



Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira

TEOREMA DE EHRENFEST NO FORMALISMO PDTO

RAPHAEL NICOLAS DOMINGOS MAIA

Acarape-Ceará, 2024

RAPHAEL NICOLAS DOMINGOS MAIA

TEOREMA DE EHRENFEST NO FORMALISMO PDTO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Licenciatura em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de licenciado em Física.

Orientador: Prof.^a Dr João Philipe Macerdo Braga

Acarape-Ceará, 17 de Julho de 2024

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Maia, Raphael Nicolas Domingos.

D715t

Teorema de Ehrenfes no formalismo PDTO / Raphael Nicolas
Domingos Maia. - Redenção, 2024.
51f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto de Ciências Exatas e da
Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira, Redenção, 2024.

Orientador: Prof.^a Dr João Philipe Macerdo Braga.

1. Mecânica quântica. 2. Teorema de Ehrenfes. 3. Física. I.
Título

CE/UF/BSP

CDD 530.13

RAPHAEL NICOLAS DOMINGOS MAIA

TEOREMA DE EHRENFEST NO FORMALISMO PDTO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de licenciado em Física.

Data de aprovação:

17/07/2024

Banca Examinadora:

Prof. Dr. João Philipe Macerdo Braga

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira

Prof. Dr. Pedro Henrique Ferreira de oliveira

Universidade Federal do Ceará

Prof. Me. Antônio Isael Paz Pires

Universidade Federal do Ceará

*Dedico esse trabalho a toda a minha família,
e a todos que me ajudaram direta e indireta-
mente.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, quero agradecer a Deus por estar concluindo esta fase muito importante para minha vida profissional e pessoal. À minha família, pelo apoio durante todos esses anos. Aos meus professores que me guiaram durante este processo, principalmente ao Professor Dr. João Philipe Macedo Braga por ter me orientado nessa trabalho. Agradeço à FUNCAP, por financiar minha pesquisa e aos meus amigos e colegas que me ajudaram direta e indiretamente.

*Posso dizer seguramente que ninguém
entende a física quântica.*

Richard Feynman, *The Character of
Physical Law*

RESUMO

A física é dividida em dois grandes ramos: a física clássica, que abrange sub-ramos como a mecânica, a termodinâmica, o eletromagnetismo, a ondulatória e a ótica e a física moderna, que tem como sub-ramos a relatividade e a mecânica quântica. Entretanto, existem certas condições nas quais as equações da física moderna se assemelham às equações da física clássica. Essa condição é denominada limite clássico. Neste trabalho, focaremos no teorema de Ehrenfest, que desempenha o papel do limite clássico na mecânica quântica. Demonstraremos que, sob determinadas condições, os valores médios dos observáveis convergem para as grandezas clássicas. Para isso, utilizaremos uma equação que relaciona a taxa de variação dos valores médios em relação ao tempo. Aplicaremos essa equação ao momento linear em uma e três dimensões, bem como ao momento angular, cujo resultado converge para a segunda lei de Newton e para a equação do torque. Além disso, mostraremos que na força de Lorentz existe um limite de validade, que é um campo magnético uniforme. O spin é um caso particular, não possuindo um análogo clássico, mas sua taxa de variação temporal é refletida na equação do torque no eletromagnetismo. Por fim, abordaremos a mecânica quântica no formalismo PDT0. Para isso, será necessário modificar o espaço de Hilbert, acrescentando uma métrica que implicará em modificações no produto interno. neste contexto, a interpretação física dos resultados permanece inalterada. Aplicaremos o teorema de Ehrenfest, obtendo que o limite clássico do formalismo PDT0 recai na equação da segunda lei de Newton em um espaço curvo.

Palavras-chave: Limite Clássico. Teorema de Ehrenfest. Mecânica Quântica. Formalismo PDT0.

ABSTRACT

Physics is divided into two major branches: modern physics, which includes sub-branches such as relativity and quantum mechanics, and classical physics, which encompasses sub-branches like mechanics, thermodynamics, electromagnetism, wave theory, and optics. However, there are certain conditions under which the equations of modern physics resemble those of classical physics. This condition is called the classical limit. In this paper, we will focus on Ehrenfest's theorem, which plays the role of the classical limit in quantum mechanics. We will demonstrate that, under certain conditions, the expectation values of observables converge to classical quantities. To do this, we will use an equation that relates the rate of change of expectation values with respect to time. We will apply this equation to linear momentum in one and three dimensions, as well as to angular momentum, whose result converges to Newton's second law and the torque equation. Additionally, we will show that in the Lorentz force, there is a limit of validity, which is a uniform magnetic field. Spin is a particular case, having no classical analogue, but its rate of temporal variation is reflected in the torque equation in electromagnetism. Finally, we will address quantum mechanics in the PTDO formalism. For this, it will be necessary to modify Hilbert space by adding a metric that will imply modifications in the inner product. In this context, the physical interpretation of the results remains unchanged. We will apply Ehrenfest's theorem, obtaining that the classical limit of the PTDO formalism falls to Newton's second law equation in a curved space.

Keywords: Classic Limit. Ehrenfest's theorem. Quantum Mechanics. PDTO formalism.

LISTA DE FIGURAS

A.4 Ilustração de um função gaussiana... p. 52

A.4 Imagem representa a probabilidade de um único lançamento de um dado d6
... p.53

A.4 Imagem representa a probabilidade de dois dado d6 lançando simultaneamente
...p.53

A.4 Imagem representa a probabilidade de dez dado d6 lançando simultaneamente
... p.53

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
EDO	Equação Diferencial Ordinária
NBR	Norma Brasileira
PDTO	Operador Translação Dependente da Posição
TCC	Trabalho de Conclusão do Curso
TCL	Teorema Central do Limite

LISTA DE SÍMBOLOS

Γ	Letra Grega Gamma Maiúscula
λ	Letra Grega Lambda
Ψ	Letra Grega Psi Maiúscula
ψ	Letra Grega Psi Minuscula
δ	Letra Grega Delta
Σ	Letra Grega Sigma
∂	Símbolo de Derivada Parcial
\hbar	Constante de Planck reduzida
i	Número Imaginário
∞	Símbolo de Lemniscata
t	Tempo
∇	Operador Nabla
ϕ	Letra Grega Phi
γ	Letra Grega Gamma Minúscula
ϵ	Letra Grega Epsilo
μ	Letra Grega Mi
σ	Letra Grega Sigma Minúscula

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
2	POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	18
2.1	Espaço de Hilbert	20
2.2	Observáveis	21
3	TEOREMA DE EHRENFEST EM TRÊS DIMENSÕES	23
3.1	teorema de EHRENFEST para campos Elétrico e magnéticos.	26
3.2	teorema de Ehrenfest para o Spin	30
4	MECÂNICA QUÂNTICA NO FORMALISMO PDTO EM UMA DIMENSÃO	32
5	TEOREMA DE EHRENFEST GENERALIZADO	36
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	42
	REFERÊNCIAS	43
A	APÊNDICE	44
A.1	DINÂMICA CLÁSSICA EM UM ESPAÇO CURVO	44
A.2	Equação de Sturm-Liouville	48
A.3	Demostrações matemáticas	49
A.4	Teorema do limite central	51

1 INTRODUÇÃO

A física é dividida em dois grandes ramos: a física clássica e a física moderna. A física clássica inclui sub-ramos como a mecânica (Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana), a termodinâmica, o eletromagnetismo, a ótica e a acústica. As leis de Newton, as equações de Hamilton e as equações de Maxwell são os pilares fundamentais da física clássica. Por outro lado, a física moderna abrange sub-ramos como a mecânica relativística, desenvolvida principalmente por Albert Einstein, que se divide em dois ramos: a relatividade restrita e a relatividade geral. A mecânica quântica tem como objeto de estudo o mundo subatômico, e a equação que rege esse sub-ramo da física moderna é a equação de Schrödinger. Entretanto, sob certas condições, as equações da física moderna ficam idênticas às equações da física clássica. Na relatividade, o limite clássico ocorre em baixas velocidades (menores que dez por cento da velocidade da luz), onde os efeitos de dilatação temporal e contração espacial são desprezíveis, e os campos gravitacionais são fracos. Nessas condições, o espaço-tempo é aproximadamente plano, resultando na gravitação universal de Newton. Para a mecânica quântica (no formalismo de Schrödinger), o limite clássico ocorre nos valores médios dos observáveis, onde, em média, as partículas obedecem às leis da mecânica clássica.

O teorema de Ehrenfest desempenha o papel do limite clássico na mecânica quântica. Neste trabalho, utilizaremos o formalismo de Schrödinger em uma e três dimensões, utilizando coordenadas cartesianas. Além disso, mostraremos que a taxa média de variação temporal do spin converge para o torque eletromagnético. Em outras palavras, o torque tem o mesmo efeito nas rotações que a segunda lei de Newton tem no movimento linear. No caso do spin, podemos fazer uma analogia com uma espira, onde, na presença de um campo magnético, ocorre uma precessão. Iremos laborar no formalismo PDTTO (Operador Translação Dependente da Posição ou, em inglês, "Position Dependent Translation Operator"), no qual, nosso objetivo é demonstrar que o teorema de Ehrenfest estabelece o limite clássico da teoria quântica. No entanto, para isso, vamos ter que fazer algumas considerações.

No caso deste trabalho, a modificação será no operador de translação, pois o espaço deixa de ser aditivo. Dito isso, para que os operadores continuem sendo hermitianos, temos que modificar o espaço de Hilbert, onde David J. Griffiths define como "O Conjunto de todas as funções de quadrado-integráveis, em um intervalo específico, constitui um espaço vetorial" (GRIFFITHS, 2011). Em outras palavras, o espaço de Hilbert corresponde ao espaço onde as funções de onda existem. Para chegar ao nosso objetivo iremos fazer uma modificação para que o espaço de Hilbert tenha uma dependência da métrica. O objetivo é demonstrar que quando temos uma métrica, o valor médio dos observáveis se

assemelha à segunda lei de Newton para um espaço curvo.

