

Princípio de ação quântica de Schwinger

(Schwinger quantum action principle)

C.A.M. de Melo^{1,2}, B.M. Pimentel¹, J.A. Ramirez¹

¹Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, São Paulo, SP, Brasil

²Instituto de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal de Alfenas, Campus Poços de Caldas, Poços de Caldas, MG, Brasil

Recebido em 8/12/2012; Aceito em 12/1/2013; Publicado em 15/10/2013

O princípio de ação quântica de Schwinger é uma caracterização dinâmica das *funções de transformação* e está fundamentado na estrutura algébrica derivada da análise cinemática dos procesos de medida em nível quântico. Como tal, este princípio variacional permite derivar as relações de comutação canônicas numa forma totalmente consistente. Além disso, propociona as descrições dinâmicas de Schrödinger, Heisenberg e uma equação de Hamilton-Jacobi em nível quântico. Implementaremos este formalismo na resolução de sistemas simples como a partícula livre, o oscilador harmônico quântico e o oscilador harmônico quântico forçado.

Palavras-chave: mecânica quântica, princípio de ação quântica, princípios variacionais.

The Schwinger quantum action principle is a dynamic characterization of the transformation functions and is based on the algebraic structure derived from the kinematic analysis of the measurement processes at the quantum level. As such, this variational principle, allows to derive the canonical commutation relations in a consistent way. Moreover, the dynamic pictures of Schrödinger, Heisenberg and a quantum Hamilton-Jacobi equation can be derived from it. We will implement this formalism by solving simple systems such as the free particle, the quantum harmonic oscillator and the quantum forced harmonic oscillator.

Keywords: quantum mechanics, quantum action principle, variational principles.

1. Introdução

Este trabalho é uma continuação do artigo *Teoria algébrica de processos de medida em sistemas quânticos* [1], onde foi explicada de uma maneira pedagógica a formulação da cinemática da mecânica quântica proposta por Julian S. Schwinger [2]. Esta cinemática baseada nos processos de medida fundamenta a formulação do seu princípio de ação quântica que será o objeto de exposição deste artigo.

O princípio de ação quântica de Schwinger foi proposto em 1951 [3] inspirado por trabalhos anteriores de Dirac [4] sobre o papel que o princípio de Hamilton da mecânica clássica deveria desempenhar no contexto da teoria quântica. Esse trabalho seminal de Dirac serviu ainda de inspiração para que Feynmann [5] desenvolvesse a sua formulação de integrais de trajetória para a mecânica quântica, considerada por muitos como a contraparte integral da formulação proposta por Schwinger [6].

Uma das grandes diferenças entre as versões clássica e quântica do princípio de ação, é que no domínio quântico esse princípio não é um princípio de otimização, ou mesmo de extremização. Embora em sis-

temas clássicos seja sempre possível escolher termos de superfície que tornem o princípio de ação um processo de otimização de um funcional [7], no domínio quântico é necessário se libertar dessas amarras conceituais, um fato que foi notado primeiro em 1936 por Paul Weiss [8]. Esse trabalho de Weiss é muito pouco conhecido e reconhecido pela comunidade, sendo raramente citado e, mesmo quando esta citação ocorre, sem a devida importância, como é o caso de uma nota de rodapé na Ref. [9] ou um breve comentário na Ref. [10].

O princípio de ação quântica é uma caracterização dinâmica das funções de transformação, feita através da análise das respostas do sistema ante transformações que relacionam as diferentes representações que o sistema quântico pode ter. Nesta formulação, são estudadas as mudanças dos estados quânticos e dos observáveis, porém, o princípio de correspondência [11,12] não é usado *a priori*, como no formalismo convencional da mecânica quântica, já que as relações de comutação entre as variáveis canônicas são derivadas de maneira totalmente consistente ao exigir condições sobre as variações dos observáveis canônicos. Também as equações dinâmicas desses observáveis (Descrição de Heisenberg) e dos estados quânticos (Descrição de

¹E-mail: cassius@unifal-mg.edu.br.

Schrödinger) são obtidas como casos especiais, bastando escolher variações específicas do operador de ação.

Desde a sua concepção, o princípio de ação quântica de Schwinger tem sido utilizado tanto na obtenção de resultados formais sobre a estrutura da teoria quântica quanto em aplicações específicas [13] que demonstram o seu poder de cálculo. Ele foi empregado para se investigar as relações entre spin e estatística que governam as partículas elementares [14], no estudo do acoplamento entre campos em espaços curvos ou torcidos [15–17], na investigação do problema de fixação de calibre para quantização de campos [18], na formulação de teorias de gauge de ordem superior [19] e até mesmo na construção de uma versão quaterniônica da mecânica quântica [20]. Uma das primeiras introduções didáticas à formulação de Schwinger para a mecânica quântica foi apresentada em [21].

O elemento principal da mecânica quântica é a *função de transformação*, também conhecida como amplitude de probabilidade ou, dependendo da escolha de estados inicial e final, o *propagador* do sistema. Estas funções contêm toda a informação do sistema, pois preservam toda a informação do que acontece com ele na transição entre uma descrição e outra. Segundo a álgebra da medida [1], as mudanças de um sistema que preservam as características da estrutura algébrica do conjunto (ou espaço) onde são aplicadas, podem ser representadas por transformações unitárias finitas ou infinitesimais dependendo do caso. Entre outras coisas, transformações unitárias mantém a probabilidade invariante, o que é fundamental para a interpretação da teoria.² Seguindo esta linha de raciocínio, estabeleceremos na seção 2. a relação existente entre as funções de transformação, as transformações unitárias e as transformações unitárias infinitesimais. Também mostraremos como estas transformações nos permitirão estudar a descrição quântica das respostas de um sistema frente a diversos tipos de variação.

Quando fazemos medidas sobre um sistema de natureza quântica, embora as mudanças do sistema entre duas observações consecutivas sejam, em geral, imprevisíveis, a causalidade tem que ser mantida. Podemos ver então que a evolução temporal de um sistema entre dois tempos t e $t + \delta t$ deve ser equivalente a uma mudança de descrição e, em princípio, deve ser gerada por uma transformação unitária entre as variáveis dinâmicas do sistema [2]. Assim, através deste tipo de transformação poderá ser estudada a evolução temporal dos estados do sistema quântico e a evolução dos observáveis pelos quais esse sistema está sendo caracterizado.

Nas próximas seções, estudaremos o papel fundamental das transformações unitárias na dinâmica quântica e como estas estão relacionadas com as variações infinitesimais tanto de operadores como de estados. Depois, estudaremos como estas variações infini-

tesimais podem ser conectadas de maneira consistente com as variações de um único operador, função das variáveis dinâmicas do sistema, obtendo de maneira natural a forma geral do Princípio de ação quântica de Schwinger e do gerador destas variações. Logo depois de aclarar esses conceitos, estudaremos como a escolha de variações específicas dos operadores associados às variáveis dinâmicas da teoria, podem ser usadas para derivar as relações de comutação e as descrições de Heisenberg e de Schrödinger, além de uma forma quântica da equação de Hamilton-Jacobi. Por fim, aplicaremos toda esta teoria de forma a obter a função de transformação de alguns sistemas simples concluindo com algumas observações gerais sobre o princípio de ação quântica de Schwinger.

2. Transformações unitárias

As medidas de um observável A sobre um sistema quântico, geram um conjunto completo de vetores e valores próprios que o representam [1]. Se fizermos medidas de outras características sobre o mesmo sistema, teremos novas representações. Cada uma destas representações está definida em um espaço que tem uma estrutura geométrica e de operadores bem definida.

Esses espaços resultantes estão relacionados por meio de transformações unitárias. Assim, os espaços vetoriais, $\{|a_k\rangle\}$ e $\{|b_k\rangle\}$, associados aos observáveis \hat{A} e \hat{B} podem ser relacionados pelo seguinte conjunto de operadores

$$\hat{U}_{ab} = \sum_{k=1}^N |a_k\rangle \langle b_k|, \quad \text{e} \quad \hat{U}_{ba} = \sum_{k=1}^N |b_k\rangle \langle a_k|, \quad (1)$$

com

$$\hat{U}_{ab}^\dagger = \hat{U}_{ba} \quad \hat{U}_{ba}^\dagger = \hat{U}_{ab}. \quad (2)$$

Pode-se mostrar, com ajuda das Eqs. (1) e (2), que

$$\hat{U}_{ab} \hat{U}_{ba} = \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ab}^\dagger = \hat{U}_{ba}^\dagger \hat{U}_{ba},$$

e que seu produto

$$\begin{aligned} \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ba} &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |a_k\rangle \langle b_k| b_l \rangle \langle a_l| \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |a_k\rangle \delta_{kl} \langle a_l| = \hat{1}, \end{aligned}$$

é unitário.

Igualmente, podemos mostrar que os operadores

$$\hat{U}_{ba} = \hat{U}_{ab}^\dagger = \hat{U}_{ab}^{-1}, \quad \text{e} \quad \hat{U}_{ab}^\dagger = \hat{U}_{ba} = \hat{U}_{ba}^{-1},$$

são unitários.

Da expressão (1) podemos mostrar que o efeito de aplicar \hat{U} sobre os vetores $|a_k\rangle$ e $|b_k\rangle$ é

$$\hat{U}_{ba} |a_k\rangle = |b_k\rangle, \quad \langle a_k| \hat{U}_{ab} = \langle b_k|.$$

²Dizemos que uma probabilidade se mantém invariante se o seu valor numérico for independente da representação adotada.

