

Representações da Mecânica Quântica

Representations of Quantum Mechanics

Ronni G.G. Amorim^{1,2,3}, Ademir E. Santana¹, Samuel J. Simon⁴, J. David M. Vianna^{*4,5}

¹Universidade de Brasília, Instituto de Física, Centro Internacional de Física, 70910-900, Brasília, DF, Brasil.

²Universidade de Brasília, Faculdade de Ciência e Tecnologia em Engenharia, 72444-240, Brasília, DF, Brasil.

³Canadian Quantum Research Center, Vernon, Canada.

⁴Universidade de Brasília, Departamento de Filosofia, 70910-900, Brasília, DF, Brasil.

⁵Universidade Federal da Bahia, Instituto de Física, 40210-340, Salvador, BA, Brasil.

Recebido em 29 de maio de 2025. Aceito em 30 de junho de 2025.

Considering general aspects of motion, the content of Lie symmetries is derived as a central structure for mechanical theories. This algebraic apparatus is associated with the Schwinger variational principle, which is related to the Feynman formulation, as is well known. In this realm of symmetries, different representations of non-relativistic quantum mechanics is addressed. The first, and most natural in this context, is the Liouville-von Neumann formulation in terms of density matrix. Looking for solutions of the Liouville-von Neumann equation, the Schrödinger-equation representation is derived as a theorem. In this realm we emphasize the meaning of the Heisenberg algebra for deriving the generators of the Galilei group. This procedure, based on symmetries, only, brings another perspective to consider an old but not fully solved problem: the Heisenberg relation for the time observer and the generator of time translation (the Hamiltonian). From the density matrix representation, the phase space Wigner representation of quantum mechanics is presented, followed by the symplectic representation. The most general presentation of quantum mechanics is based on the Fock space. This is discussed considering symmetries. As a consequence, for any type of representation, quantum mechanics is basically a quantum field theory. This interpretation is achieved by consistency and leads naturally to solve initial problems of quantum mechanics, such as the wave-particle notion and the principle of complementarity.

Keywords: Quantum Mechanics Structure, Representations, Symmetry.

Considerando aspectos gerais do movimento, o conteúdo de simetrias de Lie é deduzido como uma estrutura central para as teorias mecânicas. Este aparato algébrico está relacionado ao princípio variacional de Schwinger, que por vez, associa-se à formulação de Feynman, como é bem conhecido. É neste âmbito de simetrias que diferentes representações da mecânica quântica não-relativística são abordadas. A primeira, e mais natural neste contexto, é a formulação de Liouville-von Neumann em termos da matriz de densidade. Procurando soluções da equação de Liouville-von Neumann, a representação que se estabelece na equação de Schrödinger é obtida como um teorema. Neste caso, enfatizamos o significado da álgebra de Heisenberg na construção dos geradores do grupo de Galilei. Este procedimento, baseado apenas em simetrias, traz uma outra perspectiva de se abordar um problema antigo, mas ainda não completamente resolvido: a relação de Heisenberg para o observável tempo e o gerador de translação no tempo (o Hamiltoniano). A partir da matriz de densidade, a representação da mecânica quântica no espaço de fase, proposta por Wigner, é discutida, o que leva a representação simplética da mecânica quântica. A apresentação mais geral da mecânica quântica é estruturada no espaço de Fock, que aqui é abordado nesse contexto de simetrias. Como consequência, para qualquer tipo de representação, a mecânica quântica é basicamente uma teoria quântica de campos. Esta interpretação se estabelece por consistência e conduz a soluções de certos problemas iniciais da mecânica quântica, como a noção de onda-partícula e o princípio da complementaridade.

Palavras-chave: Estrutura da Mecânica Quântica, Representações, Simetria.

1. Introdução

O principal propósito do presente trabalho é apresentar diferentes formulações da mecânica quântica de um modo unificado e tanto quanto possível seguindo um procedimento pedagógico. Essas formulações são consequências de representações algébricas, mas

são usualmente tratadas esparsamente, o que dificulta o amadurecimento da teoria quântica tanto para as atividades de ensino, na compreensão de sua natureza filosófica/epistemológica, como para sua aplicação na pesquisa.

Considerando elementos históricos e epistemológicos, há uma ampla literatura associada aos problemas originais ligados à construção da física quântica [1–3]. Esses trabalhos possuem relevância que vão além da história e da evolução das idéias da física, pois alcançam e provêm

*Endereço de correspondência: ronniamorim@gmail.com

Editor-Chefe: Marcello Ferreira

fundamentos interpretativos em áreas como as novas engenharias, que surgiram desde as primeiras proposições da teoria quântica. Um outro aspecto importante nesses estudos é a revelação do carácter dinâmico-social das teorias físicas [2, 4].

Ainda neste contexto, a análise sobre o conteúdo de uma teoria do movimento, seja no domínio clássico como no quântico, resultou em impressionantes desdobramentos teóricos e experimentais. Um exemplo famoso é o das desigualdades de Bell [3, 5] que conduziram, depois de um caminho longo, a noções como emaranhamento e teletransporte de sistemas quânticos [6–10]. Todavia, problemas interpretativos ainda persistem, e parte provém do próprio desenvolvimento histórico da teoria. Uma mostra desse tipo de dificuldade é o estudo do significado de relações de Heisenberg envolvendo operadores do tipo tempo [11–13]. Uma outra dificuldade perene é o conceito de partícula elementar. Vejamos com mais acurácia este último aspecto.

Devido à mecânica clássica, nos livros textos o conceito de partícula está quase sempre associado à noção de ponto material-inercial [14, 15]. Isso levou, no início dos estudos dos sistemas quânticos, a intensas discussões envolvendo conceitos como onda-partícula e complementariedade. Os cuidadosos trabalhos de Bohr se constituem em uma requintada alegoria desse período [16]. A função de onda, $\psi(\mathbf{x}, t)$, passou a ser interpretada como uma amplitude de probabilidade, com $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ representando a densidade de probabilidade de se encontrar uma partícula localizada na posição $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ no instante de tempo $t \in \mathbb{R}$. Dois resultados importantes surgiram com essa definição de $\psi(\mathbf{x}, t)$ (uma função complexa definida no $\mathbb{R}^4$): os fenômenos sobre interferência, como ocorre com o elétron, receberam tratamento teórico com previsibilidade experimental, e a teoria de probabilidade clássica fora generalizada para o reino dos números complexos.

A interpretação inicial de $\psi(\mathbf{x}, t)$ esteve inspirada na teoria cinética clássica [17, 18], na qual cada ponto, $\mathbf{x}$, do espaço de configurações é o locus de uma partícula (um ponto material-inercial) com velocidade $\mathbf{v}$ num instante de tempo t . A densidade de probabilidade em teoria cinética, $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, é então o que se chama de estado do sistema. Esta nomenclatura foi emprestada pela formulação da mecânica quântica, que passou a interpretar $\psi(\mathbf{x}, t)$ também como “estado” do sistema quântico. Essa denominação é ainda comum nos livros didáticos sobre mecânica quântica, continua adequada na pesquisa sobre a interação da radiação com a matéria [19], mas na generalidade de aplicações arrasta dificuldades históricas, como a noção de onda-partícula. A superação desse tipo de dificuldade ocorreu com a axiomatização em termos de operadores de campos e de simetrias [20–22]. Nesta situação, considerando uma teoria de movimento para campos, a noção de “estado mecânico” é ligeiramente diferente. Vejamos.

De modo breve [20], um campo, fisicamente, é representado por uma função definida como $\sigma(\mathbf{x}, t)$, sendo

σ uma propriedade física de pontos do espaço-tempo, $(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^4$. A propriedade física σ , matematicamente, pode ser um escalar, um vetor (como no caso do campo campo elétrico), ou um spinor (como no caso do campo de Dirac), entre outros objetos matemáticos. Além disso, um campo $\sigma(\mathbf{x}, t)$ traz consigo os atributos mecânicos do sistema em estudo, e por definição não se reduz a pontos materiais. Neste sentido, interpretada como campo, a função $\psi(\mathbf{x}, t)$ estabelece as características físicas de pontos do espaço-tempo; isto é, ψ descreve fisicamente uma amplitude de probabilidade associada a pontos $(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^4$. Além disso, $\psi(\mathbf{x}, t)$ transporta as informações sobre o sistema mecânico em estudo. No caso do elétron, ψ traz consigo as informações sobre a massa do elétron, sua carga elétrica e spin.

A representação quântica mais geral, que descreve sistemas atômicos e subatômicos, ocorre no espaço de Fock, $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ [21, 22], uma generalização do espaço de Hilbert, $\mathcal{H}_E$, este último definido no espaço de funções complexas do $\mathbb{R}^3$ (espaço Euclidiano), do tipo Lebesgue de segundo tipo, como é o caso de ψ . Isso levou a mecânica quântica a se constituir em uma teoria quântica de campo, com consequências práticas extraordinárias. Uma dessas foi a descoberta do transistor [23]. Neste caso, a representação no espaço de Fock permitiu a introdução do conceito de “buraco” em física da matéria condensada (equivalente ao conceito de anti-partícula, nas teorias de campos relativísticas). Esta representação foi denominada historicamente de “segunda quantização” [21], uma nomenclatura que gerou dificuldades, mas que aos poucos alcança o desuso. Além disso, a formulação original da mecânica quântica estabelecida no espaço $\mathcal{H}_E$ passou a ser um caso particular da representação em $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$.

É importante observar que na situação relativística, o elétron é descrito pelo campo de Dirac, satisfazendo a equação de Dirac (invariante por transformações de Lorentz). Se o elétron estiver em uma velocidade, v , baixa comparada com a velocidade da luz, c , o limite não-relativístico ($v \ll c$) da equação de Dirac conduz à equação de Pauli-Schrödinger, e o campo de Dirac passa a se chamar campo de Schrödinger ou Pauli-Schrödinger. Mas note que o campo é o mesmo, pois o sistema físico – o elétron – é o mesmo, caracterizado por uma massa, uma carga elétrica e um spin, que são invariantes, nos domínios de altas e baixas velocidades. Como o campo de Dirac não é decomposto em outros campos mais fundamentais, o elétron é denominado de partícula elementar. Experimentalmente, de fato, não se observa estrutura no elétron, até onde se mede atualmente suas características básicas.

Por ser um campo, este por definição, como vimos acima, não fica redutível a um ponto material. Entretanto, essa situação pode ser contemplada como um caso especial: quando o campo está muito localizado no espaço, com o comportamento de uma delta de Dirac. Por este motivo é possível utilizar a ideia de ponto material, como acontece nos cursos básicos de física e na

pesquisa em áreas como a física da matéria condensada e da óptica.

Ressalte-se que o objeto matemático a descrever um sistema físico não é um elemento ontológico de disputa. Escolhe-se o objeto a representar o sistema físico que permita consistência e abrangência nas aplicações. Por isso, considerando o elétron, nos casos específicos se opera às vezes com campos, às vezes com o conceito de ponto material, e às vezes de modo híbrido.

Em termos do movimento, o “estado mecânico” do elétron, descrito como um campo no contexto atômico, é dado por ψ e suas derivadas espaciais e temporal, o que é indicado por $\partial\psi$. Neste caso, ψ descreve a conformação do sistema no espaço, em certo instante de tempo; $\partial\psi$ representa aspectos de mudança dessa conformação do campo, ou seja, o seu movimento no espaço-tempo. Isto é a generalização do caso de partículas pontuais, em que o “estado mecânico” é dado pela conformação espacial (a localização), $\mathbf{x}(t)$, e sua derivada primeira, a velocidade $\mathbf{v}$; uma informação sobre o movimento do sistema num instante de tempo t . O uso de derivadas de ordens mais altas, em ambos os casos, para a definição de estado mecânico é ainda possível, mas não será estudado aqui.

Com estas definições especificadas e com as condições de simetria do espaço-tempo, ou seja, do $\mathbb{R}^4$, se deduz, por exemplo, através do princípio variacional de Schwinger [24–29], as equações de movimento dos campos. Esse processo inclui as equações dos campos de calibre, que descrevem as interações abelianas (como o campo eletromagnético) e não abelianas (como o glúon)¹.

Neste trabalho, procuramos tratar essas questões, iniciando por enfatizar o significado das simetrias na construção de uma teoria do movimento [31]. É sob esta perspectiva que analisamos diferentes representações da mecânica quântica. De fato, este é um ponto

de partida que nosso grupo vem explorando há algumas décadas por razões diversas. Algumas, podemos dizer, com conteúdo mais formal, tratando de teorias das representações unitárias em diferentes variedades, como espaços simpléticos, ou no contexto das teorias quânticas de campos à temperatura finita [32–34]. Uma motivação física primeira para tais estudos é a busca de contribuições para o entendimento do confinamento em teorias de campos, como o problema da quebra de simetria quiral na transição de fase da matéria hadrônica para o chamado plasma de quarks e glúons. Problema este intimamente relacionado com a termalização dos sistemas físicos. Mas há outros elementos motivadores, incluindo os de natureza pedagógica, e todos estão relacionados.

Muitas das questões apresentadas acima se mostraram recorrentes quando ministramos cursos sobre mecânica quântica tanto para a pós-graduação acadêmica quanto para a pós-graduação profissional. Neste último caso, em particular, há uma imensa demanda para a transposição didática adequada no que diz respeito a mecânica quântica em seu estágio atual [30]. Neste trabalho, explorando a noção de simetria, apresentamos tentativas de se aproximar de respostas a essas questões, que possuem implicações tanto pedagógicas/filosóficas quanto na prática da pesquisa acadêmica. Nos deteremos nas simetrias não-relativísticas.

Para evidenciar o papel das simetrias, reformulamos o princípio de Schwinger a partir de uma perspectiva algébrica. Este aparato, apresentado na seção 2, permite clarificar fisicamente o significado das simetrias de Lie para as teorias do movimento. Neste contexto, na seção 3, a formulação da mecânica quântica em termos da matriz de densidade se mostra a mais natural e apresenta ampla generalidade. Como uma consequência, a representação em termos da equação de Schrödinger é obtida como um teorema. Neste caso, elementos interpretativos não usuais são detalhados na perspectiva de simetrias. É assim que analisamos as relações de Heisenberg, em particular a temporal. A extensão da matriz de densidade para o espaço de fase conduz à representação de Wigner, que é a base da teoria cinética quântica, das formulações estocásticas da física quântica, das teorias de campos não-comutativas, e com aplicações diversas como em óptica quântica, em física de partículas e física da matéria condensada. Estes resultados são explorados nas seções 4 e 5. Na seção 6, a representação em termos do espaço $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ é discutida brevemente. As conclusões finais estão na seção 7. No Apêndice A, apresentamos uma revisão sobre grupos e álgebras de Lie, e com certo detalhe explicitamos a emergência do conceito de constantes de estruturas nas álgebras de Lie, um aspecto fundamental, mas pouco discutido e detalhado na literatura pedagógica. A propósito, em todo o texto, tanto quanto possível, seguimos uma apresentação pedagógica, evitando o excesso de rigor matemático, que fica substituído por apelos físicos. Incluímos uma quantidade de referências que não é exaustiva, mas que pode ser

¹ Uma situação intrincada persiste até os dias atuais com o conceito de “fóton”, uma partícula elementar. Historicamente, o campo eletromagnético, depois da síntese de Maxwell, recebeu nomes diversos, como campo de Maxwell, ou campo de radiação. A palavra “fóton” foi utilizada para se referir ao elemento básico de discretização dos níveis de energia do campo eletromagnético, o quantum. Por esse motivo, às vezes também é definido como “excitações do campo eletromagnético”. Com o advento da eletrodinâmica quântica, a palavra “fóton” passou a descrever a partícula elementar mediadora da interação eletromagnética. O nome “fóton” neste caso é o próprio campo de Maxwell, carregando assim seus atributos mecânicos, quais sejam: carga elétrica nula, massa nula e spin 1. No limite clássico a discretização da energia não fica evidente devido a escala. Por esse motivo, a palavra “fóton” não aparece num curso de eletrodinâmica clássica. Mesmo se referindo ao fóton como uma partícula elementar, em nenhuma situação há algo como uma “bolinha, ou ponto, de luz inercial”; no melhor há os limites da óptica geométrica. Quando se fala de um certo número de fótons em uma cavidade, digamos n , isto significa que na cavidade há campo de Maxwell com energia dada por $n\hbar\omega$, onde ω é a frequência da radiação. Em termos de comparação, vale apontar que o mediador da interação forte, a partícula chamada “glúon”, é descrito por um campo do mesmo nome; e somente esse nome é utilizado. O mesmo ocorre com outros campos como o bóson de Higgs, e os W e Z bósons, estes últimos sendo os mediadores da interação eletrofraca [30].

utilizada como um ponto de partida para as pessoas interessadas. Para tal, privilegiamos trabalhos outros de revisão e alguns originais de conteúdo histórico. Exceto em algumas situações específicas, como no estudo do limite clássico, usaremos $\hbar = 1$.

