

Conexões entre a mecânica clássica e a mecânica quântica

Bruce Reiner (9301861), Carlos H. Yamaguchi (9318459),
Marcelo Vinícius H. Cemin (9425852), Gabriel F. Caccáos (9017377)

Instituto de Física da USP

07 de novembro de 2017

1 Introdução

Desde a sua primeira formulação proposta por Newton em meados de 1680, decorrente de observações básicas da natureza, a mecânica clássica é tomada como principal ponto de partida tanto para a investigação de novos problemas quanto para o início de ensino e estudo de física. Sua posterior generalização derivada por Lagrange em 1780, juntamente com os métodos hamiltonianos de resolução, trouxeram uma formulação mais rigorosa, do ponto de vista matemático e mais abrangente, do ponto de vista físico. A generalização dos princípios de mecânica clássica permitem, de forma quase direta, verificar sua correlação com as demais áreas da física outrora desenvolvidas por caminhos alternativos como termodinâmica, ondulatória e eletromagnetismo.

Neste trabalho, procura-se estabelecer uma conexão entre mecânica clássica e mecânica quântica procurando um caminho lógico e natural de nascimento das ideias de quantização e fazendo um paralelo entre as principais ferramentas de ambas as teorias.

2 Metodologia

Procura-se primeiramente realizar um apanhado histórico a fim de melhor entender o contexto em que se desenvolve os fundamentos da Mecânica Quântica. Os experimentos, os problemas e as ideias que deles surgiram mostram, de maneira gradual,

que apesar da proposta de quantização parecer um “salto”, ainda que necessário, esteve em constante evolução, apoiando-se sempre na sólida, conhecida e já consagrada formulação da mecânica clássica. Uma vez com os mecanismos em mãos, procura-se estabelecer um paralelo entre a álgebra do mundo quântico, em especial os comutadores, a descrição matricial e a mecânica ondulatória proposta por Schrödinger e as equações da mecânica clássica como os parêntesis de Poisson, as equações de movimento e o formalismo de Hamilton-Jacobi. No decorrer das deduções, são usados, portanto, ideias e postulados ditos como fundamentais bem como as propriedades de operadores hermitianos.

3 Contextualização histórico-cronológica

3.1 1900

Lei de distribuição da radiação do corpo negro formulada por Max Planck com a introdução de sua famosa constante de maneira a ajustar os dados experimentais da época. Vindo de encontro com teorias consagradas da física clássica, Planck postulou que a energia emitida por partículas em vibração dar-se-ia de forma discreta e de maneira proporcional à sua frequência ν de vibração:

$$E = h\nu. \tag{1}$$

Posteriormente, a constante h de Planck consagrou-se não apenas como um recurso matemático de ajuste de dados, mas sim como uma das grandezas fundamentais da natureza intimamente ligada às ideias de quantização ainda em construção.

3.2 1905

Baseando-se nas ideias de Planck que expressava a energia de forma discreta e na tentativa de explicar todas as peculiaridades do efeito fotoelétrico, Einstein propôs um modelo de transmissão e absorção de energia que, além de conferir um caráter corpuscular e quantizado à luz, também introduziu a ideia de níveis de excitação atômica relacionada à transferência dessa energia.

3.3 1911

O modelo atômico ganha mais um grau de sofisticação com os experimentos de Rutherford que estudou o espalhamento de partículas alfa bombardeadas contra uma folha de ouro, concluindo a existência de um núcleo massivo, denso e carregado positivamente rodeado por uma região mais esparsa e de carga negativa.

3.4 1913

Ano da publicação do primeiro trabalho de Bohr que, além de constituir a primeira aplicação (com sucesso) dos princípios de quantização ao átomo de hidrogênio, também traz os postulados sobre os quais toda a mecânica quântica iria se fundamentar:

- existência de estados estacionários com energias W_n bem definidas;
- transição entre os níveis de energia acompanhada da emissão ou absorção da quantidade excedente de energia $W_{nm} = W_n - W_m$ em forma da radiação;
- frequência da radiação emitida segundo a equação de Planck: $\nu = W_{nm}/h$;
- quantização do momento angular $l = n\hbar$.

3.5 1915

Conectando a matemática já bem estabelecida da mecânica clássica com a necessidade triunfante de quantização, Wilson e Sommerfeld desenvolveram um poderoso método de quantização que se resume a resolver as equações clássicas de movimento pelo método Hamiltoniano e restringir as órbitas permitidas quantificando a variável ação de um sistema suposto periódico

$$\oint p_j dq_j = n_j h \quad (2)$$

O método rende exemplos e resultados interessantes:

3.5.1 Oscilador harmônico (quântico)

As equações de Hamilton no caso de um oscilador unidimensional de massa m e frequência natural ν_0 são

$$x(t) = x_0 \sin(2\pi\nu_0 t) \quad (3)$$

e

$$p_x(t) = 2m_0 x_0 \cos(2\pi\nu_0 t). \quad (4)$$

Substituindo-as na equação 2 com período de integração $T = 1/\nu_0$, obtém-se

$$\oint p_x dx = \int_0^T p_x(t) \frac{dx(t)}{dt} dt = m(2\pi\nu_0 x_0)^2 \int_0^{1/\nu_0} \cos^2(2\pi\nu_0 t) dt = nh.$$