Assim, dado que a transformação efetuada pelo operador \hat{U} é unitária, podemos ver que ao atuar sobre uma base ortonormal vai transformá-la em uma outra base que também é ortonormal. Como consequência, as relações geométricas projetivas entre os estados e o produto interno

$$\begin{aligned}\langle b_l | b_k \rangle &= \langle a_l | \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ba} | a_k \rangle = \langle a_l | \hat{U}_{ab} \hat{U}_{ab}^{-1} | a_k \rangle \\ &= \delta_{kl} = \langle a_l | a_k \rangle,\end{aligned}$$

são preservados. Como explicado na Ref. [1], a norma do espaço de estados está relacionada com a probabilidade de se obter um resultado específico em uma medida realizada sobre um sistema preparado em dado estado conhecido.

Se introduzirmos uma terceira base associada a um operador C , $\{|c_k\rangle\}$, e seus operadores associados U_{cb} e U_{ac} podemos ver que esta é suscetível de ser composta com as outras transformações, de forma que

$$\hat{U}_{ab} = \hat{U}_{ac} \hat{U}_{cb}. \quad (3)$$

Assim, poderíamos introduzir tantas bases intermediárias e transformações quantas quizermos, o que mostra que estas formam um grupo fechado, *i.e.*, qualquer transformação unitária pode ser construída como uma composição de outras transformações unitárias.

2.1. Representação de um operador

A representação matricial de um operador na Ref. [1], foi construída na base de medidas sucessivas de diferentes tipos de observáveis sobre um sistema já caracterizado por autoestados de outro observável. Em vista disto, podemos ver que um operador genérico \hat{X} pode ser representado em qualquer base completa, mesmo que os autovetores de \hat{X} não sejam conhecidos explicitamente. Assim, dada a base $\{|a_k\rangle\}$ de autoestados do observável \hat{A} , podemos expressar o operador \hat{X} da seguinte forma

$$\hat{X} = \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle | a_k \rangle \langle a_l |,$$

onde o produto entre operadores deve satisfazer

$$(\hat{X}\hat{Y})^{-1} = (\hat{Y}^{-1})(\hat{X}^{-1}).$$

Portanto, a ação do operador \hat{X} sobre um vetor do espaço gerado por \hat{A} produz um outro vetor que pode ser expresso como combinação dos elementos da base $\{|a_k\rangle\}$,

$$\hat{X} | a_m \rangle = \sum_{k=1}^N \langle a_k | \hat{X} | a_m \rangle | a_k \rangle.$$

Da mesma forma que expressamos o operador \hat{X} na base de vetores gerados pelo operador \hat{A} , podemos representar o operador \hat{A} na base de seus vetores próprios.

Esta representação é chamada de *representação espectral do operador \hat{A}* , pois é dada em função dos elementos do espectro $E[\hat{A}]$ do operador \hat{A} e dos projetores em cada sub-espaço $|a_k\rangle \langle a_l|$, ou seja,

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \langle a_k | \hat{A} | a_l \rangle | a_k \rangle \langle a_l | \\ &= \sum_{l=1}^N a_l | a_l \rangle \langle a_l |.\end{aligned}$$

De fato, essa representação nada mais é que um reflexo da equação de valores próprios $\hat{A} | a_l \rangle = a_l | a_l \rangle$ e da completeza da base $\{|a_k\rangle\}$.

Com a teoria estudada até este ponto, podemos mostrar que se os espaços vetoriais associados a dois observáveis \hat{A} e \hat{B} , que satisfazem as equações de valores próprios

$$\hat{A} | a_l \rangle = a_l | a_l \rangle, \quad \hat{B} | b_l \rangle = b_l | b_l \rangle,$$

estão relacionados por transformações unitárias do tipo da Eq. (1), suas representações espectrais

$$\hat{A} = \sum_{l=1}^N a_l | a_l \rangle \langle a_l |, \quad \hat{B} = \sum_{l=1}^N b_l | b_l \rangle \langle b_l |,$$

poderão ser relacionadas da seguinte forma

$$\begin{aligned}\hat{B} &= \sum_{l=1}^N b_l U_{ba} | a_l \rangle \langle a_k | \hat{U}_{ab} = \hat{U}_{ba} \left(\sum_{l=1}^N a_l | a_l \rangle \langle a_k | \right) \hat{U}_{ab} \\ &= \hat{U}_{ba} \hat{A} \hat{U}_{ab},\end{aligned}$$

desde que eles compartilhem o mesmo espectro, ou seja $E[\hat{A}] = E[\hat{B}]$.

3. Transformações unitárias infinitesimais para estados e operadores

Na seção anterior, observamos como usar as transformações unitárias para representar os observáveis de um sistema em função das estruturas geométricas associadas a outros observáveis que caracterizam o mesmo sistema. Também vimos que se dois desses observáveis compartilham o mesmo espectro, então estes podem ser relacionados com o uso de uma transformação unitária. Desta forma, temos que as transformações unitárias são úteis para descrever as respostas de um sistema ante diferentes medidas.

Para uma análise mais detalhada do que acontece quando temos variações no sistema ocasionadas por uma medida, analisaremos de forma geral a influência de transformações que induzem pequenas variações sobre os estados ou operadores.

3.1. Variações infinitesimais das funções de transformação

As funções de transformação satisfazem as seguintes regras de composição

$$\langle b_l | a_m \rangle = \sum_n \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle \quad (4)$$

$$\langle b_l | a_m \rangle = \overline{\langle a_m | b_l \rangle}. \quad (5)$$

Podemos tomar as variações sobre uma função de transformação como a diferenciação sobre uma função dependente dos estados envolvidos, assim,

$$\delta \langle b_l | a_m \rangle = \sum_c [\delta \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle + \langle b_l | c_n \rangle \delta \langle c_n | a_m \rangle] \quad (6)$$

e

$$\delta \langle b_l | a_m \rangle = \delta \overline{\langle a_m | b_l \rangle}. \quad (7)$$

Dadas as relações que estabelecemos anteriormente entre operadores e estados, podemos interpretar a variação da função de transformação como o elemento matricial de um operador infinitesimal $\delta \hat{W}_{ab}$

$$\delta \langle a_m | b_l \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a_m | \delta \hat{W}_{ab} | b_l \rangle. \quad (8)$$

Esta definição de operador infinitesimal, pode ser usada para expressar novamente a Eq. (6) como

$$\langle b_l | \delta \hat{W}_{ba} | a_m \rangle = \sum_n \left[\langle b_l | \delta \hat{W}_{bc} | c_n \rangle \langle c_n | a_m \rangle + \langle b_l | c_n \rangle \langle c_n | \delta \hat{W}_{ca} | a_m \rangle \right] \quad (9)$$

$$= \langle b_l | \delta \hat{W}_{bc} + \delta \hat{W}_{ca} | a_m \rangle. \quad (10)$$

De forma similar a Eq. (3), podemos extrair a seguinte relação

$$\delta \hat{W}_{ba} = \delta \hat{W}_{bc} + \delta \hat{W}_{ca}. \quad (11)$$

Manipulando os índices podemos mostrar que se $c = a$, devemos ter $\delta \hat{W}_{aa} = 0$. Por outro lado, se $b = a$ temos

$$\delta \hat{W}_{ac} = -\delta \hat{W}_{ca}.$$

Repetindo o mesmo raciocínio para a relação adjunta, obtemos

$$\delta \overline{\langle a_m | b_l \rangle} = -i \langle b_l | \delta \hat{W}_{ab}^\dagger | a_m \rangle = i \langle a_m | \delta \hat{W}_{ab}^\dagger | b_l \rangle,$$

o que nos permite mostrar uma relação de inversão similar à que temos para as transformações unitárias

$$\delta \hat{W}_{ca} = \delta \hat{W}_{ac}^\dagger.$$

Isto mostra que todo operador infinitesimal $\delta \hat{W}$ definido da forma da Eq. (8) é auto-adjunto, ou seja, o “ i ” colocado nessa definição serve para fazer com que o operador $\delta \hat{W}_{ab}$ seja hermitiano.

3.2. Transformações unitárias infinitesimais

Em relação às transformações unitárias as transformações infinitesimais são, por definição, uma pequena variação da transformação identidade [1]. Assim, podemos dizer as transformações unitárias infinitesimais detalham as pequenas mudanças que pode sofrer o sistema sem que o conteúdo da sua informação seja alterado.

Denotando por \hat{G} o gerador infinitesimal, temos que uma transformação unitária infinitesimal pode ser escrita na forma

$$\hat{U}(\alpha) \sim 1 + \frac{i}{\hbar} \hat{G}, \quad (12)$$

o que é equivalente a

$$\hat{U} - 1 \sim \frac{i}{\hbar} \hat{G}, \quad (13)$$

$$\hat{U}^\dagger - 1 \sim -\frac{i}{\hbar} \hat{G}.$$

Observe que \hat{G} , enquanto operador infinitesimal, deve ser necessariamente hermiteano, conforme discutido na seção anterior.