2. Estrutura de Simetrias das Teorias Mecânicas

Nesta seção analisamos a estrutura algébrica das teorias de movimento, reformulando o princípio variacional de Schwinger. Utilizamos alguns dos nossos estudos prévios [35–38], onde a variedade do espaço-tempo fica definida a partir da noção de medida e é utilizada como ponto de partida para análise do movimento; uma consequência dessa análise que será explorada aqui é o carácter algébrico do movimento intimamente ligado a simetrias descritas por grupos de Lie [30, 39].

Inicialmente, consideramos que as variáveis mecânicas (às vezes chamadas de cinemáticas) associadas à descrição de um sistema físico formam um conjunto de objetos $\mathcal{V} = \{A, B, C, \dots\}$ com uma estrutura de espaço vetorial. O detalhamento do tipo de espaço vetorial depende de casos físicos específicos. É oportuno revisar aqui a definição de espaço vetorial.

O conjunto $\mathcal{V}$ é munido de duas operações: “+”, denominada “soma”, e “.”, “multiplicação por um escalar”, de modo que se A e $B \in \mathcal{V}$, então $A + B \in \mathcal{V}$. A multiplicação envolve um vetor A e um número do corpo, aqui escolhido como os Reais, $\mathbb{R}$, isto é, se $a \in \mathbb{R}$, então $a \cdot A = aA = Aa \in \mathcal{V}$. Essas operações satisfazem as seguintes condições para todo $A, B, C \in \mathcal{V}$ and $a, b, c \in \mathbb{R}$:

$$A + B = B + A, \quad (1)$$

$$(A + B) + C = A + (B + C), \quad (2)$$

$$A + 0 = A, \quad (3)$$

$$A + (-A) = 0, \quad (4)$$

$$a(A + B) = aA + aB, \quad (5)$$

$$(a + b)A = aA + bA, \quad (6)$$

$$(ab)A = a(bA), \quad (7)$$

$$1A = A, \quad (8)$$

com $0 \in \mathcal{V}$ denominado de vetor nulo. Neste caso $\mathcal{V}$ é denominado de espaço vetorial, ou espaço linear. O axioma na Eq. (1) descreve a comutatividade da soma; a Eq. (2) evidencia a associatividade da soma; a Eq. (3) garante a existência do vetor nulo; a Eq. (4) garante a existência dos vetores inversos ou negativos com relação a soma. Como é usual, usa-se a mesma noma notação para a soma, “+”, para vetores e números, mas isso não conduz a confusão. Algumas observações são ainda de interesse aqui. Note que se $A + B = 0$, então $B = -A$. Este resultado mostra que o inverso de B é único. Se $A \in \mathcal{V}$, então para $a = -1$, segue que $(-1)A = -A$. Além disso, se $a = 0$ and $A \neq 0$, logo $aA = 0A = 0$.

Para $A = 0$ e $a \neq 0$, $a0 = 0$. Mais uma vez, usa-se a mesma notação para o vetor nulo e número zero, sem criar ambiguidade. Esses axiomas foram propostos como uma síntese da generalização da geometria Euclidiana, e alcançam vários sistemas físicos como veremos.

Além dessa estrutura de espaço vetorial, $\mathcal{V}$ é naturalmente provido com um produto associativo, $\circ$, tal que $\circ : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$. Esse produto é também representado em uma notação simplificada como $A \circ B = AB = C$, com $A, B, C \in \mathcal{V}$. A forma mais simples de $\circ$ é uma estrutura linear. Dessa maneira, $\mathcal{V}$ passa a ser uma álgebra associativa, e uma consequência importante é a expansão, à lá Taylor, de funções de observáveis.

A mudança de um elemento cinemático pode ser quantificada a partir de parâmetros do espaço-tempo, ou seja, do $\mathbb{R}^4$. Considerando uma variável A função de um parâmetro $\tau \in \mathbb{R}$, i.e $A = A(\tau)$, então a mudança de A , δA , devido a uma mudança infinitesimal de τ , pode ser escrita como $\delta A = A(\tau + \delta\tau) - A(\tau)$. Além disso, essa variação pode ser especificada pela ação de um elemento $G \in \mathcal{V}$, chamado gerador, através de um mapeamento do tipo $(,) : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$. A situação mais simples é a linear, tal que $\delta A = (A, G) \delta\tau$. Observe que $(,)$ dota o espaço vetorial $\mathcal{V}$ com outra estrutura algébrica a ser especificada.

Um aspecto físico a ser considerado é que um gerador de mudanças, G , não produz variações mecânicas sobre si mesmo. Isto resulta em $(G, G) = 0$. Escrevendo $G = A + B$, tal que $(A + B, A + B) = 0$, e a usando a linearidade de $(,)$, obtemos

$$(A, B) = -(B, A); \quad (9)$$

isto é, o produto $(,)$ is antissimétrico.

Vamos denotar $C = AB$. Uma mudança infinitesimal de C , δC , é escrita, até primeira ordem, como $\delta C = (A + \delta A)(B + \delta B) - AB$, que resulta em $\delta C = (\delta A)B + A(\delta B)$. Considerando que as variações em A, B e C sejam geradas por G e especificada pelo parâmetro τ , temos $\delta A = (A, G) \delta\tau$ and $\delta B = (B, G) \delta\tau$ and $\delta C = (C, G) \delta\tau$. Como consequência, encontramos facilmente que

$$(AB, G) = (A, G)B + A(B, G).$$

Esta é a chamada regra de Leibnitz, ou derivação, estabelecendo a relação entre o produto associativo, $\circ$, e o produto $(,)$.

É importante salientar que dado $A, B \in \mathcal{V}$, o produto (A, B) é um elemento $D \in \mathcal{V}$, ou seja, podemos escrever $D = (A, B)$. Esta relação deve valer para todo o domínio de definição de um parâmetro $\xi \in \mathbb{R}$ associado as variações em A, B, D conduzidas por um gerador dado por C . Desse modo, escrevemos $D(\xi) = (A(\xi), B(\xi))$. Após uma variação infinitesimal no parâmetro ξ , $\delta\xi$, temos

$$D(\xi + \delta\xi) = (A(\xi + \delta\xi), B(\xi + \delta\xi)), \quad (10)$$

refletindo uma condição de estabilidade do produto $(,)$.

Escrevendo $D(\xi + \delta\xi) = D(\xi) + \delta D$, $A(\xi + \delta\xi) = A(\xi) + \delta A$ e $B(\xi + \delta\xi) = B(\xi) + \delta B$, e considerando o gerador C , tal que $\delta A = (A, C)\delta\xi$, $\delta B = (B, C)\delta\xi$ e $\delta D = (D, C)\delta\xi$, a partir da Eq. (10), obtemos

$$(A, (B, C)) + (C, (A, B)) + (B, (C, A)) = 0,$$

que é a identidade de Jacobi. Logo, $(,)$ é um produto de Lie, e por conseguinte o espaço linear $\mathcal{V}$ é uma álgebra de Lie com derivação. Assim podemos construir representações de simetrias de Lie (ver o Apêndice A).

Finalizando esta seção, é significativo destacar que o princípio variacional de Schwinger segue diretamente dessa representação, uma vez identificado os geradores de simetria. Considere uma simetria de Lie caracterizada pelas constantes de estrutura C_k^{ij} . Os geradores são elementos de $\mathcal{V}$ e escritos como A^i . Neste caso, a álgebra de Lie fica dada por (há uma soma nos índices repetidos)

$$(A^i, A^j) = C_k^{ij} A^k. \quad (11)$$

Os elementos do grupo de Lie, descrevendo a simetria, são dados por $G(\xi) = \exp(\xi_i A^i)$, onde $\xi = (\xi_i, i = 1, 2, \dots, s)$. O grupo é conectado à identidade e é dependente de s parâmetros Reais.

É útil ter em mente, como exemplo, as rotações que são caracterizadas pelas constantes de estruturas dadas pelo tensor antissimétrico ϵ^{ijk} , com $i, j, k = 1, 2, 3$. Tendo como espaço de representação o $\mathbb{R}^3$, a álgebra de Lie fica dada por

$$[J^i, J^j] = \sum_{k=1}^3 \epsilon^{ijk} J^k, \quad (12)$$

com J^i sendo as matrizes geradoras de rotação. O produto de Lie $(,)$ é dado pela relação de comutação, $[,]$. Se o espaço de representação for o de funções no $\mathbb{R}^3$, então os geradores são dados por $J^i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon^{ijk} x^j \partial^k$.

Um invariante I da álgebra dada pela Eq. (11) é uma função dos geradores A_i , isto é, $I = I(A^1, \dots, A^s)$, tal que $(I, A^i) = 0, \forall i$. No exemplo do grupo de rotações, um invariante é dado por J^2 . Os conhecidos lemas de Schür e um teorema de Von Neuman [39] asseguram que um invariante como $I = I(A^1, \dots, A^s)$ é um múltiplo da identidade.

Para este contexto de simetrias, podemos generalizar o princípio de ação estacionária de Schwinger. Inicialmente, definimos uma função $\mathcal{L} = \mathcal{L}(A^i)$ que descreva o sistema físico. A função $\mathcal{L}$ deve ser, então, invariante por transformações de simetria, em particular as do do espaço-tempo, uma vez que para diferentes observadores o sistema físico é o mesmo. De fato, $\mathcal{L}$ contém todos os atributos físicos que definem uma função densidade de Lagrangiana, o que conduz ao um princípio de variacional definido pela ação funcional

$$S[A^i] = \int_{\tau'}^{\tau''} \mathcal{L}(A^i) d\tau. \quad (13)$$

O princípio variacional mais simples estabelece, então, que uma variação infinitesimal de $S[A^i]$, δS , deve depender apenas da diferença dos geradores G da transformação de simetria entre τ' e τ'' . O que conduz a

$$\delta S[A^i] = G(\tau'') - G(\tau'). \quad (14)$$

O parâmetro τ está associado com a simetria gerada por G . Não é necessário explorar, neste momento, esses resultados. Mas é oportuno apontar que, ao se considerar as translações no espaço e no tempo, o que leva naturalmente a álgebra de Heisenberg, então os resultados devido a Schwinger para a mecânica quântica são obtidos [24–27]. Este princípio se constitui em uma das representações que conduzem à teoria quântica, e é equivalente ao método de Feynman [28, 29, 92, 93] que também se liga às formulações estocásticas. Aqui, invertemos o método de Schwinger, enfatizando a álgebra de Lie, por nos permitir uma leitura unificada das outras diferentes formulações tratadas a seguir.

3. Representações de Liouville-Von Neumann e Schrödinger

Nesta seção, utilizamos os resultados da seção anterior para introduzir a representação da mecânica quântica formulada a partir do espaço $\mathcal{V}$. O primeiro resultado conduz imediatamente a equação de Liouville-Von Neumann [32]. Na sequência, explicitando o espaço de representação dos objetos de $\mathcal{V}$, o espaço de Hilbert, deduziremos a equação de Schrödinger.

Seja um sistema quântico descrito por um operador, $\rho(t) \in \mathcal{V}$, onde t é o tempo. Por enquanto, não é necessário explicitar o espaço de definição dos operadores em $\mathcal{V}$. Todavia, consideramos que $\text{Tr}\rho(t) = 1$ de modo a ser interpretado com uma densidade de probabilidade. Seja A um observável do sistema quântico descrito por $\rho(t)$. Segue que, em certo instante de tempo t , a média de A , dada por $\langle A \rangle = \text{Tr}\rho(t)A$, é um número Real a ser associado com a medida. A questão então passa ser encontrar a forma como $\rho(t)$ muda com o tempo. Como $\mathcal{V}$ é um espaço vetorial, podemos procurar o gerador L da variação temporal de $\rho(t)$ no espaço das aplicações lineares, $\hat{\mathcal{O}}$ atuando sobre $\mathcal{V}$, de modo que $\hat{\mathcal{O}} : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$. Escolhamos para $\hat{\mathcal{O}}$, o operador L , gerador das translações temporais, parametrizadas por t . Segue (ver o Apêndice) que os elementos do grupo de translação temporal, enquanto um operador em $\underline{\mathbb{Q}}$, é dado por $T(t, t_0) = \exp\{-i(t - t_0)L\}$. Esta expressão garante que $T(t, t_0)$ está conectado a identidade. Dado então $\rho(t_0)$, o operador de densidade no tempo t_0 , segue que $\rho(t)$ fica dado por $\rho(t) = e^{-i(t-t_0)L}\rho(t_0)$. Considerando que a normalização de $\rho(t)$ permanece válida para todo o tempo, $\text{Tr}\rho(t) = 1, \forall t$, segue que $T(t, t_0)$ é um operador unitário. Logo, L é um operador Hermitiano. Estes resultados levam a

$$i\partial_t \rho(t) = L\rho(t). \quad (15)$$

Passemos então a procurar uma forma explícita para L . Com este objetivo: (i) considere que o tempo é homogêneo, e portanto Galileano (voltaremos a este aspecto ao final desta seção). Há então um observável $H \in \mathcal{V}$, o Hamiltoniano, invariante por translação temporal, de modo que

$$H(t) = e^{-i(t-t_0)L}H(t_0) = H(t_0),$$

onde $H(t_0) = H(t) = H$ está fixo. Isto leva a $i\partial_t H = LH = 0$; (ii) exploremos a estrutura de álgebra de Lie em $\mathcal{V}$; nessa estrutura, dado um operador $A \in \mathcal{V}$, podemos introduzir um operador $\hat{A}$, do tipo $\hat{O}$, ou seja atuando nos elementos de $\mathcal{V}$, tal que se $B \in \mathcal{V}$, definimos a ação de $\hat{A}$ sobre B como $\hat{A}B = (A, B)$. O operador $\hat{A}$ fica explicitado como $\hat{A} = (A, \cdot)$. Usando a antissimetria do produto de Lie $(\cdot, \cdot)$, temos $\hat{A}A = (A, A) = 0$. Como uma consequência, dado que $LH = 0$, o gerador L pode ser escrito $L = \hat{H} = (H, \cdot)$.

Para obter a expressão de H e consequentemente L é preciso explicitar o espaço de representações onde os operadores de $\mathcal{V}$ atuam. Adotaremos o espaço de Hilbert. Por completude da apresentação, e também para fixar a notação, vamos definir o espaço de Hilbert, $\mathcal{H}_E$, construído a partir de funções complexas definidas no espaço Euclidiano, $\mathbb{R}^3$. Consideramos, então, funções do tipo $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}$, satisfazendo a condição de integrabilidade de Lebesgue de segunda ordem. Usando a notação de Dirac, uma base em $\mathcal{H}_E$ é dada por $|\mathbf{x}\rangle$. O dual é escrito como $\langle \mathbf{x}|$, com $\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Segue que $\psi(\mathbf{x})$ é a componente de $|\psi\rangle$ na base $|\mathbf{x}\rangle$, isto é, $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$, onde $|\psi\rangle$ é um vetor arbitrário de $\mathcal{H}_E$, com o dual dado por $\psi^\dagger(\mathbf{x}) = \langle \psi|\mathbf{x}\rangle$. A relação de completude da base é dada por $\int |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}|d\mathbf{x} = 1$. Usando este resultado temos um produto interno naturalmente definido por

$$\langle \psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\Omega} \psi_1^\dagger(\mathbf{x})\psi_2(\mathbf{x})d\mathbf{x},$$

onde Ω é o domínio de definição dos vetores $\mathbf{x}$ no espaço Euclidiano (cuja dimensão não está explicitada por não ser necessária).

Os operadores do tipo $A \in \mathcal{V}$ atuam linearmente sobre os elementos de $\mathcal{H}_E$, ou seja,

$$A(|\psi\rangle + \gamma|\phi\rangle) = A|\psi\rangle + \gamma A|\phi\rangle \quad (16)$$

com $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ and $\gamma \in \mathbb{C}$. Um exemplo é o operador multiplicativo $\mathbf{X} \in \mathcal{V}$ defined by

$$\mathbf{X}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad (17)$$

where $\mathbf{x}$ descreve o espectro de $\mathbf{X}$ na base $|\mathbf{x}\rangle$.

