Capítulo 3

Cinemática e dinâmica quânticas

Neste capítulo construiremos os conceitos da cinemática e da dinâmica em M.Q. fundamentados em álgebra linear, teoria da probabilidade, nos postulados (§2.1)), e na premissa de que as leis da natureza são invariantes às operações de simetria específicas do espaço-tempo.

A importância da simetria do espaço-tempo está presente já em mecânica clássica e constitui uma característica fundamental das teorias quânticas de campos modernas. O primeiro teorema de Noether, publicado em 1918, afirma que toda simetria diferenciável[1] da função lagrangiana de um sistema físico tem uma lei de conservação correspondente. Sob este aspecto, as leis do movimento da mecânica clássica são uma formalização das propriedades de conservação de energia e momento (linear e angular) e estas, por sua vez, são consequências das simetrias do universo. Em M.Q. o mesmo acontece.

Por simplicidade, trabalharemos no limite não-relativístico ($v << c$) e toda discussão desse capítulo será baseada em estados puros, o que nos permite trabalhar diretamente com o vetor de estado $|\psi\rangle$ sem a necessidade de se trabalhar com operadores de estado.

3.1 Transformações de estados e observáveis

Comecemos essa seção com um importante teorema:

Teorema 9 (Teorema de Wigner) *Um mapeamento de um espaço vetorial em outro, no mesmo espaço, deve preservar o valor de* $|\langle\phi \mid \psi\rangle|$ *e pode*

[1] Simetria diferenciável significa uma transformação de coordenadas (ou suas velocidades) contínuas infinitesimais que deixa o sistema invariante.

ser implementado através de operadores unitários ou anti-unitários (também chamados lineares e anti-lineares).

Em outras palavras, se há uma transformação de estados e de observáveis entre dois sistemas de referência (nomeadamente os sistemas S e S′) então a probabilidade deve ser invariante e a seguinte igualdade $|\langle \phi' \mid \psi' \rangle|^2 = |\langle \phi \mid \psi \rangle|^2$ deve valer.

O teorema também estabelece que o operador U que implementa essa transformação é um operador unitário ou anti-unitário:

- **Operador unitário:** é o operador que tem a propriedade de preservar a norma de um vetor, definido por $U^\dagger = U^{-1}$, que resulta em $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbf{1}$, sendo $\mathbf{1}$ a operação de identidade. Logo, $\langle \phi' | \psi' \rangle = (\langle \phi' | U^\dagger)(U |\psi\rangle) = \langle \phi | \psi \rangle$.

- **Operador anti-unitário:** como bras e kets são anti-lineares devido à simetria Hermitiana (ver §1.1.7), um operador anti-linear é tal que $A(c_1 |\phi_1\rangle + c_2 |\phi_2\rangle) = c_1^*(A|\phi_1\rangle) + c_2^*(A|\phi_2\rangle)$. Desta forma, o mapeamento de S em S' é tal que $\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*$.

Note que $|\langle \phi' \mid \psi' \rangle|^2 = |\langle \phi \mid \psi \rangle|^2$ para ambos os mapeamentos, por operadores lineares e anti-lineares.

Consideremos um operador hermitiano tal que $A|\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle$ no sistema S. No sistema S′ temos $A' |\phi_n'\rangle = a_n |\phi_n'\rangle$. Note que temos o mesmo autovalor pois transformações de base não alteram os autovalores (valores esperados) de um operador. Pelo teorema de Wigner $|\phi_n'\rangle = U|\phi_n\rangle$ então:

$$A'U|\phi_n\rangle = a_n U |\phi_n\rangle\,, \tag{3.1}$$

multiplicando à esquerda por U^{-1} encontramos:

$$U^{-1}A'U|\phi_n\rangle = U^{-1}a_n U|\phi_n\rangle\,, \tag{3.2}$$

como a_n é um escalar, comuta com U e encontramos:

$$U^{-1}A'U = A, \quad \text{ou ainda} \quad A' = UAU^{-1}. \tag{3.3}$$

Esta é a operação de similaridade definida em §1.2.

Considere, agora, uma família de operadores unitários $U(s)$, que dependem de um parâmetro contínuo s. Além disso define-se $U(0) = \mathbf{1}$ e $U(s_1 + s_2) = U(s_1)\,U(s_2)$. Consideremos que s é um parâmetro infinitesimal tal que valha a expansão de Taylor:

$$U(s) = \mathbf{1} + s\left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} + O\left(s^2\right), \tag{3.4}$$

o mesmo deve ser válido para $U^\dagger$:

$$U^\dagger = (s) = \mathbf{1} + s \left.\frac{dU^\dagger}{ds}\right|_{s=0} + O\left(s^2\right), \tag{3.5}$$

tal que:

$$UU^\dagger = \mathbf{1} + s \left.\left[\frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds}\right]\right|_{s=0} = \mathbf{1}, \tag{3.6}$$

logo:

$$\frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds} = 0, \tag{3.7}$$

cuja solução é do tipo:

$$U\left(s\right) = e^{iKs}, \tag{3.8}$$

com $K = K^\dagger$. Em palavras: o operador que realiza a transformação de um sistema S para um sistema S′ (seja lá qual for essa transformação) é uma exponencial de um operador multiplicado por um parâmetro s. Esse operador K é necessariamente hermitiano e está associado à natureza do parâmetro s. Veremos mais adiante as características de K e de s e vislumbraremos a crucial importância desse resultado em M.Q.

3.2 Simetrias no espaço-tempo

Considerando o limite não-relativístico ($v << c$), as simetrias do espaço-tempo são descritas pelo **grupo de Galileu** (quando $v \approx c$ as simetrias são descritas pelo grupo de Lorentz). O ponto mais importante das simetrias é que as leis da física têm que ser invariantes para transformações de coordenadas. Em M.Q. essa assertiva é assegurada pelo teorema de Wigner.

A transformação de coordenadas mais geral possível é:

$$\vec{x} \to \vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a} + \vec{v}t, \tag{3.9}$$

$$t \to t' = t + s, \tag{3.10}$$

sobre a equação (3.9) o seu primeiro termo corresponde às rotações, o segundo às translações[2] e o terceiro aos movimentos com velocidade relativa entre referenciais. Já a equação (3.10) corresponde a translações temporais.

