8)$$

no qual $\hat{0}$, é o símbolo que rejeita sistemas em qualquer estado, chamamos-o de *símbolo nulo*. Esse último resultado expressa o fato de que não há sistemas que estejam no estado $|a_i\rangle$ para serem selecionados na segunda medida seletiva, pois todos aqueles que não estavam no estado $|a_j\rangle$ foram rejeitados na primeira medida. De modo geral, podemos resumir as Eqs. (2.7) e (2.8) em uma única equação:

$$\hat{M}_{a_i} \hat{M}_{a_j} = \hat{\delta}_{ij} \hat{M}_{a_j}, \quad (2.9)$$

no qual $\hat{\delta}_{ij}$ é o símbolo delta de Kronecker, que vale $\hat{1}$ quando $i = j$ e, $\hat{0}$ quando $i \neq j$.

Dada as definições de adição e multiplicação dos símbolos de medição, temos que as seguintes relações são verdadeiras:

$$\begin{aligned} \hat{1}\hat{1} &= \hat{1}, & \hat{0}\hat{0} &= \hat{0}, & \hat{1}\hat{0} &= \hat{0}\hat{1} = \hat{0}, & \hat{1} + \hat{0} &= \hat{1}, \\ \hat{1}\hat{M}_{a_i} &= \hat{M}_{a_i}\hat{1} = \hat{M}_{a_i}, & \hat{0}\hat{M}_{a_i} &= \hat{M}_{a_i}\hat{0} = \hat{0}, & \hat{M}_{a_i} + \hat{0} &= \hat{M}_{a_i}. \end{aligned}$$

*A leitura sequencial dessa multiplicação, feita da direita para a esquerda, é apenas uma convenção. Nada impede que se adote a convenção de leitura da esquerda para a direita.

A partir das definições vista nessa seção, vemos que os símbolos de medição formam um anel não-comutativo. No entanto, esse anel é diferente daqueles que estamos familiarizados (relacionado ao conceito de números), pois nesse anel é válido a relação

$$\hat{M}_{a_i} + \hat{1} = \hat{1}, \quad (2.10)$$

essa relação expressa o fato que \hat{M}_{a_i} já está incluso em $\hat{1}$ e somar os dois símbolos resulta em $\hat{1}$, em outras palavras, o processo de medida que seleciona sistemas no estado $|a_i\rangle$ já está incluso no processo de medida que seleciona todos os estados, então nesse caso, somar \hat{M}_{a_i} não acrescenta nenhuma informação nova com respeito a medida. Essa é uma característica do anel dos símbolos de medição que não é visto em outros tipos de anéis. Portanto, deve se estar ciente que a soma que aparece na equação (2.10) não é o mesmo tipo de soma que estamos familiarizado para dois números ou duas matrizes. Uma breve introdução aos conceitos da álgebricos relevantes para a teoria física da medida e anéis pode ser consultada na referência Melo (2002).

2.2 EXPERIMENTO DE STERN-GERLACH

Para ilustrar a relação entre o símbolo de medição e o processo de medida, faremos uma breve discussão sobre o experimento de Stern-Gerlach (STERN; GERLACH, 1922).



Figura 1 – Configuração do experimento de Stern-Gerlach.

Fonte: Adaptado de Schwinger, J. e Englert, B. G., *Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements*, 2001, p. 30.

Primeiramente, átomos de prata (Ag) são aquecidos em um forno que possui um pequeno orifício, permitindo que os átomos escapem na forma de um feixe. Como ilustrado na Fig. 1, o feixe atravessa as fendas e, então, é submetido à um campo magnético não-homogêneo produzido por um par de polos, onde um deles possui uma aresta bastante afinada.

O átomo de prata possui um núcleo e 47 elétrons, no qual 46 podem ser vistos como uma nuvem eletrônica esférica com momento angular resultante nulo. Em uma primeira aproximação, podemos ignorar o spin nuclear, desse modo, o átomo tem um momento angular que vem da contribuição apenas do momento angular de spin do 47º elétron (SAKURAI; NAPOLITANO, 2020). O momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ é proporcional ao spin do elétron \mathbf{S} .

Devido ao fato que a energia de interação entre o momento magnético e o campo magnético é $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$, a componente z da força que o átomo sente é dada por

$$F_z = \frac{\partial(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})}{\partial z} \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}, \quad (2.11)$$

no qual desconsideramos outras direções além de z . Ao atravessar o campo magnético, os átomos com $\mu_z < 0$ ($S_z > 0$) sentem uma força direcionada para cima, enquanto os átomos com $\mu_z > 0$ ($S_z < 0$) sentem uma força direcionada para baixo. Na descrição de Schwinger, dizemos que o aparato de Stern-Gerlach funciona como seletor de átomos com a componente z de $\boldsymbol{\mu}$, ou, equivalentemente, a componente z de \mathbf{S} .

Classicamente, esperava-se que o feixe de átomos, ao atravessar o campo magnético, se espalhasse de forma aproximadamente uniforme e contínua na tela, com os valores de μ_z variando no intervalo entre $-\boldsymbol{\mu}$ e $|\boldsymbol{\mu}|$. Contudo, o que se observou foi que apenas duas manchas eram projetadas, correspondentes às direções “para cima” e “para baixo”. Como $\boldsymbol{\mu}$ é proporcional a \mathbf{S} , observou-se apenas dois valores possíveis para S_z : $\hbar/2$ e $-\hbar/2$, que correspondem às direções para cima (*up*) e para baixo (*down*), respectivamente. Aqui, \hbar representa a constante de Planck reduzida, definida como $\hbar = h/(2\pi)$, onde h é a constante de Planck.

Na linguagem da mecânica quântica, associamos um operador \hat{S}_z ao observável S_z . Além disso, como esse sistema quântico possui dois estados possíveis $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ (*up* e *down*), esse operador pode ser escrito como

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| - \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \langle\downarrow| = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| - |\downarrow\rangle \langle\downarrow|) = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

Na descrição de Schwinger, definimos os seguintes símbolos de medição:

$$\hat{M}_\uparrow \equiv |\uparrow\rangle \langle\uparrow|, \quad \hat{M}_\downarrow \equiv |\downarrow\rangle \langle\downarrow|, \quad (2.13)$$

no qual \hat{M}_\uparrow é o símbolo associado ao processo de medida que seleciona os átomos com spin

orientado para cima e rejeita aqueles com spin orientado para baixo. Enquanto, \hat{M}_\downarrow é o símbolo associado ao processo de medida que seleciona os átomos com spin orientado para baixo e rejeita aqueles com spin orientado para cima.



Figura 2 – Seletores de feixe de átomos com spin up e spin down.

Fonte: Adaptado de Schwinger, J. e Englert, B. G., *Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements*, 2001, p. 31.

Na Fig. 2a, mostra o aparato de Stern-Gerlach que filtra o feixe de átomos com orientação de spin para cima e, rejeita os átomos com spin para baixo. Já a Fig. 2b, mostra o aparato de Stern-Gerlach que filtra o feixe de átomos com orientação de spin para baixo e, rejeita os átomos com spin para cima.

A soma desses dois símbolos de medição resulta em

$$\hat{M}_\uparrow + \hat{M}_\downarrow = \hat{1}, \quad (2.14)$$

ou seja, o símbolo $\hat{1}$ está associado ao seletor que aceita tanto os átomos com spin orientado para cima quanto aqueles com spin orientado para baixo.

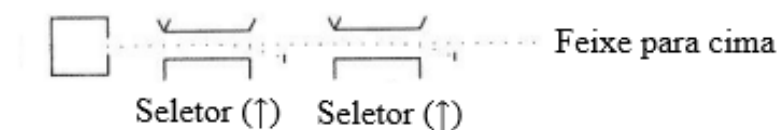


Figura 3 – Medidas Seletivas Sucessivas Iguais

Fonte: Adaptado de Schwinger, J. e Englert, B. G., *Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements*, 2001, p. 31.

Agora, suponhamos que sejam realizadas duas medições seletivas sucessivas: primeiro, é feita uma medição que seleciona apenas os átomos com spin orientado para cima; em seguida, realiza-se uma nova medição que também seleciona apenas os átomos com spin orientado para cima (Fig. 3). Temos então,

$$\hat{M}_\uparrow \hat{M}_\uparrow = \hat{M}_\uparrow, \quad (2.15)$$

isso significa que realizar a mesma medida seletiva duas vezes é equivalente a fazer uma única medida seletiva. Isso ocorre porque, se na primeira medida todos os átomos com spin orientado para cima foram selecionados, a segunda medida irá selecionar exatamente os mesmos átomos.

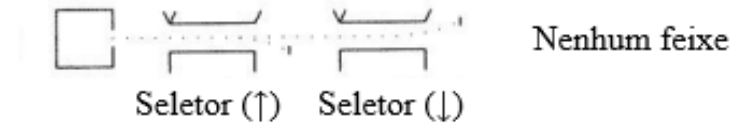


Figura 4 – Medidas Seletivas Sucessivas Diferentes.

Fonte: Adaptado de Schwinger, J. e Englert, B. G., *Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements*, 2001, p. 31.

Por outro lado, se realizarmos uma medida seletiva que seleciona apenas átomos com spin orientado para cima, seguida de uma segunda medida que seleciona apenas átomos com spin orientado para baixo, teremos

$$\hat{M}_{\downarrow}\hat{M}_{\uparrow} = \hat{0}, \quad (2.16)$$

ou seja, se na primeira medida o aparato rejeitou os átomos com spin orientado para baixo, não haverá nenhum átomo a ser aceito na segunda medida, que seleciona apenas os átomos com spin orientado para baixo (Fig. 4).

2.3 PROPRIEDADES COMPATÍVEIS E INCOMPATÍVEIS

Dois observáveis A e B são compatíveis se a medida de um não afeta o resultado da medida do outro. Nesse caso, seus respectivos símbolos de medição comutam, i. e.,

$$\hat{M}_{a_i}\hat{M}_{b_j} = \hat{M}_{b_j}\hat{M}_{a_i} \quad (i, j = 1, \dots, N). \quad (2.17)$$

Considere um conjunto de observáveis físicos $\{A_1, \dots, A_r\}$, todos mutuamente compatíveis entre si, definimos como uma *medida seletiva completa* o produto dos seus símbolos de medições

$$\hat{M}_a = \prod_{l=1}^r \hat{M}_{a_l}, \quad (2.18)$$

sendo \hat{M}_{a_l} o símbolo de medição que seleciona um estado possível do observável A_l . Como todos os símbolos desse conjunto comutam mutuamente entre si, qualquer sequência desse

produto é equivalente.

As medidas de todos esses observáveis compatíveis irão retornar um conjunto de valores que representam o estado do sistema, dizemos então que o sistema se encontra no estado $a \equiv \{a_1, \dots, a_r\}$. Uma medida seletiva completa permite obter informações do sistema sem que haja perturberância nos resultados, pois a medida de qualquer observável dentro desse conjunto não irá afetar os resultados dos outros observáveis. Realizar qualquer medida de um observável que não esteja nesse conjunto de compatibilidade, irá causar mudanças incontroláveis nos valores previamente medidos.

Uma medida mais geral envolve observáveis que não são compatíveis. O exemplo mais comum de observáveis não compatíveis na mecânica quântica é o conjunto de *coordenadas* e *momentum*. O princípio da incerteza de Heisenberg demonstra que não é possível medir simultaneamente a posição e o momento de um átomo com a mesma precisão, pois a medição de uma grandeza afeta a incerteza da outra, isso não é uma limitação experimental, mas uma característica da natureza na escala quântica.

Se considerarmos dois conjuntos completos de observáveis, $A = \{A_1, \dots, A_r\}$ e $B = \{B_1, \dots, B_r\}$, que não são compatíveis, os símbolos \hat{M}_a e \hat{M}_b não comutam. E ao fazer uma medida sequencial desses observáveis, teremos:

$$\hat{M}_a \hat{M}_b = |a\rangle \langle a|b\rangle \langle b| = \langle a|b\rangle |a\rangle \langle b| = \langle a|b\rangle \hat{M}_a^b, \quad (2.19)$$

sendo que $\hat{M}_a^b \equiv |a\rangle \langle b|$ seleciona sistemas inicialmente no estado b que emergem para o estado a . Mais adiante será visto que $\langle a|b\rangle$ é um número que está relacionado com a probabilidade do sistema emergir do estado b para o estado a .

Por outro lado, a sequência inversa da medida é dada por

$$\hat{M}_b \hat{M}_a = |b\rangle \langle b|a\rangle \langle a| = \langle b|a\rangle |b\rangle \langle a| = \langle b|a\rangle \hat{M}_b^a. \quad (2.20)$$

Os números $\langle a|b\rangle$ e $\langle b|a\rangle$ podem ser reais ou complexos, o mais geral é o caso em que eles formam um par conjugado

$$\langle b|a\rangle = (\langle a|b\rangle)^*. \quad (2.21)$$

Nesse caso, $\hat{M}_b \hat{M}_a \neq \hat{M}_a \hat{M}_b$, ou seja, os resultados das medidas são diferentes dependendo da ordem em que são realizadas. No caso de serem compatíveis, teremos que $\langle b|a\rangle = \langle a|b\rangle$, o que implica que eles são números reais.

2.3.1 Incompatibilidade das componentes do momento angular

Um exemplo de propriedades incompatíveis são as componentes S_x , S_y e S_z do momento angular de spin \mathbf{S} . Para ilustrar isso, retomemos a discussão do experimento de Stern-Gerlach. Considere uma medida seletiva que filtra apenas os átomos com a componente z para cima, à qual associamos o símbolo de medição $\hat{M}_{\uparrow z}$. Em seguida, realiza-se uma medida seletiva que filtra apenas os átomos com a componente x para cima, à qual associamos o símbolo de medição $\hat{M}_{\uparrow x}$. Nesse caso, indicamos a medida sucessiva por

$$\hat{M}_{\uparrow x} \hat{M}_{\uparrow z} = \langle \uparrow^{(x)} | \uparrow^{(z)} \rangle \hat{M}_{\uparrow x}^{\uparrow z}, \quad (2.22)$$

é o símbolo $\hat{M}_{\uparrow x}^{\uparrow z}$ que seleciona átomos inicialmente no estado $|\uparrow^{(z)}\rangle$ e que emergem para o estado $|\uparrow^{(x)}\rangle$. E $\langle \uparrow^{(x)} | \uparrow^{(z)} \rangle$ é o número associado à probabilidade do átomo emergir do estado $|\uparrow^{(z)}\rangle$ para o estado $|\uparrow^{(x)}\rangle$.

A experiência demonstra que, ao realizar uma terceira medida utilizando o aparato de Stern-Gerlach que filtra a componente S_z , o feixe se divide novamente em orientações para cima e para baixo. Isso levanta uma questão intrigante: como a componente S_z orientada para baixo, previamente rejeitada na primeira medida, pode reaparecer?

Esse exemplo é utilizado para ilustrar a impossibilidade de determinar simultaneamente S_z e S_x . A segunda medida seletiva, relacionada à componente $S_{\uparrow x}$, destrói completamente qualquer informação anterior sobre S_z (SAKURAI; NAPOLITANO, 2020).

2.4 FUNÇÃO DE TRANSFORMAÇÃO

O número $\langle a|b \rangle$ é chamado de *função de transformação*, ela relaciona duas descrições de estados diferentes. Além disso, é possível usar essas funções para relacionar diferentes símbolos. Por exemplo, dois símbolos de medições \hat{M}_d^c e \hat{M}_b^a estão relacionados através de uma combinação linear

$$\hat{M}_d^c = \sum_{a,b} \langle a|d \rangle \langle c|b \rangle \hat{M}_b^a. \quad (2.23)$$

Prova:

$$\begin{aligned}\hat{M}_d^c &= \hat{1}\hat{M}_d^c\hat{1} = \sum_a |a\rangle \langle a|d\rangle \langle c| \sum_b |b\rangle \langle b| = \sum_{a,b} |a\rangle \langle a|d\rangle \langle c|b\rangle \langle b| \\ &= \sum_{a,b} \langle a|d\rangle \langle c|b\rangle |a\rangle \langle b| = \sum_{a,b} \langle a|d\rangle \langle c|b\rangle \hat{M}_b^a.\end{aligned}$$

Outra propriedade fundamental é a equivalência entre diferentes funções, ou seja

$$\langle a|c\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle \langle b|c\rangle. \quad (2.24)$$

Para $c = a'$, temos que

$$\langle a|a'\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle \langle b|a'\rangle = \delta_a^{a'}, \quad (2.25)$$

particularmente,

$$\sum_b \langle a|b\rangle \langle b|a\rangle = 1. \quad (2.26)$$

Essa última relação reflete uma característica probabilística como será vista mais adiante.