A partir disso, mostraremos que, em campos magnéticos e elétricos, existe um limite de validade para o teorema de Ehrenfest. A equação da força de Lorentz é satisfeita apenas quando o campo magnético é uniforme, pois, no caso de campos não uniformes, além da complexidade das soluções da força de Lorentz, a aplicação do teorema de Ehrenfest teria uma solução complexa.

2 POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Em mecânica clássica, podemos realizar uma descrição do movimento ao conhecer as forças que atuam no sistema, juntamente com as condições iniciais, que consistem na posição (r_0) e na velocidade (v_0). COHEN (1977) define três condições para que um sistema físico tenha sua trajetória bem definida:

1. O estado do sistema em um tempo fixo t_0 é definido especificando N coordenadas generalizadas $q_i(t_0)$ e seus N momentos conjugados $p_i(t_0)$
2. o valor, num determinado momento, das diversas grandezas físicas é completamente determinado quando o estado do sistema neste momento é conhecido: conhecer o estado do sistema pode-se prever com certeza o resultado de qualquer medição realizada no tempo t_0
3. a evolução temporal do estado do sistema é dada pelas equações de Hamilton-Jacobi. Como estas são equações diferenciais de primeira ordem, sua solução $[q_i(t), p_i(t)]$ é única se o valor dessas funções em um determinado momento t_0 é fixo, $[q_i(t_0), p_i(t_0)]$. O estado do sistema é conhecido para sempre se seu estado inicial for conhecido.

Em outras palavras, a mecânica clássica é uma física determinista; diante das condições mencionadas, consegue prever os resultados com total certeza. Isso difere da mecânica quântica, que também é determinística, mas a diferença reside no fato de que os resultados de suas previsões são expressos em termos de probabilidades.

A mecânica quântica possui quatro postulados, os quais são princípios essenciais para a teoria. O primeiro postulado, definido por COHEN, como "Em um tempo fixo t_0 , o estado de um sistema físico é definido ao especificar um ket $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente ao espaço de estados ϵ ." (COHEN-TANNOUJDI B. DIU, 1977) esse postulado é a essência do princípio da superposição, que nos permite expressar as soluções como uma combinação linear.

O segundo postulado tem como principal função mensurar as grandezas físicas ou operadores, que, segundo (COHEN-TANNOUJDI B. DIU, 1977) "Toda quantidade física mensurável A é descrita por um operador \hat{A} atuando em ϵ ; este operador é um observável." Em outras palavras, para que uma grandeza tenha valores mensuráveis, os valores atribuídos por ela devem ser reais. Se isso for verdade, essa grandeza é considerada observável.

O terceiro postulado indica uma equação de autovalor e autovetor, onde temos um operador atuando em um vetor tendo como resultado um número multiplicando o vetor, no qual Cohen define o terceiro postulado da seguinte forma "o único resultado possível da medição de uma quantidade física A é um dos autovalores do observável correspondente a "(COHEN-TANNOUDJI B. DIU, 1977). Matematicamente, temos a seguinte relação.

$$\hat{A}_n|\Psi\rangle = a_n|\Psi\rangle \quad (1)$$

Desta forma, na mecânica quântica os observáveis respeita a equação de autovalor e autovetor descrito pela álgebra linear.

O quarto postulado é enunciado em duas partes: o caso discreto e o caso contínuo. Primeiramente vamos trabalhar com o caso contínuo, onde Cohen define como sendo:

"Quando a quantidade física a é medida em um sistema i , o estado normalizado ψ , a probabilidade $dp(a)$ de obter um resultado incluído entre a e $a+da$ é igual a $dp(a) = |\langle v_a|\psi\rangle|^2 da$, onde $|v_a\rangle$ é o autovetor correspondente ao autovalor a do observável A "(COHEN-TANNOUDJI B. DIU, 1977).

Este postulado está associado à probabilidade, conforme Sakurai defini da seguinte maneira "o quadrado do produto interno $|\langle a|a\rangle|^2$ é um dos postulados fundamentais da mecânica quântica, não podendo, assim, ser provado"(SAKURAI, 1994). Dessa maneira, o módulo ao quadrado da função fornece informações sobre as probabilidades. Como é um caso contínuo, podemos integrar todo o espaço; assim, a probabilidade de encontrarmos a partícula é de 100%, logo temos:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi dx = 1 \quad (2)$$

Agora, para o caso discreto, Cohen descreve o quarto postulado da seguinte forma:

Quando a quantidade física A é medida em um sistema i , o estado normalizado ψ , a probabilidade $p(a_n)$ de obter o autovalor a_n do observável correspondente A é $p(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$ onde g_n é o grau de degenerescência de a_n e $[\langle u_n^i\rangle]$ ($i = 1, 2, \dots, g_n$) é o conjunto ortogonal de vetores que forma uma base no autosubespaço ϵ_n associado ao autovalor a_n de A . (COHEN-TANNOUDJI B. DIU, 1977)

O pensamento é o mesmo do caso anterior, a diferença é que, no caso discreto, temos os coeficientes da expansão e são esses coeficientes que medem a probabilidade. Então, temos a seguinte relação matemática, logo:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = 1. \quad (3)$$

Assim como no caso contínuo onde se integramos todo o espaço temos uma probabilidade de 100%, ou seja, a partícula deve estar em algum lugar no espaço, esse pensamento se aplica no caso discreto, pois agora a partícula tem lugares proibidos, mas se somar todas os locais permitidos teremos uma probabilidade 100% de encontrar a partícula.

2.1 ESPAÇO DE HILBERT

O Espaço de Hilbert é um dos conceitos mais fundamentais da mecânica quântica, pois é uma generalização do espaço euclidiano, como conhecemos na mecânica clássica, onde as grandezas podem ser vetoriais ou escalares. No entanto, na mecânica quântica, nossas grandezas são expressas em termos de funções complexas. Do ponto de vista da álgebra linear, as funções podem ser vistas como vetores. Assim como as grandezas na física clássica residem no espaço euclidiano, as funções de onda residem no espaço de Hilbert, conforme enfatizado por Griffiths "funções de onda existem no espaço de Hilbert" (GRIFFITHS, 2011). Dito isso, é importante definir o produto interno como o produto duas funções de onda que informa a probabilidade de encontrar a partícula no espaço, vale destacar que, se o produto interno possuir uma geometria euclidiana, podemos defini-lo da seguinte forma:

$$\vec{v} \cdot \vec{u} = v_1 u_1 + v_2 u_2 + \dots + v_n u_n. \quad (4)$$

Também podemos escreve-la em termos de um somatório:

$$\vec{v} \cdot \vec{u} = \sum \sum v_i u_j. \quad (5)$$

Na mecânica quântica, especificamente no contexto da função de onda em um espectro contínuo, é necessário realizar a soma de todos os elementos infinitesimais de uma função. Portanto, procedemos à integração sobre todo o espaço do produto das funções. Sendo assim, podemos expressar o produto interno da seguinte maneira:

$$\langle f|g \rangle = \int_a^b f(x)^* g(x) dx. \quad (6)$$

Porém, a função de onda Ψ que traz todas as informações do sistema não possui sentido físico, pois o mesmo pertence ao mundo dos números complexos como podemos ver pela equação Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle. \quad (7)$$

É possível identificar que no lado esquerdo temos uma função que envolve o número complexo "i", enquanto no lado direito não há presença de números complexos. Assim, o espaço de Hilbert é caracterizado como um espaço vetorial complexo. No entanto,

para que a função de onda tenha significado físico, ela deve fornecer valores reais. Nesse contexto, podemos empregar a interpretação estatística de Born, que nos decorre do quarto postulado que discutimos anteriormente, ou seja, o produto interno entre as funções de onda tem que se limitado, ou seja,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle < \infty. \quad (8)$$

Ademais, é necessário que as funções de onda sejam ortogonais e caso estejam normalizadas¹, podemos usar a seguinte relação:

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (9)$$

Onde δ_{ij} é chamado de delta de Kronecker, que no caso assume dois valores, se $i = j$, temos $\delta_{ij} = 1$ mas se $i \neq j$ temos que $\delta_{ij} = 0$

2.2 OBSERVÁVEIS

No espaço de Hilbert, estão presentes os observáveis, que podem ser definidos como propriedades ou grandezas físicas que são passíveis de medição, ou seja, são mensuráveis. Griffiths define isso de maneira elegante ao afirmar: "O valor esperado de um observável $Q(x, p)$ pode ser expresso de forma muito elegante na seguinte representação do produto interno"(GRIFFITHS, 2011). Isso significa que o produto interno expressa o valor esperado do observável, proporcionando uma representação eficaz desse conceito no contexto do espaço de Hilbert. Sabendo disso podemos escrever o produto interno da seguinte forma:

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle. \quad (10)$$

Uma propriedade é que o resultado da medida deve ser um valor real. Dessa forma, temos que:

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^*. \quad (11)$$

Essa condição é válida para quaisquer funções de onda que satisfaçam a equação de Schrödinger. Portanto, podemos escrever a seguinte igualdade para os observáveis, desde que \hat{Q} seja hermitiano:

$$\langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle \quad (12)$$

Podemos classificar os operadores², onde os observáveis são definidos como operadores hermitianos, e todas as grandezas físicas devem ser hermitianas. Isso ocorre porque

¹ A normalização refere-se ao processo de ajustar valores medidos em diferentes escalas para uma escala comum, geralmente uma escala entre 0 e 1.

² operadores é um ente matemático que estabelece uma relação funcional entre dois espaços vetoriais

elas precisam ter valores reais. Dessa forma, podemos expressar a seguinte relação de forma mais geral:

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle \quad (13)$$

Como em física queremos muitas vezes medir a taxa de variação em relação ao tempo, podemos então aplicarmos isso no valor esperado do observável, o que nos resultará na seguinte relação.