Podemos pensar em transformações sucessivas. Seja $\tau_1 = \tau_1\left(R_1, \vec{a}_1, \vec{v}_1, s_1\right)$ e $\tau_2 = \tau_2\left(R_2, \vec{a}_2, \vec{v}_2, s_2\right)$. Queremos calcular $\tau_3 = \tau_2\tau_1$. Usando as relações de

[2] Aqui $\vec{a}$ é um operador de translação no espaço. Não confundir com aceleração.

teoria de grupos temos[3]:

$$R_3 = R_2 R_1, \quad \vec{a}_3 = \vec{a}_2 + R_2 \vec{a}_1 + \vec{v}_2 s_1, \tag{3.11}$$
$$\vec{v}_3 = \vec{v}_2 + R_2 \vec{v}_1, \quad s_3 = s_2 + s_1, \tag{3.12}$$

ou seja

$$\vec{x}'' = R_2 \left(R_1 \vec{x} + \vec{a}_1 + \vec{v}_1 t\right) + \vec{a}_2 + \vec{v}_2 \left(t + s_1\right), \quad t'' = t + s_1 + s_2, \tag{3.13}$$

que corresponde às transformações de τ_1 e em seguida de τ_2. Como as transformações são garantidas por operadores unitários então $U(\tau_2) U(\tau_1) |\psi\rangle$ e $U(\tau_3) |\psi\rangle$ devem ser iguais a menos de um fator de fase, logo:

$$U(\tau_2 \tau_1) = e^{i\omega(\tau_2, \tau_1)} U(\tau_2) U(\tau_1). \tag{3.14}$$

Importante ressaltar que quando representamos um vetor arbitrário $|\psi\rangle$ em coordenadas (comumente chamado de função de onda $\psi(x)$, ver capítulo 5), existe uma relação inversa na atuação do operador unitário quando comparamos a atuação no vetor ou nas suas coordenadas:

$$U(\tau) \psi(x) = \psi\left(\tau^{-1} x\right). \tag{3.15}$$

$\Longrightarrow$ *Resolva o exercício 3.1.*

3.3 Geradores do grupo de Galileu

Qualquer operador unitário de 1 parâmetro único (uniparamétrico) pode ser expresso como a exponencial de um "gerador hermitiano". Como o grupo de Galileu envolve 3 rotações espaciais, 3 translações espaciais, 3 velocidades relativas e uma translação temporal temos 10 geradores no caso geral, e escrevemos:

$$U = \prod_{\mu=1}^{10} e^{i s_\mu K_\mu}, \quad \text{com} \quad K_\mu = K_\mu^\dagger, \tag{3.16}$$

consideremos o parâmetro s_μ infinitesimal, de tal forma que:[4]

$$U = \mathbf{1} + i \sum_{\mu=1}^{10} s_\mu K_\mu. \tag{3.17}$$

$\Longrightarrow$ *Resolva o exercício 3.2.*

[3] O tratamento de teoria de grupos para simetrias de espaço encontra-se no apêndice C.

[4] Veja a equação (3.99) do exercício 3.2 e considere expansão em primeira ordem.

A lei da multiplicação (Eq.3.14) expressar-se-á atravéz das regras de comutação dos operadores, que exploraremos agora. Consideremos o produto de 2 operadores infinitesimais do grupo de Galileu seguido de suas inversas[5]:

$$U = e^{i\epsilon K_\mu} e^{i\epsilon K_\nu} e^{-i\epsilon K_\mu} e^{-i\epsilon K_\nu}, \tag{3.18}$$

expandindo até segunda ordem $(\mathbf{1} + i\epsilon K - \epsilon^2 K/2)$ encontramos:

$$U = \mathbf{1} + \epsilon^2 (K_\nu K_\mu - K_\mu K_\nu) + O\left(\epsilon^3\right), \tag{3.19}$$

lembrando sempre que a equivalência entre dois operadores é única a menos de uma fase, ou seja:

$$e^{i\omega} U = \mathbf{1} + i \sum_{\mu=1}^{10} s_\mu K_\mu + i\omega \mathbf{1}. \tag{3.20}$$

A equivalência entre as equações (3.20) e (3.19) para os 11 parâmetros (os 10 parâmetros s_μ e o parâmetro ω da fase) deve ser tal que o comutador $[K_\mu, K_\nu]$ seja uma combinação linear dos geradores e do operador identidade:

$$[K_\nu, K_\mu] = i \sum_{\lambda=1}^{10} c^\lambda_{\nu\mu} K_\lambda + i b_{\nu\mu} \mathbf{1}, \tag{3.21}$$

a forma específica de $c^\lambda_{\nu\mu}$ depende das relações de transformações de coordenadas dadas pelas equações (3.12), já a forma de $b_{\nu\mu}$ depende do fator de fase.

Na tabela 3.1 listamos as operações de simetria possíveis ao grupo de Galileu. Note que o operador associado às translações espaciais é o operador momento linear $(-P_\alpha,\ \alpha = 1, 2, 3)$, o associado às rotações é o operador momento angular $(-J_\alpha)$, o associado às velocidades relativas é o operador velocidade (G_α) e o associado à translações temporais é o operador hamiltoniano (H). Estas associações serão formalizadas mais adiante, mas já adotamos essa notação por praticidade.

Podemos, agora, avaliar os comutadores (Eq.(3.21)) escolhendo pares de geradores e substituindo na Eq.(3.18), considerando as operações da Eq. (3.12), com as formas escalares, vetoriais e matriciais adequadas a estas operações[6]. Finalmente teremos as relações de comutação entre todos os geradores de transformações de simetria:

$$[P_\alpha, P_\beta] = 0, \qquad [G_\alpha, G_\beta] = 0, \qquad [P_\alpha, H] = 0, \tag{3.22}$$

$$[J_\alpha, J_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J_\gamma, \qquad [J_\alpha, P_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} P_\gamma, \qquad [J_\alpha, G_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} G_\gamma, \tag{3.23}$$

$$[G_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta} M \mathbf{1}, \qquad [G_\alpha, H] = iP_\alpha, \qquad [J_\alpha, H] = 0. \tag{3.24}$$

[5]Note que esta expressão define comutação em teoria de grupos, enquanto a mais usual $[A, B] = AB - BA$ é a definição em teoria de anéis.

[6]Por exemplo, para rotação, ver Eqs.(1.23).

