

Projeto

Índice

1 Motivação: operadores de posição e momento	1
1.1 O operador de posição	2
1.2 O operador de momento	3
1.3 Relação de comutação canônica	3
1.4 Os operadores de posição e momento são simétricos	4
2 Os axiomas da mecânica quântica*	4
3 O que esperamos de uma quantização	5
4 Quantização de Weyl e o teorema de Groenewold	6
5 Quantização geométrica no espaço euclidiano	7
5.1 Prequantização no espaço euclidiano	7
5.2 Quantização no espaço euclidiano	9
6 Quantização geométrica em variedades simpléticas	10
6.1 Por que a geometria simplética é o cenário natural para a mecânica clássica	10

1 Motivação: operadores de posição e momento

Aqui sigo Tong, [Lecture Notes on Classical Dynamics](#) Sec. 1.1 e Tong, [Lecture Notes on Quantum Mechanics](#) Sec. 1.1. Os princípios fundamentais da mecânica clássica foram estabelecidos nos séculos XVI e XVII por Galileo e Newton. No famoso texto *Principia Mathematica* do Newton, publicado em 1686, ele estabeleceu as três leis de movimento e a lei da gravitação.

A segunda lei de movimento é $F = ma$. A ideia é que tendo uma coleção de partículas sujeitas a uma coleção de forças agindo em elas, essa equação nos permite descrever as velocidades das partículas no futuro.

Mais detalhadamente, o estado de uma partícula está determinado pela posição x e a velocidade $v = \dot{x}$. Conhecendo essas informações em algum tempo t_0 , podemos usar a segunda lei de Newton, reescrita como $F = m\ddot{x}$ para determinar $x(t)$ e $v(t)$ para qualquer tempo t . Note que não basta saber a posição: é necessário saber tanto a posição $x(t_0)$ quanto a velocidade $\dot{x}(t_0)$.

Como falamos na primeira aula desse curso, existem distintas descrições da mecânica clássica além da Newtoniana; notavelmente a mecânica Lagrangiana e a Hamiltoniana.

Na seguinte seção vamos descrever rapidamente a relação entre o formalismo Hamiltoniano e a geometria simplética.

Na mecânica quântica, o estado de uma partícula está determinado por uma função de onda, que é uma função $\psi(\mathbf{x}, t)$ com valores em \mathbb{C} . Em contraste com a mecânica clássica, para saber o estado da partícula em qualquer tempo t , basta conhecer a função de onda em algum tempo t_0 . Note que embora pareça um cenário mais simples, a substituição de um vetor num espaço de dimensão finita por uma função é um passo não trivial.

É natural esperar que a informação da velocidade da partícula esteja de alguma maneira codificada na função de onda. Uma interpretação da função de onda é que a função de onda nos diz a *probabilidade* de que a partícula esteja numa posição dada. Mas precisamente, a probabilidade de que a partícula esteja em um volume E perto de \mathbf{x} é $\int_E |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV$. Dizemos que $|\psi(\mathbf{x})|^2$ é a *densidade de probabilidade* para a posição da partícula.

É por isso que precisamos trabalhar com funções de onda normalizadas, i.e. tais que

$$\int d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1$$

(a partícula tem que estar em algum lugar!)

1.1 O operador de posição

(Essa seção é [Hall](#), 3.3)

Considere o caso muito simples de uma partícula movendo-se na reta \mathbb{R} . A função de onda dessa partícula é $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ tal que $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1$. Para quem sabe um pouco de probabilidade, o valor esperado associado a essa densidade de probabilidade é

$$E(x) = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 dx.$$

vamos chamar isso de *operador de posição*.

Uma importante ideia na mecânica quântica é levar o valor esperado das quantidades que medimos (como posição, momentum, energia, etc...) em termos de operadores num espaço de Hilbert, neste caso $L^2(\mathbb{R})$. No caso da posição, definimos o *operador de posição* X como

$$(X\psi)(x) = x\psi(x)$$

de modo que

$$E(x) = \langle \psi, X\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} x \psi dx$$

como é usual a definição de norma em espaços de funções complexas.

1.2 O operador de momento

(Tong, *Lecture Notes on Classical Dynamics*, introdução.) No mesmo caso de uma partícula, a segunda lei de Newton pode ser reformulada como $\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}}$ onde $\mathbf{p} := m\dot{\mathbf{x}}$ é o *momento*.

Achar um operador de momento é o que responde a pergunta de como uma função de onda contém a informação da velocidade de uma partícula. Embora não podemos aprofundar nisso, a explicação é que o momento está codificado nas oscilações da função de onda.