Com isso, a transformação infinitesimal de um vetor é dada por

$$\hat{U}^\dagger |a_l\rangle \sim \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab}\right) |a_l\rangle \sim |b_l\rangle, \quad (14)$$

e a de seu dual

$$\langle a_l | \hat{U} \sim \langle a_l | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab}\right) \sim \langle b_l |.$$

A natureza infinitesimal dessas transformações fica mais evidente quando colocada na forma

$$-\frac{i}{\hbar} \hat{G}_{ab} |a_l\rangle = |b_l\rangle - |a_l\rangle = \delta |a_l\rangle, \quad (15)$$

e

$$\frac{i}{\hbar} \langle a_l | \hat{G}_{ab} = \langle b_l | - \langle a_l | = \delta \langle a_l |. \quad (16)$$

Levando-se em conta os fatos anteriores, podemos derivar a forma da variação infinitesimal de um operador genérico \hat{X} , sabendo que a transformação unitária \hat{U} considerada na Eq. (8) pode ser expressa como uma transformação do tipo da Eq. (12). Observando que

$$\langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle = \langle a_k | \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger | a_l \rangle,$$

a transformação do operador pode ser posta em função da variação dos estados onde $|b_l\rangle = |a_l\rangle + \delta |a_l\rangle$ e $\langle b_l| = \langle a_l| + \delta \langle a_l|$. Desta forma

$$\langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle = \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle + \langle a_k | \hat{X} (\delta |a_l\rangle) + (\delta \langle a_k |) \hat{X} | a_l \rangle + (\delta \langle a_k |) \hat{X} (\delta |a_l\rangle), \quad (17)$$

onde, tomando infinitésimos até primeira ordem, podemos ver que

$$\langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle - \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle = \langle a_k | \hat{X} (\delta |a_l\rangle) + (\delta \langle a_k |) \hat{X} | a_l \rangle. \quad (18)$$

Observe que o lado direito da Eq. (18) é o mesmo que tomar a variação do elemento matricial $\langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle$ levando em conta que as variações apenas acontecem nos estados, ou seja,

$$\delta \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle = (\delta \langle a_k |) \hat{X} | a_l \rangle + \langle a_k | \hat{X} (\delta | a_l \rangle). \quad (19)$$

Identificando termo a termo as expressões (18) e (19) podemos chegar à seguinte expressão

$$\begin{aligned} \delta \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle &= \langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle - \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle \\ &= \langle a_k | \hat{U}_{ab} \hat{X} \hat{U}_{ab}^\dagger | a_l \rangle - \langle a_k | \hat{X} | a_l \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Por outro lado, a definição de operadores infinitesimais da Eq. (8) nos permite então identificar

$$\frac{i}{\hbar} \delta \hat{X} = \hat{U} \hat{X} \hat{U}^\dagger - \hat{X}, \quad (21)$$

como sendo a variação do operador \hat{X} (mantendo a base de estados $\{|a_l\rangle\}$ fixa) que é induzida pela transformação unitária infinitesimal \hat{U} . Substituindo a forma infinitesimal da Eq. (12), encontramos que a variação de um operador depende exclusivamente do gerador \hat{G}

$$\delta \hat{X} = - [\hat{X}, \hat{G}], \quad (22)$$

onde a expressão $[\hat{X}, \hat{G}] = \hat{X}\hat{G} - \hat{G}\hat{X}$ é o comutador entre os dois operadores.

4. Análise dinâmica

Até este momento as mudanças dos sistemas em nível quântico têm sido vinculadas com transformações entre espaços vetoriais abstratos, construídos como associados a operadores. Conforme explicado na Ref. [1], os estados de um sistema quântico devem ser caracterizados em termos de um conjunto completo de observáveis compatíveis, o que representa o máximo conteúdo de informação que podemos extrair de um determinado sistema sem interferir objetivamente com as suas propriedades. As alterações dessas propriedades ao longo do tempo constituem então o que podemos chamar de dinâmica do sistema.

Uma vez que um dado conjunto completo de observáveis compatíveis contém o máximo de informação sobre o sistema, podemos tomar esse conjunto completo como variáveis dinâmicas, de forma que qualquer outro observável físico possa ser expresso em função dessas variáveis.

A cada mudança de um sistema físico podemos associar uma nova descrição e uma transformação unitária (infinitesimal ou não) que as relaciona [11, 22]. Assim, se em cada instante de tempo associarmos uma descrição diferente e como tal uma relação entre estas, poderemos associar estas mudanças com as transformações sobre os estados ou sobre os operadores. Estas representações deverão ser ordenadas tomando um

instante de tempo considerado como o tempo inicial t_0 e medir a partir deste até um tempo final t , com $t > t_0$.

O raciocínio anterior pode ser visualizado da seguinte forma: se o sistema no tempo t_0 está caracterizado pelo conjunto de quantidades $\{|b(t_0)\rangle\}$, e num instante posterior t_1 é caracterizado pelas quantidades $\{|a(t_1)\rangle\}$, a função de transformação entre os dois conjuntos de medidas será dada pela expressão

$$\langle a(t_1) | b(t_0) \rangle, \quad (23)$$

onde cada um dos conjuntos associados são estados próprios dos conjuntos completos de observáveis $A(t_1)$ e $B(t_0)$, os quais não necessariamente são compatíveis entre si.

4.1. O operador ação e o Lagrangiano quântico

A função de transformação (23) relaciona as representações de um sistema entre dois instantes fixos de tempo, devendo então conter o máximo de informação possível sobre a dinâmica ao nível quântico. Portanto, podemos ver que seguindo as Eqs. (20) e (21), o operador que gera as variações relacionadas com a dinâmica pode ser definido por meio do seguinte postulado fundamental:

Existe uma classe especial de alterações infinitesimais para a qual os operadores associados $\delta \hat{S}_{t,t_0}$ são obtidos por variações apropriadas de um único operador, o operador ação \hat{S}_{t,t_0}

$$\delta \langle a(t) | b(t_0) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \delta \hat{S}_{t,t_0} | b(t_0) \rangle, \quad (24)$$

onde

$$\delta \hat{S}_{t,t_0} = \delta [\hat{S}_{t,t_0}].$$

Desta forma, dada a propriedade aditiva mostrada na Ref. (11), se dividirmos o intervalo de tempo (t_0, t) em intervalos infinitesimais de tempo de tamanho Δt , podemos ver que a transformação relaciona as descrições do sistema $\{|a\rangle\}$, no tempo t , e $\{|b\rangle\}$, no tempo t_0 , é uma sucessão que pode se expressar como

$$\hat{S}_{t,t_0} = \sum_{t_i=t_0}^{t-\Delta t} \hat{S}_{t_i+\Delta t, t_i}. \quad (25)$$

No limite em que o Δt é muito pequeno a soma anterior pode ser expressa como

$$\hat{S}_{t,t_0} = \int_{t_0}^t \hat{L}(t) dt. \quad (26)$$

O operador quântico $L(t)$ deve ser dependente das variáveis dinâmicas do sistema \hat{q} , tendo assim $\hat{L}(t) = \hat{L}(\hat{q}, \frac{d\hat{q}}{dt}, t)$, em analogia com a mecânica clássica este operador será denominado o *Lagrangiano* quântico do sistema, que deverá ser um operador auto-adjunto.

4.2. Princípio de ação quântica de Schwinger

As variações infinitesimais de estados e de operadores estão diretamente associadas à existência do operador \hat{G} , que pode depender das variáveis dinâmicas que descrevem o sistema em um espaço físico. Desta forma seguindo a idéia de que para cada instante de tempo existe uma representação do sistema, variações de tais descrições estariam associadas ao operador \hat{G} avaliado nesse tempo particular.

Tomando as expressões nas Eqs. (15) e (16), as variações de uma função de transformação como na Eq. (23) serão dadas por

$$\begin{aligned} \delta[\langle a(t) | b(t_0) \rangle] &= [\delta \langle a(t) |] | b(t_0) \rangle + \langle a, t | [\delta | b(t_0) \rangle] \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \hat{G} | b(t_0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle a, t | \hat{G}_0 | b(t_0) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \hat{G} - \hat{G}_0 | b(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (27)$$

Por outro lado, tomando na Eq. (24) a variação dada na Eq. (27) pode ser relacionada com a variação do operador ação \hat{S}_{t,t_0} ,

$$\begin{aligned} \delta[\langle a(t) | b(t_0) \rangle] &= \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \hat{G} - \hat{G}_0 | b(t_0) \rangle \quad (28) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \delta \hat{S}_{t,t_0} | b(t_0) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \delta \int_{t_0}^t \hat{L}(t) dt | b(t_0) \rangle. \end{aligned}$$

A dependência necessária de $\hat{L}(t)$ sobre as variáveis dinâmicas do sistema nos leva a ver o operador ação \hat{S} como um funcional e $\delta \hat{S}_{t,t_0}$ como a variação deste frente às mudanças das variáveis dinâmicas³ q e sua derivada $\dot{q} = \frac{dq}{dt}$.

As variações admitidas pelo princípio de ação quântica Schwinger são as mais gerais possíveis. Pode-se variar a descrição do sistema mudando os estados e operadores que fornecem essa descrição, pode-se variar parâmetros do qual o sistema possa depender, pode-se variar o instante de tempo no qual as medidas são realizadas e pode-se variar até mesmo a própria estrutura funcional do operador Lagrangiano.