Transformações espaço-temporais	Operador Unitário
Rotação em torno de um eixo α $\vec{x}' \to R_\alpha(\theta_\alpha)\vec{x}$	$e^{-i\theta_\alpha J_\alpha}$
Translações em torno de um eixo α $x'_\alpha \to x_\alpha + a_\alpha$	$e^{-ia_\alpha P_\alpha}$
Velocidade ao longo do eixo α $x'_\alpha = x_\alpha + v_\alpha t$	$e^{iv_\alpha G_\alpha}$
Translações temporais $t' \to t + s$	e^{isH}

Tabela 3.1: Transformações de Galileu e seus geradores. O uso de sinal menos em alguns operadores unitários é para ficar conforme com convenções.

As equações acima[7] dependem de um parâmetro M que, até o momento, não pode ser definido pelas equações que temos a disposição, a menos de ser uma constante, resultado que pode ser obtido através do Lema de Schur:

Lema 1 (Lema de Schur) *Se as representações de um determinado grupo são irredutíveis, um operador que comuta com os operadores desse grupo só pode ser uma matriz constante (múltiplo da identidade).*

Geralmente os operadores de interesse em M.Q. formam uma representação irredutível do grupo de Galileu, valendo o lema de Schur. A definição de representações redutíveis e irredutíveis, e uma prova do Lema de Schur podem ser encontrada no Apêndice B, seguindo [3].

$\Longrightarrow$ *Resolva os exercícios 3.3 e 3.4.*

3.4 Identificação dos operadores com as variáveis dinâmicas

3.4.1 Operador posição

Podemos definir o operador posição de uma partícula $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, Q_3)$ como sendo:

$$Q_\alpha |\vec{x}\rangle = x_\alpha |\vec{x}\rangle, \quad \alpha = 1, 2, 3, \tag{3.25}$$

cujos autovalores dão a posição da partícula. Note que $\mathbf{Q}$ é um operador hermitiano. Esse operador exige que o espaço seja tratado como contínuo, o que é verdade nas escalas atômicas e nuclear e pode falhar na escala

[7] $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$; $\epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1$; $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0$ se $\alpha = \beta$.

astronômica (por conta de efeitos de Relatividade Geral) ou na escala de Plank (10^{-35}m). O subgrupo formado por todos os operadores posição é abeliano, ou seja, todos os operadores são mutuamente comutantes.

3.4.2 Operador velocidade

Vamos introduzir agora um operador que chamaremos de "operador velocidade", definido por:

$$\frac{d\left\langle Q\right\rangle}{dt}=\left\langle V\right\rangle, \tag{3.26}$$

para qualquer estado. Note que para uma partícula clássica as variâncias de $\langle Q\rangle$ e $\langle V\rangle$ são nulas e teríamos a definição clássica de velocidade. Mas por enquanto podemos supor que estamos apenas usando a mesma palavra.

Para o caso particular de um estado puro descrito pelo vetor de estado $|\psi\rangle$, o valor esperado do operador velocidade $\langle\psi\left|V\right|\psi\rangle$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\left\langle\psi\left|V\right|\psi\right\rangle &= \frac{d}{dt}\left\langle\psi\left(t\right)\left|Q\right|\psi\left(t\right)\right\rangle \qquad (3.27)\\ &= \left(\frac{d}{dt}\left\langle\psi\left(t\right)\right|\right)Q\left|\psi\left(t\right)\right\rangle+\left\langle\psi\left(t\right)\right|Q\left(\frac{d}{dt}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle\right).\end{aligned}$$

3.4.3 Deslocamento temporal

Aplicando um deslocamento temporal $t\rightarrow t'=t+s$, e lembrando que os operadores de translação obedecem a $U\left(\tau\right)\psi\left(x\right)=\psi\left(\tau^{-1}x\right)$, temos que tal translação gera:

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle\rightarrow e^{-isH}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=\left|\psi\left(t+s\right)\right\rangle, \tag{3.28}$$

Expandindo o operador unitário em primeira ordem, temos

$$\begin{aligned}e^{-isH}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle &= \left(\mathbf{1}-isH\right)\left|\Psi(t)\right\rangle\\ \left|\psi\left(t+s\right)\right\rangle &= \left|\Psi(t)\right\rangle-isH\left|\Psi(t)\right\rangle\\ \frac{\left|\psi\left(t+s\right)\right\rangle-\left|\Psi(t)\right\rangle}{s} &= -iH\left|\Psi(t)\right\rangle\\ \frac{d}{dt}\left|\Psi(t)\right\rangle &= -iH\left|\Psi(t)\right\rangle \qquad (3.29)\end{aligned}$$

onde o último passo é simplesmente a definição de derivada.

Alternativamente, pode-se simplesmente considerar

$$e^{isH}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=\left|\psi\left(t-s\right)\right\rangle, \tag{3.30}$$

e, fazendo $s = t$ e multiplicando ambos os lados por $U = e^{-itH}$, temos $|\psi(t)\rangle$ como resultado da aplicação de U em um vetor de estado:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-itH} |\psi(0)\rangle \,, \tag{3.31}$$

que é solução de:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -iH |\psi(t)\rangle \,. \tag{3.32}$$

Note a semelhança com a Equação de Schrödinger dependente do tempo. Falta, apenas, identificar o operador gerador de translação temporal H com o Hamiltoniano do sistema.

3.4.4 Comutação canônica entre Q e H

Jogando os resultados da seção §3.4.3 em (3.28) encontramos:

$$V = i\,[H, Q] \,. \tag{3.33}$$

Temos aqui uma definição para o operador velocidade em função da relação de comutação entre o operador gerador de translação temporal H e o operador que extrai a posição da partícula Q, advinda diretamente da definição dos valores esperados de V (Eq.(3.26)).

3.4.5 Deslocamento espacial

Consideremos a transformação de coordenadas: $\vec{x} \to \vec{x}' = \vec{x} + \vec{a}$. O operador que implementa essa transformação de coordenadas é o operador momento linear:

$$|\vec{x}\rangle' = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}} |\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{a}\rangle \,, \tag{3.34}$$

mas para o operador $Q' = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}} Q e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}}$ vem:

$$Q'_\alpha |\vec{x}\rangle' = x_\alpha |\vec{x}\rangle' \,, \tag{3.35}$$

porém, por outro lado, $Q_\alpha |\vec{x}\rangle = x_\alpha |\vec{x}\rangle$ e também $|\vec{x}\rangle' = |\vec{x} + \vec{a}\rangle$ e comparando encontramos:

$$Q' = Q - \mathbf{a}\mathbf{1}, \tag{3.36}$$

que corresponde a uma medida de posição em relação a uma origem deslocada espacialmente.