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi|\hat{Q}\Psi\rangle. \quad (14)$$

Vamos aplicar a regra do produto na equação (14), assim obteremos:

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t}|\hat{Q}\Psi\rangle + \langle \Psi|\frac{\partial}{\partial t}(\hat{Q}\Psi)\rangle \quad (15)$$

Reaplicando a regra do produto no segundo termo da equação e separando em dois pela regra da soma, teremos:

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t}|\hat{Q}\Psi\rangle + \langle \Psi|\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\Psi\rangle + \langle \Psi|\hat{Q}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\rangle. \quad (16)$$

Agora substituindo a equação (7) em (16), temos que:

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi|\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle + \langle \Psi|\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\Psi\rangle \quad (17)$$

como \hat{H} é o hamiltoniano e representa um operador hermitiano, podemos usar a seguinte relação:

$$\langle \hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle \Psi|\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle. \quad (18)$$

Podemos assim escrever em termos do comutador³, sendo assim a equação (17) fica da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}]\rangle + \langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\rangle \quad (19)$$

A equação (19) é chamada de equação de Heisenberg do movimento para um operador \hat{Q} em termos de seu valor esperado $\langle Q\rangle$. Vale ressaltar, que o limite de validade desta equação é que o hamiltoniano e operador \hat{Q} devem ser hermitiano.

³ o comutador é definido da desta forma $[a, b] = ab - ba$

3 TEOREMA DE EHRENFEST EM TRÊS DIMENSÕES

Sabemos que o teorema de Ehrenfest estabelece o limite clássico da teoria quântica, para ilustrar essa ideia vamos usar os conceitos do TLC, que mostra como os valores médios tendem a um valor central, o que tem uma implicação interessante. Valores aleatórios ou de natureza probabilística têm uma tendência para valores determinísticos, levando o desvio padrão ¹, a se aproximar de zero². Isso tem como consequência a transição de uma grandeza probabilística para uma determinística.

A aplicação do TCL na mecânica quântica de Schrödinger na qual envolve um tratamento probabilístico, faz com o que os valores médios convirjam para o determinismo, ou seja, na física Newtoniana. No mundo clássico onde lidamos com uma grande quantidade de átomos, o valor médio dos observáveis deve obedecer às equações da mecânica.

Agora, vamos calcular a taxa de variação no tempo do valor esperado do momento linear e verificar se o resultado coincide com a segunda Lei de Newton em uma dimensão, que é expressada pela seguinte equação:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (20)$$

Em três dimensões temos a seguinte equação:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla V \quad (21)$$

Para calcular a taxa de variação do valor esperado do momento linear utilizaremos a equação (19)

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} \right\rangle. \quad (22)$$

Vale lembrar que o hamiltoniano é dado pela seguinte equação:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V. \quad (23)$$

Substituindo a equação (23) em (22), obteremos:

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V, \hat{p} \right] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} \right\rangle \quad (24)$$

Como o momento não depende explicitamente do tempo, teremos como resultado o valor nulo, com isso utilizaremos a propriedade da soma de um comutador $[a + b, c] =$

¹ desvio padrão é dado por uma medida de dispersão do conjunto, ou seja, uma medida que indica quão uniformes são os dados do conjunto

² Apenas quando temos muitas medidas

$[a, c] + [b, c]$, portanto, teremos:

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \frac{i}{\hbar}(\langle [\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}] \rangle + \langle [V, \hat{p}] \rangle) \quad (25)$$

Como o produto escalar do momento com ele mesmo (p^2) comuta com suas componentes em geral, isso também será válido em uma dimensão. Dessa forma, podemos analisar para uma dimensão, pois o resultado será o mesmo para as outras. Vamos começar com a coordenada x. Podemos afirmar que a primeira parte da equação (25) fica da seguinte forma $\langle [\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}] \rangle = 0$ conseqüentemente, teremos o seguinte resultado.:

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [V, \hat{p}] \rangle \quad (26)$$

pelo apêndice A.4 o comutador de uma função qualquer com o operador momento tem como resultado $[f(x), p] = i\hbar\frac{df}{dx}$, dessa maneira, nossa equação ficará':

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle \quad (27)$$

Como podemos perceber, os valores médios das grandezas quânticas se comporta de maneira clássica. Outra forma de analisar esse resultado é observar como as partículas se comportam quando estão em grande número. O desvio padrão tende a zero para os valores esperados na mecânica clássica, garantido pelo TLC. Podemos expandir esse resultado para três dimensões, trabalhando com os eixos x, y e z, de maneira análoga ao que fizemos para uma dimensão, vamos apenas adicionar as outras dimensões. Dessa forma, a equação terá como resultado:

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -(\langle \frac{\partial V}{\partial x} \hat{x} \rangle + \langle \frac{\partial V}{\partial y} \hat{y} \rangle + \langle \frac{\partial V}{\partial z} \hat{z} \rangle) \quad (28)$$

assim chegamos na seguinte equação:

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle \quad (29)$$

Podemos ver que as equações (27) e (29) são idênticas a segunda lei de Newton para um e em três dimensão.

Agora analisaremos uma particular submetida em potencial do tipo $V(\vec{R})$, vamos demonstrar que taxa de variação temporal no valor médio do momento angular orbital \vec{L} converge para o torque (segunda lei de Newton para rotações):

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{L} \rangle = \langle \vec{N} \rangle \quad (30)$$

onde $\vec{N} = \vec{r} \times (-\nabla V)$, para resolver a equação (30), vamos usar a equação (19) novamente, assim ficamos com:

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{L} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{L}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \rangle \quad (31)$$

Como o \vec{L} não depende do tempo de forma direta, o segundo termo da equação (31) é nula, e vamos trabalhar primeiro com o eixo x, por fim vamos substituir (23) em (31), assim ficamos com:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\frac{\hat{P}^2}{2m} + V, L_x] \rangle \quad (32)$$

Reaplicando a propriedade da soma no comutador, assim temos:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}(\langle \frac{1}{2m}[\hat{P}^2, L_x] \rangle + \langle [V, L_x] \rangle) \quad (33)$$

Como o $L_x = yp_z - zp_y$, então a equação (33) ficará da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}(\langle \frac{1}{2m}[\hat{P}^2, yp_z - zp_y] \rangle + \langle [V, yp_z - zp_y] \rangle) \quad (34)$$

Como o módulo do momento comuta com as suas componentes a equação (16) pode ser escrita de tal maneira:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [V, yp_z - zp_y] \rangle \quad (35)$$

Novamente podemos dividi em duas equação, logo, teremos:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}(\langle [V, yp_z] \rangle - \langle [V, zp_y] \rangle) \quad (36)$$

Como y e z são números, podemos usar a mesma relação da equação (26) de modo que:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = \frac{i}{\hbar}(yi\hbar\langle \frac{\partial V}{\partial z} \rangle - zi\hbar\langle \frac{\partial V}{\partial y} \rangle) \quad (37)$$

A equação (37) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt}\langle L_x \rangle = -\langle [\vec{r} \times \nabla V]_x \rangle \quad (38)$$

é possível fazer as outras componentes de forma análoga e chegaremos na seguinte relação:

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{L} \rangle = -\langle [(\vec{r} \times \vec{\nabla} V)] \rangle \quad (39)$$

O resultado que chegamos nas equações (29) e (39) são os valores médios dos observáveis, os quais obedecem as equações clássicas.

3.1 TEOREMA DE EHRENFEST PARA CAMPOS ELÉTRICO E MAGNÉTICOS.

O objetivo dessa secção é mostrar que o valor médio de uma campo elétrico e magnéticos converge para a força de lorentz, que é descrita pela seguinte equação:

$$\vec{F} = q(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E}) \quad (40)$$

Para isso, iremos usar o hamiltoniano, que é regido pela equação abaixo:

$$H = \frac{1}{2m}(P - qA)^2 + q\phi \quad (41)$$

Onde temos que A é o potencial vetor, que tem a seguinte relação com o campo magnético:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (42)$$

Desta forma, vamos aplicar a equação a (19) no vetor posição:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \langle \vec{v} \rangle \quad (43)$$

Assim ficamos com:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \vec{r}] \rangle + \langle \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \rangle \quad (44)$$

Como \vec{r} não depende do tempo, logo a segunda parte é nula, com isso temos apenas o comutador para resolver:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \vec{r}] \rangle \quad (45)$$

Vamos substituir o hamiltoniano na equação acima, posteriormente desenvolver o produto notável e aplicar a regra da soma do comutador na equação anterior:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \frac{1}{2m} ([\vec{p}^2, \vec{r}] - q[\vec{p}\vec{A}, \vec{r}] - q[\vec{A}\vec{p}, \vec{r}] + [q^2\vec{A}, \vec{r}]) + [q\phi, x] \rangle \quad (46)$$

Como q , \vec{A} e \vec{r} são números reais, os dois últimos termos são nulos, assim resta os primeiros termos para desenvolver, usando em apenas uma dimensão:

$$[p^2, x] = [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, x] \quad (47)$$

Utilizando o apêndice A.4, temos a seguinte propriedade $[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}$, ficando assim:

$$[p^2, x] = [p_x^2, x] \quad (48)$$

Usando a propriedade do apêndice A.4 ficaremos com:

$$[p_x, x]p_x + p_x[p_x, x] = -i\hbar p_x - p_x i\hbar = -2i\hbar p_x \quad (49)$$

Desenvolvendo o segundo termo e aplicando o produto interno obteremos:

$$[\vec{p}\vec{A}, x] = [p_x A_x + p_y A_y + p_z A_z, x] \quad (50)$$

Utilizando a comutatividade do momento e da posição restará apenas o primeiro termo:

$$[\vec{p}\vec{A}, x] = [p_x A_x, x] \quad (51)$$

Fazendo uso da seguinte propriedade do apêndice A.4

$$[\vec{p}\vec{A}, x] = [p_x, x]A_x + p_x[x, A_x] \quad (52)$$

Como A_x é um potencial, logo é um valor real, com isso a equação acima pode ser escrita de tal maneira:

$$[\vec{p}\vec{A}, x] = -i\hbar A_x \quad (53)$$

Assim, de forma análoga a anterior temos que o ultimo termo ficará:

$$[\vec{A}\vec{p}, x] = -i\hbar A_x \quad (54)$$

De tal modo, ficamos com o comutador de $[H, x]$ que é dada por:

$$[H, x] = \frac{-i\hbar}{m}(p_x - qA_x) \quad (55)$$

Analogamente para três dimensões ficamos com:

$$[H, \vec{r}] = \frac{-i\hbar}{m}(\vec{p} - q\vec{A}) \quad (56)$$

Substituindo a equação (56) na (45), temos que o valor médio da velocidade é:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{m}(\langle \vec{p} - q\vec{A} \rangle) \quad (57)$$