Portanto,

$$x_{0_n} = \sqrt{\frac{nh}{2\pi^2\nu_0 m}}. \quad (5)$$

Assim, os níveis de energia são

$$\begin{aligned} W_n &= T_n + V_n = 2(\pi\nu_0 x_n)^2 m (\cos^2(2\pi\nu_0 t) + \sin^2(2\pi\nu_0 t)) \\ &= 2m(\pi\nu_0 x_n)^2 \\ &= nh\nu_0 = nW_0. \end{aligned} \quad (6)$$

3.5.2 Rotação rígida

Na rotação de um corpo de momento de inércia I e momento angular $p_\varphi = I\dot{\varphi}$ constante, a quantização de Wilson-Sommerfeld é dada por

$$\oint p_\varphi d\varphi = p_\varphi \int_0^{2\pi} d\varphi = nh,$$

ou seja,

$$p_{\varphi_n} = n\hbar, \quad (7)$$

o que recobra a quantização do momento angular previamente postulada por Bohr. Dessa forma, os níveis de energia são

$$W_n = \frac{p_n^2}{2I} = \frac{n^2 \hbar^2}{2I}. \quad (8)$$

3.5.3 Difração em rede cristalina

Considere um feixe de elétrons que incide em uma rede cristalina de dimensão d fazendo um ângulo θ com a horizontal. Ao ser difratado, o feixe transfere para o cristal um momento total equivalente a $p_z = 2p \sin \theta$, como ilustra a figura 1.

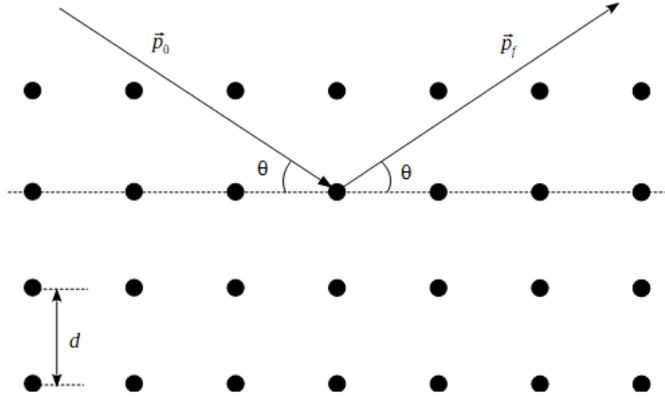


Figura 1:

A quantização de Wilson-Sommerfeld para o momento é dada por

$$\oint p_z dz = p_z \int_0^d dz = nh,$$

ou seja,

$$2p_z d \sin \theta = nh. \quad (9)$$

Essa expressão é semelhante à equação da difração de Bragg para os máximos de interferência construtiva:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (10)$$

Comparando-se as equações 9 e 10, determina-se a relação entre o momento e o comprimento de onda proposta, por de Broglie em 1924:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (11)$$

O experimento, juntamente com a teoria de quantização de Wilson-Sommerfeld, dá margem à discussão de propriedades ondulatórias da matéria que exprimem papel fundamental no contexto de desenvolvimento dessa nova teoria.

3.6 1925

Início da formulação matricial proposta por Heisenberg e declínio dos antigos métodos de quantização devido ao refinamento dos resultados experimentais que passaram a demandar números quânticos semi-inteiros.

3.7 1926

Schrödinger, sua equação e o desenvolvimento dos métodos de mecânica ondulatória cuja capacidade de descrever os sistemas do mundo quântico foi suficiente para a sua consolidação mesmo sem uma dedução teórica tanto da equação usada como base quanto dos mecanismos pelos quais as propriedades físicas do sistema são extraídas e interpretadas. Desde então, consideram-se fundamentais:

- A equação de Schrödinger
- A descrição por funções de onda $\Psi(t, \mathbf{x})$
- Interpretação probabilística da norma (amplitude) de $\Psi(t, \mathbf{x})$

4 Equação de Schrödinger

Descreve e interpreta-se o elétron como um pacote de onda que se propaga pelo espaço. No caso de uma onda plana de frequência angular ω e número de onda k :

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \quad (12)$$

Pela quantização de Planck e o comprimento de onda de de Broglie

$$E = hv = \frac{h}{2\pi} 2\pi v = \hbar\omega \Leftrightarrow \omega = \frac{1}{\hbar} E \quad (13)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \Leftrightarrow \mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \quad (14)$$

Substituindo as equações 13 e 14 na equação 12, obtem-se

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}-Et)/\hbar}. \quad (15)$$

Tomando, separadamente, o gradiente e a derivada temporal da equação 15, obtém-se a correspondência dos novos operadores para a mecânica quântica:

$$\nabla\Psi = \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\Psi \Leftrightarrow (-i\hbar\nabla)\Psi = (\mathbf{p})\Psi \Leftrightarrow \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla \quad (16)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi \Leftrightarrow (i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\Psi = E\Psi \Leftrightarrow E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (17)$$

Da conservação de energia ($T + V = E$, onde a energia cinética $T = \mathbf{p}^2/2m$ e o potencial escalar V são aplicados diretamente à função de onda), nasce a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(t, \mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\Psi(t, \mathbf{x}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, \mathbf{x}), \quad (18)$$

que também pode ser reescrita de uma forma mais compacta definindo o novo operador hamiltoniano:

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}), \quad (19)$$

o qual, aplicado a Ψ , expressa uma equação de autovalores e autovetores:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (20)$$

A equação de Schrödinger não possui dedução formal e é vista simplesmente como um dos aspectos fundamentais da teoria. Sua validade e aceitação decorrem diretamente da concordância em relação a observações empíricas, além de fluir de raciocínios teóricos bastante robustos. A 2ª lei da termodinâmica é outro importante exemplo de equação que surge de maneira fundamental e suas consequências estão tanto teórica quanto experimentalmente corretas. O novo operador hamiltoniano desempenha papel central no desenvolvimento da teoria e suas principais propriedades resultam do fato de ser hermitiano.