3.4.6 Comutação canônica entre Q e P

Usando a expansão de Taylor: $e^{-ia_\alpha P_\alpha} = \mathbf{1} + ia_\alpha P_\alpha + O\left(a^2\right)$, considerando-se deslocamentos infinitesimais, encontramos:

$$
\begin{aligned}
e^{-ia_\alpha P_\alpha} Q e^{ia_\alpha P_\alpha} &= \left(\mathbf{1} - ia_\alpha P_\alpha\right) Q \left(\mathbf{1} + ia_\alpha P_\alpha\right) \\
&= Q + Qia_\alpha P_\alpha - ia_\alpha P_\alpha Q + O\left(a^2\right),
\end{aligned} \tag{3.37}
$$

simplificando e usando $Q' = e^{-ia_\alpha P_\alpha} Q e^{ia_\alpha P_\alpha} = Q - a\mathbf{1}$ encontramos:

$$i\left[Qa_\alpha P_\alpha - a_\alpha P_\alpha Q\right] = Q - a_\alpha I, \tag{3.38}$$

então:

$$\left[Q_\alpha, P_\beta\right] = i\delta_{\alpha\beta}\mathbf{1}, \tag{3.39}$$

que é a relação canônica de comutação entre as componentes dos operadores **Q** e **P**.

$\Longrightarrow$ *Resolva o exercício 3.5.*

3.4.7 Rotação de um ângulo infinitesimal e comutação canônica entre Q e J

A transformação correspondente a uma rotação de um ângulo infinitesimal θ em torno de um vetor unitário $\hat{n}$, que leva $\vec{x} \to \vec{x}' = \vec{x} + \theta\hat{n} \times \vec{x}$, corresponde à seguinte operação nos autovetores do operador posição:

$$|\vec{x}\rangle \to |\vec{x}\rangle' = e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}} |\vec{x}\rangle = |\vec{x}'\rangle, \tag{3.40}$$

cuja atuação no operador posição é:

$$Q'_\alpha = e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}} Q_\alpha e^{i\theta\hat{n}\cdot\vec{J}}. \tag{3.41}$$

Repetindo os mesmos cálculos de antes somos capazes de demonstrar:

$$\left[J_\alpha, Q_\beta\right] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_\gamma. \tag{3.42}$$

3.4.8 Deslocamento no espaço de velocidades e comutação canônica entre Q e G

Por fim, precisamos descrever a transformação de velocidades, implementada pelo operador G:

$$e^{i\vec{v}\cdot\vec{G}} V e^{-i\vec{v}\cdot\vec{G}} = V - \mathbf{v}\mathbf{1}, \tag{3.43}$$

que tem forma exatamente análoga ao vetor Q. Repetindo os cálculos de antes encontramos:

$$\left[G_\alpha, Q_\beta\right] = 0. \tag{3.44}$$

3.5 Formas específicas dos geradores do grupo de Galileu

Estamos interessados, agora, em obter a forma específica dos geradores de simetria do grupo de Galileu e tornar explícita a semelhança destes operadores com as grandezas de momento linear, momento angular e energia, através de suas relações com o operador posição **Q**. Os resultados dependem, entretanto, da partícula ter ou não graus de liberdade internos, estar ou não na presença de campos externos, que são exemplos de fatores que quebram as simetrias do sistema. Para desenvolvermos essas ideias consideramos separadamente três casos:

3.5.1 Caso 1: Partícula livre sem graus de liberdade internos

Consideremos as relações de comutação, em especial:

$$[G_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta} M\mathbf{1}, \tag{3.45}$$

e também:

$$[Q_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}\mathbf{1}, \tag{3.46}$$

por comparação podemos supor que a solução para G é $G_\alpha = MQ_\alpha$, porém não sabemos se ela é única.

Construímos $G - MQ$ que, obviamente, comuta tanto com P quanto com G. Mas como P e Q formam uma representação irredutível[8], pelo lema de Schur, os operadores que comutam com ele têm que ser um múltiplo da identidade, logo:

$$G_\alpha - MQ_\alpha = c_\alpha\mathbf{1}, \quad \Rightarrow \quad G_\alpha = MQ_\alpha + c_\alpha\mathbf{1}, \tag{3.47}$$

que é a relação mais genérica possível que podemos obter para G_α. Além disso, as seguintes relações de comutação:

$$[J_\alpha, G_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} G_\gamma, \quad [J_\alpha, Q_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_\gamma, \tag{3.48}$$

mostram que tanto G quanto Q se comportam como vetores no sentido usual (satisfazem às mesmas relações de comutação de vetores 3D). Porém, $c_\alpha\mathbf{1}$ não é um vetor e, portanto, devemos exigir $c_\alpha = 0$, o que torna a solução $G_\alpha = MQ_\alpha$ única.

[8] Ver apêndice B.

Continuando, podemos fazer algo análogo para J. Consideremos as seguintes relações de comutação:

$$[Q_\alpha, P_\beta] = i\delta_{\alpha\beta}\mathbf{1}, \qquad [J_\alpha, J_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma, \quad [J_\alpha, P_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}P_\gamma, \tag{3.49}$$

$$[J_\alpha, G_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}G_\gamma, \quad [J_\alpha, Q_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}Q_\gamma. \tag{3.50}$$

Temos que $\mathbf{J} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ é uma solução. Construímos $\mathbf{J} - \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ que comuta com Q e P e, pelo lema de Schur, $\mathbf{J} - \mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ tem que ser um múltiplo da identidade. Como antes $\mathbf{J}$ também se transforma como vetor, logo a constante multiplicativa da identidade tem que ser nula, assim:

$$\mathbf{J} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P}. \tag{3.51}$$

Para o caso do operador H temos que:

$$[G_\alpha, H] = iP_\alpha, \quad G_\alpha = MQ_\alpha, \tag{3.52}$$

tal que podemos obter:

$$[Q_\alpha, H] = \frac{iP_\alpha}{M}. \tag{3.53}$$

Uma solução possível é construir: $H = \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2M}$. Como fizemos antes, construímos $H - \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2M}$, que comuta com Q e P e, pelo lema de Schur, deve ser um múltiplo da identidade. Aqui não temos argumento para fazer igual a zero a constante multiplicativa da identidade, então ficamos com:

$$H = \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2M} + E_0, \tag{3.54}$$

onde E_0 é alguma "energia" de referência.