Com isso podemos calcular a força de Lorentz, uma vez que a força resultante é dada por:

$$\vec{F}_r = m \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (58)$$

Substituindo a equação (57) na equação (19), ficamos:

$$\frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \frac{1}{m}(\langle \vec{p} - q\vec{A} \rangle)] + \langle \frac{\partial}{\partial t} (\frac{1}{m}(\langle \vec{p} - q\vec{A} \rangle)) \rangle \quad (59)$$

Calculando a segunda parte da equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\frac{1}{m}(\langle \vec{p} - q\vec{A} \rangle)) = \frac{q}{m} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (60)$$

Isso porque o potencial vetor depende do explicitamente do tempo, note que para segunda parte temos:

$$[H, \vec{v}] = \frac{m}{2}[v^2, \vec{v}] + q[\phi, v] \quad (61)$$

Como $\vec{p} = m\vec{v}$ então a equação acima pode se escrita da seguinte maneira:

$$\frac{m}{2}[v^2, \vec{v}] + \frac{q}{m}[\phi, \vec{p}] \quad (62)$$

Pelo apêndice A.4, a segunda parte da equação resultará em:

$$\frac{q}{m}[\phi, \vec{p}] = i\hbar\vec{\nabla}\phi \quad (63)$$

Resolvendo a primeira parte, em seguida aplicando o produto notável e a regra da soma no comutador, ficaremos:

$$[\vec{v}^2, \vec{v}] = [v_x^2, \vec{v}] + [v_y^2, \vec{v}] + [v_z^2, \vec{v}] \quad (64)$$

Primeiro, resolvendo na coordenada x , como as componentes da velocidade comutam entre si, temos:

$$[v_x^2, v_x] = 0 \quad (65)$$

Desenvolvendo as demais coordenadas:

$$[v_y^2, v_x] = [v_y, v_x]v_y + v_y[v_y, v_x] \quad (66)$$

Substituindo o valor de v na equação acima:

$$[v_y, v_x] = \frac{1}{m^2}[(p_y - qA_y), (p_x - qA_x)] \quad (67)$$

Manipulando a equação (67) chegamos no seguinte resultado:

$$[v_y, v_x] = \frac{q}{m^2}([A_y, p_x] + [p_y, A_x]) \quad (68)$$

Dessa forma, temos que:

$$[v_y, v_x] = \frac{q}{m^2}(i\hbar\frac{\partial A_y}{\partial x} - i\hbar\frac{\partial A_x}{\partial y}) = \frac{qi\hbar}{m^2}(\vec{\nabla} \times \vec{A})_z \quad (69)$$

Como sabemos $(\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{B}$, então a equação (69) ficará:

$$[v_y, v_x] = \frac{qi\hbar}{m^2}B_z \quad (70)$$

Para a coordenada v_z , o procedimento é o mesmo, então temos:

$$[v_z, v_x] = \frac{qi\hbar}{m^2}B_y \quad (71)$$

Assim a equação (64) fica da seguinte forma:

$$[\vec{v}^2, \vec{v}] = \frac{qi\hbar}{m^2}(-v_yB_z - B_zv_y + v_zB_y + B_yv_z) \quad (72)$$

Como podemos ver, isso é um produto vetorial, logo:

$$[\vec{v}^2, \vec{v}] = \frac{qi\hbar}{m^2} [-(\vec{v} \times \vec{B})_x + (\vec{B} \times \vec{v})_x] \quad (73)$$

No caso mais geral, em três dimensões o processo é análogo, desta forma, ficamos:

$$[\vec{v}^2, \vec{v}] = \frac{qi\hbar}{m^2} [-(\vec{v} \times \vec{B})_x + (\vec{B} \times \vec{v})_x] \quad (74)$$

Vamos substituir a (60), (63) e (74) na equação (59) e vamos multiplicar pela massa em ambos os lados o que resultará:

$$m \frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt} = \frac{q}{2} \langle [(\vec{v} \times \vec{B}) - (\vec{B} \times \vec{v})] \rangle + q \langle -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \rangle \quad (75)$$

Como $\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$, dessa maneira a equação acima ficará:

$$m \frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt} = \frac{q}{2} \langle [(\vec{v} \times \vec{B}) - (\vec{B} \times \vec{v})] \rangle + q \langle \vec{E} \rangle \quad (76)$$

Como podemos ver, o teorema de Ehrenfest não é validado para um campo magnético qualquer, mas apenas quando esse campo é uniforme. Podemos então utilizar a propriedade do produto vetorial, onde $(\vec{v} \times \vec{B}) = -(\vec{B} \times \vec{v})$. Sendo assim, a equação anterior fica da seguinte maneira:

$$m \frac{d\langle \vec{v} \rangle}{dt} = q \left(\sum_{i=1}^3 \langle v_i \rangle \hat{e}_i \times \vec{B} \right) + q \langle \vec{E} \rangle \quad (77)$$

A equação da força de Lorentz é satisfeita apenas quando o campo magnético é uniforme. No caso de campos não uniformes, além da complexidade das soluções da força de Lorentz, ocorrerá uma discrepância entre os resultados dos valores médios e a força de Lorentz clássica.

3.2 TEOREMA DE EHRENFEST PARA O SPIN

A grandeza clássica tem o seu análogo quântico, como vimos anteriormente. O momento linear clássico é escrito da seguinte forma, $\vec{p} = m\vec{v}$ enquanto o seu análogo quântico é expresso como $\vec{p} = -i\hbar\nabla$. No entanto, algumas grandezas só existem no mundo microscópico, como é o caso do spin, que foi observado pela primeira vez em 1921 pelos físicos O. Stern e W. Gerlach. O spin é considerado o quarto grau de liberdade de uma partícula, mas como o hamiltoniano não é escrito em termos de coordenadas p q 's não possui um análogo clássico. Porém, sua taxa de variação do seu valor esperado tem um resultado importante, o qual vamos mostrar agora.

Para isso iremos escrever o hamiltoniano para campos magnéticos, diante analisaremos a sua variação temporal, para isso usaremos a equação (19), com $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, no qual $\vec{\mu}$ é o momento dipolo magnético, que é proporcional com ao Spin, dessa forma, podemos descrever da seguinte forma:

$$\hat{H} = -\gamma\vec{S} \cdot \vec{B} \quad (78)$$

Substituindo a equação (78) na equação (19) temos:

$$\frac{d\langle\vec{S}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[-\gamma\vec{S} \cdot \vec{B}, \vec{S}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\vec{S}}{\partial t}\right\rangle \quad (79)$$

Como o spin não depende do tempo, logo, o segundo termo é nulo, como γ é um numero, chamado de Razão giromagnética³ podemos colocar para fora do comutado. Em seguida, vamos usar a seguinte propriedade $-[A, B] = [B, A]$, por fim, aplicando o produto interno e a propriedade da soma, podemos reescrever a equação acima da seguinte forma:

$$\frac{d\langle\vec{S}\rangle}{dt} = \frac{i\gamma}{\hbar}\langle[\vec{S}, S_x B_x] + [\vec{S}, S_y B_y] + [\vec{S}, S_z B_z]\rangle \quad (80)$$

Iremos começar pela coordenada z , ficamos com $[S_z, S_x B_x] + [S_z, S_y B_y]$, isso porque $[S_i, S_j] = i\hbar S_{\epsilon(i,j,k)}$, ϵ é chamando de simbolo de Levi-Cita, usando a seguinte propriedade de comutação $[AB, C] = [A, B]C + B[C, A]$, teremos como resultado:

$$[S_z, S_x B_x] = [S_z, S_x]B_x + S_x[B_x, S_z] \quad (81)$$

Pelo apêndice A.4 o comutador de $[S_i, B_j] = 0$, logo:

$$[S_z, S_x B_x] = (i\hbar S_y B_x)_z \quad (82)$$

Resolvendo o segundo termo, temos que:

$$[S_z, S_y B_y] = [S_z, S_y]B_y + S_y[B_y, S_z] \quad (83)$$

³ é uma constante para cada núcleo e determina a dependência da energia com o campo magnético

Resolvendo a equação acima ficamos com a seguinte:

$$[S_z, S_y B_y] = -(i\hbar S_x B_y)_z \quad (84)$$

Com isso, podemos escrever o comutador da equação (80), para S_z , da seguinte forma:

$$[S_z, \vec{S} \cdot \vec{B}] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B})_z \quad (85)$$

Analogamente para as outras coordenadas, podemos escrever de forma mais genérica a seguinte relação:

$$[\vec{S}, \vec{S} \cdot \vec{B}] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}) \quad (86)$$

Substituindo a equação (86) na (80) ficamos:

$$\frac{d\langle \vec{S} \rangle}{dt} = \gamma \langle (\vec{S} \times \vec{B}) \rangle \quad (87)$$

Podemos ainda escrever a equação anterior como:

$$\frac{d\langle \vec{S} \rangle}{dt} = \langle (\vec{\mu} \times \vec{B}) \rangle \quad (88)$$

A equação (88) é semelhante à equação do torque no eletromagnetismo, permitindo uma analogia com a taxa de variação temporal do valor esperado do spin. Isso pode ser visto na equação abaixo:

$$\tau = (\vec{\mu} \times \vec{B}) \quad (89)$$

Conforme mencionado anteriormente, o spin em si não possui um análogo clássico, pois o análogo clássico aparece o termo do spin com vemos na equação (87), mas sua taxa de variação temporal é bastante semelhante a grandeza do torque no eletromagnetismo. Podemos pensar numa espira submetida a um campo magnético, onde devido ao campo e momento de dipolo magnético essa espira vai tender a precessionar, isso é análogo ao que acontece com o spin, pois o mesmo tem a tendência a se alinhar com o campo magnético.