Considerando estes resultados podemos obter uma solução da Eq. (15) escrevendo

$$\rho = \sum_r \gamma^{(r)} |\psi^{(r)}(t)\rangle \langle \psi^{(r)}(t)|, \quad (18)$$

onde $|\psi^{(r)}(t)\rangle \in \mathcal{H}$, with $r = 1, 2, \dots$. Para que ρ seja uma solução da Eq. (15), o vetor $|\psi(t)\rangle$ deve ser solução

da equação

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle. \quad (19)$$

Esta é conhecida como equação de Schrödinger.

Um “estado” puro é caracterizado por $r = 1$, resultando em $\rho = |\psi(t)\rangle\langle \psi(t)|$. Podemos nos concentrar neste resultado. Observe que a densidade de probabilidade $\rho(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}|\rho(t)|\mathbf{x}\rangle$ é dada por

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|\mathbf{x}\rangle = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2.$$

Note ainda que o valor médio de um observável A é dado como

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \rho(t) A = \langle \psi(t)|A|\psi(t)\rangle.$$

Por estes motivos, a função de onda complexa $\psi(\mathbf{x}, t)$ é interpretada como uma amplitude de probabilidade. Neste sentido, $\psi(\mathbf{x}, t)$ é um campo, ou seja, um aspecto físico, a amplitude de probabilidade, ψ , no ponto $\mathbf{x}$ do espaço de configurações no instante de tempo t .

Em geral, para $r = 1, 2, \dots, s$, o campo é chamado de mistura, e as constantes γ^r representam o peso estatístico do ensemble de campos. Este aspecto não será explorado aqui.

Estes resultados mostram que a formulação em termos do operador de densidade é mais geral que a formulação em termos da equação de Schrödinger. Como deduzido nesta seção, a equação de Liouville-Von Neumann é uma consequência da análise de simetrias, sendo independente do espaço de representação escolhido.

Continuando com o espaço de Hilbert $\mathcal{H}_E$ é possível analisar a simetria fundamental do espaço tempo, que é o grupo de Galilei usando a descrição de Schrödinger onde os observáveis são fixos e os campos (vetores de estado) variam no tempo. Na representação do campo de Schrödinger, o operador Hamiltoniano, $H \in \mathcal{V}$, além de ser um observável é também o gerador de evolução temporal para o campo $\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x}|\psi(t)\rangle$, de acordo com a Eq. (19). Em outros termos, definindo $T(t - t_0) = \exp\{-i(t - t_0)H\}$, temos $|\psi(t)\rangle = T(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle$, solução da Eq. (19). Vimos que a homogeneidade temporal levou a H ser um invariante, e representando o observável energia do sistema. E assim chegamos a uma forma explícita do Liouvilliano (que é o gerador de evolução temporal de ρ). Considerando a representação do campo de Schrödinger, o gerador de evolução temporal e o observável energia, H , coincidem. Os outros observáveis devem então coincidir com outros geradores de simetrias. Por exemplo, o gerador de translação espacial, pode ser especificado em $\mathcal{H}_E$ por $T(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a})$. Deste modo, uma forma explícita de $T(\mathbf{a})$ é dada por $T(\mathbf{a}) = \exp\{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}\}$, onde $\mathbf{P}$ é o gerador de translações espaciais e ao mesmo tempo representa o observável momentum linear. Na base $|\mathbf{x}\rangle$, as componentes do operador $\mathbf{P}$ ficam dadas por $P^j = -i\partial/\partial x^j$, $j = 1, 2, 3$. É preciso mostrar então que $\mathbf{P}$ possui as características físicas de momentum linear.

Utilizando o operador $\mathbf{X}$, que descreve o observável posição (que não é um gerador de simetria), obtemos, em termos de componentes, o resultado seguinte,

$$[X^l, P^j] = i\delta^{lj}, \quad (20)$$

com $j, l = 1, 2, 3$. Esta relação forma uma álgebra de Heisenberg. Com este resultado, podemos contruir os outros geradores de simetria a partir de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$. O gerador de transformação entre sistemas inerciais, as transformações puras de Galilei, que é um tipo de translação espacial parametrizada pelo parâmetro $\mathbf{v}$, fica dado por $K^l = mX^l - tP^l$, onde m é uma constante. Em termos do gerador $\mathbf{K}$, tem-se em $\mathcal{H}_E$ tem-se operador $\exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{K})$, cujo efeito sobre os observáveis $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$ resulta em

$$\begin{aligned} \exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}) X_j \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}) &= X_j + v_j t, \\ \exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}) P_j \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}) &= P_j + mv_j. \end{aligned}$$

Ou seja, $\mathbf{X}$ se transforma como um observável posição e $\mathbf{P}$ se transforma como observável momentum; a constante m possui então unidade de massa. Note que para deduzir essas relações, basta usar a álgebra de Heisenberg, Eq. (20), e a propriedade de derivação dos comutadores. Em dito outro, não é necessário explicitar a base de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{P}$.

Os geradores de rotações, equivalentes aos observáveis denominados de componentes do momentum angular, J^i , são dados por $J^i = i\epsilon^{ijk} X^j P^k$. Além disso, como $H = i\partial/\partial t$, encontramos a álgebra de Lie do grupo de Galilei,

$$[J^l, J^j] = i\epsilon^{ljk} J^k, \quad (21)$$

$$[J^l, K_j] = i\epsilon^{ljk} K_k, \quad (22)$$

$$[J^l, P^j] = i\epsilon^{ljk} P_k, \quad (23)$$

$$[K^l, H] = -P^l, \quad (24)$$

$$[K^l, P^j] = -im\delta_{lj}. \quad (25)$$

Há dois invariantes nessa álgebra, dados por

$$\begin{aligned} I_1 &= H - \frac{P^2}{2m}, \\ I_2 &= J^2 - S(S+1). \end{aligned}$$

O invariante I_1 está associado com a conservação da energia. O invariante I_2 descreve a conservação do momentum angular.

Uma forma explícita para o gerador H é obtida reescrevendo a Eq. (24) como

$$[mX^j - tP^j, H(\mathbf{X}, \mathbf{P})] = iP^j.$$

Uma solução geral para esta equação algébrica é obtida considerando que H é um invariante para todo o valor de t . Sendo assim, H , deve satisfazer a condição $[mX^j, H(\mathbf{X}, \mathbf{P})] = iP^j$. Logo, uma forma geral de H é dada por

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{X}). \quad (26)$$

Este resultado é consistente com a imposição de simetria de calibre sobre o campo ψ , um aspecto que abordaremos na seção 5. Há entretanto outros pontos de interesse a realçar.

O primeiro, e mais importante, é que esta abordagem em termos de simetria apresenta aspectos importantes para a interpretação das relações de Heisenberg. Estas identificam as variáveis dinâmicas básicas, chamadas de canônicas, a partir da qual todas as relações de simetria (a álgebra de Lie do grupo de simetria em consideração) são deduzidas, independente da representação; o que é uma consequência direta da natureza do produto de Lie.

Observe que o Hamiltoniano nesta formulação surge como um invariante, uma constante de movimento, a caracterizar a escolha pela homogeneidade do tempo. Isto significa que a mudança temporal de um sistema inercial para outro ocorre por uma constante, ou seja, o tempo se transforma como $t \rightarrow t' = t + \alpha$ onde α é uma constante. Isto define o tipo de sincronização dos relógios na simetria Galileana. Devemos observar que um ponto no espaço muda por rotações, translações espaciais e pelas transformações puras de Galilei. Entretanto, nesta situação Galileana, o tempo t não muda por uma mudança de coordenadas espaciais. E por esse motivo, H é um invariante e possui uma forma explícita, como deduzida e apresentada na Eq. (26). Este resultado acontece tanto na mecânica clássica como aqui na mecânica quântica não-relativística, consequência da homogeneidade do tempo.

Este é o tempo que Newton utilizou nos *Principia* e denominou de “tempo relativo”; basicamente é o tempo definido e medido pela introdução dos relógios [14]. Esse tempo t , a menos de constante, é idêntico para todos os sistemas de referência inerciais Galileanos. É importante demarcar que esse conceito não é equivalente ao de tempo absoluto, desenvolvido de certa maneira por Santo Agostinho, e que Newton o trata apenas de passagem nos *Principia* [14], onde se lê no escólio:

“Absolute, true, and mathematical time, of itself, and from its own nature flows equably without regard to anything external, and by another name is called duration; relative, apparent, and common time, is some sensible and external (whether accurate or unequale) measure of duration by means of motion, which is commonly used instead of true time; such as an hour, a day, a month, a year.”

Nos cálculos, como os do cometa de Haley, Newton utiliza o tempo relativo (homogêneo), que é o mesmo em toda a física contemporânea não-relativística. Esse mesmo tempo relativo é implementado na teoria da relatividade devido a características experimentais dos sistemas movendo-se em alta velocidade. Neste caso, observa-se experimentalmente a contância da velocidade da luz para diferentes sistemas de referência; um aspecto que é elevado à categoria de princípio na teoria da relatividade restrita. Uma consequência é que a

questão da sincronicidade dos relógios é modificada, e a homogeneidade do tempo é abandonada. De modo outro, a proposição de um tempo absoluto que “from its own nature flows equably without regard to anything external” guarda apenas uma perspectiva ontológica que não é utilizada pela física [15].

Essas considerações evidenciam que, no caso não-relativístico, um tipo de relação de Heisenberg de um operador multiplicativo T como seu conjugado, H , é irrelevante, pois não traz atributos mecânicos de nenhuma natureza. Essa situação muda para os fenômenos físicos em altas velocidades, para os quais a simultaneidade temporal não se estabelece apenas por uma diferença de contantes, mas depende das mudanças nas coordenadas espaciais. Isso acarretará mudanças em uma álgebra de Heisenberg generalizada para as quatro dimensões do espaço de Minkowski, e leva à construção da álgebra de Lie do grupo de Lorentz e Poincaré. Por fim, é importante destacar que, dado a álgebra de Heisenberg, a construção de Schwinger segue de imediato [25].

4. Representação de Wigner

Nesta seção, discutiremos a representação da mecânica quântica no espaço de fase, idealizada por Wigner em 1932. A apresentação será conduzida de maneira pedagógica, trazendo a definição da função de Wigner, suas principais propriedades, exemplificadas como algumas aplicações. Enfatizamos as dificuldades de utilização da função de Wigner para a implementação das interações entre os sistemas, definidas a partir das simetrias de calibre.

A física quântica construída no espaço de fase tem início com Dirac, que em 1930 [40] considerou os elementos da matriz de densidade ρ , na base das coordenadas espaciais $\rho(x, x', t) = \langle x | \rho(t) | x' \rangle$. (Por simplicidade, em toda esta seção e na próxima, trataremos do espaço de configurações em apenas uma dimensão.) Dirac utilizou a transformada de Fourier

$$f_D(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dq' e^{-ix'p/\hbar} \rho(x, x', t).$$

A variedade em que f_D está definida possui a dimensão de espaço de fase, por construção. Contudo, no limite clássico, não é óbvia a sua conexão com a função de distribuição clássica. Este é um aspecto importante ao se tentar construir uma teoria cinética quântica. Wigner, dois anos depois, em 1932, propõe então uma transformação de Fourier modificada, mantendo ainda o conteúdo de espaço de fase, isto é, [41, 42]

$$f_W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz e^{-izp/\hbar} \times \left\langle x - \frac{1}{2}z | \rho(t) | x + \frac{1}{2}z \right\rangle. \quad (27)$$

O importante aqui é que $f_W(x, p, t)$ no limite clássico, definido por se considerar, formalmente $\hbar \rightarrow 0$, recupera

o função clássica de distribuição de probabilidade e o teorema de Liouville. A função de Wigner introduz o conceito estatístico de quase-distribuição de probabilidade. Vamos a seguir detalhar essa representação e estes aspectos [43–46].

Devido à condição de normalização, $\text{Tr} \rho = 1$, encontramos que a função de Wigner é normalizada, isto é

$$\int f_W(x, p) dx dp = 1. \quad (28)$$

O que torna a função de Wigner candidata a uma densidade de probabilidade no espaço de fase. Esta expectativa é frustrada pelos seguintes resultados: a função de Wigner é real, mas não é positiva definida. A demonstração segue os seguintes passos.

Considere duas funções de Wigner, $f_W^\phi(x, p)$ e $f_W^\psi(x, p)$, associadas a $\rho^\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$ e $\rho^\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, respectivamente. Nesse caminho, encontramos

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 = 2\pi\hbar \int f_W^\psi(x, p) f_W^\phi(x, p) dx dp. \quad (29)$$

Note que o lado esquerdo desta equação é um número positivo ou zero. Por inferência, $f_W^\phi(x, p)$ e $f_W^\psi(x, p)$, sendo duas funções independentes e arbitrárias, também são funções reais. Adicionalmente, considerando que $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ sejam ortogonais, isto é, $\langle\psi|\phi\rangle = 0$, tem-se que $f_W^\phi(x, p)$ e $f_W^\psi(x, p)$ não são positivas-definidas. Conclui-se que a função de Wigner não pode ser interpretada como uma distribuição de probabilidades no espaço de fase por não ser positiva-definida. Porém, mesmo que a função de Wigner assuma valores negativos, densidades de probabilidade marginais podem ser obtidas mediante a sua integração, quais sejam,

$$\begin{aligned} \int f_W(x, p) dx &= |\psi(p)|^2, \\ \int f_W(x, p) dp &= |\psi(x)|^2. \end{aligned}$$

De modo outro, quando a função de Wigner é integrada em relação à posição, obtém-se a densidade de probabilidade associada aos momenta; quando integrada em relação aos momenta, obtém-se a densidade de probabilidade associada à posição. Assim, devido a tais propriedades, a função de Wigner recebe o *status* de quase-distribuição de probabilidades. As demonstrações dessas propriedades podem ser encontradas com detalhes na referência [32].

Ainda neste escopo, de forma análoga à relação estabelecida entre o operador densidade e a função de Wigner dada na Eq. (27), podemos associar a cada operador A , definido a partir de $\mathcal{H}_E$, uma função $a_W(x, p)$ definida no espaço de fase como [43, 44]

$$a_W(x, p) = \int e^{ipz/\hbar} \langle x - z/2 | A | x + z/2 \rangle dz. \quad (30)$$

Nesse desenvolvimento, o valor esperado de um observável A é

$$\langle A \rangle = \int a_W(x, p) f_W(x, p) dx dp = \text{Tr} \rho A. \quad (31)$$

Este resultado reforça a natureza estatística não-clássica do conceito de quase-distribuição de probabilidade da função de Wigner.

Para estudar o produto de operadores na representação de Wigner, é conveniente observar que a Eq. (27) é uma aplicação, $\Omega_W : \rho(t) \rightarrow f_W(t)$, ou seja,

$$f_W(t) = \Omega_W(\rho(t)). \quad (32)$$

Esta operação Ω_W é uma aplicação linear. Ou seja, dado os operadores A e B definidos sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}_E$ segue, então

$$\begin{aligned} \Omega_W(\alpha A + \beta B) &= \alpha \Omega_W(A) + \beta \Omega_W(B) \\ &= \alpha a_W + \beta b_W, \end{aligned} \quad (33)$$

com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\Omega_W(A) = a_W$ e $\Omega_W(B) = b_W$.

Assim, o produto de dois operadores A e B é dado por [42]

$$\Omega_W(AB) = a_W(q, p) \star b_W(q, p), \quad (34)$$

onde o produto estrela (ou produto de Weyl), $\star$, é dado por

$$\star = \exp\left(\frac{i\hbar}{2}\Lambda\right),$$

tal que Λ é o operador de Groenewold, definido como

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial x}. \quad (35)$$

O produto estrela define uma álgebra associativa, mas não-comutativa, no espaço vetorial das funções do espaço de fase. O produto estrela apresenta várias propriedades e com seu uso é possível deduzir a equação de evolução da função de Wigner.

Primeiro, observe que Ω_W , definido na Eq. (32), por ser uma aplicação linear, se aplica a equações de operadores. Considere uma simples equação do tipo $\alpha A = \beta B^1 \dots B^r$, com os operadores $A, B^1, \dots, B^r$ definidos sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}_E$. Segue, então, que

$$\Omega_W(\alpha A) = \Omega_W(\beta B^1 \dots B^r)$$

conduz a

$$\alpha a_W = \beta b_W^1 \star b_W^2 \star \dots \star b_W^r,$$

com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Podemos usar esse resultado na Eq. (15), com $L = [H, \cdot]$, que fica reescrita como

$$i\partial_t \rho(t) = [H, \rho(t)].$$

Assim, a equação de evolução temporal para $f_W(t)$ é deduzida, isto é,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f_W(x, p, t) &= H_W(x, p, t) \star f_W(x, p, t) \\ &\quad - f_W(x, p, t) \star H_W(x, p, t) \\ &= \{H_W, f_W\}_M, \end{aligned} \quad (36)$$

onde $\{a(q, p), b(q, p)\}_M = a(q, p) \star b(q, p) - b(q, p) \star a(q, p)$ é denominado parêntesis de Moyal.