Por fim, para o operador V, encontramos:

$$V = i\,[H, Q] = i\left[\frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2M} + E_0, Q\right], \tag{3.55}$$

usando as relações de comutação encontramos:

$$V = i\left[\frac{P}{2M}\left(-i\mathbf{1} + QP\right) - \left(i\mathbf{1} + PQ\right)\frac{P}{2M}\right] = \frac{P}{M}. \tag{3.56}$$

Podemos, então, resumir as relações obtidas como sendo:

$$\mathbf{P} = M\mathbf{V}, \quad H = \frac{1}{2}M\mathbf{V}\cdot\mathbf{V} + E_0, \quad \mathbf{J} = \mathbf{Q} \times M\mathbf{V}. \tag{3.57}$$

É digno de nota que a constante M que aparece nas relações acima ainda não possui dimensão, é apenas um parâmetro real que obtivemos algebricamente nas relações de comutação dos geradores do grupo de Galileu. Em outras palavras, a constante M surge de forma natural quando estamos considerando as relações de comutação do grupo de Galileu.

É possível determinar experimentalmente a razão (M/massa), assim como as razões entre (P/momento linear) e todos os outros operadores mencionados com as respectivas grandezas clássicas análogas. Importante frisarmos aqui que, até o momento, não explicitamos que os operadores explorados são ligados aos conceitos clássicos cujos nomes eles remetem. Apenas reservamos a mesma nomenclatura para identificá-los. Essa razão entre todos os operadores não é senão $\hbar^{-1}$:

$$\frac{M}{\text{massa}} = \frac{P}{\text{mom. linear}} = \frac{H}{\text{energia}} = \frac{J}{\text{mom. angular}} = \text{c}^{te} \text{ fundamental} = \frac{1}{\hbar}.$$

É surpreendente perceber que a mesma constante física fundamental serve para dar sentido físico a todos os geradores do grupo de Galileu. Com a razão $1/\hbar$ podemos interpretar M como massa, P como momento linear, H como energia e J como momento angular. A operação de translação espacial é regida, de fato (não apenas por semelhança de notação), pelo operador momento linear e é dado pela expressão $e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}$. Similarmente para rotação e translação temporal. Podemos, então, substituir $M \to M/\hbar$, $\mathbf{P} \to \mathbf{P}/\hbar$, $\mathbf{J} \to \mathbf{J}/\hbar$ e $H \to H/\hbar$ nos resultados das equações da seção §3.3, ou simplesmente pensar neles sob a condição $\hbar = 1$.

Voltamos, assim, ao que foi escrito no início deste capítulo: O bem estabelecido teorema de Noether da mecânica clássica assegura que simetrias do sistema físico levam a leis de conservação. Com o arcabouço da M.Q., que em muitos aspectos é análogo ao arcabouço clássico, podemos importar boa parte das análises e conclusões que foram construídas antes da M.Q., guardadas as devidas semelhanças de estarmos falando de operadores e não mais de funções.

O valor da constante de Plank ($h = 6.62607015 \times 10^{-43}$J.s, com $\hbar = h/2\pi$) foi fixado na *26ª Convenção Geral de Pesos e Medidas*[9], em Versalhes, novembro de 2018, quando foi internacionalmente acordada a nova definição do kilograma. As unidades do sistema internacional, que no passado foram definidas com base em protótipos físicos que eram mantidos no *Escritório Internacional de Pesos e Medidas* (França), hoje estão todas atreladas a experimentos físicos que podem ser repetidos em qualquer parte do planeta, tendo as constantes físicas fundamentais como referência (ver Fig. 3.1). Ou seja, no novo acordo internacional, o valor de sete constantes fundamentais foram fixados (ver tabela 3.2), e agora, em vez dos experimentos físicos

[9] https://www.bipm.org/en/cgpm-2018/ acesso em 11/02/2019,

servirem para elucidar os valores das constantes fundamentais no SI, assume-se que os valores das constantes são fixos e os experimentos são utilizados para definir fisicamente o que são as unidades de medida do SI. Este acordo tem a função de balizar todas as transações comerciais no planeta (porque não dizer: no universo).

Figura 3.1: As unidades do sistema internacional são definidas a partir das constantes fundamentais da natureza.

constante	valor	unidade	define
c	299.792.458	m/s	metro, kilograma, kelvin
h	$6,62607015 \times 10^{-34}$	J·s	kilograma, kelvin, candela
e	$1,602176634 \times 10^{-19}$	C	ampere
$\Delta\nu_{Cs}$	9.192.631.770	Hz	seg., metro, kilog., amp.
K_B	$1,380649 \times 10^{-23}$	J/K	kelvin
N_A	$6,02214076 \times 10^{23}$	part/mol	mol
K_{cd}	683	lumens/W	candela

Tabela 3.2: Valores das sete constantes fundamentais utilizadas para definir as unidades do SI.

3.5.2 Caso 2: Partícula com spin

O spin de uma partícula pode ser considerado como um grau de liberdade interno, independente de Q e P. Pelo lema de Schur, como existe um operador que comuta com ambos Q e P, estes não formam mais uma representação irredutível e é necessário redefinir operadores para incluir este novo grau de liberdade. Como o spin é, por definição, uma contribuição interna ao momento angular total de uma partícula, temos:

$$\mathbf{J} = \mathbf{Q} \times \mathbf{P} + \mathbf{S}, \tag{3.58}$$

onde $\mathbf{S}$ é o operador de spin, com $[\mathbf{Q}, \mathbf{S}] = [\mathbf{P}, \mathbf{S}] = 0$. Como $\mathbf{J}$ deve respeitar a primeira relação de comutação em (3.23), e $\mathbf{Q} \times \mathbf{P}$ respeita esta relação, então:

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma. \tag{3.59}$$

E como $[\mathbf{J}, H] = 0$, devemos ter $[\mathbf{S}, E_0] = 0$, o que implica que termo E_0 do hamiltoniano dependerá de $\mathbf{S}$.

Fisicamente, se não há interação de campos externos com os graus de liberdade internos, estes não afetarão as propriedades do centro de massa da partícula. Consistentemente, utilizando as regras de comutação pode-se mostrar que as relações $\mathbf{G} = M\mathbf{Q}$ e $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ permanecem válidas.

