

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Evoluções Discretas em Sistemas Quânticos com Coordenadas Não-Comutativas

Andrey Gomes Martins

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutor em Ciências.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Paulo Teotônio sobrinho (orientador) - (IFUSP)

Prof. Dr. Adilson José da Silva - (IFUSP)

Prof. Dr. Daniel Augusto Turolla Vanzella - (IFSC/USP)

Prof. Dr. Eliezer Batista - (UFSC)

Profa. Dra. Maria Carolina Nemes - (UFMG)

São Paulo
2006

Em memória de minha querida avó, Altina Maria Gomes.

Agradecimentos

Ao Professor Paulo Teotônio Sobrinho, pela orientação durante o Mestrado e o Doutorado e por ter me proporcionado a oportunidade de tomar contato com diversos temas de Física e Matemática durante minha pós-graduação.

Aos Professores A. P. Balachandran (Syracuse University), T. R. Govindarajan (Institute of Mathematical Sciences) e Carlos Molina Mendes (USP Leste), pela colaboração científica, que resultou nos artigos publicados e contribuiu enormemente para a Tese.

Aos colegas de grupo de pesquisa, Alessandro Martim Marques e Amilcar Rabelo de Queiroz, pelas discussões travadas ao longo do doutorado, que eventualmente serão transformadas em um artigo científico em colaboração com o professor Paulo Teotônio Sobrinho.

Aos professores da Universidade Federal do Pará, José Maria Filardo Bassalo, Paulo de Tarso Santos Alencar, Van Sérgio da Silva Alves e Sérgio Vizeu Lima Pinheiro, por terem me incentivado a iniciar estudos em nível de pós-graduação.

Aos meus pais, Wilson Nazareno da Costa Martins e Laurimar Maria Gomes Martins, à minha avó, Altina Maria Gomes, e à minha irmã, Luciana de Cássia Gomes Martins, pelo apoio incondicional às minhas escolhas, por acreditarem em mim e por me amarem.

Aos meus amigos, Luis Cleber Tavares de Brito, Angela Dayana Barrera de Brito, Edson Akira Asano, Karlúcio Heleno Castro Castello Branco, Ivens Martins Carneiro, Alexandre Guimarães Rodrigues, Leonidas Lopes de Melo, McGlennon da Rocha Régis e Manoel Reinaldo Elias Filho, pelos momentos de descontração e pela boa companhia em tantos momentos.

Um agradecimento extra para os amigos Cleber e Angela de Brito, pela generosidade de me hospedarem em sua residência. Agradecimentos extras também ao professor Paulo Teotônio Sobrinho, ao Akira, ao Ivens, ao Alexandre, ao Leonidas e ao Reinaldo, pela ajuda financeira em diversos momentos cruciais.

Um agradecimento especial e uma homenagem ao meu saudoso amigo Ivens Martins Carneiro, a quem conheci durante minha graduação, em Belém do Pará, e com quem convivi em São Paulo durante o período de nossos estudos de pós-graduação. Era uma pessoa admirável pelo talento, inteligência, generosidade e caráter. Entre as diversas memórias que ficam, estão nossas inúmeras conversas sobre Física, Matemática e Filosofia.

Aos funcionários do Departamento de Física-Matemática, Amélia Aparecida Ferrari Genova, Simone Toyoko Shinomiya Alvarez, Elizabeth Santana Alves Vargas, Sybele Guedes de Paulo Groff e João da Silva Borges, pelo apoio eficiente, sempre que necessário.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela concessão de uma bolsa de Doutorado.

Abstract

We study the nonrelativistic Quantum Mechanics of physical systems characterized by the presence of an extra degree of freedom which does not commute with the time coordinate. In the language of Noncommutative Geometry, we deal with systems described by an algebra of the form $\mathcal{F}(Q) \otimes \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$, where $\mathcal{F}(Q)$ is the algebra of functions over the usual configuration space Q and $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ is a deformation of $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ known as *noncommutative cylinder*. From a geometric viewpoint, the generators of the noncommutative cylinder correspond to the time coordinate and to an extra compact spatial coordinate, just like in Kaluza-Klein theories. We show that because of the noncommutativity between the time coordinate and the extra degree of freedom, the time evolution of systems described by $\mathcal{F}(Q) \otimes \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ is discretized. We develop the scattering theory for such systems, and verify the presence of a new effect: transitions from an *in* state with energy E_α and an *out* state with energy $E_\beta \neq E_\alpha$ are now allowed, in contrast to the usual case. In fact, transitions take place whenever $E_\beta - E_\alpha = \frac{2\pi}{\theta}n$, with $n \in \mathbb{Z}$. The consequences of this result are investigated in the case of a one-dimensional delta barrier. Our analysis is based on the Born approximation for the transition matrix.

Resumo

Estudamos a Mecânica Quântica não-relativística de sistemas físicos caracterizados pela presença de um grau de liberdade extra, que não comuta com a coordenada temporal. Na linguagem da Geometria Não-Comutativa, tratamos de sistemas descritos por uma álgebra da forma $\mathcal{F}(Q) \otimes \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$, onde $\mathcal{F}(Q)$ é a álgebra de funções sobre o espaço de configurações usual Q e $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ é uma deformação de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$, conhecida como *cilindro não-comutativo*. Do ponto de vista geométrico, os geradores do cilindro não-comutativo correspondem à coordenada temporal e a uma coordenada espacial (extra) compacta, em analogia com o caso das teorias do tipo Kaluza-Klein. Mostramos que, como resultado da não-comutatividade entre o tempo e a dimensão extra, a evolução temporal dos sistemas descritos por $\mathcal{F}(Q) \otimes \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ é discretizada. Ao desenvolver a teoria de espalhamento para sistemas definidos nesse espaço-tempo, verificamos o aparecimento de um efeito inexistente no caso usual: transições entre um estado *in* com energia E_α e um estado *out* com energia $E_\beta \neq E_\alpha$ passam a ser possíveis. Mais especificamente, transições serão possíveis sempre que $E_\beta - E_\alpha = \frac{2\pi}{\theta}n$, com $n \in \mathbb{Z}$. As conseqüências desse fato são investigadas de maneira qualitativa, no caso específico de uma barreira uni-dimensional do tipo delta. Essa análise é baseada na aproximação de Born para a matriz de transição.

Sumário

Introdução	1
1 O Formalismo do Tempo Congelado para o Plano Não-Comutativo	9
1.1 Simetrias	11
1.1.1 Translações	11
1.1.2 O Grupo de Poincaré	14
1.1.3 Difeomorfismos	14
1.1.4 Simetrias Discretas	15
1.2 Representações	16
1.3 Funcionais Positivos e Produtos Internos	16
1.3.1 O Caso Comutativo	17
1.3.2 O Caso Não-Comutativo	22
1.3.3 Uma Aplicação Espectral	26
2 Evoluções Discretas	27
2.1 Revendo o Cilindro Comutativo	27
2.1.1 O Domínio do Operador Momento	31
2.2 O Cilindro Não-Comutativo	32
2.3 A Representação de Schrödinger	35
2.4 Automorfismos de Translação	38
2.5 Funcionais Positivos e Produtos Internos	39
2.6 A Equação de Schrödinger Discreta	41
3 Teoria Formal de Espalhamento	43
3.1 Formalismo Dependente do Tempo	43
3.1.1 Hamiltonianas e Espaços de Hilbert	44
3.1.2 Funções de Green	45
3.1.3 Operadores de Möller e Matriz de Espalhamento	54
3.2 Formalismo Independente do Tempo	57

3.2.1	Transformadas de Fourier no Tempo	57
3.2.2	Aproximação de Born	67
3.3	Conexão com o Formalismo Usual	67
4	Um Exemplo Simples	69
4.1	O Potential Delta Repulsivo	69
4.1.1	Matriz de Transição na Aproximação de Born	71
	Conclusão	74
A	O Problema de Auto-Valores	80
A.1	Auto-Vetores de $\hat{H}_1 = -\frac{\partial^2}{2M} + V\delta(x)$	80
A.2	Ortonormalidade	83
A.3	Transformadas de Fourier	86
A.4	Relação de Completeza	88
A.4.1	Cálculo de I_1	90
A.4.2	Cálculo de I_2	93

Introdução

Iniciamos esta introdução com uma apresentação informal do conteúdo desta Tese. Em primeiro lugar, estudamos sistemas quânticos cujos graus de liberdade estão associados a coordenadas não-comutativas. Além disso, substituímos a noção usual de tempo por uma *coordenada temporal não-comutativa*. Aqui encontramos a primeira questão abordada nesta Tese: a formulação da Mecânica Quântica sob a hipótese de não-comutatividade entre o tempo e o espaço. A resposta para essa questão é o *Formalismo do Tempo Congelado*¹, desenvolvido em detalhes na referência [1]. As contribuições originais desta Tese originam-se a partir da questão de como formular a Mecânica Quântica sob as hipóteses de (i) não-comutatividade entre o tempo e o espaço e (ii) existência de um grau de liberdade extra (em adição aos graus de liberdade usuais), descrito por uma coordenada não-comutativa compacta. Os primeiros resultados obtidos estão reunidos na referência [2]. A referência [3] resume as contribuições de [1] e [2].

A condição (ii) corresponde a um cenário do tipo Kaluza-Klein, desde que a coordenada compacta possa ser interpretada como uma dimensão espacial extra. Recordemos aqui a diferença entre espaço-tempo e espaço de configurações. Como exemplo ilustrativo, consideremos um sistema formado por 2 partículas distinguíveis movendo-se em um espaço-tempo da forma $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3$. Escolhido um referencial de Galileu, as seções espaciais (indexadas pelos valores da coordenada temporal usual t) são homeomorfas a \mathbb{R}^3 . Esse “espaço físico” é comum às 2 partículas. Por outro lado, um ponto no espaço de configurações deve conter informações sobre as posições das 2 partículas com relação ao sistema de coordenadas escolhido. Nesse caso, o espaço de configurações é homeomorfo a $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$.

A interpretação tipo Kaluza-Klein parece ser apropriada para o caso de um sistema cuja física desenvolve-se no espaço-tempo. Para sistemas descritos na linguagem hamiltoniana de graus de liberdade (onde o espaço de configurações é um conceito central), a coordenada não-comutativa compacta pode ser introduzida de maneira natural, através de um termo extra na Hamiltoniana do sistema, dependente apenas do grau de liberdade compacto. Apesar das observações acima, ao longo desta Tese faremos uso de expressões tais como espaço-tempo não-comutativo, não-comutatividade espaço-temporal, etc., em-

¹Tradução da expressão inglesa “Frozen Time Formalism”.

bora tenhamos em mente a interpretação de graus de liberdade em uma formulação hamiltoniana.

Modelos envolvendo coordenadas não-comutativas têm sido intensamente investigados nos últimos anos, destacadamente no contexto das teorias de campo. Há hoje na literatura uma série de artigos de revisão sobre o tema. A referência [4] pode servir como introdução e como guia para outras referências.

Historicamente, a proposta de substituição do espaço-tempo contínuo por uma estrutura discreta data da década de 1930 [5], tendo surgido no contexto da então incipiente Eletrodinâmica Quântica, cujo tratamento perturbativo desafiava os teóricos com o famoso problema dos infinitos [6]. Em termos simples, pode-se dizer que a origem desses infinitos reside no caráter local das interações entre os campos quânticos. A expectativa era que, em um espaço-tempo caracterizado por um *comprimento mínimo*, as interações entre os campos pudessem ser “deslocalizadas”, dando assim margem ao surgimento de um possível (e desejável) mecanismo regulador para as integrais mal-definidas.