Em particular, a evolução dinâmica do sistema deve estar associada a mudanças no instante de tempo no

qual as medidas são realizadas e a possíveis mudanças nos estados e operadores que são induzidas por essa variação no tempo. Lembrando as definições feitas na Eq. (20) e comparando com a expressão da Eq. (27) as variações do operador ação dependem fundamentalmente dos valores do parâmetro temporal nos tempos inicial e final. Portanto, dado que as variações dos operadores podem se dar em função das variações dos estados, estas dependerão essencialmente das variações de t . Assim, podemos expressar as variações do operador \hat{S} como a diferença existente no sistema entre dois instantes de tempo infinitesimalmente vizinhos [7],

$$\delta \hat{S} = \int_{t_0}^{t'} d\tau' \hat{L}(q'(\tau'), \dot{q}'(\tau'), \tau') - \int_{t_0}^t d\tau \hat{L}(q(\tau), \dot{q}(\tau), \tau),$$

onde as variações temporais são dadas por

$$\delta t = t' - t.$$

Tomando o valor das variáveis dinâmicas do sistema no tempo t' , podemos definir a variação total de um operador q como sendo a mudança gerada tanto pela variação do tempo quanto pela mudança na descrição do sistema,

$$\delta q = q'(t') - q(t).$$

Essas variações devem ser distinguidas daquelas originadas apenas pela escolha de uma descrição diferente do sistema do sistema, ou seja, deve ser distinguida daquilo a que costumamos denominar uma variação *funcional* ou *de forma*, na qual o instante de tempo é mantido fixo

$$\delta_0 q = q'(t) - q(t),$$

A variação total deve então conter tanto a variação funcional quanto aquela devida à mudança induzida pela variação do tempo, o que pode ser expresso como

$$\delta q = \delta_0 q + \frac{dq(t)}{dt} \delta t. \quad (29)$$

Com isto, a expressão para $\delta \hat{S}$ será dada por

$$\begin{aligned} \delta \hat{S} &= \int_{t_0}^t [(dt + \delta dt) (\hat{L} + \delta \hat{L}) - dt \hat{L}] = \int_{t_0}^t dt \left[\frac{d(\hat{L} \delta t)}{dt} + \delta_0 \hat{L} \right] = \int_{t_0}^t dt \left[\frac{d}{dt} (\hat{L} \delta t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \delta_0 q) + \frac{\delta \hat{L}}{\delta q} (\delta q - \dot{q} \delta t) \right] = \\ &= \left[\hat{L} \delta t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} (\delta q - \dot{q} \delta t) \right]_{t_0}^t + \int_{t_0}^t dt \frac{\delta \hat{L}}{\delta q} \delta_0 q = \hat{G}_2 - \hat{G}_1 \end{aligned} \quad (30)$$

³Para evitar sobrecarregar a notação, no restante desta seção omitiremos o símbolo $\hat{}$ sobre os operadores de coordenadas generalizadas, ficando implícito que todos os q são operadores.

A natureza quântica das variações efetuadas, dada pela expressão (28), implica então que somente os termos de superfície devem contribuir para a variação do operador ação, o que implica que

$$\int_{t_0}^t dt \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right\} \delta_0 q = 0,$$

o que é equivalente a um conjunto de equações diferenciais para a evolução temporal das coordenadas generalizadas.

Dado o raciocínio anterior, temos que a variação do operador de ação quântica é dado por

$$\delta \hat{S} = \left(\frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \delta q - \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \dot{q} - \hat{L}(t) \right\} \delta t \right) \Big|_{t_0}^t.$$

Comparando este resultado com (28),

$$\delta \hat{S} = \hat{G} - \hat{G}_0,$$

podemos concluir que

$$\hat{G} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \delta q - \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \dot{q} - \hat{L}(t) \right\} \delta t.$$

Seguindo a definição clássica de momento generalizado temos que

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}} \equiv \hat{p},$$

além disso, para casos nos quais não temos vínculos, podemos definir o operador Hamiltoniano

$$\hat{H} \equiv \hat{p}\dot{q} - \hat{L},$$

de forma que o operador \hat{G} poderá ser escrito como

$$\hat{G} = \hat{p}\delta\dot{q} - \hat{H}\delta t. \quad (31)$$

Esta é a forma Hamiltoniana do princípio de ação quântica, e é fundamental para estudar a dinâmica em termos de equações diferenciais de primeira ordem.

4.3. Relações de comutação canônicas

Vimos até aqui que, na sua forma hamiltoniana, o princípio de ação quântica é dado por

$$\delta \langle [a(t) | b(t_0)] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a(t) | \left(\hat{p}\delta\dot{q} - \hat{H}\delta t \right) \Big|_{t_0}^t | b(t_0) \rangle. \quad (32)$$

Com este resultado, podemos agora estudar as variações dos operadores e variáveis dinâmicas do sistema. Para isto, comecemos observando que o gerador⁴ $\hat{G} = \hat{p}\delta\dot{q} - \hat{H}\delta t$ efetua variações apenas na coordenada generalizada \hat{q} e no tempo. Restringindo a análise para

o caso em que não temos variações no tempo ($\delta t = 0$) o gerador dos deslocamento infinitesimais será $\hat{G}_q = \hat{p}\delta_q\hat{q}$ e teremos que, por consistência, a variação do operador posição \hat{q} deverá ser

$$\begin{aligned} \delta_q \hat{q}^i &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}^i, \hat{G}_q] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\hat{q}^i, \delta_q \hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar} [\hat{q}^i, \hat{p}_j] \delta_q \hat{q}^j. \end{aligned}$$

Da mesma forma, para o operador momento \hat{p}

$$\begin{aligned} \delta_q \hat{p}_i &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{G}_q] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\hat{p}_i, \delta_q \hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \delta_q \hat{q}^j, \end{aligned}$$

onde usamos aqui a propriedade $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$. Resumindo, ficamos com o seguinte conjunto de equações de consistência,

$$\begin{aligned} \delta_q \hat{q}^i &= -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\hat{q}^i, \delta_q \hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar} [\hat{q}^i, \hat{p}_j] \delta_q \hat{q}^j, \quad (33) \\ \delta_q \hat{p}_i &= -\frac{i}{\hbar} \hat{p}_j [\hat{p}_i, \delta_q \hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \delta_q \hat{q}^j. \end{aligned}$$

As expressões anteriores levam em conta apenas as variações em \hat{q} . Devemos então completar esse quadro com expressões que nos forneçam as variações induzidas por mudanças em \hat{p} . Para isto, utilizamos o fato de que as variações do operador ação são geradas pela adição de termos de fronteira. Assim, tomando uma Lagrangiana da forma

$$\bar{\hat{L}} = \hat{L} + \frac{d\hat{\Lambda}}{dt},$$

teremos que na Eq. (26) a ação se transforma em

$$\bar{\hat{S}}_{t,t_0} = \int_{t_0}^t \bar{\hat{L}} dt = \int_{t_0}^t \hat{L} dt + \hat{\Lambda} \Big|_{t_0}^t,$$

e por isso sua variação é dada por

$$\delta \bar{\hat{S}}_{t,t_0} = \bar{\hat{G}} - \bar{\hat{G}}_0 = (\hat{G} + \delta\hat{\Lambda}) - (\hat{G}_0 + \delta\hat{\Lambda}_0).$$

Como exemplo, se escolhermos $\hat{\Lambda} = -\hat{p}\hat{q}$ não teremos consequências sobre a dinâmica do sistema, apenas a troca de \hat{p} por \hat{q} , que nos permitirá obter as relações restantes à Eq. (33). Tomando a variação de $\hat{\Lambda}$

$$\delta\hat{\Lambda} = -\delta\hat{p}\hat{q} - \hat{p}\delta\hat{q},$$

e usando as relações

$$\begin{aligned} \bar{\hat{G}}_0 - \hat{G}_0 &= \delta\hat{\Lambda}_0, \\ \bar{\hat{G}}_1 - \hat{G}_1 &= \delta\hat{\Lambda}_1, \end{aligned}$$

⁴É importante salientar que posição e momento devem ser entendidos como vetores cujas várias componentes constituem os diversos observáveis físicos mutuamente compatíveis entre si. Assim, denotaremos simplesmente $\hat{p}\delta\hat{q} = \hat{p}_k\delta\hat{q}^k$ o produto escalar, utilizando a convenção da soma de Einstein.

temos

$$\widehat{G}_p = -\delta\hat{p}\hat{q} - \hat{H}\delta t,$$

que conseqüentemente com a Eq. (33) e tomando ($\delta t = 0$) origina as seguintes expressões para as variações dos operadores

$$\begin{aligned}\delta_p\hat{q}^i &= \frac{i}{\hbar}\delta_p\hat{p}_k[\hat{q}^i, \hat{q}^k] + \frac{i}{\hbar}[\hat{q}^i, \delta_p\hat{p}_k]\hat{q}^k, \\ \delta_p\hat{p}_i &= \frac{i}{\hbar}\delta_p\hat{p}_k[\hat{p}_i, \hat{q}^k] + \frac{i}{\hbar}[\hat{p}_i, \delta_p\hat{p}_k]\hat{q}^k.\end{aligned}\quad (34)$$

As variações generalizadas (33) e (34) foram construídas quando os operadores \hat{q} e \hat{p} são variados de maneira mutuamente independente, portanto as variações relativas devem ser nulas:

$$\delta_p\hat{q}^i = \delta_q\hat{p}_i = 0.$$

Com isto, se devem cumprir as seguintes identidades

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar}\hat{p}_j[\hat{q}^i, \delta_q\hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar}[\hat{q}^i, \hat{p}_j]\delta_q\hat{q}^j &= \delta_q\hat{q}^i, \\ \frac{i}{\hbar}\delta_p\hat{p}_k[\hat{q}^i, \hat{q}^k] + \frac{i}{\hbar}[\hat{q}^i, \delta_p\hat{p}_k]\hat{q}^k &= 0, \\ -\frac{i}{\hbar}\hat{p}_j[\hat{p}_i, \delta_q\hat{q}^j] - \frac{i}{\hbar}[\hat{p}_i, \hat{p}_j]\delta_q\hat{q}^j &= 0, \\ \frac{i}{\hbar}\delta_p\hat{p}_k[\hat{p}_i, \hat{q}^k] + \frac{i}{\hbar}[\hat{p}_i, \delta_p\hat{p}_k]\hat{q}^k &= \delta_p\hat{p}_i.\end{aligned}$$

Considerando a álgebra de medida para observáveis compatíveis temos

$$[\hat{q}^i, \hat{q}^k] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

Assim, uma das possíveis soluções para este sistema é

$$[\hat{q}^i, \delta_p\hat{p}_k] = [\hat{p}_i, \delta_p\hat{p}_k] = [\hat{p}_i, \delta_q\hat{q}^j] = [\hat{q}^i, \delta_q\hat{q}^j] = 0,$$

com o que obtemos, de maneira natural,

$$[\hat{q}^i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_j^i,$$

que são as relações de comutação canônicas, para as variáveis que descrevem a dinâmica do sistema, ou seja, os operadores de momento e posição generalizados.