$\Longrightarrow$ *Resolva o exercício 3.6.*

3.5.3 Caso 3: Partícula interagindo com campos externos

Por simplicidade, consideremos a ausência de graus de liberdade internos. No caso de partículas interagindo com campos externos, a interação modifica a evolução temporal do estado, e consequentemente das probabilidades de distribuição dos observáveis. Neste caso, H deve ser visto de forma mais ampla, como o gerador da evolução dinâmica dependente do tempo $H(t)$, e não mais um simples gerador de translação no tempo. H deve ser redefinido para que a equação do movimento (3.32):

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -iH(t) |\psi(t)\rangle, \tag{3.60}$$

continue válida e as condições de comutação com os outros operadores da cinemática devem ser reavaliadas. Além disso a solução $V = P/M$ não é mais única, uma vez que sua definição leva a $\mathbf{V} = i[H, \mathbf{Q}]$, que envolve H. Para generalizá-la, considerando que $V - \frac{P}{M}$ comuta com o conjunto completo comutante dos três operadores $\vec{Q} = (Q_1, Q_2, Q_3)$ e considerando o *teorema* 8, precisamos incluir algo que, pelas relações de comutação, tem que ser uma função de Q:

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{Q})}{M}, \tag{3.61}$$

e a solução mais geral possível para o hamiltoniano fica sendo:

$$H = \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{Q}))^2}{2M} + W(\mathbf{Q}). \tag{3.62}$$

As formas possíveis de H, para que sejam invariantes ante as transformações do grupo de Galileu, incluem um potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{Q})$ e um potencial escalar $W(\mathbf{Q})$ que podem ambos variar no tempo, porém têm que ser independentes de P, uma vez que P significa uma operação geométrica pura de translação consistente do sistema no espaço. Essas mudanças são necessárias para que sigam valendo as relações de comutação entre os geradores do grupo de Galileu.

Finalmente, agora podemos identificar H como sendo o operador *Hamiltoniano* do sistema.

$\Longrightarrow$ *Resolva o exercício 3.7.*

3.6 Sistemas compostos

Vamos agora generalizar os resultados sobre as variáveis dinâmicas de partículas simples para sistemas compostos. Se duas componentes de um sistema não influenciarem de nenhuma forma um ao outro, deve ser possível descrever uma componente sem fazer qualquer menção à outra. Se:

$$A^{(1)} |a_m\rangle^{(1)} = a_m |a_m\rangle^{(1)}, \tag{3.63}$$

$$B^{(2)} |b_n\rangle^{(2)} = b_n |b_n\rangle^{(2)}, \tag{3.64}$$

onde os índices "(1)" ou "(2)" indicam que a operação atua unicamente nas partículas 1 ou 2, respectivamente. No sistema composto teremos:

$$A^{(1)} |a_m, b_n\rangle = a_m |a_m, b_n\rangle, \tag{3.65}$$

$$B^{(2)} |a_m, b_n\rangle = b_n |a_m, b_n\rangle, \tag{3.66}$$

em que usamos o produto de Kronecker (§1.2.5):

$$|a_m, b_n\rangle = |a_m\rangle^{(1)} \otimes |b_n\rangle^{(2)}. \tag{3.67}$$

Exemplo 15 *Considere* $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ *e* $B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$ *teremos que:*

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}. \tag{3.68}$$

O produto de Kronecker nos permite entender que os operadores A e B atuam apenas na parte do sistema em que estão definidos:

$$A_i^{(1)} |a_m, b_n\rangle = \left(A_i^{(1)} |a_m\rangle^{(1)}\right) \otimes |b_n\rangle^{(2)} \quad (3.69)$$

$$B_j^{(2)} |a_m, b_n\rangle = |a_m\rangle^{(1)} \otimes \left(B_j^{(2)} |b_n\rangle^{(2)}\right), \quad (3.70)$$

além disso:

$$(A_i \otimes B_j) |a_m, b_m\rangle = \left(A_i^{(1)} |a_m\rangle^{(1)}\right) \otimes \left(B_j^{(2)} |b_n\rangle^{(2)}\right), \quad (3.71)$$

assim temos que:

$$A_i^{(1)} = A_i \otimes \mathbf{1}, \quad B_j^{(2)} = \mathbf{1} \otimes B_j, \quad (3.72)$$

e também vale que:

$$\left[A_i^{(1)}, B_j^{(2)}\right] = 0, \quad \forall i, j. \quad (3.73)$$

Como componentes independentes elas devem satisfazer (veja Eq. (1.87)):

$$P(A\&B|C) = P(A|C)\, P(B|C), \quad (3.74)$$

daí teremos:

$$P_{ab}\{(A = a_m)\, \&\, (B = b_n)\, |\psi\} = |\langle a_m, b_n \mid \psi\rangle|^2 = |\langle a_m \mid \varphi\rangle|^2\, |\langle b_n \mid \phi\rangle|^2 . \quad (3.75)$$

Esta fatorização vale sempre que o estado (não necessariamente puro) satisfaz $|\psi\rangle = |\varphi\rangle^{(1)} \otimes |\phi\rangle^{(2)}$, ou ainda $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$, que é a forma mais geral. Estes tipo de fatorização indica que os estados são não correlacionados, classificação que será discutida no capítulo 8.

3.7 Equações de movimento

Considerando operadores unitários de deslocamento temporal $t \to t' = t+s$ escritos na forma $U = e^{isH}$, a equação de evolução temporal para o estado $|\psi(t)\rangle$ (3.32) é dada por:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\left(\frac{i}{\hbar}\right) H(t)\, |\psi(t)\rangle . \quad (3.76)$$

Considerando que o sistema está no estado inicial $t = t_0$, a solução escrita em termos dos operadores de evolução temporal é:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle, \quad (3.77)$$

em que $U(t,t_0)$ deve satisfazer a equação diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t,t_0)\,, \tag{3.78}$$

sujeita à condição inicial: $U(t_0,t_0) = \mathbf{1}$. Se H é hermitiano, $U(t,t_0)$ é unitário, $\forall t$.

A equação admite solução se H independe do tempo:

$$U(t,t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar}, \tag{3.79}$$

caso contrário, $U(t,t_0)$ depende H e a equação só pode ser resolvida iterativamente (através de uma série conhecida como série de Dyson).