É interessante notar o paralelo entre essa proposta e o desenvolvimento da própria Mecânica Quântica, onde a substituição das coordenadas clássicas x e p pelos geradores da álgebra de Heisenberg leva à dissolução do conceito de ponto no espaço de fases. Em termos não-rigorosos, costuma-se dizer que, no regime quântico, o espaço de fases torna-se uma rede, cujo parâmetro característico (a área de uma célula básica, no caso de um único grau de liberdade) é dado pelo valor numérico da constante de Planck. Algumas aplicações simples dessa idéia podem ser encontradas em [7].

Porém, conforme enfatizado por Madore [8], a idéia original de Heisenberg implicava no abandono da simetria de Lorentz. De fato, admitamos que o espaço-tempo seja discreto. Se pretendemos preservar a simetria de Lorentz, então devemos admitir a ação de uma transformação de Lorentz arbitrária nos pontos do espaço-tempo. Porém, como as transformações de Lorentz dependem de um parâmetro contínuo, vemos que a imagem de qualquer ponto da rede espaço-temporal é na verdade uma curva contínua no espaço de Minkowski usual, que é uma variedade diferenciável. Nesse caso específico, haveria uma incompatibilidade entre a simetria de Lorentz e a idéia de um espaço tempo caracterizado por um comprimento mínimo.

Em 1947 Snyder [9] encontrou uma maneira de combinar a simetria de Lorentz com uma noção de espaço-tempo na qual existe um comprimento mínimo. Sua abordagem consistiu em substituir as coordenadas comutativas do espaço-tempo por um conjunto de “coordenadas” não-comutativas. Apesar de ser compatível com a simetria de Lorentz, a álgebra de Snyder não admite translações como automorfismos. Outra referência do período é o trabalho de Yang [10], no qual considerou-se uma álgebra de coordenadas não-comutativas que admitia translações como simetrias, mas não era compatível com a simetria de Lorentz.

A álgebra não-comutativa considerada por Snyder tem como geradores as quatro co-

ordenadas não-comutativas do espaço-tempo, os três geradores do grupo de rotações e os três geradores dos *boosts* de Lorentz. É oportuno mencionar que recentemente alguns autores [11, 12] consideraram álgebras não-comutativas semelhantes à álgebra estudada por Snyder. Essas álgebras emergem naturalmente do estudo de um sistema de partículas interagindo gravitacionalmente em (2+1) dimensões.

Não muito posteriormente a essas primeiras iniciativas, sobreveio a era das teorias de campo renormalizáveis. É provável que esse fato tenha sido responsável pelo hiato relativamente longo que podemos observar entre os trabalhos iniciais da década de 1930 e o ressurgimento do interesse da comunidade teórica pelas teorias não-comutativas. Boa parte do interesse atual tem origem no resultado obtido por Seiberg e Witten em [13]. Esses autores mostraram que o limite de baixas energias de certos modelos de teoria de cordas correspondem a teorias de calibre não-comutativas.

Vale mencionar que o estudo da teoria quântica em espaços com coordenadas não-comutativas constitui uma extensão da zona de influência mútua entre a Física e a Matemática. Algumas idéias e métodos utilizados nesse contexto têm sua origem na Geometria Não-Comutativa ([8, 14, 15]), que consiste em uma generalização da Geometria. A “filosofia” da Geometria Não-Comutativa consiste em formular os conceitos geométricos em uma linguagem algébrica, para então assumir (por hipótese) a extensão do domínio de validade desses conceitos.

Como exemplo ilustrativo, consideremos uma variedade diferenciável M . Podemos associar a M o espaço $C^\infty(M)$ das funções infinitamente diferenciáveis sobre M . Munido do produto pontual entre funções, $C^\infty(M)$ torna-se uma álgebra comutativa. As estruturas geométricas de M refletem-se em estruturas algébricas de $C^\infty(M)$. De posse dessa formulação algébrica da Geometria, a “passagem” para a Geometria Não-Comutativa consiste essencialmente na substituição de $C^\infty(M)$ por uma álgebra não-comutativa \mathcal{A} . Em alguns exemplos específicos, \mathcal{A} corresponde a uma deformação contínua de $C^\infty(M)$, mas também podemos considerar outros exemplos, que não necessariamente possuem um análogo comutativo. Observamos também que \mathcal{A} nem sempre pode ser interpretada como uma álgebra de funções coordenadas, no sentido usual. Assim, a Geometria Não-Comutativa constitui de fato uma generalização da Geometria: a álgebra \mathcal{A} não descreve um espaço não-comutativo subjacente (no sentido em que $C^\infty(M)$ descreve M), devendo na verdade ser identificada com a própria noção de espaço não-comutativo que se pretende descrever. No desenvolvimento desta Tese nós adotaremos essa postura. Se à primeira vista essa idéia parecer abstrata, devemos recordar a sua similaridade com a quantização do espaço de fases na Mecânica Quântica, representada pela substituição das coordenadas x e p da Mecânica Clássica pelos geradores \hat{x} e \hat{p} da álgebra de Heisenberg.

Esse vasto programa de pesquisas tem levantado questões importantes acerca dos fundamentos físicos e matemáticos subjacentes às teorias baseadas em coordenadas não-comutativas. Técnicas pertencentes à diagramática de Feynman têm sido aplicadas no

estudo dos aspectos perturbativos de Teorias de Campo Não-Comutativas [16]. Outras questões centrais têm sido estudadas, sendo motivo de debates entre diferentes abordagens. Vide, por exemplo, a questão acerca da unitariedade das Teorias de Campo Não-Comutativas [17]. Algumas propostas de solução para esse problema podem ser encontradas na literatura. Em [18], por exemplo, considera-se uma modificação da teoria de perturbações, visando a obtenção de uma teoria de campos unitária.

Uma abordagem independente para teorias não-comutativas tem sido desenvolvida por Doplicher, Fredenhagen e seus colaboradores. Nessa abordagem a Teoria de Campos é unitária. Em [19] Doplicher et al. argumentam que a combinação de conceitos da Teoria Quântica de Campos com conceitos de Relatividade Geral levam a limitações do conceito de *localização* espaço-temporal. Em termos não rigorosos, tomando como base o princípio da incerteza de Heisenberg, argumenta-se que o processo de localização, caracterizado por uma incerteza Δx_μ na μ -ésima coordenada do espaço-tempo, envolve uma transferência de momento (para o sistema) da ordem de $\hbar/\Delta x_\mu$ na direção correspondente, o que por sua vez implica em uma transferência de energia. Por outro lado, de acordo com a Relatividade Geral, energia gera curvatura no espaço-tempo. Adotando a versão linearizada das Equações de Einstein, Doplicher et al. estimaram os efeitos gravitacionais oriundos desse processo de medida, obtendo assim as relações de desigualdades entre as incertezas nas medidas das coordenadas. Esses autores postularam então as seguintes regras de comutação para as coordenadas do espaço-tempo:

$$[\hat{x}_\mu, \hat{x}_\nu] = i\theta_{\mu\nu}\mathbb{I}, \quad (1)$$

onde $\theta_{\mu\nu}$ são constantes da ordem do quadrado do comprimento de Planck.

Os comutadores em (1) geram uma álgebra não-comutativa cujos elementos (estados) são caracterizados por incertezas Δx_μ compatíveis com as relações de incerteza obtidas em [19]: a noção de incerteza aqui é análoga à da Mecânica Quântica, ou seja, trata-se da variância do operador \hat{x}_μ no estado que descreve o sistema.

Nossa abordagem da Física Quântica em espaços não-comutativos foi inspirada no trabalho de Doplicher et al.. Conforme já alertamos, essa abordagem possibilita a construção de teoria unitárias, mesmo no caso em que a coordenada temporal não comuta com as coordenadas espaciais.

Na sua formulação canônica, a Mecânica Quântica é uma teoria de operadores em espaços de Hilbert. Em particular, na descrição de Schrödinger o espaço de Hilbert dos estados físicos é tomado como sendo $L^2(Q)$, o espaço das funções complexas de quadrado integrável sobre o espaço de configurações Q , com produto interno dado por:

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int_Q dq \overline{\psi(q)} \phi(q), \quad (2)$$

onde q denota um elemento genérico de Q e dq denota a medida de integração em Q .

Embora tenhamos omitido, as funções de onda em (2) podem carregar um índice t_0 , referente ao instante de tempo inicial.

Consideremos agora a dinâmica de um tal sistema, controlada pela equação de Schrödinger. Seja $\psi(q, t_0)$ a função de onda no instante inicial t_0 . Após um intervalo de tempo arbitrário $\Delta t = t - t_0$, a função de onda será dada por

$$\psi(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\psi(q, t_0), \quad (3)$$

onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano (suposto ser independente do tempo) do sistema em questão. No caso em que \hat{H} depende explicitamente do tempo, a equação (3) deve ser generalizada: em lugar de uma exponencial simples, temos uma exponencial temporalmente ordenada. Costuma-se dizer que o tempo comparece em (3) como um parâmetro.

O produto interno entre funções de onda *evoluídas* é também dado por (2), com $\psi(q)$ substituída pela função evoluída $\psi(q, t)$. Devido à Hermiticidade de \hat{H} (que implica na unitariedade de $e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}$), segue que

$$\int_Q dq \overline{\psi(q, t)} \phi(q, t) = \int_Q dq \overline{\psi(q)} \phi(q), \quad (4)$$

o que mostra que a evolução temporal é uma isometria em $L^2(Q)$.

As considerações acima ilustram o fato de que instantes de tempo podem ser identificados com intervalos de tempo, sem prejuízo algum. De fato, podemos escolher $t_0 = 0$, de modo que o intervalo de tempo Δt satisfaz $\Delta t = t - t_0 = t$. Em outras palavras, o parâmetro da evolução temporal Δt pode ser identificado com a própria coordenada temporal, cujos valores são denotados por t , e cuja função é identificar as superfícies de simultaneidade na teoria não-relativística. A importância dessas observações reside no fato de que, no caso não-comutativo, o tempo (coordenada temporal) é definido como sendo um operador agindo em um espaço de Hilbert. Assim, no caso não-comutativo não poderemos realizar a identificação descrita acima.

Após analisar o papel do tempo na Mecânica Quântica, vamos lançar um olhar diferente sobre o espaço de configurações Q . Por simplicidade, vamos adotar $Q \simeq \mathbb{R}^D$. Uma função de onda $\psi : Q \rightarrow \mathbb{C}$ pode ser vista como um elemento da álgebra $\mathcal{F}(Q)$ de funções (complexas) sobre o espaço de configurações Q . A álgebra $\mathcal{F}(Q)$ é gerada por funções coordenadas, definidas por:

$$\hat{x}_i(\vec{x}) = x_i, \quad (5)$$

onde $\vec{x} = (x_1, \dots, x_D)$. Elementos de $\mathcal{F}(Q)$ podem ser expressos como “combinações lineares contínuas” das coordenadas \hat{x}_i . De maneira geral podemos escrever:

$$\psi = \int dk \tilde{\psi}(k) e^{i \sum_i k_i \hat{x}_i}. \quad (6)$$

A interpretação de (6) é a seguinte: se \vec{y} representa uma configuração qualquer do sistema, então temos:

$$\psi(\vec{y}) = \left(\int dk \tilde{\psi}(k) e^{i \sum_i k_i \hat{x}_i} \right) (\vec{y}) = \int dk \tilde{\psi}(k) e^{i \vec{k} \cdot \vec{y}}, \quad (7)$$

o que nos permite fazer a conexão com a notação tradicional, na qual as funções de onda são escritas na base das ondas planas (representação de Fourier).

Conforme já adiantamos, é possível formular a Mecânica Quântica de uma tal forma que o tempo é definido como sendo um operador agindo em um espaço de Hilbert, da mesma maneira que as coordenadas do espaço de configurações. Conforme já dissemos, as bases desse *Formalismo do Tempo Congelado* podem ser encontradas na referência [1].