4.4. Equações de Heisenberg

Na seção anterior estudamos como são as variações dos operadores quando não envolvemos o tempo. Porém, o objetivo do estudo da dinâmica é a evolução temporal, de modo que agora tomaremos só a parte do gerador que envolve o tempo, i.e., $\hat{G}_t = -\hat{H}\delta t$. Em essência, o operador \hat{G}_t está relacionado com a transformação unitária que relaciona as descrições do sistema em um tempo t com aquela análoga no tempo $t + \delta t$, portanto, podemos ver que, tomando um operador \hat{A} qualquer em função das variáveis dinâmicas do sistema \hat{q} , \hat{p} e t , a sua variação dependerá basicamente das variações das variáveis dinâmicas, ou seja,

$$\delta_t\hat{A} = \hat{A}(\hat{q}(t + \delta t), \hat{p}(t + \delta t), t) - \hat{A}(\hat{q}(t), \hat{p}(t), t).$$

Os operadores canônicos no instante futuro $t + \delta t$, são obtidos através da variação infinitesimal no parâmetro temporal

$$\hat{q}(t + \delta t) = \hat{q} + \delta_t\hat{q} = \hat{q}(t) + \frac{d\hat{q}(t)}{dt}\delta t,$$

com uma expressão análoga para $\hat{p}(t + \delta t)$. Com isto, $\delta_t\hat{A}$ é dado por

$$\begin{aligned}\delta_t\hat{A} &= \hat{A}(\hat{q}(t + \delta t), \hat{p}(t + \delta t), t) - \hat{A}(\hat{q}(t), \hat{p}(t), t) \\ &= \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{q}}\frac{d\hat{q}}{dt} + \frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}}\frac{d\hat{p}}{dt}\right)\delta t \\ &= \left(\frac{d\hat{A}}{dt} - \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)\delta t.\end{aligned}$$

Finalmente, retomando a expressão na Eq. (22) temos

$$\delta_t\hat{A} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}, \hat{H}]\delta t = \left(\frac{d\hat{A}}{dt} - \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)\delta t,$$

obtendo finalmente a equação diferencial

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}. \quad (35)$$

Esta é a equação de Heisenberg para a evolução temporal de um observável.

4.5. Equação de Schrödinger

Da mesma forma que para o caso da equação de Heisenberg, onde só tomamos as variações sobre os operadores, podemos agora tomar o caso em que as variações da função de transformação são geradas por mudanças nos estados. Como desejamos estudar a evolução temporal do sistema, a maneira mais simples de atingir isso é tomando um dado estado inicial fixo $|\psi\rangle$ e realizar variação apenas no estado final. Isso implica que o gerador das variações infinitesimais tem ação nula sobre o estado inicial,

$$|b(t_0)\rangle = |\psi\rangle,$$

$$\hat{G}_0|\psi\rangle = \delta|\psi\rangle = 0, \quad (36)$$

e não nula para tempos posteriores,

$$\delta\langle a(t)| = \langle a(t)|\hat{G}.$$

A descrição de Schrödinger para a mecânica quântica está relacionada não apenas à escolha da evolução ser representada por mudanças no estado final, mas também pela escolha de que esse estado final caracterize o conjunto completo de observáveis escolhidos como coordenadas generalizadas do sistema, ou seja,

$$\langle a(t)| = \langle q, t|.$$

O princípio de ação quântica de Schwinger implica então que

$$\delta \langle q, t | \psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle q, t | (\hat{p} \delta \hat{q} - \hat{H} \delta t) | \psi \rangle.$$

Como escolhemos $[\hat{p}, \delta \hat{q}] = 0$, a expressão precedente toma a seguinte forma

$$\delta \langle q, t | \psi \rangle = \delta q \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p} | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{H} | \psi \rangle \delta t. \quad (37)$$

Entretanto, se considerarmos a função de transformação como uma função numérica dependente de q e t , a variação total será dada por⁵

$$\delta \langle q, t | \psi \rangle = \delta q \frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial q} + \delta t \frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial t}, \quad (38)$$

onde por simples comparação da Eq. (37) com a Eq. (38) resulta nas equações

$$\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p} | \psi \rangle = \frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial q}, \quad (39a)$$

e

$$\frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (39b)$$

Esta última é a equação de Schrödinger que estabelece a evolução temporal dos estados do sistema, a

$$F(\hat{A}, \hat{B}) = F_0 + a_1 \hat{A} + a_2 \hat{A}^2 + \dots + b_1 \hat{B} + b_2 \hat{B}^2 + \dots + c_{11} \hat{A} \hat{B} + c_{21} \hat{A}^2 \hat{B} + \dots + c_{12} \hat{A} \hat{B}^2 + \dots + d_{11} \hat{B} \hat{A} + \dots + e_{111} \hat{A} \hat{B} \hat{A} + \dots$$

Usando as relações de comutação entre \hat{A} e \hat{B} podemos reordenar os termos da série de modo que as potências do operador \hat{A} apareçam sempre à esquerda, enquanto que as potências do operador \hat{B} apareçam sempre à direita,

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

onde os novos coeficientes \mathcal{F}_0 , \mathcal{A}_1 , etc., são obtidos dos coeficientes originais por meio de combinação de termos. Chamamos a esta nova forma da função F uma *forma bem ordenada de Dirac* [4, 11], i.e., $F(\hat{A}, \hat{B}) = \mathcal{F}(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_k f_k(\hat{A}) g_k(\hat{B})$.

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

$$\begin{aligned} \langle a | F(\hat{A}, \hat{B}) | b \rangle &= \langle a | \sum_k f_k(\hat{A}) g_k(\hat{B}) | b \rangle \\ &= \sum_k f_k(a) g_k(b) \langle a | b \rangle \\ &= \mathcal{F}(a, b) \langle a | b \rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Assim, se usarmos a Eq. (41) para avaliar a variação

⁵É importante que se entenda aqui a notação $\frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial q}$ como representando o *gradiente* da função de transformação, pois q é o *vetor* dos autovalores das coordenadas, ou seja, $\frac{\partial \langle q, t | \psi \rangle}{\partial q} = \nabla_q \langle q, t | \psi \rangle$.

primeira (Eq. (39a)) permite associar a representação do operador momento no espaço de coordenadas

$$\frac{i}{\hbar} \hat{p} \rightarrow \frac{\partial}{\partial q}, \quad (40)$$

Temos assim duas maneiras distintas de realizar a evolução temporal do sistema, cada uma associada a uma escolha particular de variações do sistema físico.

4.6. Operadores bem ordenados de Dirac e integração do princípio ação

Conforme dissemos na introdução, a proposição do uso da mecânica Lagrangiana na teoria quântica foi idéia de Paul A.M. Dirac [4]. Para associar o conceito de derivadas aos operadores e portanto às funções de transformação, Dirac introduziu a idéia de operador bem ordenado, que não é mais que o rearranjo de uma função de operadores para facilitar sua avaliação como elemento matricial.

Considere o elemento matricial de uma função de operadores da forma

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

onde \hat{A} e \hat{B} , representam cada um conjunto de observáveis. Vamos supor que a função F possa ser expandida na forma de uma série

Portanto, vemos que a forma bem ordenada do operador ação nos permite fazer uma integração direta da função de transformação, obtendo

$$\langle a(t_1)|b(t_0)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t_1,t_0}}. \quad (42)$$

Esta forma particular é explicitamente aquela proposta como ansatz por Dirac na Ref. [4] e obtida aqui como uma consequência direta do princípio de ação quântica de Schwinger.

4.7. Equação de Hamilton-Jacobi quântica

A forma (42) para a função de transformação nos permite obter uma equação quântica análoga à equação de Hamilton-Jacobi clássica.

Assim, tomando a forma da equação de Schrödinger (39b), vemos que

$$-\frac{i}{\hbar}\langle q|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\partial\langle q|\psi\rangle}{\partial t} = \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t_0,t}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial\mathcal{W}_{t_0,t}}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t_0,t}}, \quad (43)$$

de onde, por comparação, obtemos

$$\langle q|-\hat{H}|\psi\rangle = \langle q|\frac{\partial\hat{\mathcal{W}}_{t_0,t}}{\partial t}|\psi\rangle.$$

Similarmente, para a Eq. (39a)

$$\begin{aligned} \frac{\partial\langle q|\psi\rangle}{\partial q} &= \frac{i}{\hbar}\langle q|\hat{p}|\psi\rangle = \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{W}_{t_0,t}}}{\partial q} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial\mathcal{W}_{t_0,t}}{\partial q}\langle q|\psi\rangle \\ \langle q|\hat{p}|\psi\rangle &= \langle q|\frac{\partial\hat{\mathcal{W}}_{t_0,t}}{\partial\hat{q}}|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Temos assim um conjunto de equações operatoriais que estabelecem o sistema de equações de Hamilton-Jacobi quânticas

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{W}}}{\partial t} + \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t) = 0, \quad (44a)$$

e para o momento generalizado,

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{W}}}{\partial\hat{q}} = \hat{p}. \quad (44b)$$

Assim como as equações de Heisenberg e de Schrödinger, este conjunto de equações de Hamilton-Jacobi constitui uma nova forma de representar a dinâmica do sistema físico, e nos permite obter as amplitudes de transição para um sistema quântico qualquer.

Observe que a noção de derivada de operadores está associada a um esquema de ordenamento específico. Não iremos nos alongar sobre os detalhes matemáticos necessários para definir rigorosamente essa derivada, mais detalhes podem ser encontrados na referência [23].

4.8. Exemplos de aplicação do princípio de ação quântica

Aqui faremos uso do princípio de ação quântica para encontrar as funções de transformação para sistemas quânticos simples, tendo como base o uso do operador principal de Hamilton. Para tanto, faremos uso das soluções clássicas na integral da ação clássica e de uma sucessão de funções adequadas que convergem à delta de Dirac.