4 MECÂNICA QUÂNTICA NO FORMALISMO PDTO EM UMA DIMENSÃO

O objetivo deste capítulo é modificar o espaço de Hilbert, conforme apresentado por (FILHO M. P. ALMEIDA, 2011) e generalizado por (BRAGA, 2015). Foi demonstrado que os postulados definidos no capítulo 2 continuam válidos. No entanto, iremos modificar o espaço, pois até agora trabalhamos no espaço euclidiano, onde a distância entre dois pontos pode ser expressa da seguinte forma:

$$ds^2 = \sum_i \sum_j dq_i dq_j \quad (90)$$

Como os eixos de coordenadas são comumente ¹ ortogonais entre si, podemos adicionar a delta de kronecker:

$$ds^2 = \sum_i \sum_j dq_i dq_j \delta_{ij} \quad (91)$$

Com essa condição e trabalhando com um espaço tridimensional, ficamos com:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (92)$$

Podemos dizer que no espaço euclidiano, no caso particular de uma dimensão, a equação acima terá o seguinte formato:

$$ds^2 = dx^2 \quad (93)$$

Primeiramente, vamos definir o espaço de Hilbert em mecânica quântica, para em seguida definirmos nosso operador de translação. Suponhamos a seguinte condição: uma partícula bem definida na posição x . Então, faremos com que ela se desloque para $x + dx$. Sakurai define isso elegantemente da seguinte maneira: 'Consideremos uma operação que mude este estado para outro bem localizado, quer seja $x' + dx'$, com todo o resto (por exemplo, a direção do spin) intocado' (SAKURAI, 1994). Dessa forma, podemos dizer que ao realizar uma translação, não alteramos o estado das outras informações da partícula. Portanto, podemos escrever esse operador da seguinte forma:

$$J(dx)|x\rangle = |x + dx\rangle \quad (94)$$

Reaplicando o operador translação, onde sairemos da posição $x + dx$ para outra posição bem definida, como veremos abaixo:

$$J(dx')J(dx)|x\rangle = |x + dx + dx'\rangle \quad (95)$$

¹ Isso é critério do leitor, pois pode tentar resolver problemas com um sistema de coordenadas não ortogonais

As equações acima significam que fizemos a partícula dar "dois passos". Agora, vamos dar o próximo passo. Iremos fazer com que a partícula dê um salto, ou seja, uma única translação. Assim:

$$J(dx + dx')|x\rangle = |x + dx + dx'\rangle \quad (96)$$

Note que duas translações curtas, partindo de $|x\rangle$ até $|x + dx + dx'\rangle$, equivalem a uma única translação de $|x\rangle$ até $|x + dx + dx'\rangle$. Isso significa que o espaço é aditivo. Agora iremos modificar o espaço, adicionando uma métrica, e assim transitando para um espaço curvo. Portanto, a distância entre as partículas será modificada, e teremos:

$$ds^2 = \sum_i \sum_j g_{ij} dq_i dq_j \quad (97)$$

Novamente vamos partir da ideia de que as coordenadas e a métrica² sejam ortogonais. Partindo disso, iremos acrescentar um delta de Kronecker e teremos :

$$ds^2 = \sum_i \sum_j g_{ij} dq_i dq_j \delta_{ij} \quad (98)$$

Todavia, podemos expandir o somatório para um caso tridimensional.

$$ds^2 = g_x dx^2 + g_y dy^2 + g_z dz^2 \quad (99)$$

Para o âmbito deste trabalho iremos trabalhar com o formalismo unidimensional, como isso a equação acima resultará:

$$ds^2 = g_x dx^2 \quad (100)$$

Com isso, o espaço que antes era homogêneo, pois $ds^2 = dx^2$, significando que independentemente da posição, as propriedades do espaço permaneciam as mesmas. Com a adição da curvatura, isso deixa de ser verdade, devido à métrica $g(x)$ que modifica o espaço. A primeira operação que iremos realizar é com o operador de translação. Para isso, partimos de uma posição bem definida $|x\rangle$, onde nosso operador será representado como T_g , conforme definido por (BRAGA, 2015). Com isso, temos:

$$T_g d(x)|x\rangle = |x + g(x)^{-1/2} dx\rangle \quad (101)$$

Como podemos ver, ao darmos uma translação, temos que levar em consideração a métrica. Agora, vamos aplicar a translação novamente. Com isso, teremos que levar em consideração a métrica no ponto $x + g(x)^{-1/2}$. Assim, obtemos a seguinte equação:

$$T_g(dx')T_g(dx)|x\rangle = |x + g(x)^{-1/2} dx + g(x + g(x)^{-1/2})^{-1/2} dx'\rangle \quad (102)$$

² isso nem sempre é verdade, a métrica pode não ser ortogonal entre as coordenadas

Assim como fizemos anteriormente, iremos fazer um translação de $|x\rangle$ até dx' e obteremos:

$$T_g(dx')|x\rangle = |x + g(x)^{-1/2}dx'\rangle \quad (103)$$

Agora vamos analisar as duas equações acima. Ao realizarmos duas translações simultâneas até a posição dx' , precisamos levar em consideração as métricas nos dois pontos finais de cada translação, o que é diferente de quando fazemos uma única translação. Com isso, temos que:

$$T_g(dx')T_g(dx)|x\rangle \neq T_g(dx')|x\rangle \quad (104)$$

Essa não aditividade ocorre devido ao fato de que nem sempre a métrica será aditiva, como citado por Braga: 'Como $x + g(x)^{-1/2}dx'$ não necessariamente é igual a $g(x)$ (BRAGA, 2015). Portanto, nesse formalismo, perdemos a aditividade das translações.

Agora, vamos modificar o espaço para que os operadores continuem hermitianos e a conservação da probabilidade seja mantida. Como vimos anteriormente, o módulo ao quadrado da função de onda nos informa sobre a probabilidade. Logo, se considerarmos todo o espaço, teremos uma probabilidade de 100% de encontrar a partícula. Diante disso, precisamos analisar isso em um espaço curvo. Portanto, temos que

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int_a^b \Psi^* \Psi ds = 1 \quad (105)$$

Com isso, teremos um peso no espaço de Hilbert, como Braga define: 'o espaço das funções de onda será o espaço de Hilbert com um peso, ou seja, será o espaço das funções de x definidas em um certo intervalo $a \leq x \leq b$ (BRAGA, 2015). Isso decorre do fato de estarmos interessados no arco de curva. Portanto, o produto interno (ou escalar) também deve respeitar a métrica do espaço, ou seja, o espaço de Hilbert terá um peso, pois agora devemos levar em consideração a métrica. Assim sendo, podemos escrever o produto interno da seguinte maneira:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \phi ds \quad (106)$$

ou em termos da métrica, temos:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \phi \sqrt{g(x)} dx \quad (107)$$

Outro ponto importante é que as funções são ortogonais em relação à métrica, conforme garantido pela equação de Sturm-Liouville, como demonstrado no Apêndice A.3. Isso ocorre porque a equação de Schrödinger independente do tempo, modificada por (BRAGA, 2015) com as devidas alterações, pode ser escrita da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar}{2m} D_g^2 \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (108)$$

A equação acima é bem semelhante com a equação schrodinger que conhecemos, porém, aparece um derivada generalizada D_g , que é dada por, $D_g = \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx}$, devido a equação de sturm-liouville podemos afirmar que as soluções são ortogonais em relação a métrica, com isso iremos supor que temos duas funções de onda que são solução da equação de schrodinger e devidamente normalizada, logo:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \sqrt{g(x)} dx = \delta_{ij} \quad (109)$$

Como isso também temos que modificar o valor médio, onde também será em termo da métrica, entretanto a interpretação física continua sendo valida, ou seja, manteremos a notação, todavia a única modificação será a métrica, então podemos reescreve assim:

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* A \psi \sqrt{g(x)} dx \quad (110)$$

Onde A é um operador, mas para que ele tenha sentido físico ele deve respeitar todas a características que definimos anteriormente no capítulo 2.1, mas vale destacar que ele deve ser hermitiano:

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle \psi A | \psi \rangle \quad (111)$$

Então vamos mostrar que a equação (19), continua sendo valida, o procedimento é bastante semelhante, então vamos aplicar a derivada temporal no valor médio do operador A , resultando:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} \psi \rangle \quad (112)$$

Ainda podemos reescrever a equação de Schrodinger, da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H}_g |\Psi\rangle \quad (113)$$

Onde H_g é o hamiltoniano generalizado, onde é (BRAGA, 2015) como:

$$H_g = \frac{P_g^2}{2m} + V(x, t) \quad (114)$$

Novamente P_g é chamando de momento generalizado defino (BRAGA, 2015), que é dado em termo da métrica, no qual é dado:

$$P_g = -i\hbar D_g \quad (115)$$

Como essas informações o procedimento é mesmo que fizemos anteriormente, logo teremos o seguinte resultado:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}_g, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (116)$$

Assim como na equação (19) o limite de validade é que os operadores H_g e A , sejam hermitianos.