O formalismo de tempo congelado é o mais indicado para o estudo da não-comutatividade entre o tempo e o espaço. Consideremos o caso particular em que apenas uma das coordenadas espaciais não comuta com a coordenada temporal. Esse caso preserva a característica sob estudo, isto é, a não-comutatividade do tipo tempo-espaço, além de permitir um tratamento matemático simplificado. As coordenadas espaciais remanescentes são incorporadas à descrição algébrica do sistema de maneira simples: a álgebra comutativa gerada por essas coordenadas aparece como um fator (tensorial) extra, multiplicando a álgebra gerada pelas coordenadas não-comutativas. No caso bi-dimensional teremos uma especialização da relação (1):

$$[\hat{x}_0, \hat{x}_1] = i\theta \mathbb{I}, \quad (8)$$

onde assume-se, sem perda de generalidade, que $\theta > 0$, dado que pode-se mudar o sinal dessa constante fazendo $\hat{x}_1 \rightarrow -\hat{x}_1$ (a álgebra gerada por \hat{x}_0 e \hat{x}_1 é isomorfa à álgebra gerada por \hat{x}_0 e $-\hat{x}_1$).

A álgebra unital gerada por \hat{x}_0 e \hat{x}_1 com regra de comutação (8) é chamada de plano não-comutativo, sendo denotada por $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$.

De maneira análoga ao caso da Mecânica Quântica, a regra de comutação (8) leva a um *princípio de incerteza*, válido em qualquer representação de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. Isso significa dizer que os estados físicos possuem uma dispersão no espectro da coordenada temporal. Esse fato eventualmente leva à violação da causalidade em teorias quânticas não-comutativas (ver [20] para uma discussão sobre esse aspecto da teoria). Apesar dessa observação, mencionamos que no formalismo de tempo congelado o operador \hat{x}_0 não é um observável, isto é, não preserva o espaço de Hilbert dos estados físicos (apesar de ser “ingenuamente” hermitiano). Esse aspecto será discutido na seção 1.3 desta Tese.

Em [2] deu-se prosseguimento ao programa iniciado em [1]. Nessa referência estudamos alguns exemplos de espaços não-comutativos nos quais a evolução temporal é dada pela ação de um grupo discreto no espaço dos estados quânticos. O exemplo mais simples da classe de espaços estudados em [2] é o cilindro não-comutativo, denotado por $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$. Essa álgebra pode ser vista como sendo gerada por \hat{x}_0 e pela exponencial imaginária de

\hat{x}_1 , isto é, $e^{i\hat{x}_1}$. A regra de comutação entre os geradores do cilindro não-comutativo segue diretamente de (8):

$$e^{i\hat{x}_1} \hat{x}_0 = \hat{x}_0 e^{i\hat{x}_1} + \theta e^{i\hat{x}_1}. \quad (9)$$

Os elementos de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ são elementos do plano não-comutativo invariantes por translações da forma $\hat{x}_1 \rightarrow \hat{x}_1 + 2\pi n\mathbb{I}$, com $n \in \mathbb{Z}$.

A relação (9) leva à seguinte consequência: o espectro da coordenada temporal \hat{x}_0 em uma representação irredutível de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ é discreto (parametrizado por \mathbb{Z}). Segue desse fato o primeiro resultado importante de [2]: a evolução temporal é dada por um grupo discreto de operadores unitários. Por sua vez, a evolução discreta dá origem a um efeito físico muito interessante no contexto da teoria de espalhamento, constituindo-se no resultado mais importante de [2]: diferentemente do caso usual, a probabilidade de transição entre um estado inicial com energia E_i e um estado final com energia $E_f \neq E_i$ é não-nula, mesmo no caso em que a Hamiltoniana total do sistema é independente do tempo. De fato, existirão transições desde que a seguinte regra de seleção seja satisfeita: $E_f - E_i = N \frac{2\pi}{\theta}$, com $N \in \mathbb{Z}$.

A organização desta Tese é a seguinte. No capítulo 1 apresentamos de maneira detalhada o formalismo do tempo congelado para a Mecânica Quântica Não-Comutativa (não-relativística). Iniciamos esse capítulo formulando a Mecânica Quântica não-relativística na linguagem do tempo congelado, visando assim exemplificar os principais aspectos dessa construção em um exemplo simples, que será então tomado como referência para a generalização que se seguirá, quando as mesmas idéias forem aplicadas ao caso do plano não-comutativo.

No capítulo 2 estudamos a álgebra do cilindro não-comutativo. Estudamos o espectro da coordenada temporal nas representações unitárias irredutíveis dessa álgebra, verificando que a estrutura desse espectro é discreta, com um intervalo de tempo mínimo proporcional à constante característica da não-comutatividade espaço-temporal. Em seguida estudamos os automorfismos do cilindro não-comutativo, obtendo como resultado a discretização das translações temporais.

No capítulo 3 desenvolvemos a Teoria Formal de Espalhamento para o caso dos espaços não-comutativos com evolução temporal discreta. Consideramos o caso de um espaço de configurações da forma $Q \times S^1$, onde Q é um espaço de configurações usual (Q descreve os graus de liberdade de um sistema quântico usual). Iniciamos o capítulo com o formalismo dependente do tempo, onde introduzimos as definições de estados *in* e *out*, de funções de Green, de operadores de Möller (ou operadores de onda), de operador de espalhamento e de matriz de espalhamento. Em seguida, apresentamos o formalismo independente do tempo, centrado no cálculo da matriz de transição, que determina diretamente a matriz de espalhamento. Ao estudar a matriz de transição, nós provamos que a condição “on shell” para esse operador, válida na Mecânica Quântica, deve ser generalizada no caso de evoluções discretas. De fato, as probabilidades associadas a transições que não conservam

a energia são diferentes de zero. A única condição a ser satisfeita é que a diferença entre as energias do estado *in* e do estado *out* sejam múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{\theta}$, onde θ é o parâmetro não-comutativo em (8).

No capítulo 4 estudamos o problema do espalhamento para o caso da Hamiltoniana de uma partícula movendo-se em um espaço bi-dimensional da forma $\mathbb{R} \times S^1$, sob a influência de uma barreira de potencial delta ao longo da dimensão “aberta” \mathbb{R} . A dimensão compacta S^1 constitui uma dimensão extra que não comuta com o tempo. Assim, esse sistema corresponde a um caso particular da situação geral estudada no capítulo 3. Esse modelo serve como exemplo ilustrativo, a partir do qual podemos inferir o comportamento qualitativo esperado em situações fisicamente mais realistas. Nossa análise do problema é baseada na aproximação de Born para a matriz de transição. Verificamos que a probabilidade associada a transições que não conservam a energia decresce rapidamente com o aumento da “distância” entre a energia inicial e a energia final.

Capítulo 1

O Formalismo do Tempo Congelado para o Plano Não-Comutativo

O objetivo deste capítulo é apresentar o formalismo do tempo congelado para sistemas quânticos, conforme descrito na referência [1]. A expressão *tempo congelado* não se refere a sistemas estáticos. De fato, o formalismo é plenamente aplicável, por exemplo, à Mecânica Quântica usual, onde a evolução temporal é controlada pela equação de Schrödinger.

A idéia por trás desse formalismo é formular a Teoria Quântica de tal forma que o papel do tempo seja exercido por uma coordenada temporal não-comutativa. Em outras palavras, definiremos o tempo como sendo um operador agindo em um espaço de Hilbert. Nesse formalismo, a coordenada temporal e as coordenadas espaciais são tratadas da mesma maneira. Em conjunto, eles geram uma álgebra não-comutativa, chamada de espaço-tempo não-comutativo.

Essas idéias não constituem uma novidade em Física. De fato, nossa abordagem é inteiramente baseada nas referências [19]. Recordemos que Doplicher et al. postularam a regra de comutação

$$[\hat{x}_\mu, \hat{x}_\nu] = i\theta_{\mu\nu}\mathbb{I}, \quad (1.1)$$

com o objetivo de reproduzir certas desigualdades (obtidas *heurísticamente*) envolvendo as incertezas nas medidas das coordenadas de uma partícula. Essas desigualdades constituem uma espécie de princípio da incerteza para a medida dessas coordenadas. Recordemos também que a matriz $\theta_{\mu\nu}$ que controla a não-comutatividade do espaço-tempo é totalmente geral, isto é, a não ser pelo requerimento de ser uma matriz anti-simétrica, os elementos de matriz $\theta_{\mu\nu}$ não obedecem a nenhuma restrição. Nesse sentido, a não-comutatividade considerada em [19] é mais geral do que aquela proveniente do limite de baixas energias da Teoria de Cordas. Nesse último caso, a unitariedade das teorias de calibre não-comutativas requer que tenhamos $\theta_{0i} = 0$, fato esse que permite a manutenção da noção usual (comutativa) de tempo.

Em virtude da generalidade da matriz da não-comutatividade (o que inclui o caso em que $\theta_{0i} \neq 0$), somos levados à questão de como formular de maneira adequada as noções de translação temporal e de evolução temporal para o caso não-comutativo. A coordenada temporal, sendo um operador, não pode ser identificada com o parâmetro de evolução temporal, como fazemos no caso comutativo.

A resposta para a pergunta formulada acima pode ser obtida se recordarmos o papel das translações espaciais na Mecânica Quântica. No caso de 1 dimensão espacial, as translações são geradas pelo operador momento \hat{p} , que na representação de Schrödinger escreve-se: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. O operador de translação $U(\xi) = e^{i\frac{\xi}{\hbar}\hat{p}}$ age nas funções de onda da seguinte maneira:

$$[U(\xi)\psi](x) = \left[e^{\xi \frac{\partial}{\partial x}} \psi \right](x) = \psi(x) + \xi \frac{d\psi}{dx}(x) + \frac{\xi^2}{2!} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \dots = \psi(x + \xi), \quad (1.2)$$

que segue da definição de série de Taylor.

Podemos calcular o efeito de uma translação sobre o operador de posição da partícula, denotado por \hat{x} . Para tanto, vamos fazer uso da *série de Lie* [21, 22]. Esse resultado matemático estabelece que, se A e B são elementos de uma álgebra associativa, então vale a seguinte identidade:

$$e^A B e^{-A} = B + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \underbrace{[A, [A, \dots, [A, B]]]}_{m \text{ vezes}} =: e^{[A, \cdot]} B. \quad (1.3)$$

Lembrando a regra de comutação

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbb{I}, \quad (1.4)$$

podemos escrever:

$$e^{i\frac{\xi}{\hbar}\hat{p}} \hat{x} e^{-i\frac{\xi}{\hbar}\hat{p}} = e^{i\frac{\xi}{\hbar}[\hat{p}, \cdot]} \hat{x} = \hat{x} + i\frac{\xi}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] - \frac{\xi^2}{2\hbar^2}[\hat{p}, [\hat{p}, \hat{x}]] + \dots = \hat{x} + \xi. \quad (1.5)$$

A equação (1.5) sugere a resposta para a pergunta de como formular matematicamente a noção de translação temporal na Mecânica Quântica Não-Comutativa. Assim, se \hat{x}_0 denota a coordenada temporal do espaço-tempo não-comutativo, definimos a translação temporal de τ unidades de tempo como sendo a transformação

$$U(\tau)\hat{x}_0 = \hat{x}_0 + \tau \mathbb{I}. \quad (1.6)$$

No caso específico em que apenas uma das coordenadas espaciais (\hat{x}_1) não comuta com a coordenada temporal, a regra de comutação que define o espaço-tempo não-comutativo escreve-se:

$$[\hat{x}_0, \hat{x}_1] = i\theta \mathbb{I}. \quad (1.7)$$

Deve-se notar a similaridade entre (1.7) e (1.4). Esse fato sugere que usemos \hat{x}_1 como o “conjugado” de \hat{x}_0 , isto é, como o operador que gera as translações temporais (1.6). Por outro lado, a mesma relação (1.7) implica que \hat{x}_0 pode ser usado como gerador das translações espaciais, isto é, translações agindo em \hat{x}_1 . Na próxima seção estudaremos as translações espaço-temporais de maneira mais detalhada, sob o ponto de vista dos automorfismos de (1.7).