2.4.1 Traço

A função de transformação $\langle a|b\rangle$ pode ser considerada como um funcional linear do símbolo \hat{M}_b^a (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011). Tal correspondência é dada pelo *traço*, que é definido como

$$\mathbf{Tr}\{\hat{M}_b^a\} = \mathbf{Tr}\{|b\rangle \langle a|\} = \langle a|b\rangle. \quad (2.27)$$

Para um mesmo observável, temos

$$\mathbf{Tr}\{\hat{M}_a^{a'}\} = \langle a|a'\rangle = \delta_a^{a'}, \quad (2.28)$$

particularmente,

$$\mathbf{Tr}\{\hat{M}_a^a\} = \mathbf{Tr}\{\hat{M}_a\} = 1. \quad (2.29)$$

O traço do produto de dois símbolos de medição é

$$\mathbf{Tr}\{\hat{M}_d^c \hat{M}_b^a\} = \mathbf{Tr}\{|d\rangle \langle c|b\rangle \langle a|\} = \langle c|b\rangle \mathbf{Tr}\{\hat{M}_d^a\} = \langle c|b\rangle \langle a|d\rangle, \quad (2.30)$$

e o traço do produto inverso é

$$\mathbf{Tr}\{\hat{M}_b^a \hat{M}_d^c\} = \mathbf{Tr}\{|b\rangle \langle a|d\rangle \langle c|\} = \langle a|d\rangle \mathbf{Tr}\{\hat{M}_b^c\} = \langle c|b\rangle \langle a|d\rangle, \quad (2.31)$$

apesar dos símbolos não comutarem, o traço do produto é comutativo.

2.4.2 Valor Esperado

O valor esperado de um observável A em um estado $|b_j\rangle$ do observável B é definido como

$$\langle \hat{A} \rangle_{b_j} = \langle b_j | \hat{A} | b_j \rangle = \sum_{i=1}^N \langle b_j | a_i \rangle a_i \langle a_i | b_j \rangle = \sum_{i=1}^N a_i \langle a_i | b_j \rangle \langle b_j | a_i \rangle, \quad (2.32)$$

na qual utilizamos a Eq. (2.2). Podemos ainda reescrever Eq. (2.32) fazendo uso da identidade da Eq. (2.30):

$$\langle \hat{A} \rangle_{b_j} = \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{Tr}\{\hat{M}_{a_i} \hat{M}_{b_j}\} = \mathbf{Tr}\left\{\sum_{i=1}^N a_i \hat{M}_{a_i} \hat{M}_{b_j}\right\} = \mathbf{Tr}\{\hat{A} \hat{M}_{b_j}\}. \quad (2.33)$$

Para o caso particular em que $B = A$ e $b_j = a_j$, temos

$$\langle \hat{A} \rangle_{a_j} = \mathbf{Tr}\left\{\sum_{i=1}^N a_i \hat{M}_{a_i} \hat{M}_{a_j}\right\} = \mathbf{Tr}\{a_j \hat{M}_{a_j}\} = a_j. \quad (2.34)$$

O valor esperado do operador \hat{S}_z no estado $|\uparrow\rangle$ é dado por:

$$\langle \hat{S}_z \rangle_{\uparrow} = \mathbf{Tr}\left\{\frac{\hbar}{2} \hat{M}_{\uparrow}\right\} = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.35)$$

e no estado $|\downarrow\rangle$, o valor esperado é

$$\langle \hat{S}_z \rangle_{\downarrow} = \mathbf{Tr}\left\{-\frac{\hbar}{2} \hat{M}_{\downarrow}\right\} = -\frac{\hbar}{2}. \quad (2.36)$$

2.5 INTERPRETAÇÃO PROBABILÍSTICA

Considere a seguinte mudança de escala

$$\hat{M}_a^b \rightarrow \lambda_a^{-1} \hat{M}_a^b \lambda_b; \quad \langle a|b \rangle \rightarrow \lambda_a^{-1} \langle a|b \rangle \lambda_b, \quad (2.37)$$

no qual λ_a e λ_b são fatores de escalas e pertencem aos números complexos. Particularmente, \hat{M}_a e $\langle a|a' \rangle$ são inalterados sob esse tipo de transformação.

Dois observadores podem utilizar escalas simbólicas diferentes para representar o mesmo fenômeno físico. Contudo, o resultado físico deve ser independente da escala simbólica adota por cada um. A função de transformação pode ser diferente dependendo da escala, o que nos leva a crer que ela não possui um significado físico direto, mas deve haver alguma grandeza associada à ela que seja invariante sob essa mudança de escala.

Considere a seguinte sequência de medida

$$\hat{M}_b \hat{M}_a \hat{M}_b = |b\rangle \langle b|a\rangle \langle a|b\rangle \langle b| = (\langle b|a\rangle \langle a|b\rangle) |b\rangle \langle b| = p(a,b) \hat{M}_b, \quad (2.38)$$

no qual $p(a,b)$ é um número real definido como

$$p(a,b) \equiv |\langle a|b \rangle|^2 = \langle b|a \rangle \langle a|b \rangle. \quad (2.39)$$

Veja que esse número é invariante sob a mudança de escala dada pela (2.32)

$$\lambda_b^{-1} \langle b|a \rangle \lambda_a \lambda_a^{-1} \langle a|b \rangle \lambda_b = \langle b|a \rangle \langle a|b \rangle = p(a,b). \quad (2.40)$$

Esses tipos de números obedecem à seguinte propriedade de adição

$$\hat{M}_b (\hat{M}_a + \hat{M}_{a'}) \hat{M}_b = p(a,b) \hat{M}_b + p(a',b) \hat{M}_b, \quad (2.41)$$

ou de forma mais geral,

$$\hat{M}_b \left(\sum_a \hat{M}_a \right) \hat{M}_b = \sum_a p(a,b) \hat{M}_b = \hat{M}_b. \quad (2.42)$$

Por outro lado, temos também

$$\hat{M}_b \left(\sum_a \hat{M}_a \right) \hat{M}_b = \hat{M}_b \hat{1} \hat{M}_b = \hat{M}_b, \quad (2.43)$$

logo, se compararmos a (2.42) com a (2.43), concluímos que

$$\sum_a p(a,b) = 1, \quad (2.44)$$

o que reflete um caráter probabilístico de normalização. Além disso, cada termo dessa soma se restringe à seguinte desigualdade

$$0 \leq p(a,b) \leq 1. \quad (2.45)$$

Existe uma probabilidade associada do sistema emergir de um estado para o outro. As funções de transformações são os elementos fundamentais na construção do princípio da ação quântica elaborada por Schwinger. Sabendo o comportamento da função de transformação do sistema, pode-se extrair todas informações relevantes como : probabilidades de medidas, espectro de energias, valores esperados dos observáveis e entre outras propriedades.

Em resumo, vimos neste capítulo que os símbolos de medição seguem uma lógica semelhante à lógica binária da computação. Em outras palavras, a medida seletiva “aceita” ou “rejeita” sistemas com um estado quântico específico. O experimento de Stern-Gerlach é apenas um exemplo entre muitos que obedecem a essa lógica, outro exemplo simples que normalmente é utilizado é o *estado de polarização da luz* (NUSSENZVEIG, 2014). Para uma compreensão mais detalhada da teoria algébrica da medida, recomendamos as referências Schwinger (1955), Schwinger, Englert et al. (2001), Melo, Pimentel e Ramirez (2011).

3 FORMULAÇÃO VARIACIONAL DA MECÂNICA QUÂNTICA

A *dinâmica* da formulação de Schwinger está baseada nas variações infinitesimais das funções de transformação. A partir disto, Schwinger elaborou um princípio variacional para a mecânica quântica que representa sua formulação mais geral, pois dele podemos extrair todos os fundamentos da mecânica quântica, como: equações dinâmicas, princípios fundamentais e propriedades de sistemas (SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013).

Neste capítulo, apresentaremos a construção do princípio da ação quântica e como, a partir dele, podemos derivar as equações de Heisenberg e de Schrödinger. Além disso, demonstraremos a existência de equações canônicas de Hamilton e de uma equação de Hamilton-Jacobi adaptada para operadores. Por fim, exploraremos um exemplo didático, a partícula livre e o oscilador harmônico quântico, para ilustrar algumas das técnicas de Schwinger na resolução de sistemas quânticos.

3.1 TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS

Um operador \hat{U} é chamado de unitário se o seu operador adjunto \hat{U}^\dagger for igual ao seu operador inverso, ou seja,

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}. \quad (3.1)$$

Os operadores unitários são muito utilizados em transformações na mecânica quântica, pois tais transformações não alteram o produto interno. Em outras palavras, a função de transformação permanece invariante e as probabilidades de medidas são conservadas.

As medidas de um observável A em um sistema quântico geram um conjunto de autovalores e autoestados que o representam. Ao realizar medidas de outras propriedades, obtêm-se novas representações. Cada uma dessas representações está definida em um espaço dotado de uma estrutura geométrica e de operadores bem definidas (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013).

Esses espaços estão relacionados por meio de transformações unitárias. Ou seja, os conjuntos de autoestados $\{a_i\}_{i=1}^N$ e $\{b_i\}_{i=1}^N$ associado aos observáveis A e B , respectivamente,

são relacionados pelos seguintes operadores unitários:

$$\hat{U}_{ab} = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle b_i|, \quad \text{e} \quad \hat{U}_{ba} = \sum_{i=1}^N |b_i\rangle \langle a_i|, \quad (3.2)$$

um é adjunto do outro ($\hat{U}_{ba} = \hat{U}_{ab}^\dagger$). Podemos ver que

$$\hat{U}_{ab}^\dagger \hat{U}_{ab} = \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ab}^\dagger = \sum_{i,j=1}^N |a_i\rangle \underbrace{\langle b_i|b_j\rangle}_{=\delta_{ij}} \langle a_j| = \sum_{i=1}^N \hat{M}_{a_i} = \hat{1}, \quad (3.3)$$

o que satisfaz a propriedade dada pela Eq. (3.1). Considere as transformações unitárias

$$|b'_l\rangle = \hat{U}_{ab} |b_l\rangle = \sum_{j=1}^N |a_j\rangle \underbrace{\langle b_j|b_l\rangle}_{=\delta_{jl}} = |a_l\rangle, \quad \text{e} \quad \langle a'_k| = \langle a_k| \hat{U}_{ba} = \sum_{i=1}^N \langle a_k|b_i\rangle \langle a_i|, \quad (3.4)$$

o produto interno dos estados transformados é

$$\langle a'_k|b'_l\rangle = \sum_{i=1}^N \langle a_k|b_i\rangle \underbrace{\langle a_i|a_l\rangle}_{=\delta_{il}} = \langle a_k|b_l\rangle, \quad (3.5)$$

o que mostra que a função de transformação é conservada sob uma transformação unitária.

3.1.1 Representação de operadores

Um operador genérico \hat{X} pode ser representado em qualquer base completa, mesmo sem o conhecimento prévio de seus autovalores (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2011). Seja $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^N$ uma base completa de autoestados do observável \hat{A} , então podemos expressar o operador \hat{X} como:

$$\hat{X} = \sum_{i,j=1}^N \langle a_i| \hat{X} |a_j\rangle \hat{M}_{a_i}^{a_j}. \quad (3.6)$$

Particularmente, para $\hat{X} = \hat{A}$, temos:

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^N \langle a_i| \hat{A} |a_j\rangle \hat{M}_{a_i}^{a_j} = \sum_{i=1}^N a_i \hat{M}_{a_i}, \quad (3.7)$$

onde essa representação é consequência direta das Eqs. (2.1) e (2.5).

Além disso, vimos na Eq. (3.4) que é possível relacionar o conjunto $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^N$ com o conjunto $\{|b_i\rangle\}_{i=1}^N$ através de uma transformação unitária dada pela Eq. (3.2). Quando \hat{A} e \hat{B} compartilham o mesmo espectro, isto é, $\{a_i\}_{i=1}^N = \{b_i\}_{i=1}^N$, podemos relacionar esses operadores por meio dessa transformação unitária, como mostrado a seguir:

$$\hat{U}_{ba}\hat{A}\hat{U}_{ab} = \sum_{i,j=1}^N |b_i\rangle \langle a_i| \hat{A} |a_j\rangle \langle b_j| = \sum_{i=1}^N a_i \hat{M}_{b_i} = \sum_{i=1}^N b_i \hat{M}_{b_i} = \hat{B}. \quad (3.8)$$

3.2 TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS INFINITESIMAIS

Na seção anterior, apresentamos transformações unitárias finitas. Nesta seção, introduziremos a transformação unitária infinitesimal, baseada na hipótese de Schwinger de que o estado pode variar de forma infinitesimal. Essa abordagem é essencial para a construção do princípio variacional, que será visto posteriormente.

3.2.1 Variações de Infinitesimais das Funções de Transformação

A variação da função de transformação é definida como

$$\delta (\langle a_i | b_j \rangle) = \delta (\langle a_i |) | b_j \rangle + \langle a_i | \delta (| b_j \rangle). \quad (3.9)$$

Alem disso, Schwinger define o seguinte operador para esse tipo de variação

$$\delta (\langle a_i | b_j \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle a_i | \delta \hat{W}_{ab} | b_j \rangle, \quad (3.10)$$

A unidade imaginária $i = \sqrt{-1}$ é introduzida para garantir que $\delta \hat{W}$ seja um operador hermitiano. Além disso, $\delta \hat{W}$ possui dimensão de *ação*[†].

[†]A constante de Planck reduzida aparece na (3.10) porque representa o quantum de ação, ou seja, a unidade fundamental de interação entre dois sistemas.

Podemos expressar a Eq. (3.9) em termos da base de um terceiro observável \hat{C} :

$$\begin{aligned}\delta(\langle a_i | b_j \rangle) &= \delta \left(\sum_{k=1}^N \langle a_i | c_k \rangle \langle c_k | b_j \rangle \right) \\ &= \sum_c [\delta(\langle a_i | c_k \rangle) \langle c_k | b_j \rangle + \langle a_i | c_k \rangle \delta(\langle c_k | b_j \rangle)],\end{aligned}\quad (3.11)$$

ou escrito em termos da definição (3.10)

$$\begin{aligned}\langle a_i | \delta \hat{W}_{ab} | b_j \rangle &= \sum_n \left[\langle a_i | \delta \hat{W}_{ac} | c_k \rangle \langle c_k | b_j \rangle + \langle a_i | c_k \rangle \langle c_k | \delta \hat{W}_{cb} | b_j \rangle \right] \\ &= \langle b_l | \delta \hat{W}_{ac} + \delta \hat{W}_{cb} | b_j \rangle,\end{aligned}\quad (3.12)$$

da qual indentificamos a seguinte relação

$$\delta \hat{W}_{ab} = \delta \hat{W}_{ac} + \delta \hat{W}_{cb}, \quad (3.13)$$

se $b = a$, então devemos ter $\delta \hat{W}_{aa} = 0$, o que implica em

$$\delta \hat{W}_{ca} = -\delta \hat{W}_{ac}. \quad (3.14)$$

3.2.2 Transformações unitárias das funções de transformação

Uma forma de expressar o operador unitário é através de uma exponencial complexa, ou seja,

$$\hat{U} = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{G} \right) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \left(\frac{i \hat{G}}{\hbar} \right)^p, \quad (3.15)$$

no qual \hat{G} é um operador hermitiano que é chamado de *gerador infinitesimal*. Para uma aproximação até primeira ordem, temos

$$\hat{U} \sim \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \hat{G}, \quad (3.16)$$

e o operador adjunto é

$$\hat{U}^\dagger \sim \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{G}, \quad (3.17)$$

logo,

$$\hat{U} \hat{U}^\dagger \sim \hat{1} + \frac{i}{\hbar} \hat{G} - \frac{i}{\hbar} \hat{G} + \frac{1}{\hbar^2} \hat{G}^2 \sim \hat{1}, \quad (3.18)$$

no qual desprezamos o termo \hat{G}^2 . A partir da equação (3.16), a variação infinitesimal é interpretada como uma pequena perturbação no operador unitário, gerada pelo operador infinitesimal \hat{G} .