5 TEOREMA DE EHRENFEST GENERALIZADO

Como visto no capítulo 3, o valor médio da mecânica quântica converge para as leis clássicas. No formalismo PDTO, que analisa os efeitos de uma métrica ou de um espaço curvo sobre uma partícula, espera-se que o valor médio das equações da mecânica quântica corresponda à mecânica clássica em um espaço curvo, conforme demonstrado no Apêndice A.1. O objetivo deste capítulo é demonstrar que o limite clássico do formalismo PDTO é a segunda lei de Newton em um espaço curvo. Para isso, utilizaremos a equação 116 e começaremos calculando a taxa de variação da média da posição em relação ao tempo. Assim, teremos a seguinte equação:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H_g, x] \rangle + \left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \right\rangle \quad (117)$$

Como a posição não depende explicitamente do tempo, o segundo termo é nulo. Vamos também substituir o hamiltoniano generalizado. Dessa forma, a equação acima terá a seguinte formato:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \left[\frac{p_g^2}{2m} + V(x), x \right] \rangle \quad (118)$$

Aplicando a propriedade da soma do comutador:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\langle \left[\frac{p_g^2}{2m}, x \right] \rangle + \langle [V(x), x] \rangle) \quad (119)$$

Como a posição e o potencial são números puros, logo eles comutam entre si, com isso o segundo comutador é nulo, ficamos então com:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \left[\frac{p_g^2}{2m}, x \right] \rangle \quad (120)$$

Iremos aplicar a propriedade do anexo de numero A.3, ficamos com:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{2m\hbar} \langle ([p_g, x]p_g + p_g[p_g, x]) \rangle \quad (121)$$

Vamos usar o resultado do apêndice de numero A.3 e teremos:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{2m\hbar} (\langle -i\hbar g(x)^{-1/2} p_g - i\hbar p_g g(x)^{-1/2} \rangle) \quad (122)$$

Como isso podemos simplificar a equação acima e também multiplicar em ambos os lados pela massa m , portanto, teremos:

$$m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{2} (\langle g(x)^{-1/2} p_g \rangle + \langle p_g g(x)^{-1/2} \rangle) \quad (123)$$

A equação acima nos mostra o valor médio do momento de uma partícula. Para chegar à segunda lei de Newton, vamos aplicar a derivada temporal novamente

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dt} (\langle g(x)^{-1/2} p_g \rangle) + \frac{d}{dt} (\langle p_g g(x)^{-1/2} \rangle) \right) \quad (124)$$

Antes de prosseguirmos vamos lembrar que $p_g = g(x)^{-1/2} p$, pois usaremos essa relação a parti de agora:

$$\frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dt} (\langle g(x)^{-1} p \rangle) + \frac{d}{dt} (\langle g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \rangle) \right) \quad (125)$$

Vale pontuar que não estamos lidando com uma derivada comum, mas sim com a derivada de uma média. Dito isso, vamos aplicar a equação 119 nas duas derivadas da equação acima, mas iremos resolver a primeira derivada e depois a segunda, e por fim, unir os dois resultados. Assim, ficamos com:

$$\frac{d}{dt} (\langle g(x)^{-1} p \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle [H_g, g(x)^{-1} p] \rangle + \left\langle \frac{\partial g(x)^{-1} p}{\partial t} \right\rangle \quad (126)$$

Como sabemos a métrica e o momento não dependem explicitamente do tempo logo, o segundo termo é nulo, aplicando o hamiltoniano generalizado juntamente com a propriedade da soma temos:

$$\frac{d}{dt} (\langle g(x)^{-1} p \rangle) = \frac{i}{\hbar} (\langle [\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1} p] \rangle + \langle [V(x), g(x)^{-1} p] \rangle) \quad (127)$$

Agora vamos começar a resolver o primeiro comutador, iremos utilizar a propriedade do apêndice A.3 assim temos que:

$$[\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1} p] = \frac{1}{2m} ([g(x)^{-1/2} p, g(x)^{-1} p] g(x)^{-1/2} p + g(x)^{-1/2} p [g(x)^{-1/2} p, g(x)^{-1} p]) \quad (128)$$

Para resolver o comutador, vamos fazer uma manipulação na métrica para simplificar o problema, para isso vamos fazer a seguinte relação $g(x)^{-1} = g(x)^{-1/2} g(x)^{-1/2}$, obteremos:

$$[g(x)^{-1/2} p, g(x)^{-1/2} g(x)^{-1/2} p] = g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} g(x)^{-1/2} p - g(x)^{-1/2} g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} p \quad (129)$$

É importante destacar que podemos colocar a métrica $g(x)^{-1/2}$ em evidencia pela esquerda e também podemos colocar em evidencia pela direita o termo $g(x)^{-1/2} p$ com isso o comutador pode ser reescrito como:

$$[g(x)^{-1/2} p, g(x)^{-1/2} g(x)^{-1/2} p] = g(x)^{-1/2} [p, g(x)^{-1/2}] g(x)^{-1/2} p \quad (130)$$

Usando a propriedade de comutador do momento com uma função ficamos com:

$$[g(x)^{-1/2}p, g(x)^{-1/2}g(x)^{-1/2}p] = -i\hbar g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p \quad (131)$$

Com isso a equação (128) ficará:

$$[\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1}p] = -\frac{i\hbar}{2m} (g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p g(x)^{-1/2} p + g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p) \quad (132)$$

Como a métrica e o potencial são valores então eles comutam entre si, podemos então colocar em evidência o termo da métrica, resultando em:

$$[V(x), g(x)^{-1}p] = V(x)g(x)^{-1}p - g(x)^{-1}pV(x) = g(x)^{-1}[V(x), p] \quad (133)$$

desta forma ficamos com o seguinte resultado:

$$[V(x), g(x)^{-1}p] = i\hbar g(x)^{-1} \frac{\partial V}{\partial x} \quad (134)$$

Agora vamos substituir as equações (134) e (132) na equação (127):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\langle g(x)^{-1}p \rangle) &= \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{2m} (g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p g(x)^{-1/2} p + \right. \\ &\quad \left. g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p) + i\hbar g(x)^{-1} \frac{\partial V}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (135)$$

Simplificando a equação acima, teremos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\langle g(x)^{-1}p \rangle) &= \left(\frac{1}{2m} (g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p g(x)^{-1/2} p + \right. \\ &\quad \left. g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p) - g(x)^{-1} \frac{\partial V}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (136)$$

Por fim iremos desenvolver a segunda derivada, para isso aplicaremos novamente a equação (116):

$$\frac{d}{dt}(\langle g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle [H_g, g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2}] \rangle + \left\langle \frac{\partial (g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2})}{\partial t} \right\rangle \quad (137)$$

Novamente, a métrica e o momento não dependem explicitamente do tempo, aplicando o hamiltoniano e a regra da soma, temos:

$$\frac{d}{dt}(\langle g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle [\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2}] \rangle + \langle [V(x), g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2}] \rangle \quad (138)$$

Resolvendo o primeiro comutador e aplicando a mesma propriedade do comutador que fizemos no caso anterior, temos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}\right] &= \frac{1}{2m}([g(x)^{-1/2}p, g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}]g(x)^{-1/2}p \\ &\quad g(x)^{-1/2}p[g(x)^{-1/2}p, g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}]) \end{aligned} \quad (139)$$

Resolvendo o comutador:

$$\begin{aligned} [g(x)^{-1/2}p, g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}] &= g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} - \\ &\quad g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}g(x)^{-1/2}p \end{aligned} \quad (140)$$

Assim como fizemos antes, porém, com uma diferença, vamos colocar em evidência pela direita o termo $g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}$ assim chegaremos no seguinte resultado:

$$g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}[p, g(x)^{-1/2}] = -i\hbar g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} \quad (141)$$

Sendo assim, a equação (139) fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left[\frac{p_g^2}{2m}, g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}\right] &= -\frac{i\hbar}{2m}(g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} g(x)^{-1/2}p \\ &\quad + g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x}) \end{aligned} \quad (142)$$

Agora vamos resolver o ultimo comutador:

$$[V(x), g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}] = V(x)g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} - g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}V(x) \quad (143)$$

Portanto, temos:

$$[V(x), g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}] = g(x)^{-1/2}[V(x), p]g(x)^{-1/2} = i\hbar g(x)^{-1} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \quad (144)$$

Assim, ficamos com:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\langle g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \rangle) &= \frac{1}{2m}(\langle (g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} g(x)^{-1/2}p \\ &\quad + g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x}) \rangle - \langle g(x)^{-1} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle) \end{aligned} \quad (145)$$

unido as equações, temos:

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2m} (g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p g(x)^{-1/2} p + \right. \\
&g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p) - g(x)^{-1} \frac{\partial V}{\partial x} \\
&+ \frac{1}{2m} (g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \frac{\partial (g(x)^{-1/2})}{\partial x} g(x)^{-1/2} p \\
&\left. + g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \frac{\partial (g(x)^{-1/2})}{\partial x} \right) - g(x)^{-1} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Big]
\end{aligned} \tag{146}$$

melhorando a equação acima, obtemos:

$$\begin{aligned}
m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} &= \frac{1}{2} \left\langle \left[\frac{1}{2m} (g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p g(x)^{-1/2} p + \right. \right. \\
&g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1} \frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x} p) \\
&\left. \frac{1}{2m} (g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \frac{\partial (g(x)^{-1/2})}{\partial x} g(x)^{-1/2} p \right. \\
&\left. + g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} p g(x)^{-1/2} \frac{\partial (g(x)^{-1/2})}{\partial x} \right) \Big] \Big\rangle - \left\langle g(x)^{-1} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle
\end{aligned} \tag{147}$$

Como podemos observar, a mecânica quântica no formalismo PDTO tem como limite clássico a segunda lei de Newton em um espaço curvo. Podemos fazer um paralelo com a segunda lei em um referencial não inercial, pois aparece um termo adicional. No caso da segunda lei em um referencial não inercial, temos uma força devido à aceleração do referencial. Neste caso específico, seria uma força devido à métrica, onde mesmo a partícula livre sente uma força, porém, neste caso, é devido à métrica. Podemos agora analisar olhando para o arco de curva, calculando o valor de p_g . Com isso, analisaremos o espaço trocando o eixo x por s ; assim, temos que:

$$\frac{d \langle p_g \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H_g, p_g] \rangle + \left\langle \frac{\partial p_g}{\partial t} \right\rangle \tag{148}$$

Como o momento não depende do tempo explicitamente, o segundo termo é nulo, vamos aplicar o hamiltoniano generalizado, juntamente com a propriedade do comutador e sabendo que o momento generalizado comututa com ele mesmo, ficamos

$$\frac{d \langle p_g \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [V, p_g] \rangle \tag{149}$$

Usando a propriedade do apêndice A.3, temos:

$$\frac{d \langle p_g \rangle}{dt} = - \langle D_g V \rangle \tag{150}$$

Note que assim como na mecânica clássica em um espaço curvo, quando analisamos o eixo s , temos uma equação que lembra à segunda lei de Newton, descrito pelo apêndice A.1, como podemos ver abaixo:

$$m\ddot{s} = -\frac{\partial V}{\partial s}. \quad (151)$$

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Na mecânica quântica é o teorema de Ehrenfest que faz o papel de limite clássico, onde vimos que os valores médios dos observáveis convergem para as equações da mecânica clássica, como foi o caso da segunda de Newton em uma e três dimensões e para a segunda lei de Newton para rotações, também conhecido como torque.