1.1 Simetrias

Na Mecânica Quântica Não-Comutativa os estados vetoriais (funções de onda) são elementos da álgebra gerada pelas coordenadas não-comutativas. Nesse contexto as simetrias associadas aos sistemas físicos correspondem aos automorfismos dessa álgebra. No caso específico dos sistemas baseados na álgebra do plano não-comutativo, as operações de simetria devem preservar a relação definidora (1.7). Nesta seção estudamos os automorfismos de (1.7), mencionando alguns resultados recentes da literatura.

1.1.1 Translações

Começamos falando sobre a simetria mais importante para nossos propósitos, que possibilitará a formulação da Mecânica Quântica Não-Comutativa em moldes análogos ao da Mecânica Quântica. Conforme já enfatizado, a operação de translação temporal é particularmente interessante, pois permite a noção de passagem do tempo no formalismo do tempo congelado. Além disso, essa operação exerce um papel fundamental na construção do espaço de Hilbert dos estados físicos, conforme veremos nas seções 1.3 e 2.5. Por sua vez, a operação de translação espacial possibilitará a introdução da noção de momento.

As translações espaço-temporais $\mathcal{U}(\vec{a})$, $\vec{a} = (a_0, a_1) \in \mathbb{R}^2$, definidas por:

$$\mathcal{U}(\vec{a})\hat{x}_\mu = \hat{x}_\mu + a_\mu\mathbb{I}, \quad (1.8)$$

são automorfismos de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. De fato, verifica-se por aplicação direta da definição (1.8) que a seguinte propriedade é válida:

$$[\mathcal{U}(\vec{a})\hat{x}_\mu, \mathcal{U}(\vec{a})\hat{x}_\nu] = i\theta\varepsilon_{\mu\nu}, \quad (1.9)$$

onde $\varepsilon_{\mu\nu}$ é o símbolo de anti-simetria em duas dimensões, definido por:

$$\varepsilon_{01} = -\varepsilon_{10} = 1 \quad , \quad \varepsilon_{00} = \varepsilon_{11} = 0.$$

O automorfismo de translação temporal $U(\tau)$ (mencionado no início deste capítulo) é definido por:

$$\begin{aligned} U(\tau) &:= \mathcal{U}((\tau, 0)) \ , \\ U(\tau)\hat{x}_0 &= \hat{x}_0 + \tau\mathbb{I}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

em conformidade com (1.6).

Alertamos que a noção de *evolução temporal* é mais restrita que a de translação temporal. Esta é de natureza geométrica (no sentido do Cálculo, embora aqui tenhamos em mente a generalização do Cálculo para o caso de espaços não-comutativos). Assim, podemos dizer que a translação temporal é uma noção cinemática.

Por outro lado, a evolução temporal é uma ação realizada sobre um espaço de estados físicos (um espaço de Hilbert, no caso quântico). Portanto, para que se possa falar em dinâmica é necessário identificar um espaço de Hilbert de estados. Nesse espaço a translação temporal reduz-se à evolução temporal, dada pela ação de operadores unitários (operadores de evolução). A seção 1.3 é dedicada a essa discussão.

Os geradores infinitesimais de $\mathcal{U}(\vec{a})$ são definidos através de

$$\mathcal{U}(a_0, a_1) = e^{-ia_0\hat{P}_0 + ia_1\hat{P}_1}. \quad (1.11)$$

Pode-se verificar que

$$\hat{P}_0 = -\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1} \text{ e } \hat{P}_1 = -\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0}, \quad (1.12)$$

onde a ação adjunta $\text{ad}_{(\cdot)}(\cdot) : \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2) \times \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2) \rightarrow \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ é definida por:

$$\text{ad}_{\hat{x}_\mu}\hat{a} := [\hat{x}_\mu, \hat{a}]. \quad (1.13)$$

De fato, verifica-se que $-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0}$ age como $-i\partial_1$, enquanto que $-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1}$ age como $i\partial_0$:

$$-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0}\hat{x}_1 = -i \quad \text{e} \quad -\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1}\hat{x}_0 = i. \quad (1.14)$$

(Aqui a expressão “age como” deve ser entendida como uma analogia com os operadores diferenciais do caso comutativo.)

Note-se ainda que $\text{ad}_{\hat{x}_0}$ e $\text{ad}_{\hat{x}_1}$ comutam. De fato, consideremos a identidade de Jacobi:

$$[\hat{a}, [\hat{x}_0, \hat{x}_1]] + [\hat{x}_1, [\hat{a}, \hat{x}_0]] + [\hat{x}_0, [\hat{x}_1, \hat{a}]] = 0, \quad (1.15)$$

onde \hat{a} é um elemento genérico do plano não-comutativo. Usando (1.7) e (1.13) obtemos:

$$\begin{aligned} & [\hat{a}, i\theta] - [\hat{x}_1, \text{ad}_{\hat{x}_0}\hat{a}] + [\hat{x}_0, \text{ad}_{\hat{x}_1}\hat{a}] = 0 \Rightarrow \\ & \Rightarrow \text{ad}_{\hat{x}_0}\text{ad}_{\hat{x}_1}\hat{a} = \text{ad}_{\hat{x}_1}\text{ad}_{\hat{x}_0}\hat{a}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Usando (1.14) e (1.16) vemos que os operadores diferenciais não-comutativos $-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_\mu}$ agem no plano não-comutativo da mesma maneira que os seus análogos do caso usual agem em $C^\infty(\mathbb{R}^2)$, de modo que a exponencial

$$e^{-ia_0(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1}) + ia_1(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0})} \quad (1.17)$$

age como um operador de translação de a_0 unidades na direção do tempo e a_1 unidades na direção do espaço, isto é:

$$e^{-ia_0(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1})+ia_1(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0})} = U(a_0, a_1) \equiv e^{-ia_0\hat{P}_0+ia_1\hat{P}_1}, \quad (1.18)$$

de onde segue a identificação em (1.12).

Usando (1.12) e (1.16) podemos escrever:

$$[\hat{P}_0, \hat{P}_1] = 0. \quad (1.19)$$

Os automorfismos de translação espaço-temporal são automorfismos internos¹. Considere a série de Lie (equação (1.3)). Podemos expressá-la em termos da ação adjunta definida em (1.13). É conveniente denotar a exponencial de $\text{ad}_{\hat{\beta}}$ pelo símbolo $\text{Ad}_{\hat{\beta}}$:

$$\text{Ad}_{\hat{\beta}} = e^{\text{ad}_{\hat{\beta}}}, \quad (1.20)$$

de modo que podemos escrever:

$$\text{Ad}_{\hat{\beta}}\hat{\alpha} = e^{\text{ad}_{\hat{\beta}}}\hat{\alpha} = \hat{\alpha} + [\hat{\beta}, \hat{\alpha}] + \frac{1}{2!}[\hat{\beta}, [\hat{\beta}, \hat{\alpha}]] + \dots. \quad (1.21)$$

Fazendo uso de (1.3) chegamos a:

$$\text{Ad}_{\hat{\beta}}\hat{\alpha} = e^{\hat{\beta}}\hat{\alpha}e^{-\hat{\beta}}. \quad (1.22)$$

Note-se agora que $\text{ad}_{(\cdot)}(\cdot)$ é uma aplicação bi-linear (linear nos dois argumentos), em virtude da bilinearidade do comutador. Temos então que $\text{ad}_{(\cdot)}\hat{\alpha}$ é linear, isto é:

$$a \text{ad}_{\hat{\beta}}\hat{\alpha} + b \text{ad}_{\hat{\gamma}}\hat{\alpha} = \text{ad}_{a\hat{\beta}+b\hat{\gamma}}\hat{\alpha}. \quad (1.23)$$

Em virtude de (1.22) e (1.23), a translação espaço-temporal $\mathcal{U}(a_0, a_1)$ pode ser escrita como uma conjugação pela exponencial de um elemento da própria álgebra:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(a_0, a_1)\hat{\alpha} &= e^{-ia_0(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_1})+ia_1(-\frac{1}{\theta}\text{ad}_{\hat{x}_0})}\hat{\alpha} = e^{\text{ad}_{\frac{i}{\theta}(a_0\hat{x}_1-a_1\hat{x}_0)}}\hat{\alpha} = \\ &= \text{Ad}_{\frac{i}{\theta}(a_0\hat{x}_1-a_1\hat{x}_0)}\hat{\alpha} = e^{\frac{i}{\theta}(a_0\hat{x}_1-a_1\hat{x}_0)}\hat{\alpha}e^{-\frac{i}{\theta}(a_0\hat{x}_1-a_1\hat{x}_0)}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

razão pela qual esse automorfismo é chamado de “interno”.

¹Tradução da expressão inglesa *Inner Automorphisms*.

1.1.2 O Grupo de Poincaré

É um fato bastante noticiado na literatura que a álgebra de coordenadas não-comutativas satisfazendo (1.1) não admite o grupo de Lorentz como grupo de simetrias no caso de um espaço-tempo não-comutativo quadri-dimensional (em (2+1) dimensões o grupo de Lorentz preserva (1.1), conforme mostrado em [1]).

Em [23] aprendemos que existe um sub-grupo abeliano do grupo de Lorentz que preserva (1.1) em quatro dimensões. Porém, conforme enfatizado por Chaichain et al. [24], essa simetria relativística residual apresenta limitações do ponto de vista interpretativo. De fato, as representações irredutíveis de um grupo abeliano são unidimensionais, fato esse que impede a classificação das partículas no sentido do Teorema de Wigner [25]. Em outras palavras, o conteúdo de partícula das teorias não-comutativas com a simetria residual aventada em [23] é muito diferente do conteúdo de partícula das teorias de campos relativísticas usuais. Em particular, somente partículas com *spin* 0 seriam permitidas no caso não-comutativo com simetria residual. Além disso, o limite comutativo de tais teorias parece representar uma indesejável perda de simetria no nível clássico [24].

Seguindo uma abordagem diferente [24], Chaichian et al. mostraram que é possível introduzir uma noção generalizada de simetria relativística para as teorias de campo não-comutativas baseadas na regra de comutação (1.7). De maneira independente, Wess et al. [26] formularam a mesma idéia. A idéia central de [24] e [26] consiste em modificar a maneira como os elementos do grupo de Poincaré agem em um produto de campos de uma teoria não-comutativa², de modo que a ação modificada (deformada) seja compatível com (1.1). É importante mencionar que a construção em [24] e [26] envolve de maneira essencial os geradores das translações, de modo que a noção generalizada de simetria relativística envolve o grupo de Poincaré (Lorentz + Translações).

Uma característica importante da construção em [24] e [26] é que tanto as regras de comutação entre os geradores do grupo de Poincaré quanto os seus *operadores de Casimir* são preservados pelo processo de deformação. Como resultado, a teoria de representações (e em particular o conteúdo de partícula) é a mesma das teorias de campo relativísticas no espaço-tempo comutativo.

1.1.3 Difeomorfismos

Por difeomorfismos entende-se transformações gerais de coordenadas, ou seja, transformações da forma $\hat{x}_\mu \rightarrow \hat{x}_\mu + \delta\hat{x}_\mu$, onde $\delta\hat{x}_\mu = \delta\hat{x}_\mu(\hat{x}_0, \dots, \hat{x}_{d-1})$, sendo d a dimensão do espaço-tempo. Como os campos da teoria não-comutativa são elementos da álgebra gerada pelas coordenadas \hat{x}_μ , esses campos transformam-se sob transformações gerais de coorde-

²Os campos de uma teoria não-comutativa são elementos da álgebra gerada pelas coordenadas não-comutativas.

nadas. De maneira geral, essas transformações não são compatíveis com (1.1), de modo que difeomorfismos não constituem simetrias da teoria não-comutativa. Na referência [26] os autores mostraram ser possível deformar a ação do grupo de difeomorfismos no produto de campos de uma teoria não-comutativa, de modo a preservar (1.1). Obtém-se assim uma noção generalizada de co-variância por transformações gerais de coordenadas. Em [26] essa idéia foi aplicada à construção de uma teoria de gravidade em espaços não-comutativos.