4.1 Comutadores, operadores hermitianos e a capacidade de medição

Operadores hermitianos são de grande importância em toda a extensão da física e desempenham papel fundamental em mecânica quântica devido principalmente às suas propriedades e à possibilidade de decomposição em autoestados via séries de Fourier. Se \hat{A} é um operador hermitiano, a função de onda satisfaz a equação de autovalores e

autovetores:

$$\widehat{A}\Psi(t, \mathbf{x}) = A\Psi(t, \mathbf{x}). \quad (21)$$

Portanto, para dois operadores hermitianos \widehat{A} e \widehat{B} , a equação de autovalores e autovetores fornece

$$\widehat{A}\widehat{B}\Psi = \widehat{A}B\Psi = B\widehat{A}\Psi = BA\Psi = AB\Psi, \quad (22)$$

da qual, por analogia, segue-se $\widehat{B}\widehat{A}\Psi = \widehat{B}A\Psi$. Portanto,

$$(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A})\Psi = 0$$

$$[A, B]\Psi = 0, \text{ ou seja,} \quad (23)$$

$$[A, B] = 0 \quad (24)$$

A comutação de operadores, do ponto de vista experimental, representa a possibilidade de se determinar simultaneamente ambas as grandezas. Quando dois operadores não admitem comutação, o aumento na precisão de um deles leva ao desconhecimento do outro, de maneira que o produto das incertezas associadas às suas medições seja da ordem da comutação entre os operadores. Definindo o novo operador momento angular

$$\widehat{l} = \widehat{q} \times \widehat{p} = -i\hbar(\mathbf{q} \times \nabla), \quad (25)$$

os operadores posição \widehat{q} , momento \widehat{p} e momento angular \widehat{l} verificam as seguintes comutações,

$$[q_j, q_k] = [p_j, p_k] = 0$$

$$[q_j, p_k] = \delta_{jk}i\hbar \quad (26)$$

$$[l_m, l_n] = \epsilon_{mnk}i\hbar l_k,$$

que resumem o princípio da incerteza de Heisenberg na linguagem de comutadores.

4.2 Valor médio de uma medida

A função de onda não indica com absoluta certeza os valores esperados ao se fazer um experimento. Ao invés disso, representam uma distribuição de probabilidades a partir da qual o sistema evolui. Define-se portanto, o valor médio esperado de uma

quantidade \hat{A}

$$\bar{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV \quad (27)$$

Da qual segue que a sua evolução temporal respeita

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dV + \int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi + \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV \quad (28)$$

Diretamente da equação de Schrödinger seguem as relações

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \quad (29)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^* \quad (30)$$

Substituindo (29) e (30) na equação (28) e usando o fato que o operador \hat{H} é hermitiano:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}}{dt} &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H} \Psi^* \hat{A} \Psi - \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi) dV \\ &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dV + \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [H, A] \Psi dV. \end{aligned} \quad (31)$$

Os integrandos representam o valor médio dos seus respectivos operadores, portanto

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar} \overline{[H, A]} \quad (32)$$

Que admite a generalização muito similar ao caso da mecânica clássica

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, A] \quad (33)$$

A equação acima indica a correlação existente entre os comutadores recorrentes na formulação da mecânica quântica e os parênteses de Poisson classicamente importantes., ambos diretamente associados à evolução temporal:

$$\{A, H\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [H, A]. \quad (34)$$

4.3 Equações de Hamilton

Seguindo o mesmo princípio de equivalência com a mecânica clássica, procura-se demonstrar as correspondentes Equações de Hamilton para a mecânica quântica no caso de operadores específicos mas suficientemente gerais no contexto da mecânica ondulatória.

$$[p_j, H] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial q_j} \quad (35)$$

$$[q_j, H] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_j} \quad (36)$$

Por indução, supõe-se válida as relações para o n -ésimo termo e provam-se as seguintes comutações:

1. Se $\hat{H} = q_j^n$

$$\begin{aligned} [p_j, q_j^{n+1}] &= p_j q_j^{n+1} - q_j^{n+1} p_j = (p_j q_j^n - q_j^n p_j) q_j + q_j^n (p_j q_j - q_j p_j) \\ &\Rightarrow (-i\hbar n q_j^{n-1}) q_j + q_j^n (-i\hbar) = -i\hbar (n+1) q_j^n = -\frac{\partial q_j^{n+1}}{\partial q_j} \end{aligned} \quad (37)$$

2. Se $\hat{H} = p_j^n$

$$\begin{aligned} [q_j, p_j^{n+1}] &= q_j p_j^{n+1} - p_j^{n+1} q_j = (q_j p_j^n - p_j^n q_j) p_j + p_j^n (q_j p_j - p_j q_j) \\ &\Rightarrow (-i\hbar n p_j^{n-1}) p_j + p_j^n (i\hbar) = i\hbar (n+1) p_j^n = \frac{\partial p_j^{n+1}}{\partial p_j} \end{aligned} \quad (38)$$