4.8.1. Ação para a partícula livre

A função de transformação associada à partícula livre no nível quântico é de grande importância. Esta função fundamenta o estudo e a propagação de sistemas como pacotes de onda em espaços livres de interação, e como tal, esta função é muito útil no estudo de espalhamento.

A ação clássica da partícula livre é dada por

$$S = \frac{m}{2}\frac{(q_1 - q_0)^2}{t_1 - t_0}.$$

Para encontrar a contraparte quantizada desse observável, escolhemos *a priori* um ordenamento dos tempos menores à esquerda, de forma que

$$\hat{S} = \frac{m}{2}\frac{\hat{q}^2 - \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0}{t - t_0}. \quad (45)$$

Vamos supor que o operador principal de Hamilton possa ser escrito como

$$\widehat{\mathcal{W}} = \hat{S} + \hat{\phi}(t), \quad (46)$$

onde se inclui o termo $\hat{\phi}(t)$ para dar conta dos termos que podem surgir dado o ordenamento assumido na Eq. (45).

Por definição, o operador momento é dado por

$$\frac{\partial\widehat{\mathcal{W}}}{\partial\hat{q}} = \frac{\partial\hat{S}}{\partial\hat{q}} = m\frac{\hat{q} - \hat{q}_0}{t - t_0}.$$

Usando a relação canônica $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, entre o momento \hat{p} e a posição \hat{q} podemos derivar a relação de comutação dos operadores de posição para tempos diferentes,

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\hat{q}, m\frac{\hat{q} - \hat{q}_0}{t - t_0} \right] = i\hbar,$$

o que conduz a

$$\hat{q}_0\hat{q} = \frac{i\hbar}{m}(t - t_0) + \hat{q}\hat{q}_0.$$

Dessa forma, o operador Hamiltoniano pode ser expresso como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{m}{2}\left(\frac{\hat{q} - \hat{q}_0}{t - t_0}\right)^2 = \\ &= \frac{m}{2(t - t_0)^2}\left\{\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - \frac{i\hbar}{m}(t - t_0) - 2\hat{q}\hat{q}_0\right\}. \end{aligned} \quad (47)$$

Por outro lado, derivando o operador principal de Hamilton com relação ao tempo, encontramos

$$\begin{aligned}\frac{\partial \widehat{\mathcal{W}}}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \\ &= -\frac{m}{2(t-t_0)^2} \{ \hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0 \} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t}.\end{aligned}$$

Substituindo isso e a Eq. (47) na equação quântica de Hamilton-Jacobi (44a), obtemos

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2(t-t_0)}.$$

Solucionando a equação diferencial para $\hat{\phi}$, obtemos

$$\hat{\phi}(t) = \hat{\phi}_0 + \frac{i\hbar}{2} \ln(t-t_0).$$

Uma vez que o operador $\hat{\phi}$ depende somente do tempo, devemos observar que $\hat{\phi}_0 = \phi_0 \hat{1}$, portanto se tomarmos $\phi_0 = \frac{i\hbar}{2} \ln(A)$, com A uma constante arbitrária, obtemos a seguinte forma para a função $\hat{\phi}(t)$

$$\hat{\phi}(t) = \frac{i\hbar}{2} \ln A(t-t_0).$$

Assim, $\widehat{\mathcal{W}}$ tem a forma

$$\widehat{\mathcal{W}} = \frac{1}{2} m \frac{\hat{q}^2 + \hat{q}_0^2 - 2\hat{q}\hat{q}_0}{t-t_0} + \frac{i\hbar}{2} \ln(A(t-t_0)),$$

de modo que a função de transformação (42) será dada por

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{A(t-t_0)}} \exp \left\{ -\frac{m}{2i\hbar} \frac{(q-q_0)^2}{t-t_0} \right\}.$$

Para identificar a constante A , podemos usar o fato que

$$\lim_{t_1 \rightarrow t_0} \langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \delta(q_1 - q_0).$$

Portanto, se usarmos a seguinte sucessão de funções para a delta de Dirac

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

podemos ver que se fizermos a identificação

$$y \rightarrow q_1 - q_0,$$

e

$$n^2 = \frac{m}{2i\hbar(t_0 - t_1)},$$

a função de transformação poderá ser escrita como

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t_0 - t_1)}} \exp \left[-\frac{m}{2i\hbar} \frac{(q-q_0)^2}{t-t_0} \right].$$

⁶Aqui supomos um ordenamento idêntico ao exemplo anterior.

4.8.2. Função de transformação para o oscilador harmônico

O oscilador harmônico é, talvez, o modelo de maior utilidade na mecânica quântica. Dada a forma do seu espectro, as relações algébricas dos seus operadores associados e a forma em que estão construídos seus estados, esse modelo é útil no estudo de inúmeros sistemas quânticos. Com uma grande generalidade todas as teorias que tratam sistemas com pequenas oscilações como os sólidos, o espectro vibracional de moléculas e diversos sistemas em óptica quântica podem ser estudados com este tipo de modelo. Os estados quânticos associados ao oscilador quantizado também são de grande riqueza, contando entre eles os estados comprimidos e os estados coerentes que são os estados mais “clássicos” aos quais o campo eletromagnético pode ser associado.

A função de transformação associada ao oscilador harmônico pode ser calculada via integral de Feynman [24] mas, para este caso e outros de sistemas quânticos simples, o formalismo de ação quântica de Schwinger tem uma grande economia de cálculos, obtendo os mesmos resultados.

Trataremos aqui a forma fundamental da função de transformação que pode ser associada com este modelo. A ação quântica para o oscilador harmônico será dada pela expressão⁶

$$\hat{S} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t-t_0)} \{ (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) \cos \omega(t-t_0) - 2\hat{q}_0\hat{q} \}.$$

Assim como no exemplo anterior, adotaremos o ansatz

$$\widehat{\mathcal{W}} = \hat{S} + \hat{\phi}(t).$$

Portanto, usando a Eq. (44b) o momento estará dado por

$$\hat{p} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{q}} = \frac{m\omega}{\sin \omega(t-t_0)} \{ \hat{q} \cos \omega(t-t_0) - \hat{q}_0 \}. \quad (48)$$

Como já sabemos, para conhecer as relações de comutação entre \hat{q}_0 e \hat{q} podemos usar a comutação entre as variáveis canônicas,

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\hat{q}, \frac{m\omega}{\sin \omega(t-t_0)} \{ \hat{q} \cos \omega(t-t_0) - \hat{q}_0 \} \right],$$

obtendo assim

$$\hat{q}_0\hat{q} = \hat{q}\hat{q}_0 + \frac{i\hbar \sin \omega(t-t_0)}{m\omega}. \quad (49)$$

Agora, tomando o ordenamento dado na Eq. (49) e a forma do momento (48) o operador Hamiltoniano será

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} \{ \hat{q}^2 \cos^2 \omega(t-t_0) - \\ &\quad 2\hat{q}\hat{q}_0 \cos \omega(t-t_0) + \hat{q}_0^2 \} - \\ &\quad \frac{i\hbar\omega}{2} \cot \omega(t-t_0) + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2.\end{aligned}$$

Diferenciando o operador ação com respeito ao tempo, temos que

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = -\frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{\sin^2 \omega(t-t_0)} \{(\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) \times \cos^2 \omega(t-t_0) - 2\hat{q}_0 \hat{q} \cos \omega(t-t_0)\} - \frac{m\omega^2}{2} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2).$$

Substituindo essas informações na equação quântica de Hamilton-Jacobi,

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{W}}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = -\hat{H}, \quad (50)$$

encontramos uma equação diferencial para $\hat{\phi}$ cuja solução é:

$$\hat{\phi}(t) = i\frac{\hbar}{2} \ln(A \sin \omega(t-t_0)).$$

A amplitude de transição possui então a forma

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{A \sin \omega(t-t_0)}} \times \exp \left\{ \frac{im\omega \{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega(t-t_0) - 2q_0 q \}}{2\hbar \sin \omega(t-t_0)} \right\}.$$

Seguindo novamente a mesma metodologia do exemplo anterior para a identificação da constante de integração, obtemos $A = \frac{2\pi i \hbar}{m\omega}$. Assim, a expressão para a função de transformação para o oscilador harmônico será dada por

$$\langle q, t | q_0, t_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t-t_0)}} \times \exp \left[\frac{im\omega \{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega(t-t_0) - 2q_0 q \}}{2\hbar \sin \omega(t-t_0)} \right]. \quad (51)$$

Esta função de transformação, chamada também de propagador, é usada para calcular a evolução temporal de qualquer estado inicial em que possa estar o sistema. Um exemplo é a evolução temporal de pacotes de onda em potenciais harmônicos, que dão origem a uma descrição dos estados coerentes [25].

4.9. O operador Hamiltoniano bem ordenado para a derivação das funções de transformação

Até agora, construímos as funções de transformação usando a ação do sistema e as equações de Hamilton-Jacobi em nível quântico, porém temos uma outra forma de derivar tais funções de transformação. Como vimos, ao longo deste trabalho o Hamiltoniano quântico tem sido um ponto de partida em todas as nossas análises. De fato, os princípios da mecânica quântica foram construídos com analogias na dinâmica Hamiltoniana clássica. No caso do princípio de ação quântica,

também é possível encontrar as funções de transformação usando a intervenção direta do Hamiltoniano.

Aqui o princípio de Schwinger aparece com suas peculiaridades, pois a dinâmica do sistema é realizada de forma mista, evoluindo tanto operadores quanto estados, de modo a obter a função de transformação desejada.