Agora se aplicarmos esse tipo de aproximação para \hat{U}_{ab} , a transformação do autoestado de \hat{A} é

$$\hat{U}_{ab}^\dagger |a_i\rangle = \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab} \right) |a_i\rangle \sim |b_i\rangle, \quad (3.19)$$

e para o seu dual é

$$\langle a_i | \hat{U}_{ab} = \langle a_i | \left(\hat{1} + \frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab} \right) \sim \langle b_i |. \quad (3.20)$$

A partir disso, define-se a variação infinitesimal de um autoestado como

$$\delta(|a_i\rangle) = |b_i\rangle - |a_i\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab} |a_i\rangle, \quad (3.21)$$

e

$$\delta(\langle a_i |) = \langle b_i | - \langle a_i | = \frac{i}{\hbar} \langle a_i | \hat{G}_{ab}. \quad (3.22)$$

3.2.3 Transformações Unitárias para Operadores

Dadas as relações anteriores das variações infinitesimais para os autoestados, podemos mostrar como é a variação infinitesimal de um operador genérico \hat{X} . Para isso, considere a relação

$$\langle b_i | \hat{X} |b_j\rangle = \langle a_i | \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger |a_j\rangle. \quad (3.23)$$

Pelas equações (3.21) e (3.22), percebemos que $|b_j\rangle = |a_j\rangle + \delta(|a_j\rangle)$ e $\langle b_i | = \langle a_i | + \delta(\langle a_i |)$, o que nos permite escrever

$$\langle b_i | \hat{X} |b_j\rangle = \langle a_i | \hat{X} |a_j\rangle + \delta(\langle a_i |) \hat{X} |a_j\rangle + \langle a_i | \hat{X} \delta(|a_j\rangle) + \delta(\langle a_i |) \hat{X} \delta(|a_j\rangle), \quad (3.24)$$

se descartamos o último termo dessa relação, que é de segunda ordem, temos

$$\langle b_i | \hat{X} |b_j\rangle - \langle a_i | \hat{X} |a_j\rangle = \delta(\langle a_i |) \hat{X} |a_j\rangle + \langle a_i | \hat{X} \delta(|a_j\rangle). \quad (3.25)$$

Perceba que o lado direito da (3.25) é o mesmo que tomar a variação infinitesimal do

elemento de matrix $\langle a_i | \hat{X} | b_j \rangle$, levando em conta que as variações só acontecem nos estados, ou seja,

$$\delta \left(\langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle \right) = \delta \left(\langle a_i | \right) \hat{X} | a_j \rangle + \langle a_i | \hat{X} \delta \left(| a_j \rangle \right). \quad (3.26)$$

Ao compararmos as equações (3.25) e (3.26) e, utilizarmos a relação da (3.23), identificamos que

$$\delta \left(\langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle \right) = \langle b_i | \hat{X} | b_j \rangle - \langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle = \langle a_i | \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger | a_j \rangle - \langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle. \quad (3.27)$$

Se por outro lado, agora considerarmos o operador como variável e os estados sendo fixos, podemos escrever

$$\delta \left(\langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle \right) = \langle a_i | \delta \hat{X} | a_j \rangle = \langle a_i | \hat{U}_{ab} \delta \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger | a_j \rangle - \langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle, \quad (3.28)$$

portanto,

$$\delta \hat{X} = \hat{U}_{ab} \delta \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger - \hat{X}. \quad (3.29)$$

Com as aproximações feitas nas (3.16) e (3.17), podemos reescrever como

$$\delta \hat{X} = -\frac{i}{\hbar} \hat{X} \hat{G} + \frac{i}{\hbar} \hat{G} \hat{X} + \frac{i}{\hbar^2} \hat{G} \hat{X} \hat{G}, \quad (3.30)$$

se descartamos o termo de segunda ordem $\hat{G} \hat{X} \hat{G}$, temos

$$\delta \hat{X} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{X}, \hat{G} \right], \quad (3.31)$$

sendo que $\left[\hat{X}, \hat{G} \right] = \hat{X} \hat{G} - \hat{G} \hat{X}$ é o *comutador* entre \hat{X} e \hat{G} .

3.3 PRINCÍPIO DE SCHWINGER

No capítulo anterior, foi dito que o estado de um sistema quântico é caracterizado por um conjunto de quantidades físicas todas mutuamente compatíveis, o que permite extrair o máximo de informação do sistema sem que haja perturbação de uma medida com a outra. A abordagem *dinâmica* de Schwinger é caracterizada pela evolução temporal de tais quantidades físicas.

A cada mudança de um sistema físico podemos associar uma nova descrição e uma transformação unitária (infinitesimal ou não) (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013; DIRAC, 1981; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001). Pois, como já vimos, a transformação unitária é necessária para a conservação da função de transformação e das probabilidades de medidas.

3.3.1 Operador Ação

A evolução temporal de um sistema pode ser descrita por diferentes estados em instantes de tempos distintos. Em outras palavras, suponha que, em um instante de tempo t_1 , o sistema seja caracterizado pelo conjunto de estados $\{|b(t_1)\rangle\}$, associado ao observável $B(t_1)$. Em um instante posterior t_2 , o sistema é caracterizado pelo conjunto de estados $\{|a(t_2)\rangle\}$, associado ao observável $A(t_2)$. Nesse contexto, a função de transformação entre os dois instantes é dada por:

$$\langle a(t_2)|b(t_1)\rangle. \quad (3.32)$$

Tal função de transformação deve conter o máximo de informações possíveis do sistema em nível quântico (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013).

Baseado no que vimos na seção 3.2, sobre associação entre variações e geradores infinitesimais. Podemos expressar a variação infinitesimal da (3.32) como

$$\delta(\langle a(t_2)|b(t_1)\rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle a(t_2)|(\hat{G}_2 - \hat{G}_1)|b(t_1)\rangle, \quad (3.33)$$

sendo \hat{G}_1 e \hat{G}_2 os geradores infinitesimais calculados nos instantes de tempo t_1 e t_2 , respectivamente.

Por outro lado, o Schwinger postula a existência de um operador, no qual variações infinitesimais do mesmo acarreta nas variações da função de transformação (SCHWINGER, 1955; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001). Este postulado diz o seguinte (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013):

Postulado de Schwinger: “*Existe uma classe especial de alterações infinitesimais para qual os operadores associados $\delta\hat{S}_{t_1,t_2}$ são obtidos por variações apropriadas de um único operador, o operador Ação \hat{S}_{t_1,t_2} .*”

Este postulado é o que chamamos de *princípio da ação quântica*. Matematicamente,

pode ser expresso da seguinte forma:

$$\delta (\langle a(t_2)|b(t_1)\rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle a(t_2)|\delta\hat{S}_{t_1,t_2}|b(t_1)\rangle. \quad (3.34)$$

Ao comparar a (3.34) com a (3.33), observamos que

$$\delta\hat{S}_{t_1,t_2} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1, \quad (3.35)$$

ou seja, a variação da ação corresponde à diferença de termos de superfície calculados nos instantes terminais.

Com isso, percebe-se que o princípio da ação quântica é mais geral do que o *princípio da mínima ação*, o qual assume a condição $\delta S = 0$ (LAGRANGE, 1853; HAMILTON, 1834). Enquanto o princípio da mínima ação estabelece que a natureza evolui de maneira que a ação seja mínima (mais geralmente, estacionária) (LEMOS, 2013; MARION, 2013). Já o princípio da ação quântica relaxa essa condição, pois permite que o sistema evolua para qualquer estado, desde que a variação da ação respeite a diferença dos termos de superfície.

A segunda diferença entre o princípio da ação quântica e o princípio da ação clássica é que, evidentemente, o primeiro é formulado para operadores quânticos. Isso exige uma álgebra distinta daquela utilizada para funcionais escalares, uma vez que, em geral, o produto entre operadores não satisfaz a propriedade de comutatividade.

Além disso, o trabalho com operadores quânticos frequentemente requer um tratamento matemático mais rigoroso em comparação com o tratamento empregado para funções escalares, devido à necessidade de considerar propriedades de autoadjunto, espectros e representações em espaços de Hilbert.

3.3.2 Operador Hamiltoniano

Na formulação clássica de Hamilton, a dinâmica de um sistema físico sem vínculos, com n graus de liberdade, é caracterizada por um conjunto de $2n$ variáveis. Essas variáveis consistem em n *coordenadas generalizadas* ($\{q_k(t)\}_{k=1}^n$) e, n *momentos canônicos* ($\{p_k(t)\}_{k=1}^n$) todas funções do tempo (HAMILTON, 1834; LEMOS, 2013; MARION, 2013).

Com isso, qualquer outra propriedade física do sistema pode ser expressa como função

das coordenadas, dos momentos e do tempo. A grandeza física associada à energia total do sistema é chamada de *hamiltoniano* e é denotada por:

$$H \equiv H(q_1(t), \dots, q_n(t), p_1(t), \dots, p_n(t), t). \quad (3.36)$$

E a *ação clássica* é definida pela seguinte integral

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^n p_k \dot{q}_k - H \right) dt, \quad (3.37)$$

no qual $\dot{q}_k = \frac{dq_k}{dt}$ é a k -ésima *velocidade generalizada*.

A *primeira quantização* na mecânica quântica é um processo formal que estabelece a transição do formalismo clássico para o quântico (DIRAC, 1981). Esse processo associa operadores quânticos às coordenadas generalizadas e aos momentos, conforme as seguintes correspondências:

$$\begin{aligned} q_k &\rightarrow \hat{q}_k, \\ p_k &\rightarrow \hat{p}_k. \end{aligned}$$

Com essas associações, o operador hamiltoniano é expresso como:

$$\hat{H} \equiv \hat{H}(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n, t).$$

Por analogia com a ação clássica, dada pela equação (3.37), definimos o operador ação no contexto quântico como:

$$\hat{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^n \hat{p}_k \hat{q}_k - \hat{H} \right) dt. \quad (3.38)$$

Aqui fazemos um adendo: sabemos que, em geral, dois operadores não comutam, i.e., $\hat{p}_k \hat{q}_k \neq \hat{q}_k \hat{p}_k$. Logo, isso implicaria em uma definição de operador ação diferente da (3.38). Isso torna essa definição um *ansatz*, baseado na hipótese de Schwinger de que as variações infinitesimais dos operadores comutam com qualquer outro (SCHWINGER, 1955; SCHWINGER; ENGLERT et al., 2001; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013). Em outras palavras:

$$[\hat{q}_i, \delta \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \delta \hat{p}_j] = [\hat{q}_i, \delta \hat{p}_j] = [\hat{p}_i, \delta \hat{q}_j] = \hat{0}. \quad (3.39)$$

Schwinger propôs uma definição mais geral para o operador ação:

$$\hat{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^n \frac{\{\hat{p}_k, \hat{q}_k\} + \{\hat{p}_k, \hat{q}_k\}}{4} - \hat{H} \right) dt, \quad (3.40)$$

na qual temos os *anticomutadores*

$$\{\hat{p}_k, \hat{q}_k\} = \hat{p}_k \hat{q}_k + \hat{q}_k \hat{p}_k, \quad (3.41)$$

$$\{\hat{p}_k, \hat{q}_k\} = \hat{p}_k \hat{q}_k + \hat{q}_k \hat{p}_k, \quad (3.42)$$

este último envolve também a possibilidade de escrever a ação em termos da derivada temporal dos momentos.

Em diversos casos, o momento é proporcional à velocidade, o que implica em

$$\left[\hat{p}_k, \hat{q}_k \right] = \left[\mu \hat{q}_k, \hat{q}_k \right] = 0 \implies \hat{p}_k \hat{q}_k = \hat{q}_k \hat{p}_k, \quad (3.43)$$

onde μ é uma constante de proporcionalidade[‡]. Portanto, nesses casos podemos utilizar qualquer uma dessas duas ordens.

Por fim, ao combinar a identidade da Eq.(3.35) com a definição dada pela Eq. (3.38), ficamos com

$$\delta \hat{S} = \delta \left[\int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^n \hat{p}_k \hat{q}_k - \hat{H} \right) dt \right] = \hat{G}_2 - \hat{G}_1, \quad (3.44)$$

que é o princípio da ação quântica, expresso de forma matemática, constitui uma ferramenta geral que engloba todas as demais ferramentas da mecânica quântica. Mostraremos na seção seguinte, como extrair algumas dessas ferramentas.

3.4 DERIVAÇÕES DO PRINCÍPIO DE SCHWINGER

O princípio da mínima ação é um princípio variacional que permite derivar diversas ferramentas da mecânica clássica, tais como: *equações de Euler-Lagrange, equações canônicas de Hamilton, teorema de Noether e equações de Hamilton-Jacobi*. De maneira similar, o prin-

[‡]Existem vários casos em que o momento, como o linear ou angular, é proporcional à velocidade linear ou angular. Contudo, nem sempre isso ocorre. Por exemplo, em uma partícula carregada sujeita a um campo eletromagnético, o momento depende tanto da velocidade quanto de um potencial vetor.

cípio da ação quântica de Schwinger possibilita a derivação de várias ferramentas da mecânica quântica.

Nesta seção, apresentaremos como obter as equações dinâmicas, as equações de Hamilton e as equações de Hamilton-Jacobi em sua versão quântica. Além disso, demonstraremos como derivar as equações de Schrödinger e de Heisenberg a partir do princípio da ação quântica.

3.4.1 Versão Quântica das Equações de Hamilton

A Eq. (3.44) sugere que a variação infinitesimal do operador ação seja provocada por variações infinitesimais das coordenadas, momentos e do tempo. Nesse sentido, definimos dois tipos de variações infinitesimais (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2013). O primeiro tipo é definido como:

$$\delta_0 \hat{q} \equiv \hat{q}(t) - \hat{q}(t), \quad (3.45)$$

o qual considera apenas uma variação da curva, mantendo o tempo fixo. O segundo tipo de variação leva em conta a mudança no tempo:

$$\delta t = \bar{t} - t, \quad (3.46)$$

o que resulta em:

$$\delta \hat{q} \equiv \hat{q}(\bar{t}) - \hat{q}(t). \quad (3.47)$$

Esse segundo tipo de variação é mais geral que o primeiro, pois envolve tanto a variação da curva quanto a variação provocada pelo tempo. As equações (3.45) e (3.47) se relacionam da seguinte forma:

$$\delta \hat{q} = \delta_0 \hat{q} + \dot{\hat{q}} \delta t. \quad (3.48)$$

Uma consequência dessas definições é que o primeiro tipo de variação infinitesimal comuta com a operação de derivada temporal, enquanto o segundo tipo de variação não comuta.

Para verificar essas afirmações, observamos que a Eq. (3.35) se adapta para \hat{q} do seguinte modo:

$$\delta_0 \hat{q} = \hat{q}(t) - \hat{q}(t). \quad (3.49)$$

Por outro lado, ao tomarmos a derivada temporal da Eq. (3.45), temos:

$$\frac{d(\delta_0 \hat{q})}{dt} = \dot{\hat{q}}(t) - \hat{q}(t), \quad (3.50)$$

verificamos que $\frac{d(\delta_0 \hat{q})}{dt} = \delta_0 \dot{\hat{q}}$. Já a Eq. (3.48) para o operador \hat{q} é dada por:

$$\delta \hat{q} = \delta_0 \hat{q} + \hat{q} \delta t. \quad (3.51)$$

Em contrapartida, ao tomar a derivada temporal da Eq. (3.48), obtemos:

$$\frac{d(\delta \hat{q})}{dt} = \delta_0 \dot{\hat{q}} + \dot{\hat{q}} \delta t + \hat{q} \frac{d(\delta t)}{dt} = \delta \dot{\hat{q}} + \hat{q} \frac{d(\delta t)}{dt}. \quad (3.52)$$

Logo, percebemos que a Eq. (3.52) difere da Eq. (3.51) a menos de um termo, que depende de

$$\frac{d(\delta t)}{dt} = \frac{d\bar{t}}{dt} - 1. \quad (3.53)$$

Feita essas distinções de variações, podemos explicitar a variação do operador ação, provocada a partir das seguintes variações:

$$\begin{aligned} \delta t &= \bar{t} - t \\ \delta \hat{q}_k &= \hat{q}_k(\bar{t}) - \hat{q}_k(t) \quad (k = 1, \dots, n); \\ \delta \hat{p}_k &= \hat{p}_k(\bar{t}) - \hat{p}_k(t) \quad (k = 1, \dots, n). \end{aligned}$$

Com isso, temos

$$\delta \hat{S} = \sum_{k=1}^n \left[\int_{t_1}^{t_2} \left(\delta \hat{p}_k \hat{q}_k + \hat{p}_k \delta \hat{q}_k - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_k} \delta \hat{q}_k - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} \delta \hat{p}_k - \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \delta t \right) dt + \int_{t_1}^{t_2} (\hat{p}_k \hat{q}_k - \hat{H}) \delta(dt) \right]. \quad (3.54)$$

Baseado na hipótese que Schwinger fez, dada pela (3.39), podemos dizer que $\delta \hat{p}_k \hat{q}_k = \hat{q}_k \delta \hat{p}_k$, podemos utilizar essa identidade no primeiro termo da (3.54). Já o segundo termo dessa primeira integral pode ser escrito do seguinte modo:

$$\hat{p}_k \delta \hat{q}_k = \hat{p}_k \frac{d(\delta \hat{q}_k)}{dt} - \hat{p}_k \hat{q}_k \frac{d(\delta t)}{dt} = \frac{d(\hat{p}_k \delta \hat{q}_k)}{dt} - \hat{p}_k \delta \hat{q}_k - \hat{p}_k \hat{q}_k \frac{d(\delta t)}{dt}, \quad (3.55)$$

sendo que o segundo termo, do lado direito, da primeira igualdade, aparece por conta da iden-

tidade dada pela (3.52).