3. Se $\hat{H} = C_{mn} q_j^n p_j^m$

$$[p_j, H] = C_{mn} [p_j, q_j^m] p_j^n = C_{mn} (-i\hbar m q_j^{m-1}) p_j^n = -i\hbar C_{mn} m q_j^{m-1} p_j^n = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial q_j} \quad (39)$$

$$[q_j, H] = C_{mn} q_j^m [q_j, p_j^n] = C_{mn} q_j^m (i\hbar n p_j^{n-1}) = i\hbar n C_{mn} q_j^m p_j^{n-1} = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_j} \quad (40)$$

Portanto, são válidas as equações 35 e 36, análogas às equações de movimento do formalismo hamiltoniano clássico.

4.4 Teorema de Ehrenfest

Segue diretamente das equações de Hamilton um paralelo às equações de movimento clássicas (de Newton) para o caso em que os operadores posição e momento não dependem explicitamente do tempo:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (41)$$

$$[x, H] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_x} = i\hbar \frac{\hat{p}_m}{m} \Leftrightarrow \frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (i\hbar \frac{\hat{p}_m}{m}) = \frac{\hat{p}_m}{m} \quad (42)$$

$$[p_x, H] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial x} \Leftrightarrow \frac{dp_x}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (-i\hbar) \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial x} = -\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial x} \quad (43)$$

Portanto toda a matemática que circunda a equação de Schrödinger e os seus mecanismos de valor médio, probabilidade e comutadores está diretamente relacionada à formulação clássica da mecânica, com propriedades e resultados semelhantes, além de sugestivos, como a 2ª lei de Newton e as equações de movimento das quais pode-se ainda verificar a conservação da energia no caso da comutação $[H, H] = 0$ e do momento no caso em que $V(x) = 0$.

4.5 Formalismo de Hamilton-Jacobi e mecânica ondulatória

Da equação de Hamilton-Jacobi com variáveis separáveis,

$$H\left(q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}\right) = -\frac{\partial S}{\partial t} = E, \quad (44)$$

determina-se a variável S por integração direta

$$S(t) = -Et + W(q_j, p_j) \Leftrightarrow W(q_j, p_j) = S(t) + Et \quad (45)$$

Portanto, as superfícies W para cada valor fixo de S representam a linha de mundo da partícula e se propagam com o passar do tempo ao longo do espaço de configurações. A velocidade de um ponto qualquer em W é dada pela razão da distância entre as superfícies pelo tempo transcorrido $u \equiv dS/dt$. O diferencial de W é, portanto, a sua

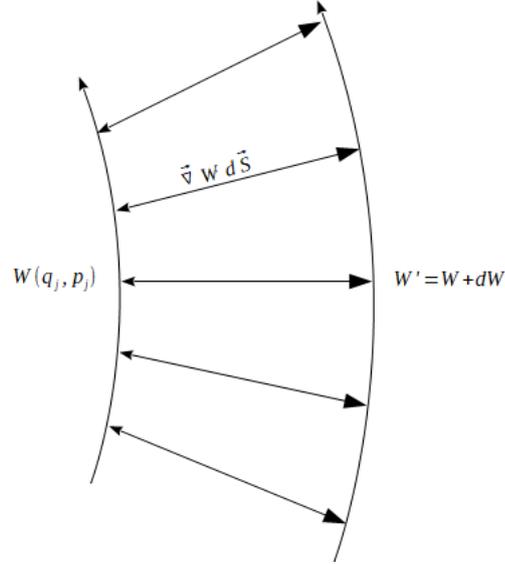


Figura 2:

derivada na direção de $d\mathbf{S}$:

$$W(q_j, p_j) \Rightarrow dW = \nabla W \cdot d\mathbf{S} \Leftrightarrow dW = |\nabla W| dS, \quad (46)$$

que, segundo a equação (42) também pode ser escrito como

$$dW = E dt \quad (47)$$

A divergência de W , sendo a soma de suas derivadas parciais em cada coordenada generalizada, segue da equação acima que relaciona-se diretamente com os momentos generalizados

$$\nabla W = \sum_j \frac{\partial W}{\partial q_j} = \sum_j \frac{\partial S}{\partial q_j} = \sum_j p_j \Rightarrow |\nabla W|^2 = \sum_j p_j^2 = \mathbf{p}^2 = 2m(E - T) \quad (48)$$

Da igualdade das equações em (44) e (45) juntamente com a divergência de W determina-se a velocidade de grupo

$$E dt = |\nabla W| dS \Leftrightarrow \frac{dS}{dt} \equiv u = \frac{E}{|\nabla W|} \Leftrightarrow u = \frac{E}{\sqrt{2m(E - T)}} = \frac{E}{p} \quad (49)$$

Em geral, esse resultado pode ser interpretado como uma frente de onda se propagando com velocidade u , ortogonal ao momento p de uma partícula que realiza a sua

trajetória sobre essa superfície, de maneira que a velocidade de um ponto qualquer da frente de onda seja inversamente proporcional à velocidade da partícula naquele ponto.