Por enquanto simplesmente vamos definir *operador de momento* como

$$P = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

onde por enquanto \hbar é só uma constante. Esse operador permite calcular o valor esperado do momento mediante

$$E(p) = \langle \psi, P\psi \rangle.$$

Observação Note que tanto o operador momento quanto o operador de posição não estão definidos em todo o espaço $L^2(\mathbb{R})$. (Já que a função $P\psi = x\psi$ pode não estar em $L^2(\mathbb{R})$, ou a função ψ pode não ser diferenciável, ou a derivada dela não estar em $L^2(\mathbb{R})$).

1.3 Relação de comutação canônica

Proposição 3.8 (Hall) Os operadores de posição X e momento P não comutam, mas satisfazem a relação

$$XP - PX = i\hbar I,$$

que chamamos de *relação de comutação canônica*.

Demonstração.

$$\begin{aligned} PX\psi &= -i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi(x)) \\ &= -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx} \\ &= -i\hbar\psi(x) + XP\psi. \end{aligned}$$

□

Essa relação é muito importante, pois ella nos dá uma intuição do que esperamos no equivalente ao colchete de Poisson no mundo quântico. Por enquanto só lembre que no caso do colchete de Poisson na variedade $\mathbb{R}^2 = \{(x, p)\}$ sabemos que $\{x, p\} = 1$.

1.4 Os operadores de posição e momento são simétricos

Lembre que um operador linear $A : \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$ é *limitado* se existe uma constante C tal que $\|A\psi\| \leq C\|\psi\|$ para todo $\psi \in \mathbf{H}$. Para cada operador limitado A existe um único operador A^* , chamado o *adjunto* de A , tal que

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A^*\phi, \psi \rangle.$$

Porém, o caso dos operadores não limitados é um pouco mais delicado. Isso vai ser importante para nós porque os operadores quânticos não são limitados.

Definição 3.3 (Hall) Um operador A num espaço de Hilbert \mathbf{H} é *simétrico* se

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A\phi, \psi \rangle$$

para todos $\phi, \psi \in \mathbf{H}$. O operador A é *autoadjunto* se $\text{Dom}(A^*) = \text{Dom}(A)$ e $A^*\phi = A\phi$ para todo $\phi \in \text{Dom}(A)$.

Proposição 3.9 (Hall) Para funções suficientemente boas ϕ e ψ em $L^2(\mathbb{R})$, temos que

$$\langle \phi, X\psi \rangle = \langle X\phi, \psi \rangle, \quad \langle \psi, P\psi \rangle = \langle P\phi, \psi \rangle.$$

2 Os axiomas da mecânica quântica*

Os seguintes "axiomas" não são axiomas matemáticos. São princípios fundamentais para a mecânica quântica que nos ajudarão a fixar a discussão feita até agora, deixando tudo pronto para começar a discutir o conceito de quantização no espaço euclidiano e depois em variedades simpléticas.

Axioma 1 O estado de um sistema (quântico) está representado por um vetor unitário ψ em certo espaço de Hilbert \mathbf{H} . Se ψ_1 e ψ_2 são dois vetores unitários em \mathbf{H} com $\psi_2 = c\psi_1$ para alguma constante $c \in \mathbb{C}$, então ψ_1 e ψ_2 representam o mesmo estado físico.

Vamos motivar a segunda frase mais pra frente.

Axioma 2 A cada função real-valorada f num espaço fase clássico tem associado um operador autoajunto \hat{f} no \mathbf{H} .

Observação \hat{f} tipicamente não é limitado.

Axioma 3 Se um sistema quântico está num estado dado por um vetor unitário $\psi \in \mathbf{H}$, a distribuição de probabilidade da medição de algum observável f satisfaz

$$E(f^m) = \langle \psi, (\hat{f})^m \psi \rangle$$

Em particular, o valor esperado de uma medição de f está dada por

$$\langle \psi, \hat{f}\psi \rangle.$$

A segunda frase no Axioma 1 se justifica porque para qualquer operador A e vetores unitários $\psi_2 = c\psi_1$ com $|c| = 1$,

$$\langle \psi_2, A\psi_2 \rangle = \langle c\psi_1, Ac\psi_1 \rangle = |c|^2 \langle \psi_1, A\psi_1 \rangle = \langle \psi_1, A\psi_1 \rangle.$$

Axioma 4 Relacionado com incertidumbre.

Axioma 5 A evolução temporal de uma função de onda ψ em um sistema quântico está dada pela equação de Schrödinger

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}\psi.$$

Onde \hat{H} é o operador que corresponde ao Hamiltoniano H por meio do Axioma 2.