Em [26] a simetria (deformada) de Poincaré corresponde a um caso particular da simetria (deformada) associada aos difeomorfismos.

Nota: Alertamos que nesta Tese trataremos apenas de sistemas não-relativísticos, de modo que a discussão acima sobre o grupo de Poincaré e o grupo de difeomorfismos é meramente informativa.

1.1.4 Simetrias Discretas

Nesta seção nos restringiremos a um espaço-tempo bi-dimensional, com regra de comutação dada por (1.7).

A inversão temporal é a aplicação anti-linear definida por:

$$T : \hat{x}_0 \mapsto -\hat{x}_0, \quad T : \hat{x}_1 \mapsto \hat{x}_1. \quad (1.25)$$

A anti-linearidade de T implica que

$$T : i\theta\mathbb{I} \mapsto -i\theta\mathbb{I}, \quad (1.26)$$

de modo que T preserva (1.7):

$$T : [\hat{x}_0, \hat{x}_1] \mapsto -[\hat{x}_0, \hat{x}_1], \quad T : i\theta\mathbb{I} \mapsto -i\theta\mathbb{I}. \quad (1.27)$$

Dessa forma, semelhantemente ao caso usual [21], essa transformação está associada a uma simetria da teoria não-comutativa.

Por sua vez, a transformação de paridade é a aplicação linear definida por:

$$P : \hat{x}_0 \mapsto \hat{x}_0, \quad P : \hat{x}_1 \mapsto -\hat{x}_1, \quad (1.28)$$

de modo que P não preserva o comutador (1.7):

$$P : [\hat{x}_0, \hat{x}_1] \mapsto -[\hat{x}_0, \hat{x}_1], \quad P : i\theta\mathbb{I} \mapsto i\theta\mathbb{I}, \quad (1.29)$$

não sendo portanto uma simetria da teoria não-comutativa.

Em virtude de (1.29), as teorias baseadas em (1.1) ou (1.7) violam P e PT . Para uma discussão sobre a simetria CPT, indica-se a leitura de [27], onde argumenta-se em favor da preservação dessa simetria em teorias de campo não-comutativas.

1.2 Representações

A álgebra $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ definida por (1.7) é o cenário da teoria quântica no nosso formalismo. Conceitos como estados, observáveis, evolução temporal, serão todos construídos a partir de elementos desse espaço e de ações sobre esses elementos. Para desenvolver essas noções utilizamos idéias da abordagem algébrica para a teoria quântica. Para uma introdução a essas idéias recomendamos [19], [28] e [29], embora exista uma rica literatura nesse campo.

Antes de mais nada devemos mencionar que $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ é uma álgebra $*$, onde a operação de *involução* é a aplicação anti-linear definida por:

$$\hat{x}_\mu^* = \hat{x}_\mu. \quad (1.30)$$

A primeira noção que trataremos aqui é a de operadores de multiplicação agindo em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. Em se tratando de uma álgebra não-comutativa, faz diferença se os operadores agem à esquerda ou à direita dos elementos da álgebra. Para cada $\hat{\alpha} \in \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ associamos os operadores de multiplicação à esquerda e à direita, denotados respectivamente por $\hat{\alpha}^L$ e $\hat{\alpha}^R$, e definidos por:

$$\hat{\alpha}^L \hat{\beta} = \hat{\alpha} \hat{\beta} \quad , \quad \hat{\alpha}^R \hat{\beta} = \hat{\beta} \hat{\alpha}, \quad (1.31)$$

para todo $\hat{\beta} \in \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$.

A associação $\hat{\alpha} \mapsto \hat{\alpha}^L$ define uma representação de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$:

$$\hat{\alpha}^L \hat{\beta}^L = \left(\hat{\alpha} \hat{\beta} \right)^L.$$

Por sua vez, $\hat{\alpha} \mapsto \hat{\alpha}^R$ é um anti-homomorfismo, isto é:

$$\hat{\alpha}^R \hat{\beta}^R = \left(\hat{\beta} \hat{\alpha} \right)^R.$$

Usando a operação de involução ($*$), podemos construir uma representação (à direita) de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. De fato, para cada $\hat{\alpha} \in \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ associamos o mapa $(\hat{\alpha}^*)^R : \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2) \rightarrow \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$, satisfazendo:

$$(\hat{\alpha}^*)^R (\hat{\beta}^*)^R = \left(\hat{\beta}^* \hat{\alpha}^* \right)^R = \left((\hat{\alpha} \hat{\beta})^* \right)^R.$$

Em ambos os casos, o espaço vetorial que carrega a representação é $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$.

1.3 Funcionais Positivos e Produtos Internos

Nesta seção discutimos de maneira genérica a questão da construção de um produto interno a partir de um funcional positivo. A busca por um produto interno em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$

decorre da necessidade de uma estrutura de espaço de Hilbert para o espaço dos estados físicos da teoria.

Seja

$$\chi : \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2) \rightarrow \mathbb{C}$$

um funcional linear compatível com a operação $*$ de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$, isto é,

$$\chi(\hat{\alpha}^*) = \overline{\chi(\hat{\alpha})},$$

onde a barra significa complexo conjugado e onde $\hat{\alpha}$ é um elemento genérico de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. O funcional linear χ é dito ser positivo se a seguinte propriedade for satisfeita:

$$\chi(\hat{\alpha}^* \hat{\alpha}) \geq 0, \quad (1.32)$$

para todo $\hat{\alpha} \in \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$.

Dado um funcional linear positivo χ , definimos a forma sesqui-linear $\langle \cdot, \cdot \rangle$ através de:

$$\langle \hat{\alpha}, \hat{\beta} \rangle = \chi(\hat{\alpha}^* \hat{\beta}). \quad (1.33)$$

Se $\langle \cdot, \cdot \rangle$ for não degenerada, isto é, se

$$\chi(\hat{\alpha}^* \hat{\alpha}) = 0 \Rightarrow \hat{\alpha} = 0, \quad (1.34)$$

então (1.33) define um produto interno em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$. Em caso contrário, será necessário eliminar os vetores não-triviais de norma nula (vetores nulos).

Nas próximas seções estudaremos em detalhes a construção do espaço de Hilbert dos estados físicos. Inicialmente ilustraremos essa construção no caso comutativo, para em seguida generalizar a construção para o caso do plano não-comutativo.

1.3.1 O Caso Comutativo

Funcionais Positivos

O espaço $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ das funções complexas sobre \mathbb{R}^2 munido do produto pontual entre funções e da operação de conjugação complexa é uma álgebra $*$. Seus elementos são denotados por $\hat{\alpha} = \hat{\alpha}(x_0, x_1)$, onde x_0 e x_1 são as coordenadas cartesianas de $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$. Para $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ não há distinção entre os operadores $\hat{\alpha}^L$ e $\hat{\alpha}^R$ definidos em (1.31).

A álgebra $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ admite uma família de funcionais lineares positivos χ_t , obtidos por integração em x_1 em um “instante de tempo” específico t :

$$\chi_t(\hat{\phi}) = \int_{\mathbb{R}} dx_1 \hat{\phi}(t, x_1). \quad (1.35)$$

A positividade de χ_t segue da definição (1.35) e da propriedade $\overline{(\overline{ab})} = \overline{a\overline{b}}$:

$$\chi_t(\hat{\phi}^* \hat{\phi}) = \int_{\mathbb{R}} dx_1 |\hat{\phi}(t, x_1)|^2 \geq 0. \quad (1.36)$$

A família de funcionais lineares positivos (1.35) nos permite introduzir uma família a um parâmetro de formas sesqui-lineares positivo-definidas em $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$, dada por:

$$\left(\hat{\phi}, \hat{\varphi}\right)_t = \chi_t(\hat{\phi}^* \hat{\varphi}) = \int_{\mathbb{R}} dx_1 \hat{\phi}^*(t, x_1) \hat{\varphi}(t, x_1). \quad (1.37)$$

O par $(\mathcal{F}(\mathbb{R}^2), (\cdot, \cdot)_t)$ será denotado por \mathcal{C}_t . Assim, \mathcal{C}_t é o espaço $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ munido do “produto escalar” $(\cdot, \cdot)_t$.

O Espaço Nulo \mathcal{N}_t

Nesta seção consideramos algumas idéias típicas da construção GNS [29].

As funções $\hat{\phi} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ que se anulam no tempo t formam um ideal \mathcal{I}_t de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$. O quociente de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ por \mathcal{I}_t é o conjunto das classes de equivalência $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)/\mathcal{I}_t$. Aqui, a relação de equivalência é a seguinte: duas funções $\hat{\phi}$ e $\hat{\varphi}$ pertencentes a $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ são equivalentes se e somente se $(\hat{\phi} - \hat{\varphi}) \in \mathcal{I}_t$.

O ideal \mathcal{I}_t munido do produto escalar $(\cdot, \cdot)_t$ será denotado por \mathcal{N}_t . Assim, \mathcal{N}_t é um ideal de \mathcal{C}_t . O ideal \mathcal{N}_t é o espaço nulo associado ao produto escalar $(\cdot, \cdot)_t$. O quociente $\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t$ é equivalente a $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)/\mathcal{I}_t$ munido do produto escalar $(\cdot, \cdot)_t$.

O produto interno no espaço das classes de equivalência é dado por:

$$\left(\hat{\phi} + \mathcal{N}_t, \hat{\varphi} + \mathcal{N}_t\right)_t = \left(\hat{\phi}, \hat{\varphi}\right)_t. \quad (1.38)$$

Não existem vetores nulos não-triviais em $\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t$. O único vetor de norma nula é a classe de equivalência do zero, isto é, o próprio espaço nulo \mathcal{N}_t .

O completamento canônico [22] de $\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t$ na métrica induzida por (1.38) fornece o espaço de Hilbert $\widehat{\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t}$.

Note-se que

$$\begin{cases} \hat{\phi} \in \mathcal{N}_t & \Rightarrow \hat{\phi}^* \in \mathcal{N}_t \\ \hat{\phi} \in (\mathcal{N}_t)^* & \Rightarrow \hat{\phi} \in \mathcal{N}_t, \end{cases} \quad (1.39)$$

O significado da primeira linha em (1.39) é o seguinte: se $\hat{\phi}$ se anula em t , então o seu complexo conjugado também se anula em t , pois $\hat{\phi}^*(t) = \overline{\hat{\phi}(t)} = 0$. Quanto à segunda linha em (1.39), seu significado é o seguinte: se $\hat{\phi}$ é o conjugado de uma função que se anula em t , então $\hat{\phi}$ também se anula em t , pois $\hat{\phi}(t) = \hat{\phi}^{**}(t) = \overline{\hat{\phi}^*(t)} = 0$.

A primeira linha de (1.39) pode ser re-escrita de maneira mais conveniente. De fato, se $\hat{\phi}^* \in \mathcal{N}_t$, então $\hat{\phi} = \hat{\phi}^{**} \in (\mathcal{N}_t)^*$, de modo que podemos escrever:

$$\begin{cases} \hat{\phi} \in \mathcal{N}_t & \Rightarrow \hat{\phi} \in (\mathcal{N}_t)^* \\ \hat{\phi} \in (\mathcal{N}_t)^* & \Rightarrow \hat{\phi} \in \mathcal{N}_t, \end{cases} \quad (1.40)$$

o que mostra que $\mathcal{N}_t = (\mathcal{N}_t)^*$.