Com isso, a primeira integral da (3.54) fica:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\hat{q}_k - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} \right) \delta \hat{p}_k - \left(\hat{p}_k + \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_k} \right) \delta \hat{q}_k + \frac{d(\hat{p}_k \delta \hat{q}_k)}{dt} - \hat{p}_k \hat{q}_k \frac{d(\delta t)}{dt} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \delta t \right] dt. \quad (3.56)$$

Além disso, usando o fato de que $\delta(dt) = d(\delta t) = \frac{d(\delta t)}{dt} dt$, a segunda integral da (3.54) pode ser escrita como:

$$\int_{t_1}^{t_2} \hat{p}_k \hat{q}_k \frac{d(\delta t)}{dt} dt - \int_{t_1}^{t_2} \hat{H} \frac{d(\delta t)}{dt} dt = \int_{t_1}^{t_2} \hat{p}_k \hat{q}_k \frac{d(\delta t)}{dt} dt - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d(\hat{H} \delta t)}{dt} dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{d\hat{H}}{dt} \delta t dt. \quad (3.57)$$

Somando as Eqs. (3.56) e (3.57):

$$\begin{aligned} \delta \hat{S} &= \sum_{k=1}^n \int_{t_1}^{t_2} \left[\left(\hat{q}_k - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k} \right) \delta \hat{p}_k - \left(\hat{p}_k + \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_k} \right) \delta \hat{q}_k + \left(\frac{d\hat{H}}{dt} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right) \delta t \right] dt \\ &+ \sum_{k=1}^n \left(\hat{p}_k \delta \hat{q}_k - \hat{H} \delta t \right) \Big|_{t_1}^{t_2} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Se tivermos considerando sistemas que não possuem vínculos, as variações $\delta \hat{q}$, $\delta \hat{p}$ e δt são todas mutuamente independentes. O que implica que os coeficientes dessas variações, que aparecem na (3.58), são todos nulos. Já que o último termo é um termo de superfície, em outras palavras, obtemos o seguinte

$$\hat{q}_k = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_k}; \quad \hat{p}_k = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_k} \quad (k = 1, \dots, n), \quad (3.59)$$

$$\frac{d\hat{H}}{dt} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad (3.60)$$

$$\sum_{k=1}^n \left(\hat{p}_k \delta \hat{q}_k - \hat{H} \delta t \right) \Big|_{t_1}^{t_2} = \hat{G}_2 - \hat{G}_1. \quad (3.61)$$

A Eq. (3.59) compõe o conjunto de equações canônicas de Hamilton para operadores. A Eq. (3.60) está relacionada à conservação de energia. A última equação envolve apenas termos de superfície, e, a partir dela, podemos reconhecer que:

$$\hat{G} = \sum_{k=1}^n \hat{G}_{q_k} + \hat{G}_t = \sum_{k=1}^n \hat{p}_k \delta \hat{q}_k - \hat{H} \delta t, \quad (3.62)$$

que é a forma de expressar o gerador infinitesimal na abordagem hamiltoniana. O gerador relacionado a variação $\delta\hat{q}_k$ é $\hat{G}_{q_k} = \hat{p}_k\delta\hat{q}_k$, enquanto o gerador de variação temporal é $\hat{G}_t = -\hat{H}\delta t$.

A derivada de um operador em relação a outro não é uma operação matematicamente bem definida. Essa notação derivativa é, na verdade, uma construção heurística que permite aplicar propriedades do cálculo diferencial, resultando em expressões que coincidem com as equações de Heisenberg.

Como exemplo, considere o hamiltoniano de um oscilador harmônico unidimensional

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}, \quad (3.63)$$

sendo \hat{p} o operador momento, \hat{x} o operador posição, m a massa e ω é a frequência angular do oscilador. Com isso, temos

$$\hat{x} = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}} = \frac{1}{2m} \left[\frac{d\hat{p}}{d\hat{p}}\hat{p} + \hat{p}\frac{d\hat{p}}{d\hat{p}} \right] = \frac{\hat{p}}{m}, \quad (3.64)$$

$$\hat{p} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{x}} = -\frac{m\omega^2}{2} \left[\frac{d\hat{x}}{d\hat{x}}\hat{x} + \hat{x}\frac{d\hat{x}}{d\hat{x}} \right] = -m\omega^2\hat{x}. \quad (3.65)$$

A seguir falaremos da equação de Heisenberg, e retornaremos neste exemplo para mostrar que as equações canônica, dadas pela (3.64) e (3.65), são equivalentes as equações de Heisenberg.

3.4.2 Equações de Heisenberg

A formulação de Heisenberg da mecânica quântica se baseia na evolução temporal de operadores, considerando os estados quânticos como fixos no tempo (HEISENBERG, 1985).

Para ilustrar esta formulação, considere um observável físico qualquer $\hat{A}(\hat{q}_k(t), \hat{p}_k(t), t)$.

A variação infinitesimal desse operador pode ser escrito em termos de suas derivadas parciais:

$$\begin{aligned}
 \delta \hat{A} &= \hat{A}[\hat{q}(t + \delta t), \hat{p}(t + \delta t), t + \delta t] - \hat{A}[\hat{q}(t), \hat{p}(t), t] \\
 &= \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{q}} \hat{q} \delta t + \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{p}} \hat{p} \delta t + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \delta t \\
 &= \frac{d\hat{A}}{dt} \delta t.
 \end{aligned} \tag{3.66}$$

Para o caso particular em que \hat{A} não depende explicitamente do tempo, temos

$$\delta_t \hat{A} = \hat{A}[\hat{q}(t + \delta t), \hat{p}(t + \delta t)] - \hat{A}[\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{q}} \hat{q} \delta t + \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{p}} \hat{p} \delta t. \tag{3.67}$$

Por outro lado, vimos na seção 3.2, que a variação infinitesimal de um operador é dada através do comutador com o gerador infinitesimal. O gerador infinitesimal responsável pela variação temporal tem a forma $\hat{G}_t = -\hat{H} \delta t$. Por conta disso, podemos também escrever a (3.67) da seguinte forma

$$\delta_t \hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{G}_t] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \delta t. \tag{3.68}$$

Ao substituírmos a (3.68) na (3.66), ficamos com

$$\delta \hat{A} = \frac{d\hat{A}}{dt} \delta t = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \delta t + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \delta t, \tag{3.69}$$

o que nos dá a equação de Heisenberg

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}. \tag{3.70}$$

Como casos particulares, temos

$$\hat{q}_k = \frac{d\hat{q}_k}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}_k, \hat{H}], \tag{3.71}$$

$$\hat{p}_k = \frac{d\hat{p}_k}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_k, \hat{H}], \tag{3.72}$$

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}. \tag{3.73}$$

Voltemos novamente ao exemplo do oscilador, cujo o hamiltoniano foi dado pela (3.63),

as equações de Heisenberg para \hat{x} e \hat{p} são:

$$\dot{\hat{x}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = -\frac{i}{2m\hbar} [\hat{x}, \hat{p}^2] = -\frac{i}{m\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p}, \quad (3.74)$$

$$\dot{\hat{p}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -\frac{im\omega^2}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}^2] = -\frac{im\omega^2}{2\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] \hat{x}, \quad (3.75)$$

o comutador \hat{x} com \hat{p} é $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, o que nos leva a

$$\dot{\hat{x}} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad (3.76)$$

$$\dot{\hat{p}} = -m\omega^2 \hat{x}, \quad (3.77)$$

o que coincide com as (3.64) e (3.65).

3.4.3 Equação de Schrödinger

Ao contrário da formulação de Heisenberg, a formulação de Schrödinger se baseia na evolução temporal dos estados quânticos, admitindo os operadores como fixo no tempo (SCHRÖDINGER, 1926). A evolução temporal do estado quântico é descrita pela famosa equação de Schrödinger.

Para derivar a equação de Schrödinger a partir do princípio da ação quântica, considere que o estado inicial $|b(t_1)\rangle \equiv |\psi\rangle$ seja fixo, ou seja,

$$\hat{G}(t_1) |\psi\rangle = 0, \quad (3.78)$$

por outro lado, o estado em qualquer instante de tempo posterior está flexível a variações infinitesimais, denotamos

$$\langle a(t) | \hat{G}(t) \equiv \langle q, t | \hat{G}(t), \quad (3.79)$$

no qual a descrição no instante t é feita no espaço de coordenadas. Sendo assim, a variação da função de transformação é

$$\delta(\langle a(t) | b(0) \rangle) = \delta(\langle q, t | \psi \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{G}(t) | \psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle q, t | [\hat{p}(t) \delta \hat{q}(t) - \hat{H}(t) \delta t] | \psi \rangle. \quad (3.80)$$

Por outro lado, a variação da função de transformação pode ser escrito em termos de suas derivadas parciais

$$\delta(\langle q,t|\psi\rangle) = \frac{\partial\langle q,t|\psi\rangle}{\partial q}\delta q + \frac{\partial\langle q,t|\psi\rangle}{\partial t}\delta t, \quad (3.81)$$

usando o fato que $\delta\hat{q} \equiv \delta q$ no espaço de coordenadas e, comparando a (3.80) com a (3.81), obtemos

$$\langle q,t|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial\langle q,t|\psi\rangle}{\partial q}, \quad (3.82)$$

e

$$\langle q,t|\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial\langle q,t|\psi\rangle}{\partial t}. \quad (3.83)$$

A (3.82) refere-se a definição do operador momento no espaço de coordenada. E a (3.83) é a equação de Schrödinger para função de transformação.

3.4.4 Operadores Ordenados

A equação (3.83) não é tão direto de ser resolvida. É necessário organizar os operadores do hamiltoniano para que atuem nos próprios autoestados. Isso ficará mais claro adiante, quando resolvermos um exemplo.

Diante disso, Dirac introduziu a ideia de operadores bem ordenados, que nada mais é do que fazer um rearranjo de uma função de operadores em uma ordem que facilite a avaliação matricial, a leitura e os cálculos. Considere o elemento matricial de uma função de operadores da forma

$$\langle a|\hat{F}(\hat{A},\hat{B})|b\rangle, \quad (3.84)$$

no qual \hat{A} e \hat{B} representam dois observáveis físicos.

Suponhamos que \hat{F} possa ser escrito na forma de uma série de potência

$$\begin{aligned} \hat{F}(\hat{A},\hat{B}) = & \hat{F}_0 + a_1\hat{A} + a_2\hat{A}^2 + \dots + b_1\hat{B} + b_2\hat{B}^2 + \dots + c_{11}\hat{A}\hat{B} + \\ & c_{21}\hat{A}^2\hat{B} + \dots + d_{11}\hat{B}\hat{A} + \dots + e_{111}\hat{A}\hat{B}\hat{B} + \dots, \end{aligned} \quad (3.85)$$

se as relações de comutação de \hat{A} com \hat{B} forem conhecida, pode se reordenar os termos dessa

série de modo que \hat{A} apareça sempre à esquerda e \hat{B} sempre à direita

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}(\hat{A}, \hat{B}) = & \hat{\mathcal{F}}_0 + \mathcal{A}_1 \hat{A} + \mathcal{A}_2 \hat{A}^2 + \dots + \mathcal{B}_1 \hat{B} + \mathcal{B}_2 \hat{B}^2 + \dots + \mathcal{C}_{11} \hat{A} \hat{B} \\ & + \mathcal{C}_{21} \hat{A}^2 \hat{B} + \dots + \mathcal{C}_{12} \hat{A} \hat{B}^2, \end{aligned} \quad (3.86)$$

os novos coeficientes surgem da combinação dos coeficientes da função não ordenada. $\hat{\mathcal{F}}$ é a função bem ordenada de \hat{F} , e recebe o nome de *forma bem ordenada de Dirac*. Ou seja, $\hat{\mathcal{F}}(\hat{A}, \hat{B}) = \hat{F}(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_k f_k(\hat{A}) g_k(\hat{B})$.

Com essa forma bem ordenada, fica simples computar o elemento de matriz

$$\langle a | \hat{F}(\hat{A}, \hat{B}) | b \rangle = \langle a | \sum_k f_k(\hat{A}) g_k(\hat{B}) | b \rangle = \sum_k f_k(a) g_k(b) \langle a | b \rangle = \mathcal{F}(a, b) \langle a | b \rangle. \quad (3.87)$$

Aplicando essa ideia para o princípio da ação quântica teremos

$$\delta(\langle a(t_2) | b(t_1) \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle a(t_2) | \delta \hat{\mathcal{W}}_{t_1, t_2} | b(t_1) \rangle = \frac{i}{\hbar} \delta \mathcal{W}_{t_1, t_2} \langle a(t_2) | b(t_1) \rangle, \quad (3.88)$$

sendo que $\hat{\mathcal{W}}$ é a versão bem ordenada do operador ação \hat{S} , e que denominamos como operador principal de Hamilton pela semelhança que ela tem com a função geratriz da evolução temporal na mecânica clássica (LEMOS, 2013).

A partir dessa definição, podemos obter uma relação mais direta da função de transformação com o operador $\hat{\mathcal{W}}$

$$\delta(\langle a(t_2) | b(t_1) \rangle) = \frac{\partial(\langle a(t_2) | b(t_1) \rangle)}{\partial t} \delta t = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{W}_{t_1, t_2}}{\partial t} \langle a(t_2) | b(t_1) \rangle \delta t, \quad (3.89)$$

o qual nos dá

$$\frac{\partial(\langle a(t_2) | b(t_1) \rangle)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{W}_{t_1, t_2}}{\partial t} \langle a(t_2) | b(t_1) \rangle. \quad (3.90)$$

A solução dessa equação diferencial é

$$\langle a(t_2) | b(t_1) \rangle = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{W}_{t_1, t_2} \right\}. \quad (3.91)$$

esta forma foi proposta por Dirac como ansatz, e aqui obtemos como consequência direta do princípio de Schwinger.

Se $\hat{\mathcal{H}}$ é o hamiltoniano ordenado, a (3.83) pode ser reescrita do seguinte modo

$$i\hbar \frac{\partial \langle q,t|\psi\rangle}{\partial t} = \langle q,t|\hat{H}|\psi\rangle = \langle q,t|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \mathcal{H} \langle q,t|\psi\rangle, \quad (3.92)$$

o que dá a seguinte equação diferencial

$$\frac{\partial \langle q,t|\psi\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \langle q,t|\psi\rangle, \quad (3.93)$$

a solução é

$$\langle q,t|\psi\rangle = C \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{H} dt\right\}, \quad (3.94)$$

no qual a constante C é uma constante de integração. Essa última relação estabelece uma conexão direta da função de transformação com o Hamiltoniano ordenado e ela é equivalente à solução dada pela Eq. (3.91). Na formulação de Schrödinger, a função de onda é um caso particular em que a descrição ocorre no espaço de posições. Já a função de transformação (ou amplitude de transição) é uma generalização, pois permite a descrição em qualquer representação.

3.4.5 Equação de Hamilton-Jacobi

Do mesmo modo que existe uma equação de Hamilton-Jacobi para a mecânica clássica, existe também uma versão para quântica que podemos extrair do princípio de Schwinger. Para obtê-la, substituímos a solução da (3.91) na equação (3.83)

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \langle q,t|\hat{H}|\psi\rangle &= \frac{\partial \langle q,t|\psi_0\rangle}{\partial t} = \frac{\partial \left(e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t,t_0}}\right)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t,t_0}} \frac{\partial \mathcal{W}_{t,t_0}}{\partial t} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{W}_{t,t_0}}{\partial t} \langle q,t|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle q,t|\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t,t_0}}{\partial t}|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (3.95)$$

temos então

$$\langle q,t|(-\hat{H})|\psi\rangle = \langle q,t|\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t,t_0}}{\partial t}|\psi_0\rangle, \quad (3.96)$$

ou,

$$\langle q,t|\left(\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t,t_0}}{\partial t} + \hat{H}\right)|\psi\rangle = 0. \quad (3.97)$$

Analogamente, se substituirmos a (3.91) na (3.82), temos que

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p} | \psi \rangle &= \frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial q} = \frac{\partial \left(e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{W}_{t, t_0}} \right)}{\partial q} = \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{W}_{t, t_0}} \frac{\partial \mathcal{W}_{t, t_0}}{\partial q} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{W}_{t, t_0}}{\partial q} \langle q, t | \psi_0 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t, t_0}}{\partial q} | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.98)$$

o que nos dá

$$\langle q, t | \hat{p} | \psi \rangle = \langle q, t | \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t, t_0}}{\partial q} | \psi \rangle. \quad (3.99)$$

Portanto, da (3.97) e (3.99) obtemos que

$$\hat{p} = \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t, t_0}}{\partial q}, \quad (3.100)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t, t_0}}{\partial t} + \hat{H} \left(\hat{q}, \frac{\partial \hat{\mathcal{W}}_{t, t_0}}{\partial q} t \right) = \hat{0}. \quad (3.101)$$

A (3.100) permite obter o operador momento através da derivada da ação ordenada. Já a Eq. (3.101) é a equação de Hamilton-Jacobi formulada para mecânica quântica.