Proposição 3.14 Seja $\psi(t)$ uma solução à equação de Schrödinger e A é um operador autoadjunto em \mathbf{H} . Supondo as condições necessárias no domínio de ψ ,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi(t)} = \left\langle \frac{1}{i\hbar} [A, \hat{H}] \right\rangle_{\psi(t)},$$

onde $\langle A \rangle_{\psi} := \langle \psi, A\psi \rangle$ e $[\cdot, \cdot]$ é o **comutador** definido como $[A, B] = AB - BA$.

Em particular, se os operadores quânticos comutarem, os valores esperados seriam 0. Essa equação é para ser comparada com a forma em que uma função f muda ao longo do fluxo Hamiltoniano: $\frac{df}{dt} = \{f, H\}$. (Lembre a definição das primeiras integrais de H , eram funções que não variavam ao longo do fluxo Hamiltoniano, satisfazendo $\{f, H\} = 0$.)

3 O que esperamos de uma quantização

Essa definição é de [Díaz](#).

Definição Uma *quantização completa* de M é um mapa

$$\mathcal{F} : f \mapsto \hat{f}$$

levando observáveis clássicos f , i.e. funções suaves em T^*M a operadores autoadjuntos \hat{f} num espaço de Hilbert \mathcal{H} satisfazendo:

1. \mathcal{F} é linear:

$$\widehat{f + g} = \hat{f} + \hat{g}, \quad f, g \in C^\infty(T^*M)$$

$$\widehat{\lambda f} = \lambda \hat{f}, \quad \lambda \in \mathbb{R}.$$

2. \mathcal{F} é um morfismo de álgebras de Lie salvo por uma constante:

$$\widehat{\{f, g\}} = \frac{1}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}]$$

3. A função constante 1 corresponde com a identidade:

$$\hat{1} = \text{Id}$$

4. As coordenadas \hat{q}^i e \hat{p}^i agem irreducivelmente em $\mathcal{H} = L^2(M)$.

4 Quantização de Weyl e o teorema de Groenewold

No sentido do Axioma 2, chamamos o operador \hat{f} a *quantização* de f . Já vimos as quantizações dos observáveis de posição, momento e energia (Hamiltoniano), então a pergunta é se é possível construir um esquema de quantização que funcione para qualquer observável de um sistema quântico. Nesta seção vamos ver rapidamente as dificuldades que isso traz, levando ao cenário onde vamos construir a quantização geométrica.

Embora existem muitos outros esquemas de quantização em sistemas com um grau de liberdade, vamos apresentar somente o esquema de Weyl.

Definição Definimos a *quantização de Weyl (simplificada)* como uma correspondência entre polinômios em \mathbb{R}^2 y operadores em $C_c^\infty(\mathbb{R})$ mediante a formula

$$Q(x^j p^k) = \frac{1}{(j+k)!} \sum_{\sigma \in S_{j+k}} \sigma(X, X, \dots, X, P, P, \dots, P),$$

onde para quaisquer operadores A_1, A_2, \dots, A_n e $\sigma \in S_n$, definimos

$$\sigma(A_1, A_2, \dots, A_n) = A_{\sigma(1)} A_{\sigma(2)} \dots A_{\sigma(n)}.$$

Essa correspondência pode ser generalizada para polinômios em \mathbb{R}^{2n} e operadores sobre $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$. Isso dá a seguinte propriedade:

Proposição 13.11 (Hall) Seja f um polinômio em x e p de grau menor ou igual que 2 e g um polinômio arbitrário em x e p . Então

$$\frac{1}{i\hbar} [Q(f), Q(g)] = Q(\{f, g\}),$$

onde $\{f, g\}$ é o colchete de Poisson.

Embora parece promissor,

Teorema "No Go" de Groenewold (13.13 Hall) Seja $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ o espaço de operadores diferenciais em \mathbb{R}^n com coeficientes polinomiais. Não existe uma aplicação linear $Q : \mathcal{P}_{\leq 4} \rightarrow \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ com as seguintes propriedades:

1. $Q(1) = \text{Id}$.
2. $Q(x_j) = X_j$ e $Q(p_j) = P_j$.

3. Para quaisquer f e g em $\mathcal{P}_{\leq 3}$,

$$\frac{1}{i\hbar}[Q(f), Q(g)] = Q(\{f, g\}).$$

A pergunta de se existe uma quantização não é fácil de responder. Vamos ver que um método para consertar isso é trocar o espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ por $L^2(\mathbb{R}^{2n})$. Porém, esse espaço é "muito grande" e vamos precisar de fazer ele mais pequeno para as coisas dar certas.