Da interpretação ondulatória das equações de Hamilton-Jacobi, voltamos atenção à equação de propagação da onda bem como à sua conhecida solução de onda plana

$$\nabla^2\Phi = \left(\frac{n}{c}\right)^2 \frac{d^2\Phi}{dt^2} \quad (50)$$

$$\Phi = \Phi_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (51)$$

onde $n = c/u$, k e ω representam o índice de refração do meio, o número de onda e a frequência angular respectivamente. Em geral, n também uma função da posição: $n(r)$, mas restringindo ao estudo da óptica geométrica onde considera-se que n varie continua e lentamente com a posição, procuramos uma solução similar à onda plana, porém com coeficientes $A(r)$ e $L(r)$ a serem determinados

$$\Phi = e^{A(r)+ik_0(L(r)-ct)} \quad (52)$$

$$\nabla\Phi = \Phi\nabla(A(r) + ik_0L(r))$$

$$\nabla^2\Phi = \Phi[\nabla^2(A(r) + ik_0L(r)) + (\nabla(A(r) + ik_0L(r)))^2] \quad (53)$$

$$\frac{d^2\Phi}{dt^2} = -k_0^2 c^2 \Phi \quad (54)$$

substituindo na equação de onda e reagrupando os termos:

$$(\nabla^2 A + (\nabla A)^2 + k_0^2(n^2 - (\nabla L)^2)) + ik_0(\nabla^2 L + 2(\nabla A) \cdot \nabla L) = 0. \quad (55)$$

Da igualdade de números complexos temos a parte real e parte imaginária simultaneamente nulas:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 A + (\nabla A)^2 + k_0^2(n^2 - (\nabla L)^2)) &= 0 \\ (\nabla^2 L + 2(\nabla A) \cdot \nabla L) &= 0, \end{aligned} \quad (56)$$

se as dimensões do meio são muito maiores que o comprimento de onda, ou seja, para

pequenos comprimentos de onda e conseqüentemente $k_0^2 = (2\pi/\lambda_0)^2$ muito grandes, a primeira equação tem solução aproximada por

$$\begin{aligned} k_0^2(n^2 - (\nabla L)^2) &= 0 \\ n^2 &= (\nabla L)^2. \end{aligned} \quad (57)$$

A equação 57 da ótica geométrica é conhecida como equação eikonal e assemelha-se à equação 48 da mecânica clássica, onde L relaciona-se a W , como será mostrado mais adiante, e o termo $\sqrt{2m(E - T)}$ funciona como um índice de refração.

Substituindo o integrando do princípio de mínima ação da mecânica clássica pelo seu correspondente na ondulatória, chega-se ao conhecido princípio de Fermat para a trajetória do feixe de luz da ótica geométrica:

$$\int 2m(E - T)dV = \int ndV = 0 \Leftrightarrow \int \frac{c}{u}dV = 0 \Rightarrow \int \frac{1}{u}dV = 0 \quad (58)$$

Analisando a fase da solução de onda, percebe-se a conexão entre os parâmetros L e W

$$\phi = k_0(L - ct) = \frac{2\pi}{\lambda_0}(L - \lambda_0 vt) = 2\pi\left(\frac{L}{\lambda_0} - vt\right) = \frac{2\pi}{h}\left(\frac{h}{\lambda_0}L - hvt\right) \quad (59)$$

fazendo uso do comprimento de onda de de Broglie ($\lambda = h/p$) e a quantização dos níveis de energia de Planck ($E = h\nu$), a fase da onda será

$$\phi = \frac{2\pi}{h}(pL - Et) \quad (60)$$

da qual é imediata a equivalência:

$$pL = W \Leftrightarrow W = \frac{h}{\lambda_0}L \quad (61)$$

$$\Psi = \Psi_0 e^{iS/\hbar} \quad (62)$$

Substituindo a função de onda na equação de Schrödinger (18) com

$$\nabla\Psi = \Psi\frac{i}{\hbar}\nabla S \Rightarrow \nabla^2\Psi = \Psi\left(\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2\right) \quad (63)$$

e

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \quad (64)$$

Obtemos:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{i}{\hbar} \nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right) + V = i\hbar \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Rightarrow \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S, \quad (65)$$

onde considera-se $\hbar \nabla^2 S \ll (\nabla S)^2 \Leftrightarrow \hbar \nabla \cdot \mathbf{p} \ll p^2$.

No limite de $\hbar \rightarrow 0$, a equação se reduz à uma da forma $H(q_j, \partial S / \partial q_j) + \partial S / \partial t = 0$, como a equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica.

5 Integrais de Feynman

As integrais de Feynman, também conhecidas como integrais de caminho (path integrals), possuem uso na mecânica quântica e teoria quântica de campos. Normalmente é visto a sua aplicação na teoria quântica de campos, mas vamos abordar o seu uso na mecânica quântica.