Em virtude de (1.40), a operação $*$ em $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ induz uma operação $*$ no espaço das classes de equivalência $\mathcal{C}_t(\mathbb{R}^2)/\mathcal{N}_t$. De fato,

$$\left(\hat{\phi} + \mathcal{N}_t\right)^* = \hat{\phi}^* + (\mathcal{N}_t)^* = \hat{\phi}^* + \mathcal{N}_t, \quad (1.41)$$

o que significa que o conjugado da classe de equivalência de $\hat{\phi}$ é dado pela classe de equivalência de $\hat{\phi}^*$.

O Espaço de Hilbert

Na nossa abordagem para a teoria quântica o espaço de Hilbert dos estados físicos não é o completamento canônico $\widehat{\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t}$ de $\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t$. Apesar disso, o exemplo da construção de $\widehat{\mathcal{C}_t/\mathcal{N}_t}$ ensina que \mathcal{C}_t (e portanto $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$) é um espaço “muito grande” para ser um espaço de Hilbert: ele contém vetores nulos não-triviais.

Uma alternativa à construção GNS seria considerar $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ munido de uma forma sesqui-linear (χ_t , por exemplo) e escolher um sub-espaço de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ que contenha apenas o zero de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ como vetor nulo (na norma induzida pela forma sesqui-linear escolhida). Essa será a estratégia adotada nesta seção.

Nosso ponto de partida é a observação de que o operador $i\partial_{x_0}$ não é “hermitiano” em \mathcal{C}_t (lembrando que \mathcal{C}_t é uma notação para o espaço $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ munido da forma sesqui-linear (1.37)). De fato:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\psi}, i\partial_{x_0}\hat{\chi}\right)_t - \left(i\partial_{x_0}\hat{\psi}, \hat{\chi}\right)_t &= i \int_{\mathbb{R}} dx_1 \overline{\hat{\psi}(t, x_1)} \partial_t \hat{\chi}(t, x_1) + i \int_{\mathbb{R}} dx_1 \overline{\partial_t \hat{\psi}(t, x_1)} \hat{\chi}(t, x_1) = \\ &= i \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}} dx_1 \overline{\hat{\psi}(t, x_1)} \hat{\chi}(t, x_1), \end{aligned} \quad (1.42)$$

o que mostra que a condição necessária para que $i\partial_{x_0}$ seja hermitiano é que o produto $\left(\hat{\psi}, \hat{\chi}\right)_t$ seja independente do tempo t .

Uma solução consiste em escolher um sub-espaço $\mathcal{H}_t \subset \mathcal{C}_t$ formado por elementos tais que $\overline{\hat{\psi}(t, x_1)} \hat{\chi}(t, x_1)$ seja independente do tempo. Isso implica em escolher a seguinte dependência em x_0 para um elemento genérico $\hat{\psi}(x_0, x_1)$ de \mathcal{H}_t :

$$\hat{\psi}(x_0, x_1) = \left[e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{\psi}(\hat{x}_1) \right] (x_0, x_1) = e^{-ix_0 H} \hat{\psi}(x_1), \quad (1.43)$$

onde H é uma Hamiltoniana independente do tempo e hermitiana no sentido da forma sesqui-linear (1.37), isto é:

$$\left(\hat{\psi}, H\hat{\chi}\right)_t = \left(H\hat{\psi}, \hat{\chi}\right)_t, \quad (1.44)$$

e onde \hat{x}_0 é a função coordenada temporal, definida por $\hat{x}_0(\vec{x}) = x_0$, com $\vec{x} = (x_0, x_1)$.

As funções em \mathcal{H}_t satisfazem a equação de Schrödinger dependente do tempo, isto é:

$$i\partial_{x_0}\hat{\psi}(x_0, x_1) = H\hat{\psi}(x_0, x_1). \quad (1.45)$$

Em virtude de (1.45), vemos que operador $i\partial_{x_0}$ é equivalente a H quando restrito a \mathcal{H}_t . Assim,

$$\left(\hat{\psi}, i\partial_{x_0}\hat{\chi}\right)_t = \left(i\partial_{x_0}\hat{\psi}, \hat{\chi}\right)_t \quad \text{para todos } \hat{\psi}, \hat{\chi} \in \mathcal{H}_t. \quad (1.46)$$

Como a Hamiltoniana H é independente de \hat{x}_0 , isto é, dado que $[i\partial_{x_0}, H] = 0$, temos que tanto $i\partial_{x_0}$ quanto H preservam o sub-espaço \mathcal{H}_t :

$$i\partial_{x_0}\mathcal{H}_t = H\mathcal{H}_t \subseteq \mathcal{H}_t. \quad (1.47)$$

De fato, se $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_t$, temos:

$$(i\partial_{x_0} - H)(i\partial_{x_0}\hat{\psi}) = i\partial_{x_0}(i\partial_{x_0}\hat{\psi} - H\hat{\psi}) = 0, \quad (1.48)$$

da mesma maneira que

$$(i\partial_{x_0} - H)(H\hat{\psi}) = H(i\partial_{x_0}\hat{\psi} - H\hat{\psi}) = 0, \quad (1.49)$$

o que mostra que $i\partial_{x_0}\hat{\psi} = H\hat{\psi} \in \mathcal{H}_t$.

Note-se ainda que, se $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_t$, então temos:

$$\hat{\psi}(x_0 + \tau, x_1) = \left(e^{-i\tau(i\partial_{x_0})}\hat{\psi}\right)(x_0, x_1) = \left(e^{-i\tau H}\hat{\psi}\right)(x_0, x_1), \quad (1.50)$$

o que mostra que a translação temporal preserva a norma de $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_t$. Portanto, se $\hat{\psi}$ se anula para $x_0 = t$, então $\hat{\psi} \equiv 0$. Isso significa que o único vetor nulo em \mathcal{H}_t é 0, isto é:

$$\mathcal{N}_t \cap \mathcal{H}_t = \{0\}. \quad (1.51)$$

Dessa forma, vemos que, quando restrita a \mathcal{H}_t , (1.37) é uma forma sesqui-linear não-degenerada, definindo assim um produto interno em \mathcal{H}_t . O completamento canônico de \mathcal{H}_t na métrica induzida por esse produto é o espaço de Hilbert $\widehat{\mathcal{H}}_t$ dos estados físicos.

A translação temporal em \mathcal{H}_t é dada pela ação de um operador unitário $U(\tau) = e^{-i\tau H}$, correspondendo portanto a uma evolução temporal. Se $\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0 H}\hat{\psi}_0$, onde $\hat{\psi}_0 = \hat{\psi}_0(x_1)$, vemos que a evolução temporal de $\hat{\psi}$ é dada por:

$$e^{-i\tau(i\partial_{x_0})}\hat{\psi} = e^{-i\tau H}\hat{\psi} = e^{-i\tau H}e^{-i\hat{x}_0 H}\hat{\psi}_0 = e^{-i(\hat{x}_0 + \tau)H}\hat{\psi}_0 \in \mathcal{H}_t, \quad (1.52)$$

A diferença conceitual entre a coordenada temporal \hat{x}_0 e o parâmetro de translação temporal (intervalo de tempo) τ fica assim bem ilustrada.

Observáveis

A definição de observáveis no formalismo desenvolvido neste capítulo deve ser tal que, se \hat{K} é um observável, então a imagem de $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_t$ por \hat{K} deve ser um elemento de \mathcal{H}_t . Em outras palavras, \hat{K} deve comutar com a equação de Schrödinger:

$$\left[i\partial_{x_0} - H, \hat{K} \right] = 0. \quad (1.53)$$

Seja \hat{L} um operador sem dependência temporal, de modo que podemos escrever: $\hat{L} = \hat{L}(\hat{x}_1, -i\partial_{x_1})$. Associamos a \hat{L} o operador \hat{K} definido por:

$$\hat{K} = e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{L} e^{+i\hat{x}_0 H}. \quad (1.54)$$

Verifica-se que \hat{K} é um observável. A sua ação em $\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{\psi}_0$ é dada por:

$$\hat{K} \hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0 H} \left(\hat{L} \hat{\psi}_0 \right), \quad (1.55)$$

o que mostra que \hat{K} mapeia elementos \mathcal{H}_t em elementos de \mathcal{H}_t .

Sob translações temporais temos:

$$\hat{K} \mapsto e^{-i\tau H} \hat{K} e^{+i\tau H} = e^{-i(\hat{x}_0 + \tau)H} \hat{L} e^{+i(\hat{x}_0 + \tau)H}. \quad (1.56)$$

A idéia por trás da definição (1.54) pode ser traduzida em palavras da seguinte maneira: primeiramente eliminamos a dependência temporal de $\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{\psi}_0$. Essa etapa é garantida pelo fator $e^{i\hat{x}_0 H}$ na definição (1.54) de \hat{K} . Em seguida, calculamos a ação de \hat{L} (que não depende de \hat{x}_0) em $\hat{\psi}_0$. O resultado ($\hat{L} \hat{\psi}_0$) não depende de \hat{x}_0 . Finalmente, a dependência com relação a \hat{x}_0 é re-introduzida através da ação do fator $e^{-i\hat{x}_0 H}$ na definição (1.54) de \hat{K} . O resultado final tem exatamente a forma (1.43).

O Tempo NÃO é um Observável

Assim como no formalismo usual, aqui também o tempo não é um observável. De fato, a coordenada temporal \hat{x}_0 não comuta com $i\partial_{x_0} - H$:

$$[\hat{x}_0, i\partial_{x_0} - H] = -i\mathbb{I}. \quad (1.57)$$

Além disso, a receita dada em (1.54) não funciona para \hat{x}_0 , pois $e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{x}_0 e^{+i\hat{x}_0 H} = \hat{x}_0$, de modo que $e^{-i\hat{x}_0 H} \hat{x}_0 e^{+i\hat{x}_0 H}$ também não comuta com $i\partial_{x_0} - H$.

Sobre a dependência temporal de \mathcal{H}_t

Na Mecânica Quântica o espaço de Hilbert dos estados físicos não possui dependência temporal, enquanto que \mathcal{H}_t possui um índice t . Apesar disso, o espaço de Hilbert no formalismo do tempo congelado também não depende de t , conforme veremos nesta seção.

Recordemos que a translação temporal restrita a elementos de \mathcal{H}_t reduz-se à ação de um operador unitário:

$$\hat{\psi}(x_0 + \tau, x_1) = \left(e^{-i\tau(i\partial_{x_0})} \hat{\psi} \right) (x_0, x_1) = \left(e^{-i\tau H} \hat{\psi} \right) (x_0, x_1). \quad (1.58)$$

Se $\hat{\psi}$ e $\hat{\phi}$ são elementos de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$, então podemos considerá-los como elementos de $\mathcal{C}_{x_0+\tau}$, por exemplo. Isso significa que o produto escalar entre esses dois vetores será calculado como em (1.37), com $t = x_0 + \tau$. Suponhamos agora que $\hat{\psi}$ e $\hat{\phi}$ sejam soluções da equação de Schrödinger. Na notação deste capítulo, isso significa que esses vetores são elementos de $\mathcal{H}_{x_0+\tau}$. Levando-se em conta o resultado (1.58), obtém-se:

$$\left(\hat{\psi}, \hat{\phi} \right)_{x_0+\tau} = \int dx_1 \hat{\psi}^*(x_0 + \tau, x_1) \hat{\phi}(x_0 + \tau, x_1) = \int dx_1 \hat{\psi}^*(x_0, x_1) \hat{\phi}(x_0, x_1) = \left(\hat{\psi}, \hat{\phi} \right)_{x_0}, \quad (1.59)$$

o que mostra que os espaços $\mathcal{H}_{x_0+\tau}$ e \mathcal{H}_{x_0} são isométricos.

A observação acima significa que a família de espaços de Hilbert \mathcal{H}_t define um único espaço de Hilbert \mathcal{H} , exatamente como no caso da Mecânica Quântica.