3.5 APLICAÇÕES

Nessa última seção, utilizamos algumas técnicas do princípio variacional de Schwinger para determinar as funções de transformação de dois sistemas quânticos. No primeiro exemplo determinamos a função de transformação da partícula livre. No segundo exemplo, determinamos a função de transformação e o espectro de energia do oscilador harmônico. O que será útil para resolver o modelo dos osciladores acoplados no próximo capítulo.

3.5.1 Aplicação 1: Partícula Livre

Para determinar a função de transformação de sistemas quânticos, partimos do hamiltoniano do sistema. O hamiltoniano clássico de uma partícula livre unidimensional de massa m e

que está orientada na direção do eixo x

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (3.102)$$

sendo p o momento canônico associado à coordenada canônica x . Pela regra de quantização, associamos operadores \hat{x} e \hat{p} aos observáveis físicos x e p . Além disso, o comutador entre esses operadores é

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (3.103)$$

e o operador hamiltoniano é

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (3.104)$$

A partir disso, podemos utilizar a técnica do ordenamento vista na subseção 3.4.4 para determinar uma função de transformação. Há várias descrições possíveis de representar a função de transformação, seja no espaço de coordenadas ou de momentos, ou então em qualquer outro conjunto de variáveis que seja mais conveniente e simples.

Nesse exemplo, escolhemos determinar a função de transformação na descrição de coordenadas, ou seja, queremos saber a descrição que leva de um estado inicial $|x, 0\rangle$, no instante $t = 0$, para um outro estado $|x, t\rangle$, em um instante de tempo $t > 0$.

Para determinar a função de transformação $\langle x, t | x, 0 \rangle$, primeiro precisamos saber a evolução temporal dos operadores \hat{x} e \hat{p} . Para tal, utilizar tanto as equações da (3.59) quanto a equação (3.70) para esses operadores

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}} &= \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hat{p}}{m}, \\ \dot{\hat{p}} &= -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = 0. \end{aligned} \quad (3.105)$$

A solução desse sistema de equações é

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \hat{x}_0 + \frac{\hat{p}_0 t}{m}, \\ \hat{p}(t) &= \hat{p}_0 = \text{constante}, \end{aligned} \quad (3.106)$$

no qual $\hat{x}_0 = \hat{x}(0)$ e $\hat{p}_0 = \hat{p}(0)$. O próximo passo é escrever o hamiltoniano em termos de $\hat{x}(t)$ e \hat{x}_0 para que atue nos seus respectivos autoestados. Como o hamiltoniano está escrito em termos de $\hat{p}(t) = \hat{p}_0$, para escrever o momento em termos das coordenadas, basta isolar \hat{p}_0 na primeira

solução da (3.106)

$$\hat{p}_0 = \frac{m}{t} [\hat{x}(t) - \hat{x}_0], \quad (3.107)$$

substituindo a (3.107) na (3.104), ficamos com

$$\hat{H} = \frac{m}{2\Delta t^2} [\hat{x}^2(t) + \hat{x}_0^2 - \hat{x}(t)\hat{x}_0 - \hat{x}_0\hat{x}(t)]. \quad (3.108)$$

O último termo da (3.108) precisa ser ordenado para que \hat{x}_0 atue no seu autoestado à direita $|x,0\rangle$ e $\hat{x}(t)$ atue no seu autoestado à esquerda $\langle x,t|$. Os operadores sempre comutam consigo mesmo quando estão calculados no mesmo instante de tempo, mas em instantes diferentes, nem sempre isso ocorre. Então precisamos saber o comutador de $\hat{x}(t)$ com \hat{x}_0 para ordenar o último termo do hamiltoniano. Para isso podemos utilizar o comutador \hat{x} com \hat{p} :

$$[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = -\frac{m}{\Delta t} [\hat{x}(t), \hat{x}_0] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad [\hat{x}(t), \hat{x}_0] = \hat{x}(t)\hat{x}_0 - \hat{x}_0\hat{x}(t) = -\frac{i\hbar t}{m}. \quad (3.109)$$

Para $t = 0$, esse comutador é nulo como era de se esperar. E agora, o ordenamento do último termo fica

$$\hat{x}_0\hat{x}(t) = \hat{x}(t)\hat{x}_0 + \frac{i\hbar t}{m}, \quad (3.110)$$

e portanto, o hamiltoniano ordenado fica:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{m}{2t^2} \left[\hat{x}^2(t) + \hat{x}_0^2 - 2\hat{x}(t)\hat{x}_0 - \frac{i\hbar t}{m} \right]. \quad (3.111)$$

Temos todos os elementos para resolver a equação (3.83). O que nos dá a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial \langle x,t|x,0\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle x,t| \hat{\mathcal{H}} |x,0\rangle = -\frac{im}{2\hbar t^2} \left(x^2 + x_0^2 - 2xx_0 - \frac{i\hbar t}{m} \right) \langle x,t|x,0\rangle, \quad (3.112)$$

onde x e x_0 são autovalores de $\hat{x}(t)$ e \hat{x}_0 , respectivamente. Essa equação pode ser resolvida por técnica de separação de variáveis e nos dá a seguinte solução

$$\begin{aligned} \langle x,t|x,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{Ct}} \exp \left\{ \left[\frac{im}{2\hbar t} (x^2 + x_0^2 - 2xx_0) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{Ct}} \exp \left\{ \left[-\frac{m}{2i\hbar t} (x - x_0)^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.113)$$

em que C é uma constante de integração. Para determinar essa constante, utilizamos a condição

de localidade:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \langle x, t | x_0, 0 \rangle = \lim_{t \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\sqrt{Ct}} \exp \left\{ \left[-\frac{m}{2i\hbar t} (x - x_0)^2 \right] \right\} \right\} = \delta(x - x_0), \quad (3.114)$$

que exprime o fato que no limite em que $t \rightarrow 0$, o sistema deve está localizado em um ponto $x = x_0$, o que pode ser descrito por uma delta de Dirac. Para aplicar essa condição, podemos utilizar o limite gaussiano, dado por:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} \exp(-n^2 y^2) = \delta(y) \quad (3.115)$$

se compararmos a (3.114) com (3.115), identificamos que $y = x - x_0$, $\frac{n}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{Ct}}$, e $n^2 = \frac{m}{2i\hbar t}$. Pois como $t \rightarrow 0$ e $n \propto t^{-1/2}$, então está consistente com o limite $n \rightarrow \infty$. Com essa identificação, a constante de integração é

$$C = \frac{2\pi i \hbar}{m}, \quad (3.116)$$

e portanto, a função de transformação da partícula livre unidimensional é

$$\langle x, t | x_0, 0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \left[-\frac{m}{2i\hbar t} (x - x_0)^2 \right] \right\}. \quad (3.117)$$

3.5.2 Aplicação 2: Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico quântico é um modelo amplamente utilizado em diversas áreas da Física. Um exemplo clássico é a descrição de pequenas vibrações de moléculas diatômicas em torno de seus pontos de equilíbrio estáveis (ISRAELACHVILI, 2011; CHIQUITO; ALMEIDA, 1999; BASSI, 2001). Outra aplicação relevante ocorre na quantização do campo eletromagnético, onde cada modo vibracional do campo é tratado como um oscilador harmônico com uma frequência característica (SCULLY; ZUBAIRY, 1997; TOBIAS et al., 2019). Além de sua relevância prática, o oscilador harmônico desempenha também um papel fundamental como modelo teórico devido à sua solvabilidade e às técnicas matemáticas associadas. Por conta disso, vários modelos são generalizados a partir dele, por exemplo cadeias de osciladores acoplados e osciladores em cavidade esférica (MARION, 2013; MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2016).

Para encontrar a função de transformação do oscilador harmônico unidimensional, partimos do seu hamiltoniano que é:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}, \quad (3.118)$$

cujas equações dinâmicas são obtidas a partir (3.59) ou (3.70)

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}} &= \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hat{p}}{m}, \\ \dot{\hat{p}} &= -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -m\omega^2 \hat{x}. \end{aligned} \quad (3.119)$$

Embora possamos resolver diretamente essas equações, adotaremos uma abordagem alternativa, utilizando um conjunto de operadores não-hermitianos com equações dinâmicas desacopladas, o que simplifica a descrição.

Os operadores não-hermitianos são definidos a partir da seguintes relações:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}), \quad (3.120)$$

onde \hat{a} e \hat{a}^\dagger são chamados de operadores de aniquilação e criação [§], respectivamente. A transformação inversa é dada por:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (3.121)$$

Substituindo as relações da Eq. (3.121) na (3.118), obtemos:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}). \quad (3.122)$$

A equação de autovalores e autoestados do operador \hat{a} é:

$$\hat{a} |a\rangle = a |a\rangle, \quad (3.123)$$

e para \hat{a}^\dagger é

$$\langle a^* | \hat{a}^\dagger = \langle a^* | a^*, \quad (3.124)$$

[§]Nos trabalhos de Schwinger, ele se referia aos operadores \hat{a} e \hat{a}^\dagger como operadores não-hermitianos.

onde a^* é o complexo conjugado de a .

Nessa descrição, podemos determinar a função de transformação que leva do estado $|a\rangle$, no instante $t = 0$, para o estado $\langle a^*|$ em um instante $t > 0$. Para isso, devemos ordenar o hamiltoniano (3.122) de forma que os todos os termos tenha \hat{a}^\dagger à esquerda e \hat{a} à direita. Podemos utilizar o comutador desses operadores, que é

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{1}, \quad (3.125)$$

o que nos dá,

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{1}, \quad (3.126)$$

com isso, podemos reescrever (3.122) da seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right]. \quad (3.127)$$

Para saber a evolução temporal dos operadores não-hermitianos, podemos utilizar (3.70):

$$\dot{\hat{a}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{a}, \hat{H}] = -i\omega\hat{a}, \quad (3.128)$$

cuja solução é

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0)e^{-i\omega t}, \quad (3.129)$$

onde $\hat{a}(0) \equiv \hat{a}_0$. De forma análoga, temos

$$\hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger(0)e^{i\omega t}. \quad (3.130)$$

Para que o hamiltoniano atue nos estados de \hat{a} e \hat{a}^\dagger , devemos reescrevê-lo utilizando a solução temporal de $\hat{a}(t)$, para que \hat{a}_0 atue no seu autoestado $|a, 0\rangle$.

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger(t)e^{-i\omega t}\hat{a}_0 + \frac{1}{2} \right], \quad (3.131)$$

com isso os operadores atuam nos seus autoestados no mesmo instante de tempo. Com esse

hamiltoniano, temos que equação de Schrödinger para função de transformação é

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle a^*, t | a, 0 \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \langle a^*, t | \left\{ \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger(t) \hat{a}_0 e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \right] \right\} | a, 0 \rangle \\ &= \left[-i\omega \left(a^* a_0 e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \right) \right] \langle a^*, t | a, 0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.132)$$

A solução dessa equação diferencial é:

$$\langle a^*, t | a, 0 \rangle = C \exp \left(a^* a_0 e^{-i\omega t} - \frac{i\omega t}{2} \right), \quad (3.133)$$

sendo C uma constante de integração. Para $t = 0$, temos que

$$\langle a^*, 0 | a, 0 \rangle = C \exp(a^* a_0), \quad (3.134)$$

para determinar a constante de integração, consideremos que para o estado nulo essa função é normalizada, em outras palavras,

$$\langle a^* = 0, 0 | a = 0, 0 \rangle = 1, \quad (3.135)$$

portanto, a constante de integração deve ser $C = 1$ para que essa condição seja válida. Logo, a função de transformação do oscilador harmônico nessa descrição é

$$\langle a^*, t | a, 0 \rangle = \exp \left(a^* e^{-i\omega t} a_0 - \frac{i\omega t}{2} \right) = e^{-i\omega t/2} \exp(a^* e^{-i\omega t} a_0). \quad (3.136)$$

Para obtermos o espectro de energia do oscilador, devemos representar essa função de transformação na base de autoestados do hamiltoniano, já que esse operador está relacionado a energia do sistema. Antes disso, precisamos definir o operador número $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. A equação de autovalores e autoestados desse operador é

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.137)$$

onde os autovalores n são números inteiros. O hamiltoniano do oscilador escrito em termos do operador número fica

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right), \quad (3.138)$$

o comutador do hamiltoniano com o operador número é $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{n}] = 0$, e portanto, os operadores \hat{H} e \hat{n} compartilham uma mesma base.

Na subseção 3.2.2, vimos que a variação infinitesimal de um estado é provocada por um gerador infinitesimal, o qual depende do tipo de variação. No caso de variações temporais infinitesimais, vimos na (3.62) que o gerador temporal é $\hat{G}_t = -\hat{H}\delta t$. Nesse caso, a variação temporal infinitesimal de $\langle a^*, t|$ é dada por:

$$\delta_t (\langle a^*, t|) = \frac{i}{\hbar} \langle a^*, t| \hat{G}_t = -\frac{i}{\hbar} \langle a^*, t| \hat{\mathcal{H}} \delta t, \quad (3.139)$$

por outro lado,

$$\delta_t (\langle a^*, t|) = \frac{\partial \langle a^*, t|}{\partial t} \delta t, \quad (3.140)$$

comparando essas duas, obtemos a equação de Schrödinger para esse estado

$$\frac{\partial \langle a^*, t|}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle a^*, t| \hat{\mathcal{H}}, \quad (3.141)$$

cuja a solução é,

$$\langle a^*, t| = \langle a^*, 0| e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}, \quad (3.142)$$

com isso, a função de transformação pode ser reescrita como

$$\langle a^*, t|a, 0\rangle = \langle a^*, 0| e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} |a, 0\rangle. \quad (3.143)$$

Podemos utilizar a relação de completude dos estados de número para escrever

$$\langle a^*, t|a, 0\rangle = \langle a^*, 0| \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} |a, 0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle a^*, 0|n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n|a, 0\rangle, \quad (3.144)$$

onde E_n é autoenergia associada autoestado $|n\rangle$. Por outro lado, a segunda exponencial que aparece na última igualdade da (3.136) pode ser expandida na seguinte série de potências:

$$\langle a^*, t|a, 0\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} \frac{(a_0)^n}{\sqrt{n!}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})} \frac{(a_0)^n}{\sqrt{n!}}. \quad (3.145)$$

Ao comparar (3.144) com(3.145), identificamos que

$$\langle a^*, 0|n\rangle = \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}}; \quad \langle n|a, 0\rangle = \frac{(a_0)^n}{\sqrt{n!}}, \quad (3.146)$$

que são as projeções dos estados de criação e aniquilação na base do operador número. Além disso,

$$\frac{E_n}{\hbar} = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2 \dots), \quad (3.147)$$

logo, as autoenergias do oscilador são dadas por:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2 \dots). \quad (3.148)$$

Note que, mesmo para $n = 0$, a energia do oscilador não é nula: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Isso significa que, mesmo no estado de menor energia possível, o oscilador não está completamente em repouso. Essa é uma característica fundamental da mecânica quântica — se a energia fosse exatamente zero, tanto a posição quanto o momento do oscilador teriam valores definidos, o que violaria o princípio da incerteza de Heisenberg.

No capítulo seguinte, aplicamos a mesma lógica utilizada para um único oscilador a fim de obter as autoenergias do Hamiltoniano de osciladores acoplados. Veremos que a simples introdução de um conjunto de operadores de criação e aniquilação para os osciladores não é suficiente para desacoplar o Hamiltoniano; será necessário realizar uma transformação ortogonal desses operadores para alcançar uma forma diagonal.

4 OSCILADORES INTERAGENTES

O modelo de osciladores interagentes surge em diversas situações dentro da ótica quântica, como na interação da matéria com o campo eletromagnético em cavidades ópticas. No processo de quantização do campo, cada modo normal é representado por um oscilador, e o número n que aparece na energia de está relacionado à contagem de fótons no modo do campo (SCULLY; ZUBAIRY, 1997; GERRY; KNIGHT, 2005; TOBIAS et al., 2019; BEDOYA, 2013).

Uma aplicação relevante é o uso de modelos de osciladores harmônicos para descrever armadilhas de íons, nas quais um oscilador representa um íon aprisionado em uma cavidade, enquanto outros osciladores acoplados a ele representam os modos do campo responsáveis pelo confinamento (KAJITA, 2022). Esse tipo de modelagem é fundamental e de grande interesse para a computação e informação quântica, uma vez que armadilhas de íons permitem aprisionar e manipular íons atômicos que funcionam como qubits, possibilitando o controle e a realização de operações lógicas entre eles (NIELSEN; CHUANG, 2010).

Outro modelo relevante é o de uma rede linear de osciladores acoplados, o qual se mostra útil para explicar a propagação de ondas elásticas em materiais cristalinos. Nesse modelo, as partículas representam os átomos, enquanto as molas modelam as ligações e vibrações entre elas. A energia de vibração das ondas que se propagam na rede é quantizada, e o quantum de energia é chamado de fônon, por analogia com o fóton (KITTEL; MCEUEN, 2018).