Dos postulados da mecânica quântica, temos que diferente do que acontece na mecânica clássica, todos os caminhos entre um ponto A a um ponto B também influenciam no resultado final. Cada caminho contribui para a amplitude de forma igual, mas com diferentes fases. Cada contribuição da fase é proporcional a ação S . Logo:

$$\phi(x(t)) = C e^{iS(x(t))/\hbar} \quad (66)$$

Onde C é uma constante, e S é a ação da mecânica clássica. E a amplitude é a soma de todas as contribuições de fase e portanto de todos os caminhos. Então:

$$K(b, a) = \sum_{\text{todos os caminhos entre } A \text{ e } B} \phi(x(t)) \quad (67)$$

E por último a probabilidade de uma partícula ir de a num tempo t_a a um ponto b em tempo t_b é a amplitude quadrado de a a b . Portanto:

$$P(a, b) = |K(a, b)|^2 \quad (68)$$

5.1 O limite clássico

No limite clássico, temos que $S \gg \hbar$, então S/\hbar é a contribuição de fase de um ângulo grande e ϕ será o cosseno ou seno desse ângulo grande – portanto, terá sinal positivo ou negativo. Fazendo δx , a variação resultante no valor de S é pequena em uma "escala clássica", mas não quando passamos para unidades de \hbar ou uma "escala quântica". Essas variações no caminho produzem uma grande mudança na fase, fazendo com que ϕ varie entre valores positivos e negativos rapidamente, e, portanto a soma contribuição total será nula. Portanto, nenhum caminho fora o do extremo precisa ser considerado.

Assim, nos caminhos que não são extremos, as variações se cancelam, pois possuem ações diferentes. Quando S é extremo, as variações não fazem efeito no valor obtido (se considerarmos uma aproximação de primeira ordem), então todas as contribuições dos caminhos próximos ao do extremo contribuem com uma fase próxima de S/\hbar o que faz que as contribuições não se cancelem. Com isso, apenas os caminhos na vizinhança do extremo possuem contribuições diferentes de zero. Ou seja, no limite clássico apenas o caminho de extremo é de importância, pois é o único que contribui. Nesse sentido conseguimos obter as equações clássicas do movimento através dos princípios quânticos.

5.2 Integral de caminho

5.2.1 A soma sobre caminhos

Nesta seção fazemos algo análogo a soma de Riemann, onde fazemos uma soma sobre todos os caminhos.

Primeiramente escolhemos um subconjunto com todos os caminhos, e também dividimos o tempo em passos de tamanho ϵ . Ou seja, entre os pontos x_a e x_b e seus respectivos tempos t_a e t_b dividimos o tempo em passos de tamanho ϵ . Então para cada passo t_i existe um ponto x_i no espaço associado a ele.

O que fazemos aqui é uma espécie de partição, em vez de dividir um intervalo $[a,b]$, dividimos o intervalo de tempo $[t_a, t_b]$. E cada valor de x_i corresponde ao valor de $f(x)$ (no caso o ínfimo para a soma inferior e o supremo pra soma superior). E por último ligamos os pontos x_i via retas, e integramos sobre todos os x_i entre 1 e N-1,

considerando:

$$N\epsilon = t_b - t_a \quad \epsilon = t_{i+1} - t_i$$

$$t_0 = t_a \quad t_N = t_b$$

$$x_0 = x_a \quad x_N = x_b$$

E obtemos que:

$$K(b, a) \approx \int \cdots \int \phi[x(t)] dx_1 \cdots dx_{N-1} \quad (69)$$

Ou seja, integramos sobre cada x_i que é variável para o tempo t_i associado. Portanto não integramos sobre x_0 e x_N pois eles são fixos. No caso, da soma de Riemann o que fazemos é somar sobre todos os intervalos que multiplicam o valor que a função pode assumir no intervalo (x_i, x_{i+1}) seja ele máximo(soma superior) ou mínimo(soma inferior).

Mas quando fazemos ϵ tendendo a zero, o limite não existe. E portanto é necessário definir um fator de normalização(dependente de ϵ) de modo que o limite exista. Por fugir do escopo deste trabalho, iremos pular essa parte e apenas assumir que existe tal fator. Assim:

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \cdots \int \phi[x(t)] e^{iS[b,a]/\hbar} \frac{dx_1}{A} \cdots \frac{dx_N}{A} \quad (70)$$

Onde $S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt$ é a integral de linha que passa por todos os x_i via retas.

5.2.2 Fórmula da integral de caminho

Assim como a integral de Riemann, a integral que obtivemos também não funciona para todos os casos possíveis. Poderíamos fazer uso da teoria de medidas para fazer uma melhor definição. Mas não é necessário e fugiria do escopo deste trabalho. Assim facilitando a notação de (70), temos:

$$K(a, b) = \int_a^b e^{iS[a,b]/\hbar} \mathcal{D}x(t) \quad (71)$$

A equação (71) é chamada a integral de caminho.

5.3 Partícula livre

A lagrangiana da partícula livre de massa m é $L = m\dot{x}^2/2$. Assim, pela definição de integral de caminho e do fato que, nesse caso, $A = (2\pi i\hbar\epsilon/m)^2$, temos:

$$K_0(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \times \int \cdots \int \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 \right\} dx_1 \cdots dx_{N-1} \quad (72)$$

Vemos que a expressão acima representa uma união de integrais gaussianas. Começando o cálculo da primeira variável, obtemos:

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{2}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} dx_1 \Rightarrow \\ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar \cdot 2\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 2\epsilon} [(x_2 - x_0)^2] \right\} \end{aligned} \quad (73)$$

Multiplicando por

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 3\epsilon} [(x_3 - x_2)^2] \right\}$$

E então integrando sobre x_2 , para obter algo análogo a (73):