1.3.2 O Caso Não-Comutativo

A discussão acima mostra que para uma teoria quântica precisamos de: (i) um produto escalar conveniente em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$; (ii) uma “equação de Schrödinger” em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$; e (iii) uma Hamiltoniana \hat{H} e observáveis agindo no subespaço de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ formado pelas soluções da “equação de Schrödinger”. Também requeremos que \hat{H} seja hermitiana com relação ao produto escalar (i).

Símbolos e Funcionais Positivos

Nesta seção nós consideramos um produto interno baseado na definição de *símbolo* de um elemento de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$.

Seja $\hat{\alpha}$ um elemento de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$, escrito de uma maneira geral como:

$$\hat{\alpha} = \int d^2k \tilde{\alpha}(\vec{k}) e^{ik_1 \hat{x}_1} e^{ik_0 \hat{x}_0}. \quad (1.60)$$

O símbolo α_S de $\hat{\alpha}$ é a função complexa definida por:

$$\alpha_S(x_0, x_1) = \int d^2k \tilde{\alpha}(\vec{k}) e^{ik_1 x_1} e^{ik_0 x_0} . \quad (1.61)$$

Usando (1.61) nós definimos um funcional linear positivo S_t , dado por:

$$S_t(\hat{\alpha}) = \int dx_1 \alpha_S(t, x_1) . \quad (1.62)$$

As propriedades de S_t são similares às de χ_t . Em particular, ele fornece a forma sesqui-linear $(\cdot, \cdot)_{S_t}$, dada por:

$$(\hat{\alpha}, \hat{\beta})_{S_t} = S_t(\hat{\alpha}^* \hat{\beta}) = \int dx_1 \alpha_S^*(t, x_1) \beta_S(t, x_1) . \quad (1.63)$$

A forma sesqui-linear $(\cdot, \cdot)_t$ possui vetores não-triviais de norma nula. O espaço dos vetores nulos é denotado por \mathcal{N}_t^θ . Note-se que se $\alpha_S(t, \cdot) = 0$, então $\hat{\alpha} \in \mathcal{N}_t^\theta$.

A observação feita acerca da existência de vetores nulos não representa problemas, pois o espaço de Hilbert dos estados físicos não é obtido pela construção GNS, de modo que os vetores nulos não desempenham nenhum papel em sua construção.

A Equação de Schrödinger

Recordemos que os análogos não-comutativos dos operadores diferenciais (comutativos) $i\partial_0$ e $-i\partial_1$ são dados por (ver equação(1.12)):

$$\hat{P}_0 = -\frac{1}{\theta} \text{ad}_{\hat{x}_1} \quad \text{e} \quad \hat{P}_1 = -\frac{1}{\theta} \text{ad}_{\hat{x}_0} . \quad (1.64)$$

Seja \hat{H} uma Hamiltoniana independente do tempo, o que significa que $[\hat{P}_0, \hat{H}] = 0$. Podemos escrever:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1) . \quad (1.65)$$

O conjunto dos estados que satisfazem a equação de Schrödinger é:

$$\mathcal{H}_\theta = \left\{ \hat{\psi} \in \mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2) : (\hat{P}_0 - \hat{H}) \hat{\psi} = 0 \right\} . \quad (1.66)$$

As soluções de (1.66) são dadas por:

$$\hat{\psi} \in \mathcal{H}_\theta \implies \hat{\psi} = e^{-i \hat{x}_0^R \hat{H}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\hat{x}_1) . \quad (1.67)$$

Note-se que o produto $\hat{x}_0^R \hat{H}$ não possui problemas de ordenamento, dado que

$$\left[\hat{x}_0^R, \hat{H} \left(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1 \right) \right] = 0.$$

Translações temporais agem em \mathcal{H}_θ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} e^{-i\tau \hat{P}_0} \left[e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\hat{x}_1) \right] &= e^{-i(\hat{x}_0^R + \tau) \hat{H}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\hat{x}_1) = \\ &= e^{-i\tau \hat{H}(\hat{P}_1, \hat{x}_1^L)} \left[e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\hat{x}_1) \right]. \end{aligned} \quad (1.68)$$

O Espaço de Hilbert

Assim como no caso comutativo, o espaço de Hilbert dos estados físicos é constituído pelas soluções da Equação de Schrödinger, mostradas em (1.66) e (1.67).

Se a Hamiltoniana \hat{H} for hermitiana com relação a $(\cdot, \cdot)_{S_t}$, isto é, se $(\hat{\alpha}, \hat{H}\hat{\beta})_{S_t} = (\hat{H}\hat{\alpha}, \hat{\beta})_{S_t}$, temos que $e^{-i\hat{x}_0 \hat{H}}$ é um operador unitário (também no sentido de $(\cdot, \cdot)_{S_t}$).

Se o símbolo $\psi_S(x_0, x_1)$ de $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_\theta$ se anula para $x_0 = t$ (isto é, $\psi_S(t, x_1) = 0$ para todo x_1), então $\psi_S = 0$. De fato, se $\psi_{S,\tau}$ é o símbolo de $e^{-i\hat{P}_0 \tau} \hat{\psi}$, então segue da definição (1.61) que

$$\psi_{S,\tau}(x_0, x_1) = \psi_S(x_0 + \tau, x_1). \quad (1.69)$$

Porém, como $\hat{P}_0 \hat{\psi} = \hat{H} \hat{\psi}$, obtemos:

$$e^{-i\tau \hat{P}_0} \hat{\psi} = e^{-i\tau \hat{H}} \hat{\psi}. \quad (1.70)$$

Tomando o símbolo de (1.70), encontramos:

$$\psi_{S,\tau}(x_0, x_1) = \psi_S(x_0 + \tau, x_1) = [e^{-i\tau H} \psi_S](x_0, x_1), \quad (1.71)$$

onde H é a Hamiltoniana obtida a partir de \hat{H} pela substituição de \hat{x}_1 e \hat{P}_1 por x_1 e $-i\frac{\partial}{\partial x_1}$, respectivamente (em outras palavras, H é a versão comutativa de \hat{H}). Como

$$H = H \left(x_1, -i\frac{\partial}{\partial x_1} \right), \quad (1.72)$$

podemos dizer que H não “percebe” a variável x_0 em $\psi_S(x_0, x_1)$. Nesse caso, podemos considerar x_0 como um parâmetro, de modo que $\psi_S(x_0, x_1)$ denota uma família a um parâmetro de funções da variável x_1 . Sob essa perspectiva, para cada valor fixo de x_0 o operador $e^{-i\tau H}$ “enxerga” $\psi_S(x_0, x_1)$ como uma função de x_1 que carrega um índice contínuo x_0 . Tendo chegado a esse ponto, suponhamos agora que $\psi_S(t, x_1) = 0$ para todo

x_1 , ou seja, suponhamos que para um determinado valor do parâmetro x_0 ($x_0 = t$), a função $\psi_S(x_0, x_1)$ da variável x_1 seja identicamente nula. Como $e^{-i\tau\hat{H}}$ preserva a norma de elementos de \mathcal{H}_θ , a sua versão comutativa $e^{-i\tau H}$ preserva a norma de funções. Como a norma de $\psi_S(t, x_1)$ (enquanto função de x_1) é nula, segue que a norma de $[e^{-i\tau H}\psi_S](t, x_1)$ também é nula, ou seja,

$$[e^{-i\tau H}\psi_S](t, x_1) = 0. \quad (1.73)$$

Finalmente, usando (1.73) em (1.71) (com $x_0 = t$) obtemos:

$$\psi_S(t + \tau, x_1) = 0 \quad , \quad \text{para todo } x_1, \quad (1.74)$$

o que significa que $\psi_S(x_0, x_1) = 0$ para todo par (x_0, x_1) , dado que τ é arbitrário.

Tendo demonstrado que $\psi_S(t, x_1) = 0$ (para algum t) implica em $\psi_S(x_0, x_1) \equiv 0$, podemos mostrar que o espaço \mathcal{H}_θ de soluções da equação de Schrödinger é um espaço de Hilbert. De fato, lembremos que o espaço dos vetores nulos (com relação à forma sesqui-linear $(\cdot, \cdot)_{S_t}$) é formado pelos $\hat{\psi}$ tais que $\psi_S(x_0, x_1)$ se anula para $x_0 = t$. Porém, acabamos de verificar que se $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_\theta$, então

$$\psi_S(t, \cdot) = 0 \implies \psi_S(\cdot, \cdot) = 0.$$

Em virtude da definição (1.61) de símbolo, se $\psi_S(\cdot, \cdot) = 0$, então $\tilde{\psi}(k_0, k_1) = 0$ (para todo par (k_0, k_1)), o que por sua vez implica que $\hat{\psi} \equiv 0$, ou seja, se $\hat{\psi}$ pertence ao espaço nulo de $(\cdot, \cdot)_{S_t}$, então $\hat{\psi}$ é o zero de \mathcal{H}_θ . Verificamos assim que \mathcal{H}_θ não possui vetores nulos não-triviais (no sentido de $(\cdot, \cdot)_{S_t}$). Isso significa que a restrição de $(\cdot, \cdot)_{S_t}$ a \mathcal{H}_θ é uma forma sesqui-linear não-degenerada, definindo portanto um produto interno verdadeiro em \mathcal{H}_θ .

Analogamente ao caso comutativo, podemos mostrar que os espaços de Hilbert obtidos através da construção acima são todos equivalentes entre si. De fato, se $\hat{\psi}$ e $\hat{\eta}$ são elementos de \mathcal{H}_θ , temos:

$$\begin{aligned} \left(e^{-i\tau\hat{P}_0}\hat{\psi}, e^{-i\tau\hat{P}_0}\hat{\eta} \right)_{x_0} &= \int dx_1 \psi_S^*(x_0 + \tau, x_1)\eta_S(x_0 + \tau, x_1) = \\ &= \left(\hat{\psi}, \hat{\eta} \right)_{x_0 + \tau}, \end{aligned} \quad (1.75)$$

bem como

$$\left(e^{-i\tau\hat{P}_0}\hat{\psi}, e^{-i\tau\hat{P}_0}\hat{\eta} \right)_{x_0} = \left(e^{-i\tau\hat{H}}\hat{\psi}, e^{-i\tau\hat{H}}\hat{\eta} \right)_{x_0} = \left(\hat{\psi}, \hat{\eta} \right)_{x_0}, \quad (1.76)$$

de modo que

$$\left(\hat{\psi}, \hat{\eta} \right)_{x_0 + \tau} = \left(\hat{\psi}, \hat{\eta} \right)_{x_0}, \quad (1.77)$$

o que mostra que a família de produtos internos em \mathcal{H}_θ obtidos acima é independente de x_0 .

Observáveis

A construção de observáveis segue a mesma linha de (1.54): dado um operador $\hat{L} = \hat{L}(\hat{x}_1^L, \hat{P}_1)$, definimos o observável \hat{K} associado a \hat{L} através da fórmula

$$\hat{K} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}} \hat{L} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}}. \quad (1.78)$$

1.3.3 Uma Aplicação Espectral

Seja H uma Hamiltoniana da Mecânica Quântica:

$$H = -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V(x_1), \quad (1.79)$$

com auto-estados ψ_E satisfazendo a equação de Schrödinger:

$$\psi_E(x_0, x_1) = \varphi_E(x_1) e^{-iEx_0}, \quad (1.80)$$

$$H\varphi_E = E\varphi_E, \quad (1.81)$$

onde x_0 e x_1 denotam as coordenadas comutativas do espaço-tempo.

A Hamiltoniana \hat{H} (correspondente ao caso não-comutativo) associada a H é definida por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2M} + V(\hat{x}_1^L). \quad (1.82)$$

A Hamiltoniana \hat{H} possui o mesmo espectro de H . Seus auto-estados $\hat{\psi}_E$ são obtidos a partir de ψ_E por substituição das coordenadas comutativas x_0 e x_1 em (1.80) por coordenadas \hat{x}_0 e \hat{x}_1 satisfazendo (1.7):

$$\hat{\psi}_E = \hat{\varphi}_E(\hat{x}_1) e^{-iE\hat{x}_0}, \quad (1.83)$$

$$\hat{H}\hat{\varphi}_E(\hat{x}_1) = E\hat{\varphi}_E(\hat{x}_1). \quad (1.84)$$

Se tomarmos o símbolo da equação (1.84) obteremos exatamente a equação de Schrödinger (1.81) da Mecânica Quântica.