Para isto, podemos começar tomando a equação de Schrödinger (39b) para a evolução dos estados e escolher neste caso $|\psi\rangle = |q_0\rangle$. O Hamiltoniano bem ordenado, $\tilde{H}(q, q_0; t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(q, q_0; t)$, induz então a seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q, t | q_0 \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{\mathcal{H}}(q, q_0; t) | q_0 \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(q, q_0; t) \langle q, t | q_0 \rangle. \end{aligned} \quad (52)$$

Para integrar o resultado anterior, precisamos explicitar a possível dependência de $\langle q, t | q_0 \rangle$ com q e q_0 , para isto podemos considerar que

$$\langle q, t | q_0 \rangle = \mathcal{A}(q, q_0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(q, q_0; \tau) d\tau \right], \quad (53)$$

onde a expressão $\mathcal{A}(q, q_0)$ provém da integração da função de transformação no tempo, podendo sempre ser determinada com a condição

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q, t | q_0 \rangle = \delta(q - q_0).$$

Para a evolução temporal dos observáveis físicos, usamos as equações dinâmicas de Heisenberg (35) para o momento \hat{p} , e a posição \hat{q}

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}], \quad (54)$$

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{q}, \hat{H}]. \quad (55)$$

Portanto, nesta abordagem que lança mão exclusivamente do operador Hamiltoniano, jamais se faz uso de expressões clássicas correspondentes às quantidades quânticas, manifestando portanto que o princípio de ação quântica dispensa o tradicional formalismo de “quantização” de um sistema clássico. Todas as quantidades do problema são quânticas, e tratadas como tal, desde o princípio.

4.9.1. Função de transformação para o oscilador harmônico

Trataremos novamente o exemplo do oscilador harmônico mas usando o Hamiltoniano bem ordenado. Como sabemos, o hamiltoniano quântico do sistema é dado por

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2, \quad (56)$$

usando as equações de Heisenberg (54) e (55), temos

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -\hat{q}m\omega^2 \quad \text{e} \quad \frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}.$$

Fazendo uso das condições iniciais $\hat{p}(t_0 = 0) = \hat{p}_0$ e $\hat{q}(t_0 = 0) = \hat{q}_0$, esse sistema acoplado de primeira ordem pode ser explicitamente resolvido, obtendo a seguinte expressão para o momento

$$\hat{p} = \frac{m\omega}{\sin \omega t} \hat{q}_0 - m\omega \frac{\cos \omega t}{\sin \omega t} \hat{q}. \quad (57)$$

Substituindo a Eq. (57) no Hamiltoniano (56), temos

$$\begin{aligned} \hat{H}(q, q_0; t) &= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) - \\ &\frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0 \hat{q} + \hat{q} \hat{q}_0). \end{aligned} \quad (58)$$

Este Hamiltoniano pode ser ordenado usando as relações de comutação canônicas para obter

$$[\hat{q}, \hat{q}_0] = i\hbar \frac{\sin \omega t}{m\omega}.$$

Assim, a forma bem ordenada do Hamiltoniano (58) é dada por

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{q}, \hat{q}_0; \tau) &= \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (\hat{q}_0^2 + \hat{q}^2) - \\ &m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} \hat{q} \hat{q}_0 + \frac{i\hbar\omega \cos \omega t}{2 \sin \omega t}. \end{aligned}$$

Agora podemos solucionar a Eq. (52), tomando para este caso

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q, t | q_0 \rangle}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\sin^2 \omega t} (q_0^2 + q^2) - \right. \\ &\left. m\omega^2 \frac{\cos \omega t}{\sin^2 \omega t} q q_0 + \frac{i\hbar\omega \cos \omega t}{2 \sin \omega t} \right) \langle q, t | q_0 \rangle, \end{aligned}$$

de onde, integrando, obtemos

$$\begin{aligned} \langle q, t | q_0 \rangle &= \sqrt{\frac{1}{A(q, q_0) \sin \omega t}} \times \\ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega t} \left\{ (q_0^2 + q^2) \cos \omega t - 2q_0 q \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (59)$$

Para obter a forma de $\mathcal{A}(q, q_0) = \sqrt{\frac{1}{A(q, q_0) \sin \omega t}}$ devemos fazer uso da representação do operador momento (39a) em termos das autofunções das coordenadas generalizadas. Diferenciando a Eq. (59) com relação a q , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q, t | q_0 \rangle}{\partial q} &= \left(\sqrt{A} \frac{\partial}{\partial q} \sqrt{\frac{1}{A}} \right) \langle q, t | q_0 \rangle + \\ &\left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{\sin \omega t} (q \cos \omega t - q_0) \right\} \langle q, t | q_0 \rangle. \end{aligned}$$

Por outro lado, da Eq. (57), temos que

$$\frac{i}{\hbar} \langle q, t | \hat{p} | q_0 \rangle = -\frac{m\omega}{\sin \omega t} (q \cos \omega t - q_0) \langle q, t | q_0 \rangle,$$

o que implica que

$$\frac{\partial A}{\partial q} = 0.$$

Procedendo com um raciocínio análogo, chegaremos à conclusão que A também não depende de q_0 , sendo portanto uma constante. Essa constante A pode ser encontrada tomando o limite $t \rightarrow 0$, e verificando $\lim_{t \rightarrow 0} \langle q, t | q_0 \rangle = \delta(q - q_0)$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \langle q, t | q_0 \rangle &= \lim_{t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{1}{A \sin \omega t}} \times \\ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin \omega t} (q - q_0)^2 \right\} &= \delta(q - q_0). \end{aligned}$$

Com este resultado obtemos a mesma função de transformação para o oscilador harmônico que na Eq. (51)

$$\begin{aligned} \langle q, t | q_0 \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} \times \\ \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2i\hbar \sin \omega t} [(q_0^2 + q^2) \cos \omega t - 2q_0 q] \right\}. \end{aligned}$$

4.9.2. Função de transformação para o oscilador harmônico forçado

O oscilador harmônico forçado é rico em aplicações em mecânica quântica, pois permite o estudo da reação de sistemas quantizados frente à exposição a campos externos [26,27]. Dessa forma, situações como a interação de um conjunto de átomos interagindo com um campo externo monocromático dependente do tempo, como lasers e masers, correspondem a este tipo de modelo. Da mesma maneira, alguns efeitos quânticos os quais ocorrem quando se tem o controle sobre algumas transições entre determinados estados podem ser modelados com este tipo de oscilador.

Apresentaremos aqui o oscilador quântico forçado como nosso último exemplo de aplicação do princípio de Schwinger, muito embora exista ainda uma vasta gama de aplicações e desenvolvimentos formais que podem ser encontrados na literatura, [21].

O Hamiltoniano para o oscilador harmônico forçado é

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2 - m\lambda F(t) \hat{q},$$

onde $m\lambda$ é a constante de acoplamento com a fonte dependente do tempo. Usando as Eqs. (54) e (55) obtemos

$$\begin{aligned} \hat{p}(t) &= \frac{m\omega}{\sin \omega (t - t_0)} \left[\hat{q} \cos \omega (t - t_0) - \hat{q}_0 + \right. \\ &\left. \frac{\lambda}{m\omega} \int d\tilde{t} F(\tilde{t}) \cos \omega (t - \tilde{t}) \right]. \end{aligned}$$

Chamando $a = \frac{\lambda}{m\omega} \int d\tilde{t} F(\tilde{t}) \cos \omega (t - \tilde{t})$, podemos calcular o termo de energia cinética

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega (t - t_0)} [2a (\hat{q} \cos \omega (t - t_0) - \hat{q}_0) + a^2].$$

O operador Hamiltoniano pode ser bem ordenado no sentido de Dirac

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{q}_0, \hat{q}\hat{q}_0 + \hat{q}_0\hat{q}; t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(\hat{q}, \hat{q}_0, \hat{q}\hat{q}_0; t),$$

obtendo finalmente,

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m} &= \hat{q}^2 \frac{m\omega^2 \cos^2 \omega(t-t_0)}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} + \frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} 2a(\hat{q} \cos \omega(t-t_0) - \hat{q}_0) - \\ &2\hat{q}\hat{q}_0 \frac{m\omega^2 \cos \omega(t-t_0)}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} - i\hbar \frac{\omega \cos \omega(t-t_0)}{2 \sin \omega(t-t_0)} + \frac{m\omega^2 a^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} + \frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} \hat{q}_0^2. \end{aligned}$$

Com isso, o operador Hamiltoniano bem ordenado será expresso como

$$\begin{aligned} \hat{H} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} &= \hat{q}^2 \frac{m\omega^2 \cos^2 \omega(t-t_0)}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} + \frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} 2a(\hat{q} \cos \omega(t-t_0) - \hat{q}_0) - \\ &2\hat{q}\hat{q}_0 \frac{m\omega^2 \cos \omega(t-t_0)}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} - i\hbar \frac{\omega \cos \omega(t-t_0)}{2 \sin \omega(t-t_0)} + \frac{m\omega^2 a^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} + \\ &\frac{m\omega^2}{2 \sin^2 \omega(t-t_0)} \hat{q}_0^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2 - m\lambda F(t)\hat{q}. \end{aligned}$$

Usando a Eq. (39a) podemos avaliar a função $\mathcal{A}(q, q_0)$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle q, t|q_0 \rangle}{\partial q} &= \frac{\partial \mathcal{A}(q, q_0)}{\partial q} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(q, q_0; \tau) d\tau \right] - \\ &\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}(q, q_0) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(q, q_0; \tau) d\tau \right] \frac{\partial}{\partial q} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(q, q_0; \tau) d\tau, \end{aligned}$$

de onde podemos identificar a forma geral da função de transformação. Assim, seguindo o mesmo procedimento que para os outros sistemas, temos que recuperar no limite

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \langle q, t|q_0 \rangle = \delta(q - q_0),$$

logo, temos que

$$\langle q, t|q_0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega(t-t_0))}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(q, q_0) \right],$$

onde

$$S(q, q_0) = \frac{m\omega}{\sin \omega(t-t_0)} \times \left[(q^2 + q_0^2) \cos^2 \omega(t-t_0) - 2qq_0 + bq - \bar{b}q_0 - \frac{b\bar{b}}{m\omega} \right],$$

$$e \ b = \int d\tilde{t} F(\tilde{t}) \sin \omega(t-\tilde{t}) \ e \ \bar{b} = \int d\tilde{t} F(\tilde{t}) \cos \omega(\tilde{t}-t_0).$$

Como dissemos anteriormente, este é um modelo de particular importância que tem sido abordado por diferentes autores como Husimi [26] e Man'ko [27].