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar \cdot 3\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 3\epsilon} [(x_3 - x_0)^2] \right\} \quad (74)$$

Desse jeito conseguimos uma recursão, de modo que o resultado final após a integração sobre dx_{N-1} será:

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar \cdot n\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot n\epsilon} [(x_n - x_0)^2] \right\} \quad (75)$$

Mas $n\epsilon = t_n - t_0 = t_b - t_a$, então (75) será:

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im(x_n - x_0)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right\} \quad (76)$$

Agora vamos para o cálculo do momento, supondo que o ponto inicial é na origem e o ponto b é (x, t) , então:

$$K_0(x, t; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{imx^2}{2\hbar t} \right\} \quad (77)$$

Se o tempo é fixo, vemos que a amplitude varia com a distância, conforme vemos

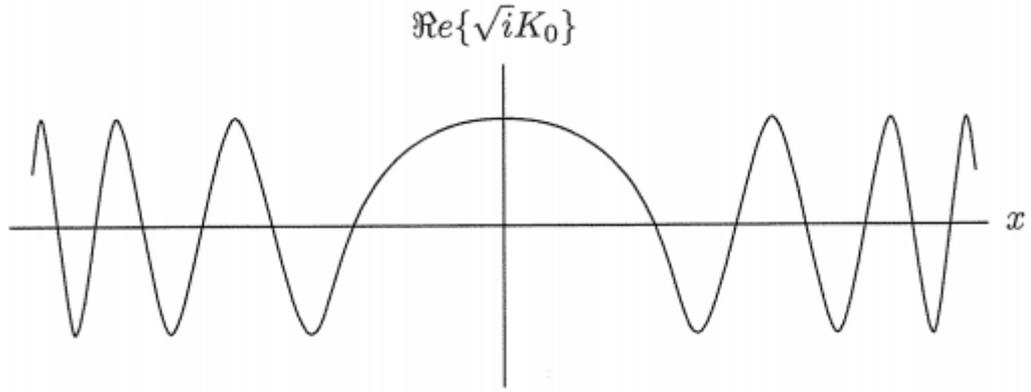


Figura 3: A parte real de $\sqrt{i}K_0$ para um t fixo

na figura acima. Percebemos que quanto mais longe da origem maior o número de oscilações. E quando x fica muito grande a amplitude fica praticamente um seno, com comprimento de onda λ que varia lentamente. Trocando x por λ temos que a fase da amplitude muda por 2π . E obtemos:

$$2\pi = \frac{m(x + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{mx\lambda}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \quad (78)$$

Assumindo ($x \gg \lambda$), podemos desprezar o termo λ^2 , para obter:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)} \quad (79)$$

De um ponto de vista clássico se uma partícula sai da origem e vai até x num intervalo de tempo t , temos que a velocidade é x/t e o momento é mx/t . Agora de um ponto de vista quântico quando o movimento pode ser descrito de forma razoável por um momento clássico $p = mx/t$, então a amplitude varia no espaço com comprimento de onda:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (80)$$

Que é o comprimento de onda de Broglie conforme (11). Agora vamos generalizar para achar a energia. Neste caso:

$$K(b, a) \approx \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(b, a) \right\} \quad (81)$$

Como é possível variar o ponto final(x_b), isso influencia na ação clássica. E na aproxi-

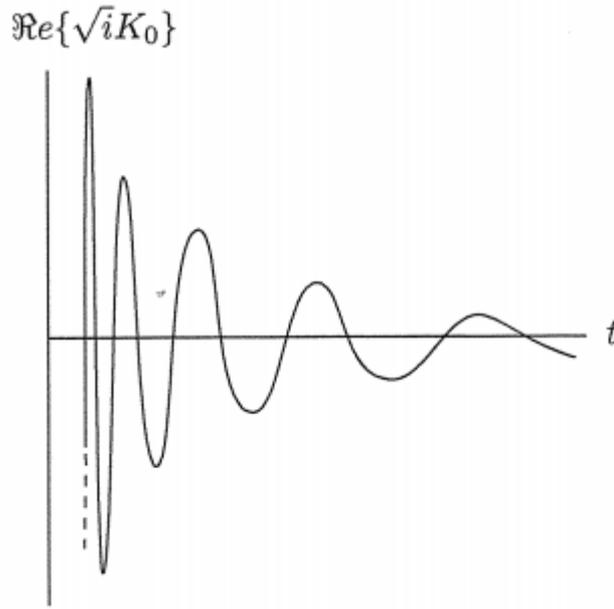


Figura 4: A parte real de $\sqrt{i}K_0$ variando no tempo

mação semiclassica ($S \gg \hbar$) teremos que K irá variar rapidamente com mudanças em x_b . Então a mudança de fase, será:

$$k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x_b} \quad (82)$$

Mas $\partial S / \partial x_b$ é o momento clássico quando chega no ponto x_b . Então $p = \hbar k$ e k é o número de onda. Como o comprimento de onda é a distância que a fase muda em 2π , então $k = 2\pi / \lambda$. Assim 82 é uma equação de Broglie relacionando o momento e o número de onda.