Ressalte-se mais uma vez que o produto de Moyal (ou produto estrela) não é comutativo. Este aspecto garante a consistência do formalismo de Wigner com a formulação usual da mecânica quântica. Em especial, há consistência com a preservação das relações de Heisenberg, dadas em uma dimensão por $[X, P] = XP - PX = i\hbar$, com X e P sendo os operadores de posição e momentum atuando em $\mathcal{H}_E$. Usando Ω_W , encontramos a relação de Heisenberg no espaço de fase,

$$\{x, p\}_M = i\hbar, \quad (37)$$

onde usamos a notação $\Omega_W(\hat{X}) = x_W = x$ e $\Omega_W(\hat{P}) = p_W = p$. Este resultado reforça que, embora os observáveis na representação de Wigner são dados por funções no espaço de fase, o produto ocorre através do produto estrela; e não pelo produto associativo usual de funções no espaço de fase, que é comutativo.

No limite formal em que $\hbar$ tende a zero, a Eq. (36) se torna [41, 42]

$$\frac{\partial}{\partial t} f_W(x, p, t) = \{H_W(x, p, t), f_W(x, p, t)\}, \quad (38)$$

em que $\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial x}$ denota o parêntesis de Poisson. A Eq. (38) nos diz que no limite clássico, a função de Wigner satisfaz a equação de Liouville. Este fato evidencia uma das características fundamentais da representação de Wigner: o princípio da correspondência pode ser trivialmente obtido. Esta correspondência com o teorema de Liouville, faz com que o formalismo de Wigner seja o ponto de partida para a construção da teoria cinética quântica, mesmo considerando que $f_W(x, p)$ seja uma quase-distribuição de probabilidade, com a possibilidade de adquirir valores negativos.

Num primeiro momento, a possibilidade de a função de Wigner assumir valores negativos pode parecer algo problemático. Entretanto, essa negatividade revelou aspectos outros das características estatísticas tipicamente quânticas. Neste sentido, se introduz o parâmetro de negatividade a partir da função de Wigner associada ao estado $|\psi\rangle$, por meio da expressão [47].

$$\eta(\psi) = \int \{|f_W(x, p)| - f_W(x, p)\} dx dp. \quad (39)$$

Esta definição quantifica o volume da parte negativa da função de Wigner, e esta quantidade está associada à não-classicalidade do sistema, ou seja, quanto maior é o

valor de $\eta(\psi)$, maior é o caráter quântico do sistema. A negatividade da função de Wigner está também relacionada a caoticidade quântica [48].

A consistência do formalismo de Wigner com a mecânica de Schrödinger era de se esperar pois esta representação no espaço de fase nada mais é que uma transformada de Fourier do formalismo da matriz de densidade. Entretanto, a negatividade de $f_W(x, p)$ não fora bem aceita de início em particular por não se entender experimentalmente o que aquela característica revelava. Isso levou à introdução de outras distribuições quânticas no espaço de fase, como a função de Husimi [49], mas que se associa a $f_W(x, p)$. Com a finalidade de exemplificar a representação de Wigner, em particular, para evidenciar sua negatividade, analisaremos o problema do oscilador harmônico simples unidimensional.

A equação de Schrödinger estacionária fica dada por

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2\right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (40)$$

A solução desta equação é dada por

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}, \quad (41)$$

em que $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ e $H_n(\alpha x)$ são os polinômios de Hermite. Segue que a função de Wigner do oscilador harmônico fica dada por

$$\begin{aligned} f_W^n(x, p) &= (2\pi\hbar)^{-1} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right) e^{-\alpha^2 x^2} \\ &\times \int dy e^{ipy/\hbar - \alpha^2 y^2/4} \\ &\times H_n(g^-(x, y)) H_n(g^+(x, y)), \end{aligned}$$

onde $g^\pm(x, y) = \alpha(x \pm y/2)$. Completando o quadrado na exponencial dentro da integral, segue

$$\begin{aligned} f_W^n(x, p) &= (2\pi\hbar)^{-1} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right) e^{-\alpha^2 x^2 - \frac{p^2}{4\alpha^2 \hbar^2}} \\ &\times \int dy e^{-\left(-\frac{ip}{2\hbar\alpha} + \alpha y/2\right)^2} \\ &\times H_n(g^-(x, y)) H_n(g^+(x, y)). \end{aligned}$$

Introduzindo a mudança de variáveis $z = -\frac{ip}{2\hbar\alpha} + \alpha y/2$, chegamos a

$$\begin{aligned} f_W^n(x, p) &= (-1)^n \frac{2}{\alpha} (2\pi\hbar)^{-1} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right) \\ &\times e^{-\alpha^2 x^2 - \frac{p^2}{4\alpha^2 \hbar^2}} \int dz e^{-z^2} \\ &\times H_n\left(\alpha\left(z + \frac{ip}{2\hbar\alpha} + x\right)\right) \\ &\times H_n\left(\alpha\left(z + \frac{ip}{2\hbar\alpha} - x\right)\right). \end{aligned}$$

Utilizando a relação

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2} H_m(z+a) H_n(z+b) \\ = \sqrt{\pi} 2^n m! b^{n-m} L_m^{m-n}(-2ab), \end{aligned}$$

na qual $L_n^{(m)}$ são os polinômios de Legendre associados, finalmente obtemos a função de Wigner correspondente ao oscilador harmônico unidimensional dada por

$$\begin{aligned} f_W^n(x, p) &= 2(-1)^n (2\pi\hbar)^{-1} e^{-\alpha^2 x^2 - \frac{p^2}{4\alpha^2 \hbar^2}} \\ &\times L_n\left(2\alpha^2 x^2 + \frac{p^2}{2\hbar^2 \alpha^2}\right). \end{aligned}$$

Note que a função de Wigner depende de n , parâmetro que define a sua ordem (e a ordem dos polinômios de Laguerre). As Figuras (1–4) mostram o comportamento da função de Wigner para o estado fundamental ($n = 0$), e do primeiro e segundo estados excitados, $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente.

No gráfico da Fig. (1) não há regiões negativas para a função de Wigner. Isto é consistente com o valor calculado para o parâmetro de negatividade, definido na Eq. (39), que para este caso é nulo. Este resultado evidencia que o estado fundamental do oscilador harmônico apresenta características estatísticas clássicas. Nas Figs. (2)–(4), percebe-se que a função de Wigner possui partes negativas, o que caracteriza essas distribuições com propriedades não-clássicas. A Tabela (1) traz os valores do parâmetro de negatividade para alguns estados do oscilador harmônico. O resultado a destacar é que com o aumento da ordem da função de Wigner ocorre o aumento do volume da sua parte negativa. Ou seja, à medida que n aumenta, a função de Wigner apresenta cada vez mais um caráter não-clássico.

Devido a essas características de negatividade, no início, o interesse na função de Wigner fora restrito. Com a evolução teórica, assim como com o refinamento das

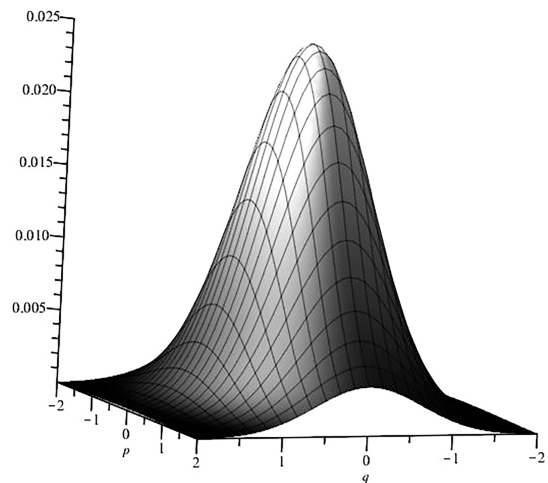


Figura 1: Função de Wigner: $n = 0$ (tomando $\alpha = 1$).

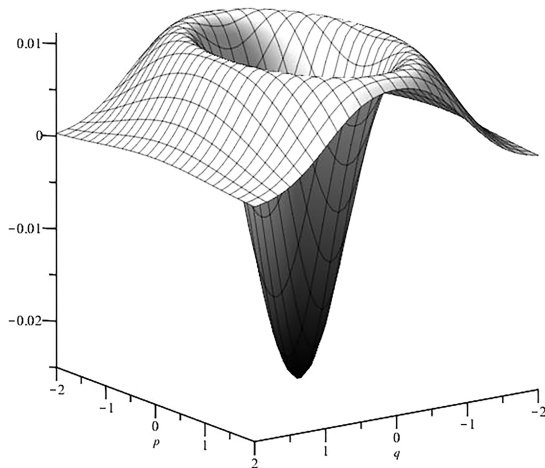


Figura 2: Função de Wigner: $n = 1$ (tomando $\alpha = 1$).

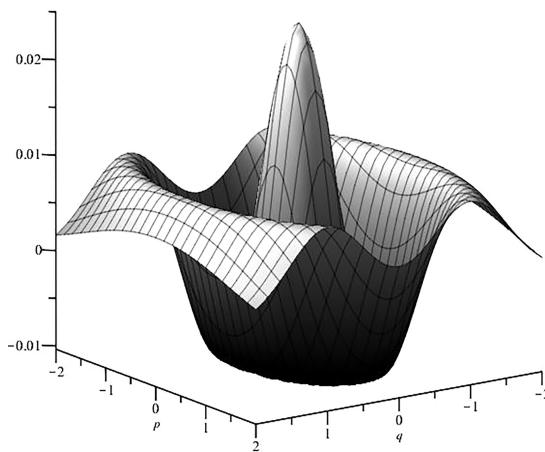


Figura 3: Função de Wigner: $n = 2$ (tomando $\alpha = 1$).

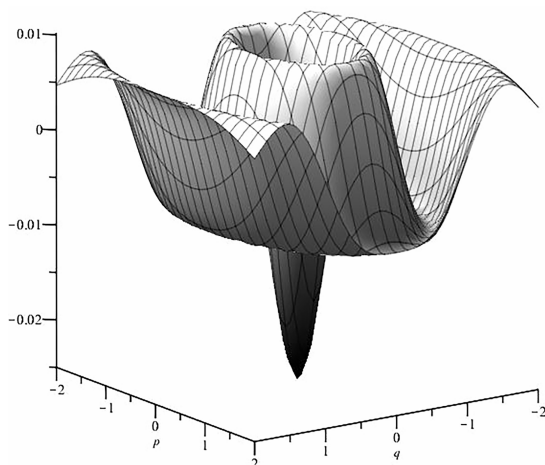


Figura 4: Função de Wigner: $n = 3$ (tomando $\alpha = 1$).

técnicas experimentais em óptica quântica, a importância do formalismo de Wigner tornou-se transparente. O interesse atual ocorre em diversas áreas tais como: com as representações tomográficas e medidas das funções

Tabela 1: Parâmetro de negatividade e a função de Wigner.

n	0	1	2	3	4
$\eta(\psi_n)$	0	0.4261	0.7289	0.9766	1.1913

de Wigner [49]–[56]; sua estrutura algébrica como base da geometria não-comutativa e métodos de deformações [57]–[70]; em análises estocásticas [71, 72]. Funções de distribuição outras foram propostas na literatura e se vinculam à função de Wigner, como as P-funções [73]–[80]. Esses aspectos assim como a construção da teoria cinética quântica foram desenvolvidas no decorrer das décadas e que estão apresentados num significativo conjunto de contribuições [81]–[88].

Em física de partículas elementares, a função de Wigner relativística não percorreu um caminho suave. Uma dificuldade estrutural é que a função de Wigner é Real. Este fato dificulta a análise das simetrias por transformações de fase, a base para os campos de calibre, como já observamos. Esta dificuldade está na origem da formulação de Wigner, com a matriz de densidade que apresenta características intrincadas para incluir campos de calibre assim como com o desenvolvimento de adequadas teorias de perturbação [89]–[91].

As tentativas de contornar essas dificuldades apontaram para se explorar funções de onda no espaço de fase associadas com possíveis distribuições no espaço de fase [92]–[99]. Uma solução consistente com essa demanda surge com as representações de simetrias no espaço de fase, um tipo de espaço symplético. Este tipo de representação introduz classes de funções de onda, denominadas de quase-amplitudes de probabilidade, que se vinculam na generalidade à função de Wigner, uma quase-distribuição de probabilidade [100]; um aspecto a ser explorado mais adiante. Por ora, indo para o final dessa seção, vamos identificar os elementos de simetria no formalismo de Wigner.

Considerando a álgebra de Heisenberg definida pela Eq. (37), vemos que podemos contruir representações de simetria com o parêntesis de Moyal. De fato, para uma álgebra de Lie dada por $[A^l, A^j] = iC^{ljk}A^k$, usamos Ω_W definido nas Eqs. (32) e (33), e encontramos

$$\{a_W^l, a_W^j\}_M = iC^{ljk}a_W^k.$$

Logo, as relações da álgebra de Lie do grupo de Galilei, dadas pelas Eqs. (21)–(25), resultam em:

$$\{j_W^l, j_W^j\}_M = i\varepsilon^{ljk}j_W^k, \quad (42)$$

$$\{j_W^l, k_W^j\}_M = i\varepsilon^{ljk}k_W^k, \quad (43)$$

$$\{j_W^l, p_W^j\}_M = i\varepsilon^{ljk}p_W^k, \quad (44)$$

$$\{k_W^l, h_W\}_M = -p_W^l, \quad (45)$$

$$\{k_W^l, p_W^j\}_M = -im\delta_{lj}, \quad (46)$$

onde o parêntesis de Moyal é o produto de Lie. Nestas equações, temos

$$j_W^l = j^l = i\varepsilon^{ljk}x^j p^k,$$

$$\begin{aligned} p_W &= p, \\ K_W^l &= K^l = mx^l - tp^l, \\ H_W &= H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Observe que, formalmente, essas expressões são as mesmas funções que em mecânica clássica. A contrapartida clássica é obtida lembrando que aqui o parêntesis de Moyal é levado no parêntesis de Poisson no limite clássico.

Um outro aspecto importante a observar é que a Eq. (34) pode ser vista como [32]

$$a(x, p) \star b(x, p) = \hat{a}(x, p)b(x, p), \quad (47)$$

onde usamos $a_W(x, p) = a(x, p)$ e $b_W(x, p) = b(x, p)$. Ou seja, $a(x, p)\star = \hat{a}(x, p)$ é um operador atuando na função $b(x, p)$. Esses operadores-estrela constituem um dos interesses teóricos da representação de Wigner; aspecto que exploramos a seguir.

5. Representação Simplética

Para contruir a representação da teoria quântica de campos no espaço de fase, contemplando simetrias de calibre, é possível considerar funções de onda no espaço de fase. As primeiras tentativas, embora importantes, apresentavam dificuldades com a interpretação física [95, 96]. Uma solução surgiu em 2004, com a análise de simetrias de Galilei, inicialmente, utilizando como espaço de representação uma variedade simplética [100]. Uma base simplética geral pode ser construída a partir do fibrado cotangente de um espaço vetorial associado ao espaço-tempo. Um exemplo é o espaço Euclidiano, no caso não relativístico; ou o espaço de Minkowski, para o caso relativístico. Basicamente, à variedade original é adicionado os vetores correspondentes ao espaço dual, com uma métrica simplética acoplando os dois setores. Se o espaço inicial for o $\mathbb{R}^n$, a estrutura cotangente garante um espaço de $D = 2n$ dimensões. Para $n = 1$ a variedade simplética possui dimensão $D = 2$. Neste caso, um ponto possui componentes denotadas por (x, p) e em geral apresenta as características de um espaço de fase. Um espaço de Hilbert é construído a partir de funções complexas $\psi(x, p)$ definidas nesta variedade simplética, e é denominado, “espaço de Hilbert Simplético”, $\mathcal{H}(S_p)$. Para isso, funções $\psi(x, p) \in \mathcal{H}(S_p)$ são de quadrado integrável, ou seja, satisfazem a equação

$$\int \psi^\dagger(x, p)\psi(x, p)dx dp < \infty.$$

Uma base é dada por $|x, p\rangle$, sendo o dual $\langle x, p|$, e satisfaz a condição

$$\int |x, p\rangle\langle x, p|dx dp = 1. \quad (48)$$

Isto resulta em $\psi(x, p) = \langle x, p|\psi\rangle$.