Neste capítulo, abordamos o modelo de osciladores acoplados em uma dimensão utilizando algumas técnicas do princípio da ação quântica. Seguimos uma abordagem parecida com a que foi utilizada na referência Melo, Pimentel e Ramirez (2016) para determinar a função de transformação e o espectro de energia do modelo de osciladores interagentes em uma cavidade esférica. Conseguimos realizar uma transformação ortogonal que leva a um hamiltoniano de osciladores desacoplados, representando os modos normais de vibração do sistema como um todo. Inicialmente, tratamos o caso de dois osciladores, a fim de generalizar os resultados para o caso de N osciladores.

4.1 OSCILADORES INTERAGENTES EM UMA DIMENSÃO (CASO N=2)

O modelo mais simples de osciladores acoplados consiste em duas partículas de mesma massa m , cada uma conectada a uma mola de constante elástica k . Além disso, as duas massas estão interligadas por uma terceira mola, também de constante k , conforme ilustrado na Figura 5.

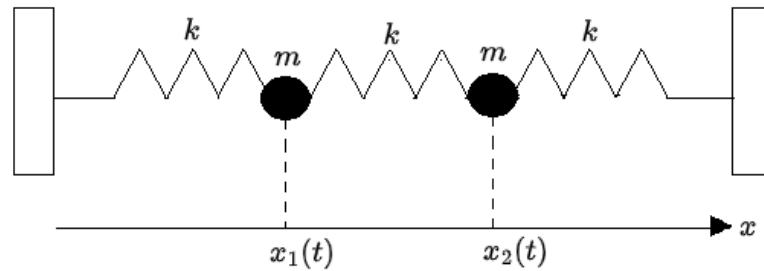


Figura 5 – Sistema de dois osciladores acoplados por molas idênticas.

Fonte: Autor.

Seja $x_1(t)$ e $x_2(t)$ as posições das partículas no instante de tempo t . As equações de movimento são dadas por:

$$m\ddot{x}_1 = -2kx_1 + kx_2, \quad m\ddot{x}_2 = -2kx_2 + kx_1. \quad (4.1)$$

Na formulação hamiltoniana, as equações canônicas são:

$$\dot{x}_1 = \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{p_1}{m}, \quad \dot{p}_1 = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = -2kx_1 + kx_2, \quad (4.2)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{p_2}{m}, \quad \dot{p}_2 = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = -2kx_2 + kx_1, \quad (4.3)$$

onde p_1 e p_2 são os momentos conjugados das coordenadas x_1 e x_2 . A Hamiltoniana correspondente ao sistema é:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x_2^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2}(x_2 - x_1)^2, \quad (4.4)$$

onde ω é a frequência angular de oscilação, definida como $\omega = \sqrt{k/m}$.

4.1.1 Operador Hamiltoniano

Para obter a versão quântica desse sistema, aplicamos a quantização canônica, substituindo as variáveis clássicas por operadores:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}_2^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2} (\hat{x}_2 - \hat{x}_1)^2 \\ &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (2\hat{x}_1^2 - \hat{x}_1\hat{x}_2 - \hat{x}_2\hat{x}_1 + 2\hat{x}_2^2).\end{aligned}\quad (4.5)$$

Podemos reescrever essa expressão de forma mais compacta utilizando notação matricial:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}} &\equiv \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{bmatrix}; & \hat{\mathbf{x}}^T &\equiv [\hat{x}_1 \quad \hat{x}_2], \\ \hat{\mathbf{p}} &\equiv \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix}; & \hat{\mathbf{p}}^T &\equiv [\hat{p}_1 \quad \hat{p}_2].\end{aligned}\quad (4.6)$$

As relações de comutação entre as coordenadas e os momentos são:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}; \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (4.7)$$

Na forma matricial, o comutador entre $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ pode ser expresso como:

$$[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] \equiv \hat{\mathbf{x}}^T \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}^T \hat{\mathbf{x}} = [\hat{x}_1, \hat{p}_1] + [\hat{x}_2, \hat{p}_2]. \quad (4.8)$$

Além disso, introduzimos a matriz de acoplamento:

$$\mathbf{\Omega}^2 \equiv \omega^2 \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Com essas definições, o hamiltoniano assume a forma compacta:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^T \hat{\mathbf{p}} + \frac{m}{2} \hat{\mathbf{x}}^T \mathbf{\Omega}^2 \hat{\mathbf{x}}. \quad (4.10)$$

4.2 PROPRIEDADES DA MATRIZ DE ACOPLAMENTO

A matriz dada pela equação (4.9) é simétrica, ou seja, satisfaz a relação $[\Omega^2]^T = \Omega^2$. Matrizes simétricas possuem as seguintes propriedades (LAY; LAY; MCDONALD, 2018):

- Todos os autovalores de uma matriz simétrica são números reais;
- Os autovetores correspondentes a autovalores distintos são ortogonais.

Além disso, uma matriz simétrica pode ser diagonalizada por uma matriz ortogonal \mathbf{O} , cuja inversa é igual à sua transposta, ou seja, $\mathbf{O}^{-1} = \mathbf{O}^T$. Dessa forma, a diagonalização da matriz de acoplamento é dada por

$$\Omega^2 = \mathbf{O}^T \mathbf{D}^2 \mathbf{O}, \quad (4.11)$$

onde \mathbf{D}^2 é a matriz diagonal associada a Ω^2 .

Uma propriedade importante de matrizes simétricas é que qualquer potência delas também resulta em uma matriz simétrica. Além disso, para qualquer $\beta \in \mathbb{R}$, vale a relação geral:

$$\Omega^\beta = \mathbf{O}^T \mathbf{D}^\beta \mathbf{O}, \quad (4.12)$$

ou também,

$$\mathbf{D}^\beta = \mathbf{O} \Omega^\beta \mathbf{O}^T. \quad (4.13)$$

Assim, se conhecemos a matriz diagonal \mathbf{D}^2 , podemos determinar \mathbf{D} , uma vez que $\mathbf{D}^2 = \mathbf{D}\mathbf{D}$.

Para encontrar os autovalores da matriz Ω^2 , resolvemos a equação característica:

$$\det(\Omega^2 - \lambda^2 \mathbf{I}) = 0, \quad (4.14)$$

onde λ^2 representa um autovalor e \mathbf{I} é a matriz identidade. Ao resolver essa equação, obtemos os seguintes autovalores:

$$\lambda_1^2 = \omega^2, \quad \lambda_2^2 = 3\omega^2. \quad (4.15)$$

Os autovetores correspondentes são determinados pela relação de autovalores e autovetores:

$$\Omega^2 \mathbf{v} = \lambda^2 \mathbf{v}. \quad (4.16)$$

Os autovetores normalizados correspondentes aos autovalores λ_1^2 e λ_2^2 são, respectivamente:

$$\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.17)$$

Dessa forma, as matrizes ortogonal e diagonal associadas ao problema são:

$$\mathbf{O} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D}^2 = \omega^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

No caso de matrizes diagonais, a potência de seus elementos é equivalente à potência da matriz, ou seja,

$$\mathbf{D}^\beta = \text{diag}(\lambda_1^\beta, \lambda_2^\beta, \dots, \lambda_N^\beta). \quad (4.19)$$

Aplicando essa propriedade, obtemos:

$$\mathbf{D} = \omega \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{bmatrix}, \quad (4.20)$$

onde as autofrequências (ou frequências de modos normais) da matriz $\mathbf{\Omega}$ são $\omega_1 \equiv \omega$ e $\omega_2 \equiv \sqrt{3}\omega$.

4.3 OPERADORES DE CRIAÇÃO E ANIQUILAÇÃO

A estrutura do hamiltoniano dada pela equação (4.10) sugere que podemos introduzir um conjunto de operadores de criação e aniquilação, de forma análoga ao tratamento do oscilador harmônico. No entanto, ao expressar o sistema em termos desses operadores, o hamiltoniano ainda continua acoplado. Para desacoplá-lo, é necessário realizar uma nova transformação para um segundo conjunto de operadores de criação e aniquilação.

O primeiro conjunto de operadores é denominado *operadores de estados vestidos* (DSO). Esses operadores estão relacionados à vibração individual de cada oscilador (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2016). Contudo, devido ao acoplamento entre os osciladores, os operadores de um oscilador não apenas criam e aniquilam os estados próprios do respectivo oscilador, mas também afetam os estados do outro oscilador.

O segundo conjunto de operadores de criação e aniquilação é denominado *operadores de modos normais* (NMO) (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2016). Esses operadores estão associados ao movimento coletivo do sistema como um todo, no qual as vibrações de cada oscilador se superpõem para formar os modos normais. Ao desacoplar o Hamiltoniano utilizando os operadores NMO, conseguimos tratar os novos osciladores como sistemas independentes, em que cada oscilador representa um modo normal de vibração do sistema. A seguir, mostraremos que os operadores NMO estão relacionados com os operadores DSO através de uma transformação ortogonal.

4.3.1 Operadores de Estados Vestidos (DSO)

No contexto da ótica quântica, os operadores de criação e aniquilação de estados vestidos recebem esse nome devido a uma interpretação específica da interação entre a matéria e o campo eletromagnético. Nessa interpretação, a interação pode ser vista como se o átomo estivesse “vestido” pelos fótons do campo, fazendo com que o sistema átomo-campo se torne um único ente coeso (COHEN-TANNOUDJI; HAROCHE, 1969). Embora o modelo que estamos tratando envolva mais diretamente ligações e vibrações entre átomos, adotaremos a mesma terminologia para os operadores que introduziremos a seguir.

Os operadores de aniquilação (\hat{a}_1, \hat{a}_2) e criação $(\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger)$ formam o conjunto de operadores de estados vestidos (DSO). Para representar esses operadores de maneira matricial, definimos as seguintes matrizes associadas a eles:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}} &\equiv \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{bmatrix}; & \hat{\mathbf{a}}^T &\equiv \begin{bmatrix} \hat{a}_1 & \hat{a}_2 \end{bmatrix}, \\ \hat{\mathbf{a}}^\dagger &\equiv \begin{bmatrix} \hat{a}_1^\dagger \\ \hat{a}_2^\dagger \end{bmatrix}; & \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} &\equiv \begin{bmatrix} \hat{a}_1^\dagger & \hat{a}_2^\dagger \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

A forma do Hamiltoniano dada pela equação (4.10) nos induz a realizar a seguinte transformação de variáveis:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}} &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar}} \Omega^{-\frac{1}{2}} (m\Omega\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{p}}), & \hat{\mathbf{a}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar}} \Omega^{-\frac{1}{2}} (m\Omega\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{p}}), \\ \hat{\mathbf{a}}^T &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar}} (m\hat{\mathbf{x}}^T \Omega + i\hat{\mathbf{p}}^T) \Omega^{-\frac{1}{2}}, & \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar}} (m\hat{\mathbf{x}}^T \Omega - i\hat{\mathbf{p}}^T) \Omega^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

A transformação inversa é dada por:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \Omega^{-\frac{1}{2}} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger), & \hat{\mathbf{p}} &= -i\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} \Omega^{\frac{1}{2}} (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}^\dagger), \\ \hat{\mathbf{x}}^T &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} (\hat{\mathbf{a}}^T + \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T}) \Omega^{-\frac{1}{2}}, & \hat{\mathbf{p}}^T &= -i\sqrt{\frac{m\hbar}{2}} (\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T}) \Omega^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\quad (4.23)$$

Além disso, o comutador de $\hat{\mathbf{a}}$ com $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ é:

$$[\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger] = \hat{\mathbf{a}}^T \hat{\mathbf{a}}^\dagger - \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \hat{\mathbf{a}} = -\frac{i}{\hbar} (\hat{\mathbf{x}}^T \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}^T \hat{\mathbf{x}}) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}]. \quad (4.24)$$

Com essas transformações, o Hamiltoniano em termos dos operadores DSO pode ser expresso como:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} (\hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \Omega \hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^T \Omega \hat{\mathbf{a}}^\dagger). \quad (4.25)$$

Apesar dessa transformação, o sistema ainda permanece acoplado. Os operadores de criação e aniquilação de um oscilador continuam a influenciar o comportamento do outro. No entanto, podemos realizar uma nova transformação para desacoplar o sistema. Utilizamos a transformação ortogonal \mathbf{O} para gerar um novo conjunto de operadores, o que leva o Hamiltoniano a um sistema de osciladores desacoplados, com as autofrequências determinadas na seção anterior.

4.4 Operadores de Modos Normais (NMO)

Para realizar o desacoplamento do hamiltoniano dado pela (4.25), fazemos uma transformação ortogonal nos operadores de criação e aniquilação:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}} &= \mathbf{O}^T \hat{\mathbf{a}}; & \hat{\mathbf{A}}^T &= \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{O}, \\ \hat{\mathbf{A}}^\dagger &= \mathbf{O}^T \hat{\mathbf{a}}^\dagger; & \hat{\mathbf{A}}^{\dagger T} &= \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \mathbf{O}.\end{aligned}\quad (4.26)$$

Esse novo conjunto de operadores de criação e aniquilação é denominado *operadores de modos normais* (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2016). O comutador entre $\hat{\mathbf{A}}$ e $\hat{\mathbf{A}}^\dagger$ é dado por:

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{A}}^\dagger] = \hat{\mathbf{A}}^T \hat{\mathbf{A}}^\dagger - \hat{\mathbf{A}}^{\dagger T} \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{O} \mathbf{O}^T \hat{\mathbf{a}}^\dagger - \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \mathbf{O} \mathbf{O}^T \hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{a}}^T \hat{\mathbf{a}}^\dagger - \hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \hat{\mathbf{a}} = [\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger], \quad (4.27)$$

o que nos dá as relações de comutação:

$$\left[\hat{A}_1, \hat{A}_1^\dagger \right] = \hat{1}_1; \quad \left[\hat{A}_2, \hat{A}_2^\dagger \right] = \hat{1}_2, \quad (4.28)$$

os índices nos operadores unitários indicam que cada operador de modo normal atua exclusivamente no respectivo espaço de Hilbert. O operador unitário do sistema como um todo é dado por $\hat{1} = \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2$. Como vemos pela (4.27), o comutador é invariante sob a transformação (4.26), o que faz dela uma transformação canônica.

O hamiltoniano, expresso em termos dos operadores NMO, é:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar}{2} \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger T} \mathbf{O} \mathbf{O}^T \boldsymbol{\Omega} \mathbf{O}^T \mathbf{O} \hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{O} \mathbf{O}^T \boldsymbol{\Omega} \mathbf{O}^T \mathbf{O} \hat{\mathbf{a}}^\dagger \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\hat{\mathbf{A}}^{\dagger T} \mathbf{D} \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}^T \mathbf{D} \hat{\mathbf{A}}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (4.29)$$

que agora possui uma forma diagonalizada. Utilizando a matriz dada pela (4.20), podemos reescrever (4.29) como:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar}{2} \left(\omega_1 \hat{A}_1^\dagger \hat{A}_1 + \omega_2 \hat{A}_2^\dagger \hat{A}_2 + \omega_1 \hat{A}_1 \hat{A}_1^\dagger + \omega_2 \hat{A}_2 \hat{A}_2^\dagger \right) \\ &= \frac{\hbar \omega_1}{2} \left(\hat{A}_1^\dagger \hat{A}_1 + \hat{A}_1 \hat{A}_1^\dagger \right) + \frac{\hbar \omega_2}{2} \left(\hat{A}_2^\dagger \hat{A}_2 + \hat{A}_2 \hat{A}_2^\dagger \right), \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde as autofrequências são $\omega_1 = \omega$ e $\omega_2 = \sqrt{3}\omega$. Utilizando as relações de comutação da (4.28), podemos reordenar o hamiltoniano da seguinte maneira:

$$\hat{H} = \hbar \omega_1 \left(\hat{A}_1^\dagger \hat{A}_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_2 \left(\hat{A}_2^\dagger \hat{A}_2 + \frac{1}{2} \right), \quad (4.31)$$

com isso, obtemos um sistema descrito por dois osciladores desacoplados com frequências ω_1 e ω_2 . Contudo, esses osciladores desacoplados não são os mesmos osciladores acoplados pelas molas. Cada um desses osciladores desacoplados representa um modo normal de vibração do sistema como um todo. Ao contrário dos operadores DSO, que fazem com que os operadores de um oscilador atue nos estados do outro, os operadores NMO atuam exclusivamente nos próprios autoestados. Isso implica que não há acoplamento entre os modos normais do sistema como um todo.[¶]

[¶]Classicamente, cada modo normal representa uma forma distinta do sistema oscilar. Uma das configurações possíveis é que os osciladores oscilem em fase, no mesmo sentido, com frequência $\omega_1 = \omega$. Na segunda configuração, os osciladores oscilam em fase, mas em sentidos opostos, com frequência $\omega_2 = \sqrt{3}\omega$.