Agora vamos supor uma variação no tempo para K_0 , então conforme a figura 4 vemos que existe uma variação na amplitude e fase. Também um t muito grande e negligenciar a mudança que ocorre com a amplitude. O período de oscilação T é definido como o tempo que a fase diminui em 2π . Então:

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left(\frac{T}{1+T/t} \right) \quad (83)$$

E introduzindo a frequência angular $\omega = 2\pi / T$. Temos:

$$\omega \approx \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x}{t} \right)^2 \quad (84)$$

E sendo $(m/2)(x/t)^2$ a energia clássica, a equação 84 diz:

$$E = \hbar\omega \quad (85)$$

Então:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (86)$$

Nesse sentido os conceitos de energia e momento são estendidos para a mecânica quântica com as seguintes regras:

1. Se a amplitude varia no espaço em e^{ikx} , dizemos que a partícula tem momento $\hbar k$.
2. Se a amplitude varia no tempo em $e^{-i\omega t}$, dizemos que a partícula tem energia $\hbar\omega$.

6 Mecânica matricial de Heisenberg

Na formulação matricial da mecânica quântica, Heisenberg buscou uma descrição física baseada em quantidades imediatamente relacionadas a observáveis. Assim, por exemplo, as órbitas de Bohr não deveriam desempenhar papel fundamental nesta teoria, uma vez que não são diretamente observáveis. Por outro lado, todas as quantidades observáveis, como frequência emitida, taxa de transição, etc., são sempre relacionadas a pares de órbitas, e nunca a uma órbita só. Heisenberg buscou, então, construir uma teoria que relacionasse todos os pares de órbitas de um sistema. O objeto matemático mais natural para isso é uma matriz infinita:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Heisenberg supôs que a cada observável newtoniano, como posição ou momento, corresponde uma matriz infinita e que os elementos dessa matriz produziram quantidades mensuráveis, isto é, observáveis. É notável o fato de que a não comutatividade de matrizes, diferentemente dos observáveis newtonianos, não impediu a formulação matricial, o que mais tarde mostrou-se estar relacionado ao princípio da incerteza.

Para um sistema de um grau de liberdade com hamiltoniana H , a equação de movimento, conhecida por equação de movimento de Heisenberg, é dada por

$$i\hbar \frac{dq}{dt} = [q, H], \quad (87)$$

o que fornece um conjunto de infinitas equações acopladas (uma vez que q é uma matriz infinita):

$$i\hbar \frac{dq_{nm}}{dt} = (qH)_{nm} - (Hq)_{nm} = \sum_k (q_{nk}H_{km} - H_{nk}q_{km}). \quad (88)$$

Se for possível encontrar uma representação da matriz hamiltoniana na forma diagonal, isto é, $H_{nk} = \delta_{nk}H_{nn}$, então as equações de movimento se desacoplam:

$$\begin{aligned} \frac{dq_{nm}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_k (q_{nk}\delta_{km}H_{mm} - H_{nn}\delta_{nk}q_{km}) \\ &= \frac{q_{nm}(H_{mm} - H_{nn})}{i\hbar} \\ &= i\omega_{nm}q_{nm}, \end{aligned} \quad (89)$$

que são equações facilmente integráveis. Definindo $\omega_{nm} = (H_{nn} - H_{mm})/\hbar$, obtêm-se

$$q_{nm}(t) = q_{nm}(0)e^{i\omega_{nm}t}. \quad (90)$$

Portanto, o problema fundamental da formulação de Heisenberg é encontrar matrizes infinitas de observáveis que correspondam às condições de comutação e tal que a matriz hamiltoniana se torne uma matriz diagonal.

7 Conclusão

Após o estudo de algumas conexões entre a mecânica clássica e quântica, podemos concluir que apesar de possuírem formulações e postulados totalmente diferentes, algumas ideias não mudam e outras são generalizadas. O que muda muitas vezes é como se dá o tratamento dessas ideias.

No caso a integral de Feynman e o principio de Hamilton possuem uma ligação muito forte, e percebe-se que a integral de Feynman é um tipo de "generaliza-

ção"quântica do princípio de Hamilton, onde quando fazemos o limite que $S \gg \hbar$ chegamos na mecânica clássica a partir de princípios quânticos. Já a mecânica matricial teve origem quando Heisenberg tentou usar ideias clássicas para explicar fenômenos quânticos. E a equação de Schrödinger possui ligação com a equação eikonal da ótica geométrica que é uma teoria clássica.

Portanto existem ligações entre os fenômenos físicos do mundo clássico e quântico, apesar de não existir um princípio fundamental ou algo do gênero, temos o fato que algumas ideias se perpetuam com o tempo. Ou mesmo usar ideias mais novas como utilizar a formulação da equação de Schrödinger para criar um novo método de explicar fenômenos clássicos, como a mecânica de Koopman–von Neumann que faz uso de operadores estilo mecânica quântica para descrever o mundo macroscópico.

Referências

- [1] Pauling, L et al. *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*, Dover Publications, New York & USA (1985).
- [2] Heisenberg, W. *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover Publications, New York & USA (1949).
- [3] Greiner, W. *Quantum Mechanics: an Introduction*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York & USA (2000).
- [4] Goldstein, H et al. *Classical Mechanics*, Addison Wesley, Boston & USA (2000).
- [5] Feynman, Richard P. et al. *Quantum Mechanics and Path Integrals Emended Edition*, Dover Publications, New York & USA (2005).
- [6] Lam, K. S. *Non-relativistic Quantum Theory: Dynamics, Symmetry, and Geometry*, World Scientific & Singapore (2009)