Seguindo a seção 2, podemos introduzir um formalismo de matriz de densidade simplética. Dado o espaço $\mathcal{H}(S_p)$, definimos ρ_{S_p} , com $\text{Tr}\rho_{S_p} = 1$. A equação de evolução é dada por [32]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{S_p}(t) = [\hat{H}, \rho_{S_p}(t)]. \quad (49)$$

onde o gerador de evolução temporal, denotado aqui por $\hat{H}$, é um operador definido por sua atuação sobre $\mathcal{H}(S_p)$, mas que ainda não possui forma conhecida.

Uma solução da Eq. (49) é dada por $\rho_{S_p} = |\psi\rangle\langle\psi|$, desde que $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}(S_p)$ seja solução da equação

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (50)$$

Explicitando a representação na base $|x, p\rangle$ temos

$$i\partial_t \langle x, p|\psi(t)\rangle = \langle x, p|\hat{H}|\psi(t)\rangle. \quad (51)$$

Usando a relação dada na Eq. (48) e $\psi(x', p', t) = \langle x', p'|\psi(t)\rangle$, temos

$$i\partial_t \psi(x, p, t) = \int \langle x, p|\hat{H}|x', p'\rangle \psi(x', p', t) dx' dp'. \quad (52)$$

Sem perda de generalidade (como no caso da representação em $\mathcal{H}_E$), consideramos que $\hat{H}$ é diagonal nesta base $|x, p\rangle$, de tal modo que $\langle x, p|\hat{H}|x', p'\rangle = \hat{H}(x, p)\delta(x - x')\delta(p - p')$, onde $\hat{H}(x, p) = \langle x, p|\hat{H}|x, p\rangle$. Então temos

$$i\partial_t \psi(x, p, t) = \hat{H}(x, p)\psi(x, p, t). \quad (53)$$

Devido a normalização de ρ , então $\psi(x, p, t)$ é normalizada, isto é,

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int |\psi(x, p, t)|^2 dx dp = 1.$$

Do mesmo modo, podemos escrever a equação de evolução temporal para os elementos diagonais de ρ_{S_p} , que ficam dados por como

$$\rho_{S_p}(x, p) = \psi(x, p)\psi^\dagger(x, p), \quad (54)$$

e leva a

$$i\partial_t \rho_{S_p}(x, p, t) = [\hat{H}(x, p), \rho_{S_p}(x, p, t)]. \quad (55)$$

Para encontrar o significado físico desta representação, a seguinte condição de compatibilidade deve ser satisfeita. Isto é, dado um operador A atuando sobre vetores $|\phi(t)\rangle \in \mathcal{H}_E$, com a correspondente matriz de densidade ρ_E (na seção 2, utilizamos a notação $\rho_E = \rho$), então por consistência devemos ter

$$\langle A \rangle = \int \phi^\dagger(x) A \phi(x) dx = \text{Tr} \rho A \quad (56)$$

$$= \int f_W(x, p) a(x, p) dx dp \quad (57)$$

$$\equiv \int \psi^\dagger(x, p) \hat{a}(x, p) \psi(x, p) dx dp \quad (58)$$

$$\equiv \text{Tr} \rho_{S_p} \hat{a}, \quad (59)$$

onde $a(x, p) = a_W(x, p) = \Omega_W(A)$ e $\hat{a} = a(x, p) \star$ são, respectivamente, a representação de Wigner e simplética de A . Esta equivalência é satisfeita se a relação de ρ_{S_p} com $f_W(x, p)$ for

$$f_W(x, p) = \lim_{(x', p') \rightarrow (x, p)} e^{\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p'} - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x'} \right)} \times \langle x, p | \rho_{S_p} | x', p' \rangle. \quad (60)$$

Este resultado conduz a

$$f_W(x, p; t) = \psi(x, p; t) \star \psi^\dagger(x, p; t). \quad (61)$$

Portanto, a função de Wigner, uma quase-distribuição de probabilidade, fica associada com a função de onda $\psi(x, p)$, que devido a normalização é denominada de quase-amplitude de probabilidade. Além disso, encontramos a forma explícita do operador $\hat{a}$, isto é $\hat{a} = a(q, p) \star$. Um exemplo é o Hamiltoniano que fica dado por $\hat{H} = H_W(x, p) \star = H(x, p) \star$.

Nestas expressões, note que $\hat{a}(q, p) = a(x, p) \star = a(\hat{x}, \hat{p})$ com

$$\hat{x} = x \star = x + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \quad (62)$$

$$\hat{p} = p \star = p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (63)$$

Esses operadores satisfazem as relações de Heisenberg, isto é, $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Logo, como vimos na seção 3, podemos construir os demais geradores da álgebra de Lie do grupo de Galilei. Ou seja, o espaço $\mathcal{H}(S_p)$ é então utilizado como espaço de representações de grupos de simetria.

Para explicitar os geradores do grupo de Galilei, primeiro consideramos o operador $\hat{p}$ como o gerador de translações. O operador $\hat{x}$ possui as dimensões de posição. Além disso, como antes, é fácil deduzir a ação do elemento do subgrupo das translações espaciais dado por $T(\alpha) = \exp[i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{p}]$, onde α é um parâmetro Real com dimensões de posição. Atuando sobre o operador $\hat{x}$, temos

$$\hat{x}' = T(\alpha) \hat{x} T^{-1}(\alpha) = \hat{x} + \alpha.$$

Ou seja, o operador $\hat{x}$ é fisicamente interpretado como observável posição.

Os outros geradores do grupo de Galilei são introduzidos a partir desses resultados. Temos que o gerador de transformações pura de Galilei (mudança de referencial), o momentum angular (rotações) e Hamiltoniano (translações temporais) são, respectivamente, dados por

$$\hat{K}_l = k_l \star = m x_l \star - t p_l \star = m \hat{x}_l - t \hat{p}_l, \quad (64)$$

$$\hat{L}_l = \epsilon_{ljk} x_j \star p_k \star = \epsilon_{ljk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \quad (65)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} p_l \star p_l \star = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (66)$$

Estes operadores satisfazem as relações de comutação para a álgebra de Lie do grupo de Galilei, como dadas pelas Eqs. (21)–(25) [100].

É importante observar que no caso relativístico a representação simplética do grupo de Poincaré conduz às equações de Klein-Gordon e de Dirac formuladas no espaço de fase. Para spin 1, isto conduz à representação das equações de Maxwell na forma simpléticas. O conjunto dessas equações se mostram como um exemplo da teoria de Seiberg-Witten para campos não-comutativos de spin 1 [101–103].

Como vimos, a quase-amplitude no espaço de fase $\psi(x, p)$ é, em geral, uma função complexa, o que permite a elaboração de uma teoria de calibre no espaço de fase, e isto nos conduz à introdução de interação ao formalismo aqui elaborado. Para este fim, notemos então que a equação de Schrödinger no espaço de fase pode ser obtida a partir da densidade de Lagrangiana

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger(x, p, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{p^2 \star}{2m} \right) \psi(x, p, t). \quad (67)$$

Se considerarmos transformações de calibre do tipo

$$\psi \rightarrow e^{-i\lambda} \star \psi, \quad (68)$$

em que $\lambda = \lambda(q, p, t)$, e impusermos a invariância da densidade de Lagrangiana dada na Eq. (67) sob transformações dadas na Eq. (68), é necessário definir

$$p_k \star \rightarrow p_k \star - i A_k(x) \star, \quad (69)$$

em que $A_k(x)$ é o campo de calibre; fisicamente o potencial vetor. A Eq. (69) define a derivada covariante no espaço de fase, e assim o acoplamento mínimo.

Incluindo a análise de fase para a evolução temporal, encontramos o potencial escalar associado com o Hamiltoniano

$$\hat{H} = H(x, p) \star = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (70)$$

Isto leva à uma forma geral da equação de Schrödinger simplética [32, 100],

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, p; t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x, p, t) + V(\hat{x}) \psi(x, p, t).$$

Para incluir a interação de contato, utilizamos a densidade ρ_{S_p} , e escrevemos a versão simplética da equação de Gross-Pitaevskii, isto é,

$$i\hbar \partial_t \psi(x, p; t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x, p, t) + V(\hat{x}) \psi(x, p, t) + \frac{\lambda}{4!} |\psi(x, p, t)|^2 \psi(x, p, t).$$

A interação de contato possui essa forma uma vez que ρ_{S_p} é uma densidade de probabilidade no espaço de fase. Uma consequência imediata deste fato é que a matriz densidade simplética possibilita a definição de entropia no contexto do espaço de fase; o que não é possível com a função de Wigner. Isto permite tratar, por exemplo, do problema de emaranhamento quântico diretamente no espaço de fase.

Com o propósito de aplicar os resultados da representação simplética, retomemos ao problema do oscilador harmônico unidimensional, cuja equação de Schrödinger no espaço de fase pode ser escrita como (por simplicidade escolhemos $\hbar = 1$, $m = 1$ e $\omega = 1$)

$$\left(\frac{1}{2}p^2 \star + \frac{1}{2}x^2 \star\right) \psi(x, p) = E\psi(x, p). \quad (71)$$

Vamos definir os operadores

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \star + ip \star), \quad (72)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \star - ip \star), \quad (73)$$

que satisfazem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1, \\ \hat{a}^n \psi_n(x, p) &= \sqrt{n} \psi_{n-1}(x, p) \\ (\hat{a}^\dagger)^n \psi_n(x, p) &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x, p). \end{aligned}$$

Logo a Eq. (71) pode ser escrita como

$$\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}\right) \psi(x, p) = E\psi(x, p). \quad (74)$$

Nesse caminho, a solução da Eq. (74) é dada por

$$\psi_n(x, p) = \sqrt{\frac{(-1)^n 2^n}{n! \pi}} (\hat{a}^\dagger)^n e^{-(x^2+p^2)}. \quad (75)$$

A função de Wigner é obtida usando $f_W^n(x, p) = \psi_n(x, p) \star \psi_n^\dagger(x, p)$. Não obstante, obtém-se as mesmas funções de Wigner calculadas por meio da representação de Wigner usual. Contudo, funções de Wigner distintas podem ser deduzidas se calcularmos o produto-estrela entre estados superpostos, por exemplo, $f_W(x, p) = (c_1 \psi_{n_1} + c_2 \psi_{n_2}) \star (c_1^* \psi_{n_1}^\dagger + c_2^* \psi_{n_2}^\dagger)$.

A matriz de densidade simplética relativa ao oscilador harmônico é então dada por $\rho_{S_p}^n(x, p) = \psi_n(x, p) \psi_n^\dagger(x, p)$. Os gráficos dados nas Figs. (5)–(8) evidenciam o comportamento da matriz densidade relativa ao oscilador harmônico. Percebemos que as funções são positivas-definidas, e o aumento da ordem da função, isto é, o aumento de n , acarreta o aumento das oscilações em torno do máximo central.

Distintas são as aplicações desse formalismo para a análise da função de Wigner de diversos sistemas. Do ponto de vista teórico, a representação simplética está intimamente associada com o conceitos de grupos-térmicos, c^* -álgebras e as teorias quânticas de campos a temperatura finita. Esses aspectos não serão desenvolvidos aqui, e podem ser encontrados em outros trabalhos de revisão [32–34]. Para completar a análise das representações, o espaço de Fock será revisto com ênfase na natureza das simetrias.

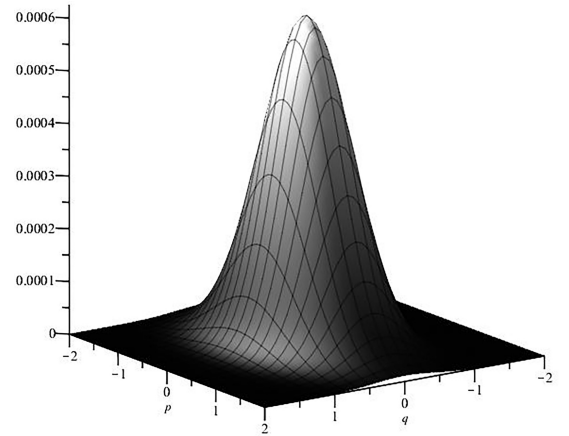


Figura 5: Matriz de densidade simplética para $n = 0$ (com $\alpha = 1$).

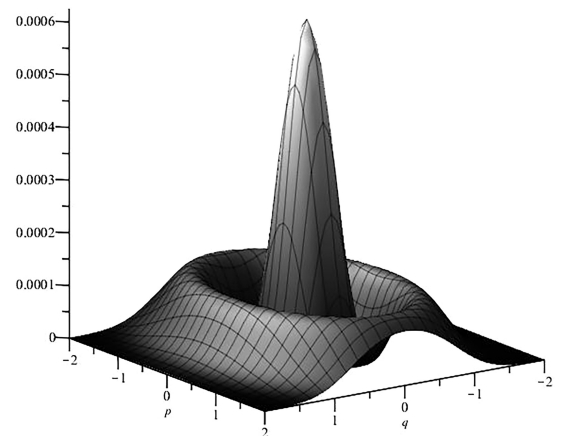


Figura 6: Matriz de densidade simplética para $n = 1$ (com $\alpha = 1$).

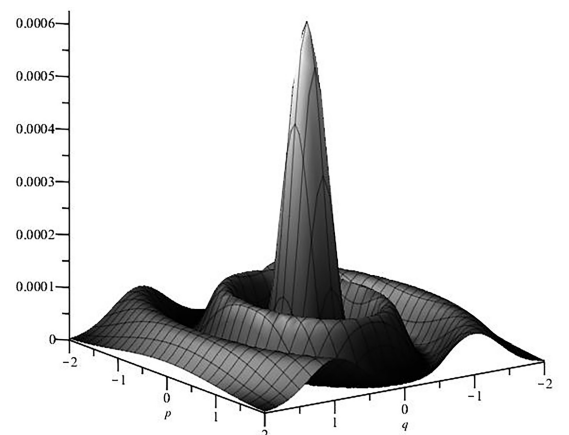


Figura 7: Matriz de densidade simplética para $n = 2$ (com $\alpha = 1$).

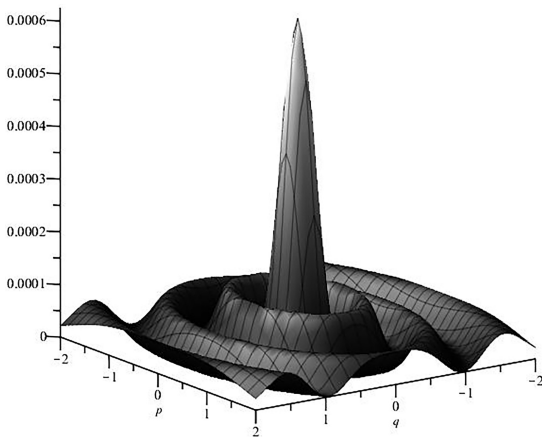


Figura 8: Matriz de densidade simplética para $n = 3$ (com $\alpha = 1$).

6. Representação no Espaço de Fock

Nesta seção, consideramos a representação das simetrias de Galilei no espaço de Fock, um aspecto pouco abordado na literatura pedagógica. Os resultados apresentados na Seção 3 sobre o espaço de Hilbert são então generalizados.

Enquanto um campo descrevendo um sistema físico, $\psi(\mathbf{x})$ assegura um atributo físico (uma amplitude de probabilidade) ψ no ponto $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^3$. Esta característica pode ser generalizada para r pontos, simultaneamente, que é escrita como $\psi_r = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r)$. Logo, ψ_r descreve um campo de correlação, com o conteúdo físico de amplitude de probabilidade, para diferentes pontos no espaço de configurações. Por exemplo, se $r = 2$, temos $\psi_2 = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle$, que significa ψ no ponto $\mathbf{x}_1$ considerando o ponto $\mathbf{x}_2$. O resultado é que para r pontos a densidade de probabilidade fica dada por $|\psi_r|^2$.

Nesta situação, o campo ψ_r admite a seguinte simetria de fase

$$\psi(\dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots) = e^{i\alpha} \psi(\dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots).$$

Considerando uma partícula elementar, então ψ traz as informações sobre a massa, tipo de carga, spin, entre outras características. Experimentalmente observa-se que as partículas elementares estão agrupadas em dois conjuntos: (a) os bósons, que são partículas para as quais o campo ψ é simétrico, isto é $\alpha = 2n\pi$, e possui spin inteiro; (b) os férmions, que são partículas para as quais o campo ψ é antissimétrico, ou seja $\alpha = 2n\pi + 1$, e possui spin semi-inteiro.