5 Quantização geométrica no espaço euclidiano

5.1 Prequantização no espaço euclidiano

Vamos seguir [Hall](#), capítulo 22, *Geometric quantization on Euclidean space*.

Os campos vetoriais Hamiltonianos, pensados como operadores diferenciais, satisfazem as relações de comutatividade desejadas: basta definir $Q(f) = i\hbar X_f$ para obter

$$\frac{1}{i\hbar}[Q(f), Q(g)] = \frac{1}{i\hbar}[i\hbar X_f, i\hbar X_g] = (i\hbar)X_{\{f, g\}} = Q(\{f, g\}).$$

Porém, esse mapa não satisfaz $Q(1) = \text{Id}$ porque o Hamiltoniano da função 1 é zero. Pode tentar consertar isso definindo $Q(f) = i\hbar X_f + f$, mas desse jeito

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar}[Q(f), Q(g)] &= \frac{1}{i\hbar}[i\hbar X_f + f, i\hbar X_g + g] \\ &= (i\hbar)(\dots) \neq Q(\{f, g\}) \end{aligned}$$

Mas isso tem solução. Considere um *potencial simplético*, i.e. uma forma θ tal que $d\theta = \omega$ a defina

$$Q(f) = i\hbar \left(X_f - \frac{i}{\hbar} \theta(X_f) \right) + f. \quad (1)$$

Vai resultar que esse operador é pelo menos simétrico, e ainda,

Proposição 22.1 (Hall) Para quaisquer $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$,

$$\frac{1}{i\hbar}[Q(f), Q(g)] = Q(\{f, g\})$$

Vamos explicar um pouquinho o que significa a eq. (1). Lembre

Definição 10.1 (Tu) Seja $E \rightarrow M$ um fibrado vetorial suave sobre uma variedade M . Uma *conexão* em E é um mapa

$$\nabla : \mathfrak{X}(M) \times \Gamma(E) \longrightarrow \Gamma(E),$$

onde $\Gamma(E)$ são as seções de E , satisfazendo para todo $X \in \mathfrak{X}(M)$ e $s \in \Gamma(E)$ que

- (i) $\nabla_X s$ é $C^\infty(M)$ -linear em X e \mathbb{R} -linear em s ,
- (ii) (regra de Leibniz) se $f \in C^\infty(M)$,

$$\nabla_X(fs) = (Xf)s + f\nabla_X s = (df(X))s + f\nabla_X s.$$

Formalmente, essa construção aplicada no fibrado tangente TM permite definir uma **derivada covariante**, denotada também por ∇_X , que estende a noção de derivada respeito a um campo vetorial para tensores de qualquer grau na variedade. A definição para as funções suaves é simplesmente $\nabla_X f = Xf$; e se cumpre a regra de Leibniz (Tu, teo. 22.8).

Agora vamos definir uma derivada covariante. Pegue um potencial simplético θ (= uma 1-forma cuja derivada exterior é a forma simplética) e defina a **derivada covariante associada a θ** como

$$\nabla_X = X - \frac{i}{\hbar}\theta(X) : C^\infty(\mathbb{R}^{2n}) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$$

onde a função $\theta(X) \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ age por simples multiplicação ponto a ponto.

Aqui é um bom momento para olhar de novo a nossa definição de $Q(f)$ (eq. (1)). A prova da relação de comutatividade, prop. 22.1, é muito fácil de escrever em termos da curvatura dessa conexão. A seguinte proposição descreve essa curvatura.

Proposição 22.3 (Hall) Seja θ um potencial simplético e ∇_X a derivada covariante associada. Para quaisquer campos vetoriais X, Y em \mathbb{R}^{2n} ,

$$[\nabla_X, \nabla_Y] - \nabla_{[X, Y]} = -\frac{1}{\hbar}\omega(X, Y).$$

Demonstração. Note que o colchete $[\cdot, \cdot]$ é o comutador de operadores, onde as funções suaves se consideram operadores que multiplicam ponto a ponto. A regra de Leibniz para derivada covariante diz que

$$\nabla_X(fg) = gXf + fXg$$

de modo que o operador $[\nabla_X, f]$ aplicado em uma função $g \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ da

$$[\nabla_X, f]g = \nabla_X(fg) - f\nabla_X g = gXf + fXg - fXg = gXf$$

ou seja, como operadores temos

$$[\nabla_X, f] = Xf.$$

Agora vamos calcular o colchete.

$$\begin{aligned} [\nabla_X, \nabla_Y] &= [X - \frac{i}{\hbar}\theta(X), Y - \frac{i}{\hbar}\theta(Y)] \\ &= [X, Y] - \frac{i}{\hbar}[X, \theta(Y)] - \frac{i}{\hbar}[\theta(Y), Y] + \frac{1}{\hbar}[\theta(X), \theta(Y)] \\ &= [X, Y] - \frac{i}{\hbar}(X(\theta(Y)) - Y(\theta(X))). \end{aligned}$$