Para um operador de estado puro ρ temos que:

$$\begin{aligned}\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| &= U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)|\,U^\dagger(t,t_0)\\ &= U(t,t_0)\,\rho(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,.\end{aligned} \tag{3.80}$$

Queremos calcular a derivada de ρ em relação ao tempo:

$$\begin{aligned}\frac{d\rho(t)}{dt} &= \frac{d}{dt}\left[U(t,t_0)\,\rho(t_0)\,U(t,t_0)\right]\\ &= \left[\frac{dU(t,t_0)}{dt}\right]\rho(t_0)\,U^\dagger(t,t_0) + U(t,t_0)\,\rho(t_0)\,\frac{dU^\dagger(t,t_0)}{dt}\\ &= \left[-\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t,t_0)\right]\rho(t_0)\,U^\dagger(t,t_0) + U(t,t_0)\,\rho(t_0)\left[\frac{i}{\hbar}U^\dagger(t,t_0)\,H^\dagger(t)\right]\\ &= -\frac{i}{\hbar}\left[H(t)\,\rho(t) - \rho(t)\,H^\dagger(t)\right]\\ &= -\frac{i}{\hbar}\left[H(t)\,,\rho(t)\right],\end{aligned} \tag{3.81}$$

pois H é hermitiano. Enquanto 3.76 é a equação de movimento para um estado puro, 3.81 é a equação de movimento para o caso mais geral do operador de estado ρ.

Pelos postulados da M.Q., os observáveis físicos estão atrelados às distribuições de probabilidade dos observáveis, em especial dos seus valores médios. A evolução temporal de um observável R é dada por:

$$\begin{aligned}Prob(R=r|\rho) = \langle R\rangle_t &= Tr\left\{\rho(t)\,R\right\}\\ &= Tr\left\{U^\dagger(t,t_0)\left[U(t,t_0)\,\rho(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,R\right]U(t,t_0)\right\}\\ &= Tr\left\{\rho(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,RU(t,t_0)\right\},\end{aligned} \tag{3.82}$$

onde usamos o fato de o traço de uma matriz ser invariante a uma operação de similaridade ($Tr\left\{U^{\dagger}MU\right\} = Tr\{M\}$) e $U^{\dagger}U = \mathbf{1}$. Com esta operação, podemos definir o operador R_H, que é o observável R no chamado **cenário de Heisenberg**:

$$R_H(t) = U^{\dagger}(t, t_0)\, R U(t, t_0)\,. \tag{3.83}$$

E neste cenário temos:

$$\langle R \rangle_t = Tr\left\{\rho(t_0)\, R_H(t)\right\}. \tag{3.84}$$

Aqui é importante fazer a distinção entre dois possíveis cenários em mecânica quântica: o cenário de Schrödinger e o cenário de Heisenberg[10]. No cenário de Schrödinger (mais usual) a evolução temporal do sistema é carregada pelo operador de estado ρ (Eq.(3.81)). No cenário de Heisenberg a evolução temporal do sistema é carregada pelos observáveis (ver Eq.(3.85) abaixo).

Ambos cenários são equivalentes na descrição quanto-mecânica da evolução temporal do sistema e, em princípio, podem ser usados para resolver o mesmo problema (embora não possamos, jamais, misturá-los em uma mesma descrição). Dependendo do problema que queremos resolver, um dos cenários será preferível sobre o outro.

Analogamente ao desenvolvimento realizado no cenário de Schrödinger, no cenário de Heisenberg temos:

$$\frac{dR_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H_H(t), R_H(t)\right] + \left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_H, \tag{3.85}$$

lembrando sempre que $H_H = U^{\dagger}HU$. Note que, para um tratamento consistente, se no cenário de Schrödinger ρ "se move" pra frente no tempo, no cenário de Heisenberg os operadores R "se movem" para trás. Por isso o sinal "$-$" ou "$+$" nas equações (3.81) e (3.85), respectivamente.

A dependência temporal dos valores médios pode ser obtida nos dois cenários considerando-se:

$$\frac{d\langle R \rangle}{dt} = Tr\left\{\frac{\partial \rho}{\partial t}R + \rho\frac{\partial R}{\partial t}\right\}, \tag{3.86}$$

que leva aos dois cenários:

$$\frac{d\langle R \rangle}{dt} = Tr\left\{\frac{i}{\hbar}\rho(t)\left[H, R\right] + \rho(t)\,\frac{\partial R}{\partial t}\right\}, \tag{3.87}$$

[10] Preferimos utilizar "cenário" em vez de "representação" para não causar confusão com outras utilizações desta.

e

$$\frac{d\langle R\rangle}{dt}=Tr\left\{\frac{i}{\hbar}\rho_0\left[H,R_H(t)\right]+\rho_0\left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_H\right\}. \tag{3.88}$$

Para estados puros

$$\langle R\rangle=\langle\psi\left(t\right)\left|R\right|\psi\left(t\right)\rangle \tag{3.89}$$

ou

$$\langle R\rangle=\langle\psi_0\left|R_H\left(t\right)\right|\psi_0\rangle\,. \tag{3.90}$$

3.8 Simetrias e leis de conservação

Considere uma transformação unitária (ou seja, conduzida por um operador unitário), contínua e uniparamétrica:

$$U\left(s\right)=e^{isK}, \tag{3.91}$$

se o operador hamiltoniano que descreve o sistema é invariante perante essa transformação:

$$U\left(s\right)HU^{-1}\left(s\right)=H, \tag{3.92}$$

a multiplicação dos dois lados da equação por U à direita, leva a

$$\left[H,U\left(s\right)\right]=0. \tag{3.93}$$

Se s é infinitesimal, podemos escrever:

$$U\left(s\right)=\mathbf{1}+isK+O\left(s^2\right), \tag{3.94}$$

e temos que:

$$\left[H,U\right]=H\left[\mathbf{1}+isK\right]-\left[\mathbf{1}+isK\right]H=0. \tag{3.95}$$

Rearranjando os termos chegamos em:

$$\left[H,K\right]=0. \tag{3.96}$$

Da Eq.(3.87), temos

$$\frac{d\langle K\rangle}{dt}=Tr\left\{\frac{i}{\hbar}\rho\left(t\right)\left[H,K\right]+\rho\left(t\right)\frac{\partial K}{\partial t}\right\}. \tag{3.97}$$

Já demonstramos que o comutador é nulo. Se, adicionalmente, K não depende explicitamente do tempo, temos:

$$\frac{d\langle K\rangle}{dt}=0, \tag{3.98}$$

ou seja, $\langle K \rangle$ é constante de movimento.