Observe que podemos introduzir uma equação de Schrödinger, Eq. (19), em termos de r pontos. Usando a base $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r\rangle$, encontramos

$$\psi_r = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r | \psi \rangle = \psi,$$

o que conduz a

$$i\partial_t \psi_r(t) = H_r \psi_r(t), \quad (76)$$

onde $H_r = H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r)$. Uma composição simples de ψ_r , para o caso simétrico, bosônico sem interação — $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r) = 0$ — é escrever

$$\psi_r = \psi(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_2) \cdots \psi(\mathbf{x}_r).$$

Cada campo $\psi(\mathbf{x}_j)$ está associado a j -ésima partícula bosônica. Neste caso, ψ_r é o campo resultante das r partículas, cada qual sendo um campo do tipo $\psi(\mathbf{x})$. A questão da interação entre os campos traz elementos outros, que são abordados com acurácia na literatura [22].

Na procura de resolver a Eq. (76), podem aparecer soluções simétricas (descrevendo bósons), ou antissimétricas (descrevendo férmions), ou ainda sem simetria definida. Entretanto, se a equação descreve partículas observadas experimentalmente, devemos impor-lhe um vínculo de simetria de fase. Assim, se estamos tratando do elétron, esperamos que uma solução física aceitável para a Eq. (76) seja do tipo antissimétrica, pois o elétron é um férmion; e de modo similar para bosons. A solução desse problema de vínculo é contruir a representação do espaço de Fock. Os principais elementos estão resumidos a seguir, com ênfase nos geradores de simetria.

O espaço de Fock, $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$, é definido como o produto tensorial

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}_E) = \oplus_r \mathcal{H}_E^{\otimes r}, \quad r = 0, 1, 2, \dots$$

Um operador de campo atuando em $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ é usualmente denotado por $\psi(\mathbf{x}, t)$ e $\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)$ satisfazendo as seguintes relações, em tempos iguais

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t)]_\pm &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ [\psi(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{x}', t)]_\pm &= [\psi^\dagger(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t)]_\pm = 0, \end{aligned}$$

onde $-$ and $+$ definem o comutador e o anticomutador, respectivamente.

Em $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ existe um vácuo, $|0\rangle$, com $\langle 0|0\rangle = 1$, a partir do qual se introduz a seguinte base $\psi^\dagger(\mathbf{x})|0\rangle = |\chi_{(1)}\rangle$. Um vetor geral em $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ pode então ser expandido como

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= \phi(t)_0 |0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \\ &\times \int \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n, t) |\chi_{(n)}\rangle d^n \mathbf{x}, \end{aligned}$$

onde $d^n \mathbf{x} = d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \cdots d\mathbf{x}_n$ e

$$|\chi_{(n)}\rangle = \psi^\dagger(\mathbf{x}_1) \psi^\dagger(\mathbf{x}_2) \cdots \psi^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle.$$

As funções $\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t)$ são simétricas ou antissimétricas. Além disso, temos

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \chi_{(n)} | \chi \rangle \\ &= \langle 0 | \prod_{i=1}^n \psi(\mathbf{x}_i) | \chi \rangle \end{aligned}$$

e

$$\langle \chi | \chi' \rangle = \phi_0^\dagger \phi'_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \int \phi^\dagger(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t) \times \phi'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t) d^n \mathbf{x}$$

Um operador do tipo $A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ simétrico nas suas variáveis e definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H}_E$, fica representado no espaço $\mathcal{F}(\mathcal{H}_E)$ por

$$\mathcal{A} = \frac{1}{n!} \int \psi^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \psi^\dagger(\mathbf{x}_n) A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) \times \psi(\mathbf{x}_n) \dots \psi(\mathbf{x}_1) d^n \mathbf{x}. \quad (77)$$

Neste caso, os geradores de simetrias das transformações de Galilei são construídos a partir dos operadores nas Eqs. (21)–(25), que são funções a um ponto, $\mathbf{x}$ ($n = 1$), e levam a

$$\mathcal{J} = \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) J(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (78)$$

$$\mathcal{P} = \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (79)$$

$$\mathcal{K} = \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) K(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (80)$$

$$\mathcal{H} = \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (81)$$

Utilizando as relações de comutação ou anticomutação para os campos $\psi(\mathbf{x})$ e $\psi^\dagger(\mathbf{x})$, a álgebra de Lie do grupo de Galilei, como dada nas Eqs. (21)–(25), é deduzida.

Considerando a descrição de Heisenberg, na qual toda evolução temporal fica dada pelos operadores, então a evolução temporal de um operador de campo fica dada por

$$\psi(t) = e^{i\mathcal{H}} \psi(t_0) e^{-i\mathcal{H}} \quad (82)$$

com $H(\mathbf{x}) = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ e $P_j = -i \frac{\partial}{\partial x^j}$. Isto resulta na equação

$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = [\psi(\mathbf{x}, t), \mathcal{H}(\mathbf{x})].$$

Utilizando as relações de comutação or anticomutação para os campos, encontramos

$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (83)$$

Formalmente, este resultado é o mesmo que a Eq. (19). Por esse motivo, a representação em $\mathcal{F}$ foi denominada de “segunda quantização”. Todavia, não há uma “segunda quantização” do campo de Schrödinger. De fato, é simples demonstrar que esta Eq. (83) tem como caso particular a equação de Schrödinger para a função $\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{H}_E$. Uma consequência é que, na situação de operador ou de uma função, a equação de movimento é deduzida por um princípio de extremo, associado ao de Schwinger, onde a Lagrangiana é dada por

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger(q, p, t) \left(-i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(q, p, t). \quad (84)$$

(Subentende-se nesta expressão a parte do campos conjugado, para o uso das Equações de Euler). Observe também a similaridade com a Lagrangiana de Schrödinger simplética, Eq. (67). A representação simplética do espaço de Fock segue em paralelo a esta [32].

7. Considerações Finais

Iniciamos este trabalho apontando algumas dificuldades conceituais e práticas que persistem com a mecânica quântica. Teoria esta que, nesses seus 100 anos, sofreu profundas modificações e em muitos aspectos evoluiu.

Como vimos, do ponto de vista tanto filosófico/interpretativo quanto prático, persiste uma profusão de apresentações da teoria quântica que por vezes parecem contraditórias. Procuramos assim responder a um conjunto de questões frequentes que surgem tanto na pesquisa aplicada e teórica bem como no ensino da mecânica quântica. Por exemplo, consideramos: o que significa representar a mecânica quântica no espaço de fase, como ocorre com a função de Wigner, diante das relações de Heisenberg, proibitivas quanto a mensuração de posição e momentum? O que significa a função de Wigner ser negativa? Ou ainda, há significado na relação de Heisenberg para o tempo e o gerador de translações temporais? Como se aborda atualmente aspectos da longa e formidável discussão sobre os conceitos de complementariedade e o de onda-partícula? Qual é o conteúdo físico da denominação – do conceito de – “segunda-quantização”? Segunda quantização do quê? O que significa uma partícula elementar? Por que a palavra “fóton” não aparece nos cursos de eletrodinâmica clássica? O que é um campo? Por que as simetrias de Lie surgem em todas as teorias do movimento? Estas foram algumas das questões que nos levaram a escrever o presente texto.

Procedemos então da seguinte forma. Primeiro, em um resumo pedagógico de alguns dos nossos trabalhos acadêmicos prévios, analisamos aspectos gerais sobre o conceito de movimento, para deduzir o conteúdo de simetrias de Lie como estrutura central para as teorias mecânicas. Estes elementos ficam relacionados ao princípio variacional de Schwinger, que como é bem conhecido associa-se à formulações de Feynman e estocásticas. Para algumas dessas conexões, embora não detalhadas, apontamos referências. Assim é no âmbito das simetrias que diferentes representações da mecânica quântica não-relativística estão tratadas neste trabalho.

A representação natural, que surge neste contexto, é a de Liouville-von Neumann com a matriz de densidade. A representação em termos da equação de Schrödinger emerge como um teorema para soluções da equação de Liouville-von Neumann. O problema da relação de Heisenberg envolvendo o tempo é considerado neste momento, sob a perspectiva das simetrias do grupo de Galilei.

A representação da mecânica quântica no espaço de fase, proposta por Wigner, é discutida, como usualmente, a partir da matriz de densidade. Porém, procuramos destacar que na formulação inicial de Wigner, as simetrias de calibre, que dão origem aos campos mediadores das interações conhecidas, não são implementadas de modo natural. Isto é consequência de a função de Wigner ser Real, impossibilitando, diretamente, o estudo dessas simetrias. Na procura do substrato de simetria, para considerar a calibragem (“gauge”, do inglês), surge então a representação simplética da mecânica quântica.

Axiomaticamente, a forma mais geral de se contruir a mecânica quântica é utilizar o espaço de Fock como espaço de representação das simetrias de Galilei (e é também a situação relativística). Aqui destacamos este aspecto. Como consequência, para qualquer tipo de representação, a mecânica quântica é basicamente uma teoria quântica de campos. Esta interpretação é decantada da análise das simetrias, se mostra consistente e permite a solução de certos problemas iniciais da mecânica quântica, como aqueles associados à noção de onda-partícula e o princípio da complementaridade.

Vários outros aspectos não foram analisados, como por exemplo: a noção de causalidade na mecânica quântica; as teorias quânticas relativísticas e o equivalente relativístico das relações de Heisenberg; aspectos do emaranhamento quântico; e as teorias quânticas térmicas. Estes temas restam por ser considerados no devir, na perspectiva como aqui procedemos.

Dedicatória: Este trabalho é dedicado, em memória, aos Professores F.C. Khanna, que faleceu há alguns meses, e a I. Umezawa, que se vivo estaria completando 100 anos de nascimento.

Apêndice A

Noções de Grupos e Álgebras de Lie

Neste apêndice será apresentada uma breve revisão sobre o conceito de grupos e de álgebras de Lie. O material foi basicamente extraído de textos anteriores [30, 104]. Por necessidade metodológica da apresentação, fundada no conceito de simetrias e na estrutura de álgebra de Lie, detalhamos certos aspectos dos grupos de Lie que não são usuais, pelo menos nas abordagens pedagógicas, como a introdução e o significado das constantes de estruturas dos grupos de Lie.

A.1. Grupos

Um grupo é um conjunto de elementos $G = \{a, b, c, \dots, o\}$ munido de uma operação “ $\circ$ ”, referida como “produto”, que satisfaz as seguintes propriedades:

- P.1: $\forall a, b \in G, a \circ b = c$, em que $c \in G$.
 P.2: $\forall a, b, c \in G, a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$.
 P.3: $\exists e \in G$, tal que $\forall a \in G$, tem-se $a \circ e = e \circ a = a$.
 P.4: $\forall a \in G, \exists a^{-1} \in G$, tal que $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$.

A propriedade P.1 estabelece a condição de fechamento do produto $\circ$, que é associativo, como garantido por P.2. As propriedades P.3 e P.4 definem a existência do elemento neutro, e , e o elemento inverso a todo cada elemento de G , respectivamente.

P.5 Se $\forall a, b \in G, a \circ b = b \circ a$, então G é um grupo abeliano, ou comutativo.

Um exemplo de grupo é o conjunto dos inteiros, isto é $G = \mathbb{Z}$ com $\circ \equiv +$. Um outro exemplo é o conjunto $G \equiv C = \{1, -1, i, -i; \circ \equiv \cdot\}$; ou seja, o produto entre os elementos do grupo C é a operação produto entre esses números. Em ambos os casos, as propriedades P.1–P.4 são satisfeitas. Como um terceiro exemplo, considere um quadrado num plano, e um eixo perpendicular a este plano passando pelo centro do quadrado com vértices (v_1, v_2, v_3, v_4) . As rotações em torno do eixo que deixam o quadrado invariante são as seguintes: $\mathcal{R} = \{R_\theta; \theta = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2, 2\pi\}$, além das respectivas rotações inversas. O conjunto $\mathcal{R}$ forma um grupo onde produto, $\circ$, é definido por aplicações sucessivas de rotações, isto é, $R_{\theta_1} \circ R_{\theta_2} = R_{\theta_1 + \theta_2}$. Uma rotação pode ser contabilizada pela mudança das letras nos vértices. Considere inicialmente o quadrado com vértices v_1, v_2, v_3, v_4 . Uma rotação no quadrado de $R_{\pi/2}$ é tal que

$$R_{\pi/2}(v_1, v_2, v_3, v_4) = (v_2, v_3, v_4, v_1),$$

e assim por diante. O elemento identidade é identificado como $R_0 \equiv R_{2\pi}$. Dado R_θ , seu inverso é definido por $R_\theta^{-1} = R_{-\theta}$, de modo que $R_\theta^{-1} \circ R_\theta = R_\theta \circ R_\theta^{-1} = R_{\theta - \theta} = R_0$.

Nesses três exemplos, o grupo é comutativo. Essas mesmas características de produto e operação de rotações são válidas para outros polígonos, como o pentágono (cinco vértices e rotações por ângulos que são múltiplos de $2\pi/5$), ou o hexágono (seis vértices e ângulos que são múltiplos de $\pi/3$), e assim por diante. A situação limite no número de lados é o círculo no plano, com $0 \leq \theta \leq 2\pi$. Neste caso há infinitos elementos do grupo, cada um especificado pelo valor de θ no respectivo intervalo de definição. Para qualquer valor do ângulo de rotação, nessas condições, o círculo ficará invariante.

Esta invariância, por sua vez, está intimamente relacionada com o conceito de simetria [105]. Por esse motivo se usa a denominação de grupo de simetria. No exemplo do círculo, a simetria se estabelece com uma figura geométrica desenhada a partir de pontos do espaço Euclidiano de duas dimensões, $\mathbb{R}^2$. Contudo, o mesmo tipo de simetria ocorre para o espaço vetorial de funções. Por exemplo, a função gaussiana $f(r) = Ae^{ar}$, com $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ é invariante por rotações no plano. Esta observação leva a necessidade de se estudar as diferentes representações dos grupos de simetria em diferentes espaços lineares.

A.2. Representação

Sejam $a, b, c, \dots$ elementos de um grupo abstrato G . Uma representação linear de G é um grupo D homomórfico a G representado em um espaço linear, $\mathcal{L}_D$. Assim, a cada elemento de G associa uma matriz ou um operador atuando no espaço linear $\mathcal{L}_D$. Por enquanto, consideramos espaços lineares $\mathcal{L}_D$ finito-dimensional. Assim, os operadores lineares atuando em $\mathcal{L}_D$ são matrizes. Segue então que, dados $a, b, c, \dots \in G$, isto conduz a $D(a), D(b), D(c), \dots \in D(G)$, tal que $D(a) \iff a$, $\forall a \in G$. Sendo um homomorfismo, a representação deve preservar a mesma álgebra do grupo G , isto é, se $a \circ b = c$, então $D(a)D(b) = D(a \circ b) = D(c)$. Portanto, o produto em G é mapeado no produto de operadores definido no espaço linear $\mathcal{L}_D$ da representação D . Defini-se $D(e) = I$ e $D(a^{-1}) = D^{-1}(a)$, em que e e I são os elementos identidades de G e de D , respectivamente.

A representação de um dado grupo não é única. Por esse motivo, podemos definir representações equivalentes. Duas representações $D(G)$ e $D'(G)$ do grupo G são ditas equivalentes se estão relacionadas por uma transformação de similaridade do tipo

$$D'(G) = SD(G)S^{-1}.$$

É necessário mostrar então que os elementos de $D'(G)$ satisfazem a mesma álgebra que os de $D(G)$. Isto significa que $D'(a)D'(b) = D'(c)$ se $D(a)D(b) = D(c)$. Considere então que $D(a)D(b) = D(c)$. Multiplicando à esquerda por S e a direita por S^{-1} , obtemos $SD(a)D(b)S^{-1} = SD(c)S^{-1}$. Uma vez que $SS^{-1} = S^{-1}S = I$, em que I representa a identidade, temos

$$SD(a)S^{-1}SD(b)S^{-1} = SD(c)S^{-1},$$

o que nos leva a

$$D'(a)D'(b) = D'(c).$$

A demonstração das demais relações fica como exercício.

Uma representação $D(G)$ é dita isomórfica quando a correspondência entre os elementos de $D(G)$ e do grupo G é unívoca. Uma representação $D(G)$ é dita redutível se por transformação de similaridade puder ser escrita na forma matricial diagonal em blocos, isto é,

$$D'(a) = SD(a)S^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} D_1(a) & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & D_2(a) \end{array} \right),$$

onde D_1 e D_2 são duas representações de G . Se este resultado não existe, então a representação $D(G)$ é dita irredutível.