Em certos casos especiais, como a força de Lorentz, há limitações a considerar se os campos magnéticos são uniformes. Isso se deve à natureza não comutativa dessas quantidades, como $(\vec{v} \times \vec{B} \neq -\vec{B} \times \vec{v})$. Simplificando, para um campo magnético não uniforme, há um termo de divergência adicional na equação de força de Lorentz. Este termo explica o fato de que o campo magnético altera a trajetória de forma diferente em cada ponto, ao contrário de um campo uniforme.

Um dos aspectos mais intrigantes é o spin, particularmente o spin $1/2$, que não tem uma contrapartida clássica. Embora os valores médios não correspondam a uma quantidade clássica, sua taxa de mudança ao longo do tempo decai em uma quantidade clássica, que neste contexto é o torque no eletromagnetismo.

Na mecânica quântica, especificamente no formalismo PDTO, o limite clássico é essencialmente a mecânica clássica dentro de um espaço curvo. Aqui, podemos ver semelhanças com a Segunda lei de Newton num quadro de referência não inercial, pois existe agora uma força atribuível à métrica. Mesmo no caso específico de uma partícula livre ($V(x) = 0$), ainda existe uma força devida à métrica.

Para futuros trabalhos, podemos expandir o Teorema de Ehrenfest no formalismo PDTO para três dimensões com uma métrica não ortogonal e analisar quais são as consequências dessa modificação. Além disso, outras possibilidades incluem a investigação da aplicação do Teorema de Ehrenfest em campos elétricos e magnéticos não uniformes, a inclusão de efeitos relativísticos, o estudo em sistemas dissipativos, a exploração em espaços-tempos curvos, a análise em sistemas com potenciais complexos, a relação com estados coerentes e a extensão para sistemas na termodinâmica quântica.

REFERÊNCIAS

ALMEIDA, C. **Ensaio: Da amostra ao teorema do limite central Um pouco dos fundamentos e uma aplicação prática.** [S.l.]: EMBRADA, 2019.

BOYCE, R. C. D. W. E. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno.** [S.l.]: LTC, Rio de Janeiro, 2012.

BRAGA, J. **Mecânica Quântica Não-aditiva.** [S.l.]: Programa de Pós-graduação do Departamento de Física da UF, 2015. Tese de Doutorado.

COHEN-TANNOUJDI B. DIU, F. L. C. **Quantum Mechanics.** [S.l.]: Hermann e John Wiley Sons, Paris, 1977. v. 1.

FILHO M. P. ALMEIDA, G. A. F. e. J. S. A. J. R. N. C. **Displacement Operator for Quantum Systems with Position-dependent Mass.** [S.l.]: JPhys. Rev. A 84, 050102-1- 050102-4, 2011.

GRIFFITHS, D. J. **Quantum Mechanics.** [S.l.]: 2. ed. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2011. v. 1.

SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics.** [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1994.

SOKOLNIKOFF, I. S. **Tensor Analysis.** [S.l.]: John Wiley Sons, New York, 1964.

THORNTON S. T., M. J. B. **Dinâmica clássica de partículas e sistemas.** [S.l.]: 5ª Edição Norte-Americana, 2012.

A APÊNDICE

A.1 DINÂMICA CLÁSSICA EM UM ESPAÇO CURVO

Para esse capítulo vamos analisar as leis que regem o movimento de uma partícula em um espaço curvo, onde a curvatura do espaço é dada por uma função que chamamos de métrica $g(x)$ em outras palavras vamos modificar a segunda lei de Newton para uma geometria não-euclidiana, onde iremos trabalhar com um problema unidimensional, vale lembrar que a segunda lei de Newton em uma dimensão é dada pela seguinte expressão:

$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx} \quad (152)$$

A equação acima tem um limite de validade que é um referencial inercial¹ e um espaço euclidiano, como isso iremos fazer modificação do espaço, para isso usaremos o formalismo de Hamilton, devido ao fato que as equações de Newton se equivale às equações de Hamilton, onde (THORNTON S. T., 2012) afirma que “O ponto de vista é diferente, mas o conteúdo é o mesmo”, então para resolver o nosso problema primeiro vamos usar a energia cinética para um espaço curvo, pois o Hamiltoniano é dado por $H = T + V$, sabendo disso (SOKOLNIKOFF, 1964) defini a energia cinética como sendo:

$$T = \frac{m}{2} g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j \quad (153)$$

Para esse trabalho vamos trabalhar no caso unidimensional, desta forma $g_{ij} = g(x)$ e $\dot{x}^i \dot{x}^j = \dot{x}^2$, assim a equação da energia cinética pode ser escrita da seguinte forma:

$$T = \frac{g(x)p^2}{2m} \quad (154)$$

Agora podemos montar o Hamiltoniano, pois vamos supor que a potencial só dependa da posição, desta forma ficamos com a seguinte relação:

$$H = \frac{g(x)p^2}{2m} + V(x) \quad (155)$$

Agora podemos usar as equações de Hamilton para encontramos a segunda lei de Newton para um espaço curvo, essas equações são escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned} \quad (156)$$

¹ um referencial onde a aceleração é nula obedecendo então a primeira lei de Newton

Então vamos usar essas equações para chegar na segunda lei de newton, então primeira mente vamos calcular \dot{x} , assim temos que:

$$\dot{x} = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{g(x)p^2}{2m} + V(x) \right) \quad (157)$$

Como o potencial não depende do momento, ficamos com a seguinte equação:

$$\dot{x} = \frac{g(x)p}{m} \quad (158)$$

Agora multiplicar por m em ambos os lados e aplicar a derivada temporal em amplos lados, desta forma ficaremos com a seguinte equação.

$$m\ddot{x} = \frac{d}{dt}(g(x)p) \quad (159)$$

Vamos aplicando a regra do produto, temos:

$$m\ddot{x} = \frac{d}{dt}(g(x))p + \frac{d}{dt}(p)g(x) \quad (160)$$

Vamos resolver a primeira derivada por regra da cadeia e a segunda usaremos a seguinte relação que $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ assim ficamos com:

$$m\ddot{x} = \dot{x} \frac{\partial g(x)}{\partial x} p - \frac{\partial V}{\partial x} g(x) \quad (161)$$

Vamos substituir a equação (154) na equação (157), e iremos também dividir em ambos os lados por $g(x)$ em ambos os lados, assim ficamos com a seguinte equação:

$$\frac{m\ddot{x}}{g(x)} = \frac{p^2}{2m} \frac{\partial g(x)}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \quad (162)$$

Agora vamos usar a relação anterior para modificar a equação acima, no caso essa equação $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ e também vamos chamar $g(x)$ de $(g(x)^{-1/2})^{-2}$, pois desta forma não alteremos a equação acima, com isso não altera a métrica vamos fazer essa substituição apenas na derivada, assim ficamos com:

$$\frac{m\ddot{x}}{g(x)} = \frac{p^2}{2m} \frac{\partial((g(x)^{-1/2})^{-2})}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \quad (163)$$

Para resolver a derivada parcial vamos aplicar a regra da cadeia, assim ficamos:

$$\frac{\partial((g(x)^{-1/2})^{-2})}{\partial x} = -2g(x)^{-3/2} \frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} \quad (164)$$

Desta forma ficamos com:

$$\frac{m\ddot{x}}{g(x)} = -\frac{p^2}{m}g(x)^{-3/2}\frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \quad (165)$$

Agora vamos lembra que $m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial X}$ então vamos usar para trocar a ordem, assim temos:

$$-\frac{\partial V}{\partial x}g(x)^{-1} = -\frac{p^2}{m}g(x)^{-3/2}\frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} + m\ddot{x} \quad (166)$$

Desta forma ficamos com a seguinte forma:

$$m\ddot{x} = \frac{p^2}{m}g(x)^{-3/2}\frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}g(x)^{-1} \quad (167)$$

Podemos fazer a seguinte manipulação para chegar equação quântica:

$$\begin{aligned} m\frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2m}(g(x)^{-1}\frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x}pg(x)^{-1/2}p+ \right. \\ &\quad \left. g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1}\frac{\partial g(x)^{-1/2}}{\partial x}p\right) \\ &\quad \left. - \frac{1}{2m}(g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}\frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x}g(x)^{-1/2}p \right. \\ &\quad \left. + g(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}pg(x)^{-1/2}\frac{\partial(g(x)^{-1/2})}{\partial x}\right)] - g(x)^{-1}\frac{\partial V(x)}{\partial x} \end{aligned} \quad (168)$$

Com a equação que encontramos vamos resolver alguns casos particulares o primeiro é $g(x)^{-1/2} = 1$ isso significaria o espaço isotrópico,

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (169)$$

Note que voltam os para a segunda lei de newton que conhecemos, agora vamos resolver para a métrica que (BRAGA, 2015) propôs, que do tipo $g(x)^{-1/2} = (1 + \gamma x)$, assim ficamos:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}\frac{1}{(1 + \gamma x)^2} + \frac{1}{(1 + \gamma x)^3}\frac{p^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(1 + \gamma x) \quad (170)$$

Desta forma ficamos com:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}\frac{1}{(1 + \gamma x)^2} + \frac{1}{(1 + \gamma x)^3}\frac{p^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}(1 + \gamma x) \quad (171)$$

Como sabemos $m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$, assim ficamos:

$$\frac{m\ddot{x}}{(1 + \gamma x)^2} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{p^2\gamma}{2m(1 + \gamma x)^3} \quad (172)$$

Desta forma chegamos na mesma equação que (BRAGA, 2015). agora vamos analisar o que acontecia no arco de curva, saindo da variável x para s , logo o momento pode ser representado por $P_g = p(g(x)^{1/2})$, com isso o hamiltoniano generalizado deve ficar da seguinte forma:

$$H_g = \frac{p_g^2}{2m} + V \quad (173)$$

Com isso as equações de Hamilton fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= \frac{\partial H_g}{\partial p_g} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H_g}{\partial s} \end{aligned} \quad (174)$$

Dito isso vamos calcular a segunda lei de newton levando em consideração o arco de curva, para isso vamos começõ calculando \dot{s} assim ficamos:

$$\dot{s} = \frac{\partial}{\partial p_g} \left(\frac{p_g^2}{2m} + V \right) = \frac{p_g}{m} \quad (175)$$

Multiplicando por m amplos os lados assim ficamos com:

$$m\dot{s} = p_g \quad (176)$$

vamos aplicar em ambos os lados a derivada temporal, assim temos:

$$m\ddot{s} = \frac{d}{dt}(p_g) \quad (177)$$

Usando a equação de Hamilton, temos:

$$m\ddot{s} = -\frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{p_g^2}{2m} + V \right) \quad (178)$$

Logo ficamos com:

$$m\ddot{s} = -\frac{\partial V}{\partial s} \quad (179)$$

Note que equação acima é idêntica a segunda lei de newton, ou seja, partículas dentro de um referencial curvo obedecem a segunda de newton e se colocamos a métrica como referencial não a diferenciar física entre os resultados e consciências das segunda lei de newton.