5. Comentários finais

A descrição da dinâmica quântica proporcionada pelo princípio de ação quântica de Schwinger permite o estudo deste tipo de fenômeno de uma maneira completa,

se usarmos a expressão para a comutação de operadores canônicos

$$[\hat{q}, \hat{p}] = -\frac{m\omega}{\sin \omega(t-t_0)} (\hat{q}\hat{q}_0 - \hat{q}_0\hat{q}) = i\hbar,$$

já que expressa da forma mais geral possível a dinâmica dos operadores e dos estados quânticos e fornece todas as descrições da mecânica quântica desde um só princípio.

Este formalismo, particularmente rico em analogias com a mecânica clássica, não constitui um procedimento tradicional de quantização. Desde o seu fundamento na teoria algébrica da medida, ele nasce como quântico, se mantendo assim até sua formulação dinâmica. Desta forma, as relações de comutação entre variáveis canônicas são decorrência da medição de observáveis não-compatíveis e da independência cinemática das variáveis dinâmicas. Esta independência cinemática restringe o tratamento mostrado aqui para sistemas que não possuem vínculos, porém a abordagem de teorias como a eletrodinâmica quântica também é possível, como mostrado nas Refs. [3, 17, 18].

As características dadas aos processos de medida e as formas em que são tomadas as respostas e as variações dos observáveis que descrevem o sistema, estão

associadas com uma descrição da dinâmica por meio de equações diferenciais de primeira ordem, o que demonstra a ligação com a formulação Hamiltoniana de uma forma direta. Originalmente, a proposta da inclusão da Lagrangiana para o estudo da dinâmica no nível quântico foi feita por Dirac [4], argüindo, entre outras coisas, que a formulação Lagrangiana é a versão mais geral possível para se descrever a dinâmica de um sistema físico qualquer. Podemos ver que a forma final do princípio de ação respalda esta idéia, porém, Schwinger usa a forma mais conveniente da Lagrangiana, a sua forma canônica, *i.e.*, em função do momento e da posição, evadindo que as equações diferenciais para os observáveis sejam de segunda ordem no tempo.

Os exemplos tratados neste artigo, tem como principal objetivo a obtenção dos resultados mais comuns abordados em cursos de graduação de mecânica quântica onde são usados os formalismos de Heisenberg, Schrödinger e Feynman, porém, desenvolvidos aqui de uma forma detalhada expondo as vantagens do uso do princípio de ação quântica de Schwinger.

Como vimos no último exemplo do oscilador harmônico forçado, o Hamiltoniano representa um sistema não-autônomo. Isto evidencia que, mesmo para sistemas não-autônomos mais complexos, o princípio de ação quântica continua tendo aplicação. Um outro caso desse tipo é o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo, que é um sistema amplamente usado em física moderna, como armadilhas de íons [28] e cavidades com paredes móveis [29]. Um tratamento deste sistema usando o princípio de ação quântica foi dado na Ref. [30].

Esperamos que esta pequena introdução didática à formulação variacional de Schwinger para a mecânica quântica ou princípio de ação quântica sirva de motivação, especialmente aos mais jovens, para que conheçam mais sobre o tema, explorando a literatura recomendada aqui e outras referências citadas nelas. Além disso, esperamos que isso motive também pesquisadores mais experientes a explorarem mais as possibilidades de aplicação deste fascinante princípio que, apesar de ter mais de 50 anos, ainda é pouco utilizado quando comparado a outras abordagens.

Agradecimentos

C.A.M. de Melo agradece à FAPEMIG pelo suporte parcial. B.M. Pimentel agradece ao CNPq e à CAPES pelo suporte parcial. J.A. Ramirez agradece à CAPES pelo suporte integral.

Referências

- [1] C.A.M. de Melo, B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, Revista Brasileira de Ensino de Física **33**, 3306 (2011), (1961) 1075; J.S. Schwinger, *Quantum Kinematics and Dynamics*, (W.A. Benjamin Publishers, 1970).
- [2] J.S. Schwinger, *Phys. Rev.* **82** (1951) 914; **91** (1953) 713; **91** (1953) 728; **92** (1953) 1283; **93** (1954) 615; **94** (1954) 1362.
- [3] P.A.M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, Band 3, Heft 1 (1933) 64. Uma versão traduzida do artigo pode ser encontrada em, *Selected Papers on Electrodynamics*, editada por J.S. Schwinger (Dover Publications Inc. - 1958) 312.
- [4] R.P. Feynman. *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*, Princeton University Publication No. 2948 (1942) Doctoral Dissertation Series Ann Arbor, MI.
- [5] S.S. Schweber, *QED and the Men Who Made It*, Princeton University Press (1994); J. Mehra, K.A. Milton, *Climbing the Mountain: The Scientific Biography of Julian Schwinger*, Oxford University Press, USA (2003); Y.J. Ng (Editor), *Julian Schwinger: The Physicist, the Teacher, and the Man*, World Scientific Pub Co Inc (1996).
- [6] E.C.G. Sudarshan and N. Mukunda, *Classical Dynamics: A Modern Perspective*, (John Willey and Sons Inc - 1974).
- [7] P. Weiss, *Proc. Roy. Soc.*, **A156** (1936) 192; **A169** (1938) 102; **A169** (1938) 119.
- [8] J.M. Jauch and F. Rohrlich, *The theory of photons and electrons* (Addison-Wesley, 1955) p.9.
- [9] E.T. Corson, *Introduction to tensors, spinors and relativistic wave-equations* (Blackie and Son Ltd, London, 1953, 1954) p.68.
- [10] P.A.M. Dirac, *Princípios de Mecânica Cuántica* (Ediciones Ariel - 1967).
- [11] D.J. Toms, *The Schwinger action principle an effective action* (Cambridge University Press - 2007).
- [12] A. Aragão, H. Boschi-Filho, C. Farina and F. Barone. *Non-Relativistic Propagators via Schwinger's Method. Braz. J. Phys.*, **37** (2007) 1260.
- [13] J.S. Schwinger, *PNAS* **4** (1958) 223.
- [14] R. Casana, C.A.M. de Melo and B.M. Pimentel, *Massless DKP field in a Lyra manifold, Class. Quant. Grav.* **24**, (2007) 723.
- [15] R. Casana, C.A.M. de Melo and B.M. Pimentel, *Spino-rial Field and Lyra Geometry, Astrophys. Sp. Sci.* **305**, (2006) 125.
- [16] R. Casana, C.A.M. de Melo and B.M. Pimentel, *Electromagnetic Field in Lyra Manifold: A First Order Approach, Braz. J. Phys.* **35**, (2005) 1151.
- [17] C.A.M. de Melo, B.M. Pimentel and P.J. Pompeia, *Schwinger's Principle and Gauge Fixing in the Free Electromagnetic Field, Il Nuovo Cim.* **B121**, (2006) 193.
- [18] R.R. Cuzinatto, C.A.M. de Melo and P.J. Pompeia, *Second order gauge theory, Ann. Phys.* **322** (2007), 1211.
- [19] C.A.M. de Melo and B.M. Pimentel, *Variational Formulation for Quaternionic Quantum Mechanics, Adv. App. Clif. Alg.* **20** (2010) 745.

- [21] C.A.M. de Melo e B.M. Pimentel, - *Formulação Variacional da Mecânica Quântica Vols. I e II*, Notas Internas do Instituto de Física Teórica - UNESP, (2004); Cópias disponíveis pela biblioteca do Instituto de Física Teórica - Unesp: IFT-N.001/2004 e IFT-N.002/2004.
- [22] J.S. Schwinger, *Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements*, (Springer, 2001).
- [23] C.A.M. de Melo, - *Princípio Variacional de Schwinger e Teoria Quântica: Aplicações à Mecânica Quântica Quaterniônica e ao Estudo de Sistemas Singulares*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física Teórica - UNESP, (2002).
- [24] C. Grosche and F. Steiner, *J. Math. Phys.*, **36**, (1995) 5.
- [25] A.F.R. De Toledo Piza, *Mecânica Quântica* (EDUSP - 2003).
- [26] K. Husimi, *Progres. Theor. Phys.* **9**, (1953) 381.
- [27] V.V. Dodonov and V.I. Man'ko, *Invariants and correlated states of nonstationary systems*, Trudy FIAN **183** (1987) 71 (Nauka, Moscow, 1987 and Nuova Science, Commack, N.Y., 1988).
- [28] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe and D. Wineland. *Quantum dynamics of single trapped ions. Rev. Mod. Phys.* **75**, (2003) 281.
- [29] V.V. Dodonov, A.B. Klimov and D.E. Nikonov, *Phys. Rev.* **A47** (1993) 4442; V. V. Dodonov, V. I. Man'ko and D. E. Nikonov, *Phys. Rev.* **A51** (1995) 3328; V. V. Dodonov and A. V. Dodonov, *J. Rus. Laser Research* **26** (2005) 6.
- [30] C.A.M. de Melo, B.M. Pimentel e J.A. Ramirez , *Non-Adiabatic Solution to the Time Dependent Quantum Harmonic Oscillator*, (Preprint arXiv:1101.0025).