4.5 FUNÇÃO DE TRANSFORMAÇÃO

Anteriormente, fizemos o desacoplamento do hamiltoniano utilizando a transformação ortogonal dos operadores de estados vestidos para os operadores de modos normais. Nesse sistema desacoplado, cada oscilador atua em um espaço de Hilbert distinto, de modo que o espaço de Hilbert do sistema global é a combinação dos espaços de Hilbert de cada oscilador, ou seja, $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$. Portanto, o estado do sistema nessa representação é dado pelo produto tensorial dos estados de \hat{A}_1 e \hat{A}_2 :

$$|A\rangle \equiv |A_1, A_2\rangle = |A_1\rangle \otimes |A_2\rangle, \quad (4.32)$$

e para o espaço dual, temos:

$$\langle A^*| \equiv \langle A_1^*, A_2^*| = \langle A_1^*| \otimes \langle A_2^*|. \quad (4.33)$$

Os operadores de modos normais atuam nesses estados da seguinte forma:

$$\hat{A}_i |A\rangle = A_i |A\rangle \quad \text{e} \quad \langle A^*| \hat{A}_i^\dagger = \langle A^*| A_i^* \quad (i = 1, 2). \quad (4.34)$$

Agora, vamos determinar a função de transformação na descrição de modos normais $\langle A^*, t|A, 0\rangle$. Para isso, começamos determinando a evolução temporal dos operadores NMO:

$$\dot{\hat{A}}_1 = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}_1, \hat{H}] = -i\omega_1 \hat{A}_1, \quad \dot{\hat{A}}_2 = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}_2, \hat{H}] = -i\omega_2 \hat{A}_2, \quad (4.35)$$

cujas as soluções são:

$$\hat{A}_1 = \hat{A}_1(0)e^{-i\omega_1 t}, \quad \hat{A}_2 = \hat{A}_2(0)e^{-i\omega_2 t}, \quad (4.36)$$

e para os operadores adjuntos temos:

$$\hat{A}_1^\dagger(t) = \hat{A}_1^\dagger(0)e^{i\omega_1 t}, \quad \hat{A}_2^\dagger(t) = \hat{A}_2^\dagger(0)e^{i\omega_2 t}. \quad (4.37)$$

Substituindo as soluções da (4.36) na (4.38), obtemos:

$$\hat{H} = \hbar\omega_1 \left[\hat{A}_1^\dagger(t)\hat{A}_1(0)e^{-i\omega_1 t} + \frac{1}{2} \right] + \hbar\omega_2 \left[\hat{A}_2^\dagger(t)\hat{A}_2(0)e^{-i\omega_2 t} + \frac{1}{2} \right]. \quad (4.38)$$

A equação (4.39) para a função de transformação que queremos determinar é:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle A^*, t | A, 0 \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \langle A^*, t | \hat{H} | A, 0 \rangle \\ &= \left\{ -i\omega_1 \left[A_1^* A_1(0) e^{-i\omega_1 t} + \frac{1}{2} \right] - i\omega_2 \left[A_2^* A_2(0) e^{-i\omega_2 t} + \frac{1}{2} \right] \right\} \langle A^*, t | A, 0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.39)$$

A solução dessa equação diferencial é:

$$\langle A^*, t | A, 0 \rangle \exp \left[A_1^* A_1(0) e^{-i\omega_1 t} - \frac{i\omega_1 t}{2} \right] \exp \left[A_2^* A_2(0) e^{-i\omega_2 t} - \frac{i\omega_2 t}{2} \right]. \quad (4.40)$$

Desse resultado, podemos notar que a função de transformação do sistema é o produto das funções de transformação de cada oscilador NMO. Aqui consideramos a constante de integração como sendo igual a 1, pelo mesmo motivo que fizemos para o oscilador harmônico livre, utilizando as relações (3.134) e (3.135).

4.6 ESPECTRO DE ENERGIA

Os operadores DSO estão relacionados com os operadores NMO através de uma transformação ortogonal que diagonaliza o hamiltoniano. Dado que a transformação \mathbf{O} , que representa em nível quântico uma transformação canônica, o espectro de energia na base NMO deve ser o mesmo que na base DSO (MELO; PIMENTEL; RAMIREZ, 2016).

No capítulo anterior, para determinar o espectro de energia do oscilador harmônico, foi necessário representar a função de transformação na base de \hat{n} (que também é a base das energias). Para o sistema de dois osciladores, o operador número é definido como:

$$|n\rangle \equiv |n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle, \quad (4.41)$$

onde os estados de cada oscilador formam uma base completa:

$$\sum_{n_1=0}^{\infty} |n_1\rangle \langle n_1| = \hat{1}_1 \quad \text{e} \quad \sum_{n_2=0}^{\infty} |n_2\rangle \langle n_2| = \hat{1}_2. \quad (4.42)$$

A função de transformação pode ser escrita da seguinte forma:

$$\langle A^*, t | A, 0 \rangle = \langle A_1^*, t | A_1, 0 \rangle \langle A_2^*, t | A_2, 0 \rangle. \quad (4.43)$$

A evolução temporal do estado $\langle A_1^*, t |$ é dada por:

$$\langle A_1^*, t | = \langle A_1^*, 0 | e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar} = \langle A_1^*, 0 | \sum_{n_1=0}^{\infty} |n_1\rangle \langle n_1| e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \langle A_1^*, 0 | n_1 \rangle e^{-iE_{n_1} t/\hbar} \langle n_1 |, \quad (4.44)$$

e a função de transformação do oscilador 1 pode ser reescrita como:

$$\langle A_1^*, t | A_1, 0 \rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} \langle A_1^*, 0 | n_1 \rangle e^{-iE_{n_1} t/\hbar} \langle n_1 | A_1, 0 \rangle, \quad (4.45)$$

De forma análoga, para o oscilador 2, temos:

$$\langle A_2^*, t | A_2, 0 \rangle = \sum_{n_2=0}^{\infty} \langle A_2^*, 0 | n_2 \rangle e^{-iE_{n_2} t/\hbar} \langle n_2 | A_2, 0 \rangle. \quad (4.46)$$

Substituindo (4.45) e (4.46) na (4.43), obtemos:

$$\langle A^*, t | A, 0 \rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} \langle A_1^*, 0 | n_1 \rangle e^{-iE_{n_1} t/\hbar} \langle n_1 | A_1, 0 \rangle \sum_{n_2=0}^{\infty} \langle A_2^*, 0 | n_2 \rangle e^{-iE_{n_2} t/\hbar} \langle n_2 | A_2, 0 \rangle. \quad (4.47)$$

Por outro lado, podemos fazer a seguinte expansão em série na (4.40) para obter:

$$\langle A^*, t | A, 0 \rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{(A_1^*)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} e^{-i(n_1 + \frac{1}{2})\omega_1 t} \frac{(A_1(0))^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{(A_2^*)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} e^{-i(n_2 + \frac{1}{2})\omega_2 t} \frac{(A_2(0))^{n_2}}{\sqrt{n_2!}}. \quad (4.48)$$

Comparando a (4.47) com (4.48), identificamos que:

$$\begin{aligned} \langle A_1^*, 0 | n_1 \rangle &= \frac{(A_1^*)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}}, & \langle n_1 | A_1, 0 \rangle &= \frac{(A_1(0))^{n_1}}{\sqrt{n_1!}}, \\ \langle A_2^*, 0 | n_2 \rangle &= \frac{(A_2^*)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}}, & \langle n_2 | A_2, 0 \rangle &= \frac{(A_2(0))^{n_2}}{\sqrt{n_2!}}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Além disso, obtemos as autoenergias de cada modo normal:

$$E_{n_1} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right), \quad E_{n_2} = \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.50)$$

e as autoenergias do sistema como um todo são a soma dessas duas autoenergias:

$$E_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right). \quad (4.51)$$

4.7 OSCILADORES INTERAGENTES EM UMA DIMENSÃO (CASO N)

Mostramos como escrever o hamiltoniano de dois osciladores em uma forma matricial, o que nos permitiu introduzir um conjunto de operadores de criação e aniquilação associados aos estados vestidos (DSO). No entanto, para desacoplar o hamiltoniano, foi necessário realizar uma transformação ortogonal para um novo conjunto de operadores, conhecidos como operadores de modos normais (NMO). Esse processo exigiu a determinação dos autovalores e autovetores da matriz de acoplamento, a fim de obter tanto a matriz diagonal quanto a matriz de transformação ortogonal. Como resultado, chegamos a um hamiltoniano que descreve dois osciladores independentes, cada um representando um modo vibracional possível.

Nesta seção, iremos generalizar os resultados obtidos anteriormente para um sistema de N osciladores acoplados em uma dimensão, conforme ilustrado na Figura 6. Seguindo a mesma abordagem, obtemos um hamiltoniano de N osciladores independentes, sendo que cada um representa um modo normal. Para isso, precisamos diagonalizar a matriz de acoplamento de dimensão N , determinando assim seus N autovalores e autovetores. Dessa forma, obtemos as frequências dos modos normais.

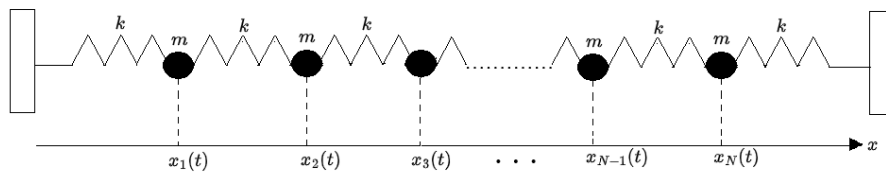


Figura 6 – Sistema de N osciladores acoplados por molas idênticas.

Fonte: Autor.

Classicamente, as equações de movimento desse sistema são dadas por (MARION, 2013):

$$\ddot{x}_l = -\omega^2(2x_l - x_{l-1} - x_{l+1}) \quad (l = 1, \dots, N). \quad (4.52)$$

Observamos que cada partícula interage diretamente apenas com suas duas partículas vizinhas

mais próximas. Com as condições de contorno $x_0 = x_{N+1} = 0$, que também se aplicam para os momentos $p_0 = p_{N+1} = 0$.

A energia cinética e potencial desse sistema são, respectivamente:

$$T = \sum_{l=1}^N \frac{p_l^2}{2m}, \quad (4.53)$$

e

$$U = \sum_{l=1}^{N+1} \frac{m\omega^2}{2} (x_l - x_{l-1})^2. \quad (4.54)$$

Portanto, o hamiltoniano clássico é:

$$H = T + U = \sum_{l=1}^{N+1} \left[\frac{p_l^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x_l - x_{l-1})^2 \right]. \quad (4.55)$$

Aplicando a quantização canônica:

$$(x_l, p_l) \rightarrow (\hat{x}_l, \hat{p}_l),$$

cujas relações de comutação são:

$$[\hat{x}_l, \hat{x}_m] = [\hat{p}_l, \hat{p}_m] = 0, \quad [\hat{x}_l, \hat{p}_m] = \delta_{lm} i\hbar. \quad (4.56)$$

O operador hamiltoniano é:

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^{N+1} \left[\frac{\hat{p}_l^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (\hat{x}_l - \hat{x}_{l-1})^2 \right]. \quad (4.57)$$

Para colocá-lo na forma matricial, definimos as seguintes matrizes coluna:

$$\hat{\mathbf{x}} \equiv \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \vdots \\ \hat{x}_N \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{x}}^T \equiv [\hat{x}_1 \quad \hat{x}_2 \quad \dots \quad \hat{x}_N],$$

$$\hat{\mathbf{p}} \equiv \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \vdots \\ \hat{p}_N \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{p}}^T \equiv [\hat{p}_1 \quad \hat{p}_2 \quad \dots \quad \hat{p}_N],$$
(4.58)

e a matriz de acoplamento para esse sistema é dada por:

$$\Omega^2 = \omega^2 \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{N \times N}.$$
(4.59)

Com isso, podemos colocar o hamiltoniano (4.57) na sua forma matricial:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^T \hat{\mathbf{p}} + \frac{m}{2} \hat{\mathbf{x}}^T \Omega^2 \hat{\mathbf{x}}.$$
(4.60)

4.7.1 Diagonalização da Matriz de Acoplamento de dimensão N

A matriz dada pela (4.59) aparece principalmente na resolução das equações de movimento desse sistema clássico. Para diagonalizá-la utilizaremos a mesma técnica que é utilizada na referência Marion (2013) para resolver esse sistema na versão clássica.

De um modo geral, os elementos da matriz (4.59) são

$$(\Omega^2)_{jk} \equiv \Omega_{jk}^2 = \begin{cases} 2\omega^2, & \text{se } j = k, \\ -\omega^2, & \text{se } |j - k| = 1, \\ 0, & \text{se } |j - k| > 1. \end{cases} \quad (4.61)$$

Essa é uma matriz simétrica e diagonalizável de dimensão N , e possui N autovalores e autovetores. Dessa forma, a equação de autovalores e autovetores é

$$\Omega^2 \mathbf{v}^{(r)} = \lambda_r^2 \mathbf{v}^{(r)}, \quad (r = 1, \dots, N), \quad (4.62)$$

onde o índice r denota um dos autovalores e um dos autovetores da matriz (4.59). Cada autovetor pode ser representado como uma matriz coluna de N elementos:

$$\mathbf{v}^{(r)} = \begin{bmatrix} v_1^{(r)} \\ v_2^{(r)} \\ \vdots \\ v_N^{(r)} \end{bmatrix}, \quad (r = 1, \dots, N). \quad (4.63)$$

A equação (4.62) também pode ser escrita da seguinte forma indicial:

$$\sum_{k=1}^N \Omega_{jk}^2 v_k^{(r)} = \lambda_r^2 v_j^{(r)}. \quad (4.64)$$

apartir da (4.61), podemos escrever o lado esquerdo da (4.64) do seguinte modo

$$\sum_{k=1}^N \Omega_{jk}^2 v_k^{(r)} = \omega^2 (2v_j^{(r)} - v_{j-1}^{(r)} - v_{j+1}^{(r)}), \quad (4.65)$$

e, combinando a (4.64) com a (4.65), obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$\lambda_r^2 v_j^{(r)} = \omega^2 (2v_j^{(r)} - v_{j-1}^{(r)} - v_{j+1}^{(r)}). \quad (4.66)$$

Para encontrar λ_r^2 , podemos testar a solução do tipo

$$v_j^{(r)} = \sin(\alpha_r j), \quad (4.67)$$

onde α_r é uma constante. Para as componentes vizinhas, temos

$$\begin{aligned} v_{j-1}^{(r)} &= \sin[\alpha_r(j-1)] = \sin(\alpha_r j) \cos(\alpha_r) - \sin(\alpha_r) \cos(\alpha_r j), \\ v_{j+1}^{(r)} &= \sin[\alpha_r(j+1)] = \sin(\alpha_r j) \cos(\alpha_r) + \sin(\alpha_r) \cos(\alpha_r j). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Substituindo essas soluções na (4.66), extraímos a seguinte relação

$$\lambda_r^2 = 2\omega^2[1 - \cos(\alpha_r)] = 4\omega^2 \sin^2\left(\frac{\alpha_r}{2}\right). \quad (4.69)$$

E para determinar α_r , podemos utilizar as condições de contorno $v_0^{(r)} = v_{N+1}^{(r)} = 0$:

$$v_0^{(r)} = \sin(0) = 0, \quad (4.70)$$

essa primeira condição não nos ajuda a determinar a constante, então usamos a segunda condição:

$$v_{N+1}^{(r)} = \sin[\alpha_r(N+1)] = 0, \quad (4.71)$$

portanto, temos

$$\alpha_r(N+1) = s\pi, \quad s = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.72)$$

ou

$$\alpha_r = \frac{s\pi}{N+1}, \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (4.73)$$

Como há apenas N valores de α_r , já que a equação (4.62) exige apenas N autovalores λ^2 . Portanto, o índice s se restringe de 1 até N . E como há uma correspondência de um para um entre os valores de s e r , podemos substituir s por r nessa última relação:

$$\alpha_r = \frac{r\pi}{N+1}, \quad r = 1, 2, \dots, N. \quad (4.74)$$

Assim, os autovalores da matriz (4.59) são obtidos a partir da seguinte relação

$$\lambda_r^2 = 4\omega^2 \sin^2\left[\frac{r\pi}{2(N+1)}\right], \quad r = 1, 2, \dots, N. \quad (4.75)$$

e os autovetores correspondentes são

$$\mathbf{v}^{(r)} = \frac{1}{\gamma_r} \begin{bmatrix} \sin(\alpha_r) \\ \sin(2\alpha_r) \\ \vdots \\ \sin(N\alpha_r) \end{bmatrix}, \quad r = 1, 2, \dots, N, \quad (4.76)$$

onde γ_r é o fator de normalização dado por:

$$\gamma_r = \sqrt{\sum_{j=1}^N \sin^2(j\alpha_r)}. \quad (4.77)$$

Utilizando o conjunto de autovetores (4.76), a matriz de transformação ortogonal é construída como

$$\mathbf{O} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{(1)} & \mathbf{v}^{(2)} & \dots & \mathbf{v}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad (4.78)$$

e a matriz diagonal é

$$\mathbf{D}^2 = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_N^2 \end{bmatrix}. \quad (4.79)$$

Utilizando a propriedade (4.19), somos capazes de escrever a matriz de diagonal associada à Ω . Os elementos da diagonal principal são as frequências de modos normais:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \omega_N \end{bmatrix}. \quad (4.80)$$

essas frequências são dadas através da seguinte relação:

$$\omega_r = \sqrt{\lambda_r^2} = 2\omega \sin \left[\frac{r\pi}{2(N+1)} \right], \quad r = 1, 2, \dots, N. \quad (4.81)$$

Com todos esses resultados somos capazes de escrever o hamiltoniano na descrição de operadores DSO e realizar uma transformação ortogonal para operadores NMO.