Se o operador hamiltoniano for invariante perante uma transformação unitária e o gerador da transformação não depender explicitamente do tempo, então esse gerador é uma quantidade conservada do sistema e a transformação unitária é uma transformação de simetria. Esse é um resultado análogo ao teorema de Noether da mecânica clássica.

Com essa observação vemos que, de fato, $\mathbf{P}$ pode ser interpretado como momento linear, $\mathbf{J}$ como momento angular e H como energia, conforme já comentamos exaustivamente nesse capítulo. Se H for invariante a translações espaciais, então o momento linear é conservado; se H for invariante a rotações, então o momento angular é conservado; e se H for invariante a translações temporais, então a energia é conservada. Como na mecânica clássica.

3.9 Comentários sobre mecânica quântica relativística

Na construção que fizemos até aqui exigimos que as leis da mecânica quântica são invariantes perante à ação do grupo de Galileu. Isso é equivalente a dizer que as probabilidades são as mesmas em dois sistemas de referência diferentes se, e somente se, essas transformações de referenciais forem implementadas por operadores unitários ou anti-unitários (devido ao teorema de Wigner).

Uma outra forma de perceber esse cenário é notar que todos os geradores do grupo de Galileu comutam com H, o hamiltoniano. Conforme comentamos ele é o gerador das translações temporais e todos os demais geradores do grupo de Galileu comutam com ele. Isso é uma manifestação do caráter não-relativístico da teoria que construímos.

Suponha, então, que estejamos interessados em construir uma teoria quântica que seja invariante perante o grupo de Lorentz, o grupo que implementa as transformações de coordenadas que são estabelecidas pela relatividade restrita.

Sabemos que as transformações de Lorentz misturam componentes espaço-temporais e também misturam energia e momento (como podemos facilmente perceber na relação pra energia relativística). Essa mistura de componentes impede que os geradores do grupo de Lorentz comutem com H, uma diferença bastante notável para o caso clássico.

Esse é um problema a ser contornado e, portanto, não se pode estabelecer H e os demais geradores de forma “independente” mas, sim, temos que estabelecê-los todos de uma vez só.

Por conta dessas sutilezas a construção matematicamente rigorosa da mecânica quântica relativística é bem mais complexa e envolve o conhecimento do grupo de Lorentz (em vez do grupo de Galileu) e de suas estruturas (mais especificamente, envolve a representação do grupo de Lorentz).

Por outro lado é graças à teoria quântica relativística que podemos conhecer bastante coisa acerca da natureza como, por exemplo, o spin e a anti-matéria. A construção de uma equação relativística para o elétron, a chamada **equação de Dirac**, leva ao surgimento natural do spin 1/2 e do pósitron, que na teoria não relativística devem ser postulados. Para maiores detalhes sobre esses assuntos sugerimos consultar [18].

3.10 Comentário final

Até aqui construímos o maquinário um pouco abstrato que estrutura a mecânica quântica, fundamentado em conceitos de álgebra linear, de teoria das probabilidades, nos postulados da mecânica quântica e nas simetrias de Galileu. De agora em diante vamos começar a trazer aplicações mais concretas deste maquinário. Os quatro capítulos seguintes falam da representação de coordenadas (capítulo 4, que trabalha o espaço real e nos leva ao conceito mais conhecido de função de onda e suas aplicações), da representação de momentos (capítulo 5, que trabalha o espaço recíproco, importante em difração e em física de materiais), dos osciladores harmônicos (capítulo 6) e da física do momento angular (capítulo 7, que define os orbitais atômicos, trata de spin, dentre outros).

3.11 Exercícios

Exercício 3.1 *Prove as propriedades de multiplicação do grupo de espaço, equações* (3.11) *e* (3.12)*. Veja o apêndice B, e demonstre também a equação de inversa C.5, na notação das equações* (3.11) *e* (3.12)*.*

Exercício 3.2 *Seja A uma matriz quadrada cuja potência A^n existe $\forall n$. A exponencial dessa matriz é definida por:*

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}. \tag{3.99}$$

Se A é hermitiano com $A\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$, mostre que $e^A\,|\psi\rangle = e^\lambda\,|\psi\rangle$.

Exercício 3.3 *Prove o lema de Schur.*

Exercício 3.4 *Prove todas as relações de comutação dos geradores do grupo de Galileu, equações* (3.22), (3.23) *e* (3.24). *Dica: escolha dois operadores* K_μ *e* K_ν *e realize a operação unitária* $e^{i\epsilon K_\mu} e^{i\epsilon K_\nu} e^{-i\epsilon K_\mu} e^{-i\epsilon K_\nu}$ *segundo as transformações de Galileu. O resultado deve ser igualado ao comutador dos dois operadores escolhidos, a menos de um múltiplo da identidade. Para encontrar o número de múltiplos da identidade, utilie a identidade de Jacoby,* $[[K_\mu, K_\nu], K_\lambda] + [[K_\nu, K_\lambda], K_\mu] + [[K_\lambda, K_\mu], K_\nu] = 0$. *Este procedimento pode ser encontrado no livro do Ballentine.*

Exercício 3.5 *Prove que os operadores* $Q = x$ *e* $P = -i\hbar(\partial/\partial x)$ *formam uma representação irredutível (por simplicidade, demonstre em uma dimensão). Dica: ver Apêndice B. Note que* Q *e* P *estão escritos na representação de coordenadas, assunto do próximo capítulo.*

Exercício 3.6 *Considere uma partícula com spin angular interno* $\mathbf{S}$ *na ausência de campo externo (§3.5.2)). Demonstre que* $[\mathbf{S}, E_0] = 0$ *e que, consequentemente, o termo* E_0 *do hamiltoniano dependerá de* $\mathbf{S}$. *Utilizando as regras de comutação, mostre que as relações* $\mathbf{G} = M\mathbf{Q}$ *e* $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ *permanecem válidas.*

Exercício 3.7 *Prove que o operador de evolução temporal conduzido pelo gerador hamiltoniano* H *é unitário se* H *for hermitiano.*

Exercício 3.8 *Resolva os exercícios do livro do Ballentine [2].*