Para exemplificar o conceito de representações, considere duas rotações no $\mathbb{R}^2$ descritas pelas matrizes

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Como apontamos, essas rotações formam um grupo com infinitos elementos, cada um especificado por um valor de θ . A lei de composição é dada pela aplicação sucessiva dessas matrizes nos eixos (x_1, x_2) do plano $\mathbb{R}^2$. Note então que a lei de composição é fechada. De fato, considere

$$R(\theta') = \begin{pmatrix} \cos \theta' & -\sin \theta' \\ \sin \theta' & \cos \theta' \end{pmatrix}.$$

O produto $R(\theta) \circ R(\theta') = R(\theta'')$ resulta em

$$R(\theta'') = \begin{pmatrix} \cos \theta'' & -\sin \theta'' \\ \sin \theta'' & \cos \theta'' \end{pmatrix},$$

com $\theta'' = \theta + \theta'$.

Para o caso do $\mathbb{R}^3$, há três possibilidades de rotações, cada uma em torno de um dos três eixos, (x_1, x_2, x_3) , e que são dadas por

$$R(\theta_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ 0 & -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

$$R(\theta_2) = \begin{pmatrix} \cos \theta_2 & 0 & -\sin \theta_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta_2 & 0 & \cos \theta_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

$$R(\theta_3) = \begin{pmatrix} \cos \theta_3 & -\sin \theta_3 & 0 \\ \sin \theta_3 & \cos \theta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

A rotação $R(\theta_1)$ ocorre em torno do eixo x_1 ; $R(\theta_2)$, em torno de x_2 ; e $R(\theta_3)$, em torno de x_3 . Estes parâmetros $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ descrevem os ângulos de rotações no espaço de configurações, o espaço Euclidiano $\mathbb{R}^3$, e são equivalentes aos ângulos de Euler. Para as rotações tanto no plano $\mathbb{R}^2$ como no $\mathbb{R}^3$, a operação do grupo “o” se reduz ao produto usual de matrizes.

Esses dois exemplos promovem transformações no $\mathbb{R}^n$, para $n = 1, 2$. Por isso são denominados de grupos de transformações. Uma característica dessa simetria é que, geometricamente, a distância de vetores no espaço Euclidiano $\mathbb{R}^n$, para $n = 1, 2$, ficam fixas por rotações. Ou seja, a métrica Euclidiana – a definir o módulo dos vetores – fica invariante. Além disso, o grupo de rotações definido no $\mathbb{R}^2$ é comutativo (abeliano), enquanto que o grupo definido no $\mathbb{R}^3$ não é comutativo (não-abeliano). Essas características demandam o estudo com mais algum detalhe e generalidade dos grupos de transformações no $\mathbb{R}^n$, inclusive para contemplar outras estruturas métricas definidas no $\mathbb{R}^n$, como o espaço de Minkowski.

A.3. Grupos de transformações de Lie no $\mathbb{R}^n$

A.3.1. Definição

Considere o $\mathbb{R}^n$, um espaço de dimensão n , com pontos especificados por $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e um conjunto de transformações $f_i : x \rightarrow x'$, com $i = 1, 2, \dots, n$

e dependente de r parâmetros reais, especificados por $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$; ou seja,

$$x'_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r). \quad (\text{A.4})$$

É apropriado utilizar a notação compacta, isto é, reescrever esta equação como

$$x' = f(x; \alpha), \quad (\text{A.5})$$

com $f = (f_1, f_2, \dots, f_n)$.

Diz-se que o conjunto de transformações f é um grupo de transformações de Lie a r -parâmetros se as seguintes condições forem satisfeitas.

- (i) Dado $x'_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$ e $x''_i = f_i(x'_1, x'_2, \dots, x'_n; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_r)$, a transformação $f_i : x \rightarrow x''$,

$$x''_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_r)$$

é um elemento do conjunto das transformações dadas na Eq. (A.5), com

$$\gamma_k = \phi_k(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_r),$$

tal que $k = 1, 2, \dots, r$. As r -funções ϕ_k são analíticas na dependência de α e β .

- (ii) Existe um conjunto de parâmetros $\alpha^0 = (\alpha^0_1, \alpha^0_2, \dots, \alpha^0_r)$ tal que

$$x' = f(x; \alpha^0) = x,$$

o que corresponde ao elemento identidade das transformações. Em geral, parametriza-se o grupo de forma que $\alpha^0 = (0, 0, \dots, 0)$.

- (iii) Dada uma transformação caracterizada pelos parâmetros $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$, existe um conjunto de parâmetros $\bar{\alpha} = (\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \dots, \bar{\alpha}_r)$, funções analíticas de α ,

$$x'' = f(x'; \bar{\alpha}) = f(f(x; \alpha); \bar{\alpha}) = x,$$

onde usamos a Eq. (A.5). Esta propriedade garante a existência da transformação inversa.

- (iv) A lei de composição é associativa.

Esses aspectos garantem que essas transformações formam um grupo. É importante observar que, por ser um grupo, há restrições sobre as transformações, como $f(f(x; \alpha); \beta) = f(x; \phi(\alpha; \beta))$. A natureza dessas restrições podem ser observadas no contexto infinitesimal, ou seja, transformações próximas da identidade.

A.3.2. Transformações infinitesimais

Para explorar o que se tem e fixar a notação, considere a transformação infinitesimal de um ponto x para um ponto x' por um parâmetro α de acordo com a Eq. (A.5). Inicialmente é conveniente considerar o caso de uma dimensão, $r = 1$. Desde o ponto x' , uma transformação

infinitesimal é conduzida e descrita pelo parâmetro $\bar{\delta}\alpha$ que representa uma variação pequena de α (ao final, toma-se o limite $\bar{\delta}\alpha \rightarrow 0$). E assim, de x' chega-se ao ponto $x' + \delta x'$, através da expressão

$$\begin{aligned} x' + \delta x' &= f(x'; \bar{\delta}\alpha) = f(f(x; \alpha); \bar{\delta}\alpha) \\ &= f(x; \phi(\alpha; \bar{\delta}\alpha)). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O significado de $\phi(\alpha; \bar{\delta}\alpha)$ é especificado ao se considerar a seguinte observação.

Como se trata de um grupo, é possível sair de x e alcançar diretamente o ponto $x' + \delta x'$ procedendo com uma escolha adequada do parâmetro da transformação. Este é escrito a partir de outra modificação infinitesimal de α , ou seja, dado como $\alpha + \delta\alpha$. Isto resulta em

$$x' + \delta x' = f(x; \alpha + \delta\alpha).$$

Comparando este resultado com a Eq. (A.6), encontra-se

$$\alpha + \delta\alpha = \phi(\alpha; \bar{\delta}\alpha). \quad (\text{A.7})$$

É importante enfatizar que $\delta\alpha, \bar{\delta}\alpha \ll \alpha$. Entretanto, antes do processo de limite, $\delta\alpha \neq \bar{\delta}\alpha$.

Agora é importante escrever explicitamente os principais resultados em termos de componentes. Utilizando as Eqs. (A.6) e (A.7), encontramos

$$\begin{aligned} x'_i + \delta x'_i &= f_i(x'_1, x'_2, \dots, x'_n; \bar{\delta}\alpha_1, \bar{\delta}\alpha_2, \dots, \bar{\delta}\alpha_r), \\ \alpha_l + \delta\alpha_l &= \phi_l(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r; \bar{\delta}\alpha_1, \bar{\delta}\alpha_2, \dots, \bar{\delta}\alpha_r). \end{aligned}$$

Isto resulta em

$$\delta x'_i = \sum_{k=1}^r U_{ik}(x') \bar{\delta}\alpha_k \quad (\text{A.8})$$

$$\delta\alpha_l = \sum_{m=1}^r T_{lm}(\alpha) \bar{\delta}\alpha_m, \quad (\text{A.9})$$

onde

$$\begin{aligned} U_{ik}(x') &= \left. \frac{\partial f_i(x'; \alpha)}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha=0}, \\ T_{lm}(x') &= \left. \frac{\partial \phi_l(\alpha; \beta)}{\partial \beta_m} \right|_{\beta=0}. \end{aligned}$$

Isolando $\bar{\delta}\alpha_m$ na Eq. (A.9) e substituindo na as Eqs. (A.8), segue que

$$\frac{\partial x'_i}{\partial \alpha_l} = \sum_{k=1}^r U_{ik}(x') V_{kl}(\alpha), \quad (\text{A.10})$$

onde $V_{kl} = T_{kl}^{-1}$. Considerando uma função $F(x)$ para transformações infinitesimais, usando a Eq. (A.9), segue que

$$\begin{aligned} dF &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial F(x)}{\partial x_i} dx_i \\ &\quad + \sum_{l=1}^r d\alpha_l X_l F(x), \end{aligned}$$

onde

$$X_l = \sum_{i=1}^r U_{il}(x) \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (\text{A.11})$$

denominado de gerador infinitesimal do grupo de Lie. Esses operadores, em número igual aos dos parâmetros, dependem do ponto em $\mathbb{R}^n$ e do tipo de transformação de simetria expressa em $U_{il}(x)$.

Note que para $F(x) = x$, tem-se a transformação próxima da identidade, ou seja,

$$x'_i = \left(1 + \sum_{l=1}^r X_l \delta \alpha_l \right) x_i.$$

Escrevendo $\delta \alpha_l = \alpha/N$, com $N \gg 0$, segue que uma transformação finita fica dada por

$$x'_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \sum_{l=1}^r X_l \frac{\alpha_l}{N} \right)^N x_i.$$

Isso leva a expressão para os elementos do grupo de transformação dada por

$$\mathcal{T}(x, \alpha) = \exp \left\{ \sum_{l=1}^r \alpha_l X_l \right\}.$$

Na sequência as características desses geradores serão analisadas.

A.3.3. Álgebra de Lie

Considere o conjunto $\mathcal{A} = (X_1, X_2, \dots, X_r)$ formado pelos geradores infinitesimais do grupo de Lie. Mostra-se que além da adição, da multiplicação por um escalar e do produto associativo do tipo $X_l X_k$ o conjunto $\mathcal{A}$ é fechado pela lei de composição $[X_l, X_k] = X_l X_k - X_k X_l$, denominado comutador ou produto de Lie. A demonstração tem início com a observação de que, por estarmos tratando de grupos de simetria, temos [106, 107]

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial \alpha_l \partial \alpha_m} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial \alpha_m \partial \alpha_l}. \quad (\text{A.12})$$

(Notação utilizada para os índices: $i, j = 1, 2, \dots, n$; e $k, l, m, s, t = 1, 2, \dots, r$. A regra da soma é utilizada para índices repetidos, por simplicidade. A covariância dos índices neste caso não é importante.)

Usando a Eq. (A.10) (com a notação $x' = x$), a Eq. (A.12) é reescrita como

$$U_{ik} \left(\frac{\partial V_{km}}{\partial \alpha_l} - \frac{\partial V_{kl}}{\partial \alpha_m} \right) = V_{kl} \frac{\partial U_{ik}}{\partial \alpha_m} - V_{km} \frac{\partial U_{ik}}{\partial \alpha_l}. \quad (\text{A.13})$$

Note que em $U_{ik} = U_{ik}(x)$, o ponto x depende dos parâmetros em α , o que leva a

$$\frac{\partial U_{ik}}{\partial \alpha_l} = \frac{\partial U_{ik}}{\partial x_j} U_{jt} V_{tl}.$$

Usando este resultado na Eq. (A.13), tem-se

$$U_{jl} \left(\frac{\partial U_{im}}{\partial x_j} - U_{jm} \frac{\partial U_{il}}{\partial x_j} \right) = C_{ml}^k U_{ik}, \quad (\text{A.14})$$

onde

$$C_{ml}^k = \left(\frac{\partial V_{ks}}{\partial \alpha_t} - \frac{\partial V_{kt}}{\partial \alpha_s} \right) T_{sm} T_{tl}. \quad (\text{A.15})$$

Dois resultados emergem dessas expressões.

O primeiro é que

$$\frac{\partial C_{ml}^k}{\partial \alpha_s} = 0.$$

Portanto, C_{ml}^k é independente de dos parâmetros α . Assim, cada C_{ik}^m é denominada constante de estrutura do grupo, e representa uma marca (um selo) do tipo de simetria descrita pela transformação específica. Um segundo resultado é o de fechamento do produto $[X_l, X_k]$. Usando a Eq. (A.11), tem-se que

$$[X_l, X_k] = C_{lk}^m X_m. \quad (\text{A.16})$$

Por consistências, outras características gerais das constantes de estrutura são deduzidas das propriedades do comutador. Utilizando $[X_l, X_k] = -[X_k, X_l]$, segue que

$$C_{lk}^m = C_{kl}^m. \quad (\text{A.17})$$

Como o comutador satisfaz a identidade de Jacobi, isto é,

$$[[X_l, X_k], X_m] + [[X_k, X_m], X_l] = [[X_l, X_m], X_k],$$

obtem-se

$$C_{lk}^t C_{tm}^s + C_{km}^t C_{tl}^s + C_{ml}^t C_{tk}^s = 0. \quad (\text{A.18})$$

Além disso, tem-se a propriedade de derivação dada por

$$[X_l X_k, X_m] = X_l [X_k, X_m] + [X_l, X_m] X_k.$$

Esse resultado mostra a relação do produto de Lie com o produto associativo. O conjunto $\mathcal{A}$ é então denominado de uma álgebra de Lie com derivação. Na sequência, como exemplo, o grupo de rotações preliminarmente abordado, é explorado enquanto sua estrutura de Lie.

A.4. Álgebra de Lie do grupo de rotações

A fim de analisar e exemplificar as propriedades dos geradores, retomamos o grupo da rotação no espaço tridimensional, $\mathbb{R}^3$, o qual é denominado de $SO(3)$. Os geradores serão representados por matrizes 3×3 . Depois, escolhendo o espaço de representação como sendo o das funções, os geradores aparecem representados como operadores diferenciais.

A.4.1. Geradores de rotações na forma matricial

Considerando as rotações dadas nas Eqs. (A.1)–(A.3), chega-se aos geradores do $SO(3)$ analisando rotações próxima da identidade do grupo, isto é, com ângulos pequenos, ou seja, $\delta\theta_1, \delta\theta_2, \delta\theta_3 \ll 1$. Em primeira ordem isto conduz a

$$R(\delta\theta_1) \simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - i\theta_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Assim para uma rotação infinitesimal em torno do eixo x_1 é escrita como

$$R(\delta\theta_1) \simeq I - i\delta\theta_1 G_1,$$

em que o gerador G_1 é dado por

$$G_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Os outros dois geradores são os seguintes:

$$G_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$G_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

Um resultado importante é a álgebra de Lie envolvendo os geradores, isto é,

$$[G_l, G_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ljk} G_k, \quad (\text{A.19})$$

onde ϵ_{ijk} é o tensor antissimétrico. Neste caso, as constantes de estrutura do grupo são dadas por $C_{ij}^k = \epsilon_{ijk}$. O fator “ i ” é introduzido aqui por conveniência. (Nesta representação $n = r = 3$; ou seja, o número de parâmetros é igual ao número de dimensões do espaço de representação.)

O espaço $\mathbb{R}^3$ é o que se chama de espaço de definição da simetria definida pelo $SO(3)$ e caracterizada pelas constantes de estruturas ϵ_{ijk} . (Trata-se aqui da parte do grupo conectada a identidade.) Outros espaços podem então ser utilizados para representar a simetria caracterizada por ϵ_{ijk} , com a álgebra de Lie dada pela Eq. (A.19). Uma possibilidade é o espaço linear das funções analíticas $F(x_1, x_2, x_3)$.