A.2 EQUAÇÃO DE STURM-LIOUVILLE

A equação de Sturm-Liouville é um EDO de segunda ordem, com o objetivo de estudar uma função se comporta num intervalo² $[a, b]$, onde a equação de Sturm-Liouville é escrita da seguinte forma:

$$\frac{d}{dx}[r(x)y'] + [q(X) + \lambda p(x)]y = 0 \quad (180)$$

Onde vamos analisar a função $p(x)$, onde iremos chamar de função peso, e a constante λ , na qual representa as autofunção da equação e $y(x)$ é a autovetor da equação, onde (BOYCE, 2012) defini 4 propriedades muito importantes, são elas :

1. Todos os autovalores λ do problema de Sturm-Liouville são reais, que podemos ser escritor de forma crescente:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots \lambda_\infty \quad (181)$$

2. Para cada autovalor existe uma única autofunção linearmente independente, determinada a menos de uma constante multiplicativa.
3. As autofunções corresponde a diferentes autovalores, e são L.I.

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n y(x_n) = 0 \quad (182)$$

4. O Conjunto de autofunções corresponde a conjunto de autovalores onde são ortogonais em relação a função peso $p(x)$ no intervalo $[a, b]$. caso estejam normalizados podemos escrever da seguinte forma:

$$\int_a^b y(x_i)y(x_j)p(x)dx = \delta_{ij} \quad (183)$$

então Ser chamamos $r(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}$, $q(x) = v(x)$, $\lambda = E$, $y(x) = \psi(x)$ por fim chamamos a nossa função peso de $p(x) = 1$, teremos a seguinte equação:

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx}\right] + [v(x) + E]\psi = 0 \quad (184)$$

Se resolvemos a equação acima ficamos com a equação de Schrodinger independente do tempo, assim as soluções da equação de Schrodinger obedecem todas a propriedade da Equação de Sturm-Liouville, mas podemos destacar que com a função peso é 1, logo as funções soluções são ortogonais entre sí, podemos ainda para formalismo PDTDO, pois se escrevemos $r(x) = \frac{1}{\sqrt{g(x)}}$, $q(x) = V(x)$, $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$ por fim a função peso é dado por $p(x) = \sqrt{g(x)}$, fazendo manipulações algébricas chegamos na equação de Schrodinger no formalismo PDTDO, porém é possível nota que, as funções são ortogonais em relação a métrica.

² Esse intervalo pode tende ao infinito, continuará sendo valido o teorema

A.3 DEMOSTRAÇÕES MATEMÁTICAS

Vamos demonstrar que $[f(x), P] = i\hbar \frac{df}{dx}$, então vamos parti do comutador, como um função multiplicando pela esquerda, temos:

$$[f(x), P]g(x) = f(x)Pg(x) - Pf(x)g(x) \quad (185)$$

Como sabemos $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$, ficamos com :

$$[f(x), P]g(x) = -i\hbar \frac{dg(x)}{dx} - (-i\hbar \frac{df(x)g(x)}{dx}) \quad (186)$$

Fazendo $g = 1$, temos:

$$[f(x), P] = i\hbar \frac{df}{dx} \quad (187)$$

Agora iremos demonstra que $[P_i, x_j] = -i\hbar \delta_{ij}$, para isso desenvolver o comutador, vamos colocar um função pelo lado direito, para facilitar as manipulações.

$$[P_i, x_j]G = p_i x_j G - x_j p_j G = -i\hbar \frac{\partial x_j G}{\partial x_i} - x_j (-i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}) \quad (188)$$

vamos considera $G = 1$, devido a derivada, ficamos com o seguinte resultado:

$$[P_i, x_j] = -i\hbar \delta_{ij} \quad (189)$$

Agora iremos demonstrar a seguinte equação $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$, para isso vamos desenvolver o comutador, com isso temos:

$$[AB, C] = ABC - CAB \quad (190)$$

vamos somar e subtrair o comutador acima por ACB , com isso ficamos:

$$[AB, C] = ABC - ACB + ACB - CAB \quad (191)$$

Desta forma demostramos que:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (192)$$

Num caso particular onde temos $A = B$, temos a seguinte relação:

$$[A^2, C] = A[A, C] + [A, C]A \quad (193)$$

Para finalizar as demonstrações usadas temos a seguinte relação, $[S_i, B_j] = 0$, novamente iremos desenvolver o comutador:

$$[S_i, B_j] = S_i B_j - B_j S_i \quad (194)$$

Como o Spin é escrito como sendo:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (195)$$

Onde $\vec{\sigma}$ é uma matriz, no caso do Spin 1/2, é do tipo 2×2 , porém são valores contante; como podemos ver abaixo:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (196)$$

Se substituindo as matrizes acima no comutador, mostraremos que:

$$[S_i, B_j] = 0 \quad (197)$$

Agora vamos mostra que $[P_g, f(x)] = -i\hbar D_g$, para isso vamos multiplicar por 1 pela esquerda assim temos:

$$[P_g, f(x)]1 = P_g f(x)1 - f(x)p_g 1 \quad (198)$$

Abrindo o os termos ficamos com:

$$[P_g, f(x)]1 = -i\hbar D_g f(x) + f(x)i\hbar D_g(1) \quad (199)$$

Desta forma ficamos com:

$$[P_g, f(x)] = -i\hbar D_g f(x) \quad (200)$$

A.4 TEOREMA DO LIMITE CENTRAL

O Teorema do limite central (TLC) é um dos mais importantes teoremas das estatística, pois podemos determinar que valores aleatórios tente ao um valor, tortando esses valores aleatórios cada vez mais de presiveis, ou seja, saindo do mundo probabilístico para o mundo determinístico, vários matemáticos e físicos trabalharam com TLC incluindo nomes como Abraham de Moivre (1667-1754) e até mesmo Carl Friedrich Gauss (1777-1855) conhecido como "Príncipe da matemática" onde foi tão importante para esse teorema que o seu próprio no estar ligado a esse teorema, pois a curva normal ou curva *gaussiana* na qual o teorema se fundamenta, na qual essa curva é dada pela imagem abaixo obtida no software Geogebra:

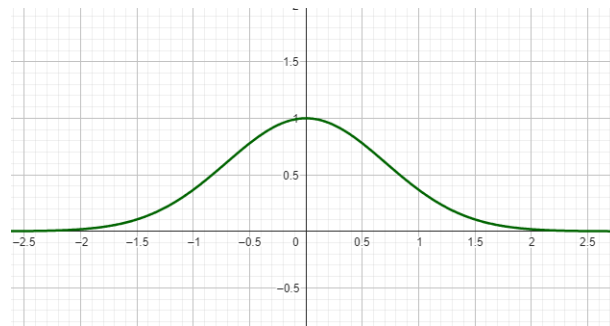


Figura I: Ilustração de um função gaussiana

onde geralmente o eixo y é representado pela probabilidade e o x uma variável qualquer onde queremos calcular a probabilidade, no caso da mecânica quântica é o eixo x geralmente é representado pela posição da partícula e o eixo y a probabilidade de encontramos essa partícula naquele ponto. Então o TLC que é definida segundo (ALMEIDA, 2019)

O teorema do limite central nos assegura que, se as amostras forem suficientemente grandes e escolhidas de maneira aleatória, as médias de todas as amostras possíveis estarão distribuídas simetricamente em torno da média populacional. Assim sendo, a Matemática nos assegura que a média das médias das possíveis amostras terá um valor igual à média populacional.

Para entendermos melhor esses teorema tão importante, vamos supor um lançamento de um dado d6 (um dado de seis lados), se vezes isso a probabilidade irá ser uniforme, pois teremos 1/6 chances para qualquer numero assim teremos o seguinte gráfico:



Figura II: A Imagem representa a probabilidade de um único lançamento de um dado d6

Na imagem acima é possível perceber que probabilidade é igual para dos os 6 valores possível do dado, cerca de 16,66% , agora vamos lança duas vezes e soma os valores, assim temos o seguinte gráfico:



Figura III: A Imagem representa a probabilidade de dois dado d6 lançando simultaneamente

Se amentamos a quantidade de lançamentos simultâneos teremos um valore que tende para o valor central, como podemos ver a abaixo:

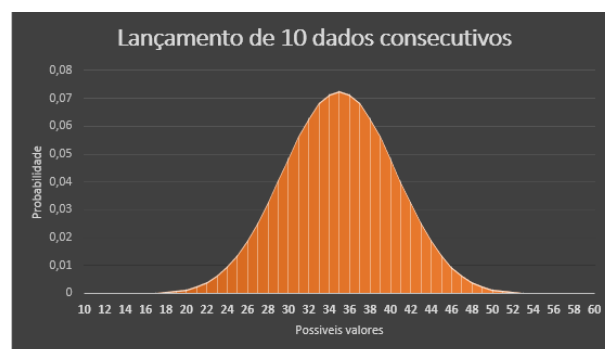


Figura IV: A Imagem representa a probabilidade de dez dado d6 lançando simultaneamente

Então se aumentamos a quantidade de lançamentos teremos valores cada vez mais um curva gaussiana, onde se colocamos mais dados o desvio padrão vai tentar a zero e com isso teremos com saber com total certeza qual ser o valor que sairá no final.