4.7.2 Hamiltoniano Desacoplado

Seguindo o mesmo raciocínio que fizemos para o caso $N = 2$, somos capazes de escrever o hamiltoniano em termos dos operadores NMO para o caso geral. Temos então

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hbar}{2} \left(\hat{\mathbf{A}}^{\dagger T} \mathbf{D} \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}^T \mathbf{D} \hat{\mathbf{A}}^{\dagger} \right) \\ &= \sum_{r=1}^N \frac{\hbar \omega_r}{2} \left(\hat{A}_r^{\dagger} \hat{A}_r + \hat{A}_r \hat{A}_r^{\dagger} \right),\end{aligned}\tag{4.82}$$

onde utilizamos a matriz (4.80) e as frequências de modos normais são dadas através da relação (4.81).

No geral, os comutadores dos operadores NMO são dados por

$$\left[\hat{A}_r, \hat{A}_s \right] = 0, \quad \left[\hat{A}_r, \hat{A}_s^{\dagger} \right] = \delta_{rs} \hat{1}_s \quad (r, s = 1, \dots, N).\tag{4.83}$$

O que nos permite fazer a ordenação desse hamiltoniano como:

$$\hat{H} = \sum_{r=1}^N \hbar \omega_r \left(\hat{A}_r^{\dagger} \hat{A}_r + \frac{1}{2} \right).\tag{4.84}$$

4.7.3 Função de Transformação

O estado do sistema de osciladores interagentes é definido através do produto tensorial dos estados dos \hat{A}'_s :

$$|A\rangle \equiv |A_1\rangle \otimes |A_2\rangle \otimes \dots \otimes |A_N\rangle,\tag{4.85}$$

e para o espaço dual é:

$$\langle A^*| \equiv \langle A_1^*| \otimes \langle A_2^*| \otimes \dots \otimes \langle A_N^*|.\tag{4.86}$$

Com essas definições, a função de transformação na descrição de modos normais é o produto das funções de transformação de cada oscilador, uma vez que os modos são independentes. Assim, a função de transformação total é dada por:

$$\langle A^*, t | A, 0 \rangle = \prod_{r=1}^N \langle A_r^*, t | A_r, 0 \rangle = \prod_{r=1}^N \exp \left[A_r^* A_r(0) e^{-i\omega_r t} - \frac{i\omega_r t}{2} \right]. \quad (4.87)$$

4.7.4 Espectro de Energia

O estado do operador número desse sistema é definido como:

$$|n\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle, \quad (4.88)$$

onde os estados do operador número de cada oscilador formam uma base completa. Cujas as relações de completude são por:

$$\sum_{n_r=0}^{\infty} |n_r\rangle \langle n_r| = \hat{1}_r \quad (r = 1, 2, \dots, N). \quad (4.89)$$

Os operadores de cada oscilador atuam unicamente no seu próprio espaço de Hilbert, sem interferir nos estados dos outros operadores.

Ao representar a função de transformação na base do operador número, obtemos

$$\langle A_r^*, 0 | n_r \rangle = \frac{(A_r^*)^{n_r}}{\sqrt{n_r!}}, \quad \langle n_r | A_r, 0 \rangle = \frac{(A_r(0))^{n_r}}{\sqrt{n_r!}} \quad (r = 1, 2, \dots). \quad (4.90)$$

além de obter as autoenergias de cada modo normal:

$$E_{n_r} = \hbar\omega_r \left(n_r + \frac{1}{2} \right) = 2\hbar\omega \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \sin \left[\frac{r\pi}{2(N+1)} \right] \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.91)$$

Somando a energia de todos os modos, obtemos a energia total do sistema:

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \sum_{r=1}^N \hbar\omega_r \left(n_r + \frac{1}{2} \right) = \sum_{r=1}^N 2\hbar\omega \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \sin \left[\frac{r\pi}{2(N+1)} \right]. \quad (4.92)$$

Por fim, a energia do vácuo ocorre quando $n_r = 0$ para todos os r , ou seja:

$$E_{0,0,\dots,0} = \sum_{r=1}^N \frac{\hbar\omega_r}{2} = \sum_{r=1}^N \hbar\omega \sin \left[\frac{r\pi}{2(N+1)} \right]. \quad (4.93)$$

Esse resultado pode ser útil para saber as energias de campos que são quantizados, já que alguns são representados por conjunto de osciladores desacoplados. No caso das ondas eletromagnéticas, o número n estaria relacionado à contagem dos fótons do campo. Já no caso das ondas elásticas que se propagam em cristais, esse número está associado ao número de fônons presentes nessas ondas (KITTEL; MCEUEN, 2018; ASHCROFT; MERMIN, 1976). Nesse contexto, conforme mostrado pela (4.91), cada modo normal pode possuir uma energia distinta, dependendo do número n_r de fônons. Além disso, como evidenciado pela (4.93), mesmo na ausência de fônons em todos os modos normais, ainda existe uma energia não nula associada ao vácuo. Portanto, mesmo na ausência de fônons, as partículas continuam a exibir flutuações em torno de suas posições de equilíbrio devido à energia do vácuo.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, analisamos diversos aspectos da formulação quântica de Schwinger. Destacamos como o princípio da ação quântica é uma abordagem ampla e poderosa, permitindo a extração de diversas ferramentas matemáticas e técnicas eficazes para a resolução de sistemas quânticos.

Um dos principais diferenciais dessa formulação é a incorporação de conceitos do princípio clássico de Hamilton, adaptando-os à mecânica quântica. Um exemplo disso são as transformações canônicas, que possibilitam a escolha de um conjunto de variáveis mais convenientes, simplificando significativamente a descrição do sistema. Isso torna essa abordagem vantajosa, pois oferece diferentes métodos para a resolução de problemas.

Nos exemplos abordados, utilizamos a descrição via hamiltoniano para resolver a equação (3.92) e determinar a função de transformação. Uma abordagem alternativa seria partir da ação quântica do sistema para resolver a equação (3.88). No entanto, essa estratégia exige a resolução da versão clássica do sistema, a determinação das variáveis de movimento e o cálculo da integral da equação (3.37), a fim de obter a ação clássica. Uma vez determinada a ação clássica, aplicamos a regra de quantização para obter o operador de ação.

Optamos pela abordagem via hamiltoniano por ser, em geral, mais direta, uma vez que a determinação do hamiltoniano costuma ser mais simples do que a da ação do sistema. No entanto, ambas as técnicas possuem níveis de dificuldade semelhantes, pois ambas exigem a determinação da evolução temporal das variáveis, seja pela formulação clássica para obter a ação, seja pela resolução das equações de Heisenberg para os operadores.

Para ilustrar algumas das técnicas da formulação de Schwinger, resolvemos alguns sistemas bem conhecidos na literatura, como a partícula livre e o oscilador harmônico, conforme apresentado em Griffiths e Schroeter (2018) e Sakurai e Napolitano (2020). Esses modelos são fundamentais, pois servem como base para o desenvolvimento de técnicas aplicáveis a sistemas mais complexos. No caso dos osciladores acoplados, ao encontrar uma transformação canônica de operadores de modos normais, o hamiltoniano ficou diagonalizado, o que tornou a descrição mais simples. Ao ter um conjunto de operadores NMO desacoplados, podemos reaproveitar as ideias do oscilador livre para determinar a função de transformação e o espectro de energia.

Embora o modelo analisado seja unidimensional e considere partículas idênticas, ele fornece uma abordagem útil para nos dar algumas intuições a respeito de vibrações de modos

normais de partículas acopladas. Além disso, acreditamos que as técnicas aqui desenvolvidas possam ser aperfeiçoadas para tratar modelos mais sofisticados, como osciladores acoplados em duas ou três dimensões, bem como sistemas compostos por partículas com propriedades distintas. Sendo modelos que se aproximam mais de situações reais de estruturas tridimensionais de partículas interagentes.

Além disso, o modelo de osciladores interagentes poderia ser utilizado para descrever interações de spin, se considerarmos as variáveis canônicas como sendo binárias 1 e -1 . O que seria uma alternativa ou equivalência ao modelo de Ising, que é utilizado para descrever interações entre spins e campos magnéticos (ISING, 1925). Isso tem aplicações em área como quantum finance, no qual é comum modelar problemas de otimização de portfólio de ações por hamiltoniano no formato de Ising (MUGEL et al., 2022). Desse modo, o modelo apresentado nesse trabalho, com as simplificações e adaptações apropriadas, poderia ser explorado para modelar algum problema de quantum finance.

Ademais, o modelo estudado servirá como base para investigações futuras sobre sistemas mais complexos, como o oscilador de Pais-Uhlenbeck (PAIS; UHLENBECK, 1950; MENDES, 2017). Para esse modelo, existem técnicas que elevam a ordem das equações de movimento dos osciladores acoplados, conduzindo naturalmente à sua formulação. Nesse contexto, torna-se relevante explorar os fundamentos da quantização em teorias de ordens superiores (GROSSE-KNETTER, 1993). Diante disso, a formulação de Hamilton-Ostrogradsky desempenha um papel fundamental ao tratar sistemas com lagrangianos e hamiltonianos de ordem superior (OSTROGRADSKI, 1850; MENDES, 2017). Assim, é razoável supor que também exista uma versão quântica dessa formulação, passível de ser derivada a partir do princípio da ação quântica.

Por último, embora nem todos os aspectos e derivações da formulação de Schwinger tenham sido explorados neste trabalho, recomendamos as seguintes referências para aprofundamento no tema Schwinger (1955), Schwinger, Englert et al. (2001), Melo, Pimentel e Ramirez (2011), Melo, Pimentel e Ramirez (2013), Melo, Pimentel e Ramirez (2016), Bedoya (2013). Por fim, esperamos que este estudo tenha fornecido uma introdução clara aos principais conceitos dessa formulação e que as ideias aqui discutidas possam servir como base para a análise de sistemas quânticos mais complexos.

REFERÊNCIAS

- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. New York: Harcourt College Publishers, 1976.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. **Theory of superconductivity**. Physical review, APS, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957.
- BASSI, A. B. **Conceitos fundamentais em espectroscopia**. Revista Chemkeys, n. 9, p. 1–14, 2001.
- BEDOYA, J. A. R. **O princípio de ação quântica de Schwinger: aspectos do tratamento de sistemas dependentes do tempo e interagentes**. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2013.
- CHIQUITO, A. J.; ALMEIDA, N. G. de. **O Potencial de Lennard-Jones: Aplicação a Moléculas Diatômicas**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 21, n. 2, 1999.
- CLAUSIUS, R. J. E. **Ueber die wärmeleitung gasförmiger körper**. [S.l.]: Verlag nicht ermittelbar, 1862.
- COHEN-TANNOUJDI, C.; HAROCHE, S. **Absorption et diffusion de photons optiques par un atome en interaction avec des photons de radiofréquence**. Journal de Physique, Société Française de Physique, v. 30, n. 2-3, p. 153–168, 1969.
- DIRAC, P. A. M. **Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion**, v. 3, n. 1, p. 64, 1933. Uma versão traduzida do artigo pode ser encontrada em *Selected Papers on Electrodynamics*, editada por Julian S. Schwinger (Dover Publications Inc., New York, 1958), pp. 312.
- _____. **The Principles of Quantum Mechanics**. Oxford, UK: Oxford University Press, 1981.
- FEYNMAN, R. P. **Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics**. Rev. Mod. Phys., v. 20, p. 36, 1948.
- FEYNMAN, R. P.; HIBBS, A. R. **Quantum Mechanics and Path Integrals**. McGraw-Hill, McGraw-Hill, New York, 1965.
- GERRY, C. C.; KNIGHT, P. L. **Introductory Quantum Optics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to quantum mechanics**. Cambridge, UK: Cambridge university press, 2018.
- GROSSE-KNETTER, C. **Effective lagrangians with higher order derivatives**. arXiv preprint hep-ph/9306321, 1993.

HAMILTON, W. R. **On a general method in dynamics**. [S.l.]: Richard Taylor United Kindom, 1834.

HEISENBERG, W. **Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen**. Berlin, Germany: Springer, 1985.

ISING, E. **Beitrag zur theorie des ferromagnetismus**. Zeitschrift für Physik, Springer, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.

ISRAELACHVILI, J. N. **Intermolecular and Surface Forces**. 3. ed. Burlington, MA, USA: Academic Press, 2011. ISBN 978-0123919277.

KAJITA, M. **Ion Traps: A Gentle Introduction**. Bristol, UK: IOP Publishing, 2022.

KITTEL, C.; MCEUEN, P. **Introduction to Solid State Physics**. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2018.

LAGRANGE, J. L. **Mécanique analytique**. Paris: Mallet-Bachelier, 1853. v. 1.

LAGRANGE, J. L. d. **Mécanique Analytique. Paris: Veuve Desaint, 1788; Mécanique Analytique (posthume), Paris: Gauthiers-Villars 1815; Übersetzung von H. Servus: Analytische Mechanik**. Berlin: Springer, 1887.

LAY, D. C.; LAY, S. R.; MCDONALD, J. J. **Álgebra Linear e Suas Aplicações**. 5. ed. Rio de Janeiro: Editora GEN - LTC, 2018. ISBN 978-85-216-3495-9.

LEMOS, N. A. **Mecânica analítica**. São Paulo, Brasil: Editora Livraria da Física, 2013.

MARION, J. B. **Classical Dynamics of Particles and Systems**. Burlington, MA, USA: Academic Press, 2013.

MELO, C. A. M. d. **Princípio variacional de Schwinger e teoria quântica: aplicações à mecânica quântica quaterniônica e ao estudo de sistemas singulares**. 2002. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual Paulista (Unesp).

MELO, C. de; PIMENTEL, B.; RAMIREZ, J. **Teoria algébrica de processos da medida em sistemas quânticos**. Revista Brasileira de Ensino de Física, SciELO Brasil, v. 33, p. 1–13, 2011.

_____. **Princípio de ação quântica de Schwinger**. Revista Brasileira de Ensino de Física, SciELO Brasil, v. 35, p. 1–16, 2013.

_____. **Non-perturbative Solution to the Quantum Interaction Problem via Schwinger's Action Principle**. arXiv preprint arXiv:1608.03334, 2016.

MENDES, L. O. **Um estudo de teorias com derivadas de ordem superior: o oscilador de Pais-Uhlenbeck**. 2017. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual de Maringá.

- MUGEL, S. et al. **Dynamic portfolio optimization with real datasets using quantum processors and quantum-inspired tensor networks**. *Physical Review Research*, APS, v. 4, n. 1, p. 013006, 2022.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum Computation and Quantum Information**. 10th anniversary. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2010.
- NOETHER, E. **Invariante Variationsprobleme, Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse 1918 (1918) 235–257**. URL <http://eudml.org/doc/59024>, 1918.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Física Básica, Volume 4: Física Quântica**. 2ª. ed. São Paulo, Brasil: Editora Blucher, 2014. Capítulo 8: Princípios básico da teoria quântica. ISBN 9788521208037.
- OSTROGRADSKI, M. **Memoires sur les equations differentielles relatives au probleme des isoperimetres mem. ac. st. petersburg, vi series, vol. 4 385517; rp woodard**. *Lect. Notes Phys*, v. 720, p. 403–433, 1850.
- PAIS, A.; UHLENBECK, G. **On field theories with non-localized action**. *Physical Review*, APS, v. 79, n. 1, p. 145, 1950.
- SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. 3. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108473224.
- SCHRÖDINGER, E. **Quantisierung als eigenwertproblem**. *Annalen der physik*, WILEY-VCH Verlag Leipzig, v. 385, n. 13, p. 437–490, 1926.
- SCHWINGER, J. **Unitary transformations and the action principle**. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 46, n. 6, p. 883–897, 1960.
- SCHWINGER, J.; ENGLERT, B.-G. et al. **Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements**. Berlin, Germany: Springer, 2001. v. 1. ISBN 978-3540419114.
- SCHWINGER, J. S. **Lectures on Quantum Mechanics**. Les Houches, França: École de Physique des Houches, 1955. (École de Physique des Houches, Les Houches, França, julho de 1955).
- SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. **Quantum Optics**. 1. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1997. ISBN 978-0521435959.
- STERN, O.; GERLACH, W. **Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld**. *Zeitschrift für Physik*, v. 9, p. 349–352, 1922.
- TOBIAS, I. P. et al. **Modelo de Jaynes-Cummings**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal de Uberlândia.