A.4.2. Geradores de rotações na forma de derivadas

Considere a rotação $R(\delta\theta_1)$ em torno do eixo x_1 com o ângulo de rotação $\delta\theta_1$ próximo a zero. A transformação

produzida pela ação desse elemento do grupo em um vetor no $\mathbb{R}^3$ é dada por exemplo como

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\delta\theta_1 \\ 0 & \delta\theta_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix},$$

que, explicitamente, resulta em

$$x'_1 = x_1, \quad (\text{A.20})$$

$$x'_2 = x_2 - \delta\theta_1 x_3, \quad (\text{A.21})$$

$$x'_3 = x_3 + \delta\theta_1 x_2. \quad (\text{A.22})$$

Com este resultado, a transformação induzida por $R(\delta\theta_1)$ sobre uma função $F(x_1, x_2, x_3)$ é representada por

$$\begin{aligned} R(\delta\theta_1)F(x_1, x_2, x_3) &= f(R(\delta\theta_1)(x_1, x_2, x_3)) \\ &= F(x'_1, x'_2, x'_3). \end{aligned}$$

Assim, tem-se

$$F(x'_1, x'_2, x'_3) = F(x_1, x_2 - \delta\theta_1 x_3, x_3 + \delta\theta_1 x_2).$$

Expandindo esta função até a primeira ordem em torno de $\delta\theta_1 = 0$ resulta em

$$\begin{aligned} f(x'_1, x'_2, x'_3) &= \left\{ 1 - \delta\theta_1 \left[\left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right] \right\} \\ &\quad \times f(x_1, x_2, x_3). \end{aligned}$$

A partir deste resultado, fica identificado o elemento do grupo responsável pela rotação infinitesimal por um ângulo $\delta\theta_1$ em torno do eixo x_1 sobre $F(x_1, x_2, x_3)$, isto é,

$$R(\delta\theta_1) = 1 - \delta\theta_1 \left[\left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right].$$

O gerador dessas rotações é então identificado como

$$iL_1 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}.$$

Isto resulta em $R(\delta\theta_1) = 1 - i\delta\theta_1 L_1$. Se $\delta\theta_1 = \theta_1/N$, para uma rotação finita de um ângulo θ_1 , obtém-se $R(\theta_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} R^N(\delta\theta)$, ou seja,

$$R(\theta_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - i \frac{\theta_1}{N} L_1 \right)^N,$$

ou ainda,

$$R(\theta_1) = e^{-i\theta_1 L_1}.$$

Procedendo de forma análoga para as outras matrizes de rotação, $R(\theta_2)$ e $R(\theta_3)$, os geradores de simetria ficam dados, respectivamente, por

$$iL_2 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3},$$

e

$$iL_3 = x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}.$$

Os geradores L_1, L_2, L_3 satisfazem a álgebra de Lie

$$[L_i, L_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k.$$

Do ponto de vista algébrico, o que caracteriza uma rotação é, então, o conjunto das constantes de estrutura, ϵ_{ijk} , independentemente do espaço de representação.

A.4.3. Dernières observations

Partindo do conceito de grupo de transformação, chegase a Eq. (A.9) descrevendo uma classe de equações diferenciais. Características outras são a identificação dos geradores de simetria, dados na Eq. (A.11), que conduziu a álgebra de Lie, Eq. (A.16), e as constantes de estrutura do grupo satisfazendo as propriedades dadas nas Eqs. (A.17) e (A.18). Além desses resultados, Lie demonstrou que o inverso também é verdadeiro, isto é, se existem constantes satisfazendo as Eqs. (A.17) e (A.18), pode-se encontrar U e V que levam a funções que são soluções da Eq. (A.9).

A busca por soluções de equações diferenciais foi um programa de pesquisa que se desenvolveu por todo o século XX e encontrou um ponto de destaque com o desenvolvimento da computação algébrica [108]. Na apresentação do presente trabalho, percorremos o caminho de explorar as representações do grupo de Lie, descrevendo as simetrias de Galilei. Especificamente, o início foi a apresentação da simetria de Galilei do espaço tempo através da álgebra de Lie. Com este aparato, construímos as diversas representações da mecânica quântica não-relativística de um modo unificado. Seguimos assim um dos caminhos como apontado por Lie para abordar e desenvolver uma teoria do movimento; no caso, a mecânica quântica não-relativística.

Disponibilidade de Dados

Todo o conjunto de dados que dá suporte aos resultados deste estudo foi publicado no próprio artigo.

Referências

- [1] M. Jammer, *The Philosophy of Quantum Mechanics: The interpretations of QM in Historical Perspective* (John Wiley, New York, 1974).
- [2] O. Freire Jr., O. Pessoa Jr. e J.L. Bromberg (org.), *Teoria quântica: Estudos Históricos e Implicações Culturais* (Editora da Universidade Estadual da Paraíba/LF Editora, Campina Grande/São Paulo, 2010).
- [3] O. Freire Jr., *The Quantum Dissidents: Rebuilding the Foundations of Quantum Mechanics (1950-1990)* (Springer, Berlin, 2015).

- [4] A. Ribeiro-Filho, em: *Origens e Evolução das Idéias da Física* editado por J.F. Rocha (Editora da Universidade Federal da Bahia, Salvador, 2002).
- [5] J.C.A. Barata, em: *100 Anos da Física Quântica* editado por M.S. Hussein e S.R.A. Salinas (LF Editorial, São Paulo, 2002).
- [6] A.F.R.T. Piza, em: *100 Anos da Física Quântica* editado por M.S. Hussein e S.R.A. Salinas (LF Editorial, São Paulo, 2002).
- [7] M. Bondani, I.P. Degiovanni, M. Genovese, M.G.A. Paris, I.R. Berchera e V. Schettini, *Found. Phys.* **41**, 305 (2011).
- [8] R. Omnès, *Found. Phys.* **43**, 1339 (2013).
- [9] M. Fox, *Quantum Optics, an Introduction* (Oxford University Press, Oxford, 2006).
- [10] A. Di Domenico, A. Gabriel, B.C. Hiesmayr, F. Hipp, M. Huber, G. Krizek, K. Mühlbacher, S. Radic, C. Spengler e L. Theussl, *Found. Phys.* **42**, 778 (2012).
- [11] K. Urbanowski, *Acad. Quant.* **2**, 1 (2025).
- [12] V. Dodonov, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **47 Suppl3** (2025), não publicado.
- [13] S.S. Chibeni, *Rev. Bras. Fis.* **27**, 181 (2005).
- [14] I. Newton, *The Principia* (Prometheus Books, New York, 1995).
- [15] L.S.F. Olavo, A.E. Santana e S.J. Simon, *Rev. Port. Filos.* **77**, 257 (2021).
- [16] N. Bohr, *Science* **111**, 51 (1950).
- [17] E. Schrödinger, *Phys. Rev.* (28), 1049 (1926).
- [18] R.L. Liboff, *Kinetic Theory: Classical, Quantum and Relativistic Description* (J. Wiley, New York, 1998).
- [19] C.J. Villas-Boas, C.E. Máximo, P.J. Paulino, R.P. Bachelard e G. Rempe, *Phys. Rev. Lett.* **134**, 133603 (2025).
- [20] R.G.G. Amorim, W.C. Santos, A.P. Ibaldo, A.E. Santana e S. Simon, *Rev. Bras. Fis.* **43**, e20210076 (2021).
- [21] F.A. Berezin, *The Method of Second Quantization* (Academic Press, New York, 1966).
- [22] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (Dover, New York, 2003).
- [23] J. Bardeen e W.H. Brattain, *Phys. Rev.* **75**, 1208 (1949).
- [24] J.S. Schwinger, *Quantum Kinematics and Dynamics* (W.A. Benjamin, New York, 1970).
- [25] J.D.M. Vianna, A. Fazzio e S. Canuto, *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional* (LF Editorial, São Paulo, 2018).
- [26] C.A.M. de Melo, B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **33**, 3306 (2011).
- [27] C.A.M. de Melo, B.M. Pimentel e J.A. Ramirez, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **35**, 4302 (2013).
- [28] K.A. Milton, arXiv:1503.08091 (2015).
- [29] P. Bracken, *Can. J. Phys.* **75**, 261 (1997).
- [30] R.G.G. Amorim e A.E. Santana, *Mecânica Quântica: Estrutura e Aplicações* (Universidade de Brasília, Brasília, 2024).
- [31] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields* (Cambridge Press, New York, 1995), v. 1.
- [32] A.E. Santana, F.C. Khanna, A.F. Santos, R.G.G. Amorim, S.C. Ulhoa e J.D.M. Vianna, *Symplectic Quantum Field Theory* (Cambridge Scholars, Newcastle, 2024).

- [33] F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson e A.E. Santana, *Thermal Quantum Field Theory: Algebraic Aspects and Applications* (World Scientific, Singapore, 2009).
- [34] F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson e A.E. Santana, *Phys. Reports* **539**, 135 (2014).
- [35] A.E. Santana e S. Simon, *J. Mod. Phys.* **6**, 58 (2015).
- [36] H.Q. Plácido, R. Bunchaft e A.E. Santana, *Hadronic Journal* **15**, 225 (1992).
- [37] A.E. Santana, A. Matos-Neto e J.D.M. Vianna, *Hadronic Journal*, **17**, 539 (1994).
- [38] A.E. Santana, A. Ribeiro-Filho e J.D.M. Vianna, *Rev. Bras. Fis.* **22**, 199 (2000).
- [39] L. Fonda e G.C. Ghirardi, *Symmetry Principles in Quantum Physics* (Marcel Dekker, New York, 1970).
- [40] P.A.M. Dirac, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [41] E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932).
- [42] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully e E.P. Wigner, *Phys. Rep.* **106**, 121 (1984).
- [43] C.K. Zachos, *Int. Mod. Phys. A* **17**, 297 (2002).
- [44] T.L. Curtright, D.B. Fairlie e C.K. Zachos, *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space* (World Scientific, Singapore, 2013).
- [45] D.K. Ferry e M. Nedjalkov, *The Wigner Function in Science and Technology* (IoP, Bristol, 2018).
- [46] Y.S. Kim e W.W. Zachary (ed.), *The Physics of Phase Space: Nonlinear Dynamics and Chaos, Geometric Quantization, and Wigner Function* (Springer, Berlin, 1986).
- [47] A. Kenfack e K. Zyczkowski, *J. Opt. B* **6**, 396 (2004).
- [48] A. Kowalewski-Kudlaszyk, J.K. Kalaza e W. Leanski, *Phys. Rev. E* **78**, 066219 (2008).
- [49] M. Veronez e M.A.M. de Aguiar, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 485304 (2013).
- [50] D. Leibfried, D.M. Meekhof, B.E. King, C. Monroe, W.M. Itano e D.J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4281 (1996).
- [51] S. Mancini, V.I. Manko e P. Tombesi, *Phys. Lett. A* **213**, 1 (1996).
- [52] V.I. Manko, em: *Theory of Nonclassical States of Light*, editado por V.V. Dodonov e V.I. Manko (Taylor & Francis, New York, 2003).
- [53] O. Manko e V.I. Manko, *J. Russ. Laser Res.* **18**, 407 (1997).
- [54] A. Ibort, V.I. Manko, G. Marmo, A. Simoni e F. Ventriglia, *Phys. Scripta* **79**, 065013 (2009).
- [55] A. Ibort, V.I. Manko, G. Marmo, A. Simoni e F. Ventriglia, *Phys. Lett. A* **374**, 2614 (2010).
- [56] A. Ibort, A. Lopez-Yela, V.I. Manko, G. Marmo, A. Simoni, E.C.G. Sudarshan e F. Ventriglia, *Phys. Lett. A* **376**, 1417 (2012).
- [57] B. Lin, S. Jing e T. Heng, *Mod. Phys. Lett. A* **23**, 445 (2008).
- [58] R.G.G. Amorim, M.C.B. Fernandes, A.R. Queiroz, A.E. Santana e J.D.M. Viana, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **35**, 3604 (2013).
- [59] S. Chountassis e A. Vourdas, *Phys. Rev. A* **58**, 1794 (1998).
- [60] T. Curtright, D. Fairlie e C. Zachos, *Phys. Rev. D* **58**, 25002 (1998).
- [61] T. Curtright e C. Zachos, *J. Phys. A* **32**, 771 (1999).
- [62] C.K. Zachos, *Int. J. Mod. Phys. A* **17**, 297 (2002).
- [63] H. Weyl, *Z. Phys.* **46**, 1 (1927).
- [64] J.E. Moyal, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45**, 99 (1949).
- [65] S.A. Smolyansky, A.V. Prozorkevich, G. Maino e S.G. Mashnic, *Ann. Phys. (New York)* **277**, 193 (1999).
- [66] O.F. Dayi e L.T. Kelleyane, *Mod. Phys. Lett. A* **17**, 1937 (2002).
- [67] A.E. Santana, A. Matos Neto, J.D.M. Vianna e F.C. Khanna, *Physica A* **280**, 405 (2001).
- [68] M.A. Alonso, G.S. Pogosyan e K.B. Wolf, *J. Math. Phys.* **43**, 5857 (2002).
- [69] M. Berkowitz, *Chem. Phys. Lett.* **129**, 486 (1986).
- [70] V. Chari e A. Pressley, *A Guide to Quantum Groups* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [71] E. Prugovecki, *Stochastic Quantum Mechanics and Quantum Spacetime: A Consistent Unification of Relativity and Quantum Theory Based on Stochastic Spaces* (Springer, Berlin, 1984).
- [72] L.S.F. Olavo, *Phys. Rev. A* **61**, 052109 (2000).
- [73] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz e D. Sternheimer, *Ann. Phys. (New York)* **111**, 61 (1978).
- [74] K. Husimi, *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.* **22**, 246 (1940).
- [75] E.C.G. Sudarshan, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 277 (1963).
- [76] R.J. Glauber, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 84 (1963).
- [77] K.E. Cahill e R.J. Glauber, *Phys. Rev.* **177**, 1882 (1969).
- [78] G.S. Agarwal e E. Wolf., *Phys. Rev. D* **2**, 2161 (1970).
- [79] G.S. Agarwal e E. Wolf, *Phys. Rev. D* **2**, 2187 (1970).
- [80] G.S. Agarwal e E. Wolf., *Phys. Rev. D* **2**, 2206 (1970).
- [81] G.V. Vereshchagin e A.G. Aksenov, *Relativistic Kinetic Theory: With Applications in Astrophysics and Cosmology* (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
- [82] F.E. Schroeck Jr., *Quantum Mechanics in Phase Space* (Springer, Berlin, 2010), 6 ed.
- [83] D.K. Ferry e M. Nedjalkov, *The Wigner Function in Science and Technology* (IoP, Bristol, 2018).
- [84] T.L. Curtright, D.B. Fairlie e C.K. Zachos, *Quantum Mechanics in Phase Space: An Overview with Selected Papers* (World Scientific, Singapore, 2005).
- [85] H.M. Moya-Cessa e F. Soto-Eguibar, *Introduction to Quantum Optics* (Rinton Press, New York, 2011).
- [86] Y.S. Kim e W.W. Zachary (ed.) *The Physics of Phase Space: Nonlinear Dynamics and Chaos, Geometric Quantization, and Wigner Function* (Springer, Berlin, 1986).
- [87] Y.S. Kim e M.E. Noz, *Phase Space Picture of Quantum Mechanics: Group Theoretical Approach* (World Scientific, Singapore, 1991).
- [88] T.L. Curtright e C.K. Zachos, *Asia Pacific Physics Newsletter* **1**, 37 (2012).
- [89] H.T. Elze e U. Heinz, *Phys. Rep.* **183**, 81 (1989).
- [90] H.T. Elze, M. Gyulassy e D. Vasak, *Nucl. Phys. B* **276**, 706 (1986).
- [91] J.H. Gao e Z.T. Liang, *Phys. Rev. D* **100**, 056021 (2019).
- [92] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **46**, e20240234 (2024).
- [93] O.L. Silva Filho e M. Ferreira, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **47**, e20240426 (2025).

- [94] J. Dito, J. Math. Phys. **33**, 791 (1992).
- [95] G. Torres-Vega e J.H. Frederick, J. Chem. Phys. **93**, 8862 (1990).
- [96] M.A. de Gosson, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 9263 (2005).
- [97] D. Chruściński e K. Mlodawski, Phys. Rev. A **71**, 052104 (2005).
- [98] M.A. de Gosson, J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 095202 (2008).
- [99] M.A. Gosson e F. Luef, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 315205 (2009).
- [100] M.D. Oliveira, M.C.B. Fernandes, F.C. Khanna, A.E. Santana e J.D.M. Vianna, Annals Phys. **312**, 492 (2004).
- [101] R.G.G. Amorim, M.C.B. Fernandes, F.C. Khanna, A.E. Santana e J.D.M. Vianna, Phys. Lett. A **361**, 464 (2007).
- [102] R.G.G. Amorim, F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson e A.E. Santana, Int. J. Mod. Phys. A **30**, 1550135 (2015).
- [103] R.G.G. Amorim, F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson e A.E. Santana, Int. J. Mod. Phys. A **34**, 1950037 (2019).
- [104] J.D.M. Vianna, *Grupos e Álgebras de Lie: Representações e Aplicações* (Universidade de Brasília, Brasília, 1987).
- [105] R.C.G. Pasquini e H.J.J. Bortolossi, Boletim Cearense de Educação e História da Matemática **3**, 6 (2016).
- [106] M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems* (Addison-Wesley, New York, 1962).
- [107] E.C.G. Sudarshan e N. Mukunda, *Classical Dynamics: A Modern Perspective* (John Wiley, New York, 1974).
- [108] T.M. Rocha-Filho e A. Figueiredo, Comp. Phys. Comm. **182**, 467 (2011).