Subtraindo o termo

$$\nabla_{[X,Y]} = [X,Y] - \frac{i}{\hbar} \theta([X,Y])$$

obtemos

$$[\nabla_X, \nabla_Y] - \nabla_{[X,Y]} = -\frac{i}{\hbar} (X(\theta(Y)) - Y(\theta(X)) - \theta([X,Y])),$$

que exatamente a fórmula “livre de coordenadas” da derivada exterior $d\theta = \omega$. \square

Agora podemos provar a relação de comutatividade, prop. 22.1.

Prova da prop ??.

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [Q(f), Q(g)] &= \frac{1}{i\hbar} \left[i\hbar \left(X_f - \frac{i}{\hbar} \theta(X_f) \right) + f, i\hbar \left(X_g - \frac{i}{\hbar} \theta(X_g) \right) + g \right] \\ &= [i\hbar \nabla_{X_f} + f, i\hbar \nabla_{X_g} + g] \\ &= i\hbar ([\nabla_{X_f}, \nabla_{X_g}]) + [\nabla_{X_f}, g] - [\nabla_{X_g}, f] + \cancel{[f, g]}^0 \\ &= i\hbar \left(\nabla_{[X_f, X_g]} + \frac{i}{\hbar} \omega(X_f, X_g) \right) + X_f(g) - X_g(f) \\ &= i\hbar \left(\nabla_{X_{\{f, g\}}} + \frac{i}{\hbar} \{f, g\} \right) + \{f, g\} + \{f, g\} \\ &= i\hbar \nabla_{X_{\{f, g\}}} - \{f, g\} + \{f, g\} + \{f, g\} \\ &= Q(\{f, g\}). \end{aligned}$$

\square

Agora vamos dar uma olhada como ficam as prequantizações dos operadores de posição e de momento:

Exemplo 22.4 (Hall) Para o potencial simplético $\theta = p_j dx_j$,

$$Q(x_j) = x_j + i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j}$$

$$Q(p_j) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Uma última proposição na seção mostra que a escolha do potencial simplético não faz muita diferença no sentido de que as prequantizações que surgem de dois potenciais simpléticos são unitariamente equivalentes; o mapa unitário que as relaciona se chama de *gauge transformation*.

5.2 Quantização no espaço euclidiano

Talvez aqui só botar o espaço de Fock=espaço de Segel-Bergman com o que a gente já sabe. Daí passa no simplético. Pode fazer isso de Fock amanhã memo.

6 Quantização geométrica em variedades simpléticas

6.1 Por que a geometria simplética é o cenário natural para a mecânica clássica

Essa seção é inspirada [neste documento](#).

Sistema físico é uma variedade com estrutura adicional. A variedade consiste dos estados do sistema (posição, momento), e a estrutura adicional são as leis de movimento. A dinâmica do sistema está determinada por uma função, o Hamiltoniano. Por medio de uma forma simplética podemos obter um campo vetorial associado a H

- ω não degenerada implica que sempre podemos achar esse campo vetorial
- ω alternante (sg.pdf prop. 6.11) implica que H é constante ao longo do fluxo Hamiltoniano (X_H aponta na direção de energia constante).
- Fórmula de Cartan implica que ω é constante ao longo do fluxo Hamiltoniano, ie. fluxo Hamiltoniano simplético (independente do tempo?) ie. $\mathcal{L}_{X_H} \omega = 0$ se e somente se ω é fechada.

As equações de Hamilton são só outra formulação da segunda lei do Newton. O campo vetorial Hamiltoniano é uma formulação geométrica das equações de Hamilton.

References

- Díaz, Héctor Castejón. "Berezin-Toeplitz Quantization on K3 Surfaces and Hyperkähler Berezin-Toeplitz Quantization". Available at <https://orbilu.uni.lu/bitstream/10993/28483/1/Thesis-HectorCastejonDiaz.pdf>. PhD thesis. Luxemburg: Université du Luxemburg, 2016.
- Hall, B.C. *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer New York, 2013. ISBN: 9781461471165.
- Tong, Daivd. *Lecture Notes on Classical Dynamics*. Cambridge, UK.
- *Lecture Notes on Quantum Mechanics*. Cambridge, UK.
- Tu, L.W. *Differential Geometry: Connections, Curvature, and Characteristic Classes*. Graduate Texts in Mathematics. Springer International Publishing, 2017. ISBN: 9783319550848.