Notamos finalmente que, como

$$\hat{P}_0 \hat{\psi}_E = \hat{\varphi}_E(\hat{x}_1) \hat{P}_0 e^{-iE\hat{x}_0} = E\hat{\psi}_E, \quad (1.85)$$

o vetor $\hat{\psi}_E$ satisfaz a equação de Schrödinger, sendo portanto um elemento de \mathcal{H}_θ (ver (1.66)).

Capítulo 2

Evoluções Discretas

Neste capítulo estudamos alguns aspectos básicos do cilindro não-comutativo. Começamos com uma revisão sobre a álgebra $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ de funções sobre o cilindro comutativo, focalizando três aspectos básicos: a forma genérica de um elemento dessa álgebra, seus geradores e finalmente a ação do operador momento angular nesse espaço. Em seguida, introduzimos o análogo não-comutativo desse espaço, conhecido como cilindro não-comutativo e denotado por $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$. Estudamos as representações irredutíveis dessa álgebra, obtendo como resultado que o espectro da coordenada temporal nessas representações é discretizado, sendo que a discretização é dada pelo parâmetro θ da não-comutatividade. Ao estudar os automorfismos de translação do cilindro não-comutativo, verificamos que as translações temporais nesse espaço são discretizadas, sendo que os intervalos de tempo são múltiplos inteiros de θ . Dando prosseguimento, construímos o espaço de Hilbert dos estados físicos. Para tanto, introduzimos uma família de formas sesqui-lineares (degeneradas) no cilindro não-comutativo. O espaço de Hilbert dos estados físicos corresponde ao sub-espaço formado pelas soluções da *Equação de Schrödinger Discreta*. Nesse sub-espaço as formas sesqui-lineares mencionadas acima reduzem-se a um único produto escalar verdadeiro.

É importante mencionar que a álgebra do cilindro não-comutativo foi estudada recentemente por Chaichian et al. em uma série de artigos [20], no contexto das teorias de campos não-comutativas.

2.1 Revendo o Cilindro Comutativo

Seja $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ o espaço das funções complexas sobre \mathbb{R}^2 . Munido do produto pontual entre funções, $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ torna-se uma álgebra comutativa. Se α é um elemento de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$, podemos

escrever:

$$(x_0, x_1) \mapsto \alpha(x_0, x_1). \quad (2.1)$$

Por sua vez, a álgebra $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ de funções complexas sobre o cilindro é definida como sendo a sub-álgebra de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ formada pelas funções $\alpha(x_0, x_1)$ periódicas em x_1 . Em se tratando de um cilindro, o período das funções é dado por $T = 2\pi R$, onde R é o raio do cilindro, que por simplicidade escolheremos como sendo igual a 1. Assim, para funções em $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ teremos:

$$\alpha(x_0, x_1 + 2\pi N) = \alpha(x_0, x_1), \quad (2.2)$$

para todo $N \in \mathbb{Z}$.

Um elemento genérico de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ escreve-se:

$$\alpha(x_0, x_1) = \iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \tilde{\alpha}(k, \omega) e^{ikx_1} e^{i\omega x_0}. \quad (2.3)$$

A expressão genérica (2.3) constitui uma espécie de “representação de Fourier” de um elemento genérico de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$.

Por sua vez, um elemento genérico de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ pode ser escrito como:

$$\alpha(x_0, x_1) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{inx_1} e^{i\omega x_0}. \quad (2.4)$$

A expressão (2.3) pode ser interpretada como uma “expansão na base das ondas planas”. Sob esse ponto de vista, as funções em $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ são determinadas pelos “coeficientes” $\{\tilde{\alpha}(k, \omega)\}$ na “base” $\{e^{ikx_1} e^{i\omega x_0}\}$. Considerações análogas aplicam-se ao caso de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$.

Duas funções (elementos de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$) particularmente importantes são as *funções coordenadas* \hat{x}_0 e \hat{x}_1 , definidas por:

$$\hat{x}_0(\vec{x}) = x_0 \quad \text{e} \quad \hat{x}_1(\vec{x}) = x_1, \quad (2.5)$$

onde x_0 e x_1 são as coordenadas do ponto \vec{x} pertencente ao plano. As funções coordenadas podem ser obtidas a partir de (2.3). De fato, se escolhermos

$$\tilde{\alpha}_0(k, \omega) = i \delta(k) \delta'(\omega), \quad (2.6)$$

onde δ' denota a derivada da delta, e substituirmos (2.6) em (2.3), teremos:

$$\alpha_0(x_0, x_1) = i \iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \delta(k) \delta'(\omega) e^{ikx_1} e^{i\omega x_0} = i \int_{\mathbb{R}} d\omega \delta'(\omega) e^{i\omega x_0} = x_0, \quad (2.7)$$

enquanto que, se escolhermos

$$\tilde{\alpha}_1(k, \omega) = i \delta'(k) \delta(\omega) \quad (2.8)$$

e substituirmos (2.8) em (2.3), teremos:

$$\alpha_1(x_0, x_1) = i \iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \delta'(k) \delta(\omega) e^{ikx_1} e^{i\omega x_0} = i \int_{\mathbb{R}} dk \delta'(k) e^{ikx_1} = x_1, \quad (2.9)$$

o que mostra que:

$$\hat{x}_0(\vec{x}) = \alpha_0(x_0, x_1) \quad \text{e} \quad \hat{x}_1(\vec{x}) = \alpha_1(x_0, x_1). \quad (2.10)$$

Podemos expressar a função $\alpha : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ (ver (2.3)) em termos das funções coordenadas \hat{x}_0 e \hat{x}_1 . Para tal fim, vamos introduzir a seguinte notação para α :

$$\hat{\alpha} = \iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \tilde{\alpha}(k, \omega) e^{ik\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}, \quad (2.11)$$

com o seguinte significado:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}(\vec{x}) &= \left(\iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \tilde{\alpha}(k, \omega) e^{ik\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} \right) (\vec{x}) = \\ &= \left(\iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \tilde{\alpha}(k, \omega) e^{ikx_1} e^{i\omega x_0} \right) = \alpha(x_0, x_1), \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde x_0 e x_1 são as coordenadas do ponto $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$.

Dizemos que as coordenadas \hat{x}_0 e \hat{x}_1 são os *geradores* de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$. Elas satisfazem a seguinte relação:

$$[\hat{x}_0, \hat{x}_1] = 0. \quad (2.13)$$

A álgebra de funções sobre o cilindro comutativo também pode ser encarada sob o ponto de vista de seus geradores. Como ponto de partida, deve-se notar que \hat{x}_1 não é um elemento de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$, pois não é uma função periódica. Por sua vez, o elemento $e^{i\hat{x}_1}$ de $\mathcal{F}(\mathbb{R}^2)$ é invariante sob a ação de translações da forma $\hat{x}_1 \rightarrow \hat{x}_1 \pm 2\pi N$, com $N \in \mathbb{Z}$, de modo que $e^{i\hat{x}_1}$ é um elemento de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$.

Em virtude do requerimento de periodicidade na variável x_1 para $\hat{\alpha} \in \mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$, segue da teoria básica das séries de Fourier [30] que a dependência de $\hat{\alpha}$ com relação a \hat{x}_1 deve ser da forma:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}. \quad (2.14)$$

A expressão (2.14) pode ser obtida a partir de (2.11) se escolhermos

$$\tilde{\alpha}(k, \omega) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \tilde{\alpha}_n(\omega) \delta(k - n). \quad (2.15)$$

De fato, substituindo (2.15) em (2.11) obtemos:

$$\hat{\alpha} = \iint_{\mathbb{R}^2} dk d\omega \sum_{n \in \mathbb{Z}} \tilde{\alpha}_n(\omega) \delta(k - n) e^{ik\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}. \quad (2.16)$$

O requerimento de periodicidade em x_1 não impõe nenhuma restrição sobre a dependência de $\hat{\alpha} \in \mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$ com relação à coordenada \hat{x}_0 , de modo que (2.14) representa um elemento genérico de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$, na notação introduzida em (2.11). Em particular, a função $e^{i\hat{x}_1}$ pode ser obtida a partir de (2.14) se escolhermos $\tilde{\alpha}_n(\omega) = \delta_{n,1} \delta(\omega)$:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \delta_{n,1} \delta(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = e^{i\hat{x}_1}. \quad (2.17)$$

Da discussão acima vemos que \hat{x}_0 e $e^{i\hat{x}_1}$ são os geradores de $\mathcal{F}(\mathbb{R} \times S^1)$.

Dando prosseguimento à discussão sobre o cilindro comutativo, vamos agora introduzir o operador diferencial \hat{p}_1 , definido por:

$$(\hat{p}_1 \alpha)(x_0, x_1) = -i \frac{\partial \alpha}{\partial x_1}(x_0, x_1). \quad (2.18)$$

O operador \hat{p}_1 é o gerador das translações em x_1 . Uma translação de ξ unidades ao longo dessa “direção” decorre da ação de $U(\xi) = e^{i\xi\hat{p}_1}$ em uma função $\alpha(x_0, x_1)$:

$$(U(\xi) \alpha)(x_0, x_1) = (e^{i\xi\hat{p}_1} \alpha)(x_0, x_1) = \left(e^{\xi \frac{\partial}{\partial x_1}} \alpha \right)(x_0, x_1) = \alpha(x_0, x_1 + \xi). \quad (2.19)$$

Note-se porém que, devido à periodicidade de $\alpha(x_0, x_1)$ com relação a x_1 , o operador diferencial \hat{p} pode ser interpretado como o momento angular de uma partícula movendo-se em um círculo.

A partir da definição (2.18), deduzimos diretamente a seguinte regra de comutação, válida para o cilindro comutativo:

$$[\hat{p}_1, e^{i\hat{x}_1}] = e^{i\hat{x}_1}. \quad (2.20)$$

A equação (2.20) pode ser combinada com a série de Lie (1.3), levando ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} e^{i2\pi\hat{p}_1} e^{i\hat{x}_1} e^{-i2\pi\hat{p}_1} &= e^{i\hat{x}_1} + i2\pi[\hat{p}_1, e^{i\hat{x}_1}] + \frac{1}{2}(i2\pi)^2[\hat{p}_1, [\hat{p}_1, e^{i\hat{x}_1}]] + \dots = \\ &= e^{i\hat{x}_1} + i2\pi e^{i\hat{x}_1} + \frac{1}{2}(i2\pi)^2 e^{i\hat{x}_1} + \dots = e^{i2\pi} e^{i\hat{x}_1}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

ou seja:

$$e^{i2\pi\hat{p}_1} e^{i\hat{x}_1} e^{-i2\pi\hat{p}_1} = e^{i\hat{x}_1}, \quad (2.22)$$

de onde se vê que $e^{i2\pi\hat{p}_1}$ está no centro da álgebra gerada por \hat{p}_1 e $e^{i\hat{x}_1}$. Pelo Lema de Schür, em uma representação (unitária) irredutível dessa álgebra, o elemento $e^{i2\pi\hat{p}_1}$ é representado por um múltiplo do operador identidade, sendo que o fator de proporcionalidade é uma fase, isto é:

$$e^{i2\pi\hat{p}_1} = e^{i\varphi} \mathbb{I}. \quad (2.23)$$

O número φ é chamado de fluxo ao longo do círculo [31]. Para cada valor de $\varphi \in [0, 2\pi)$ associamos uma representação independente da álgebra gerada por \hat{p}_1 e $e^{i\hat{x}_1}$. Denotamos o espaço de Hilbert dessa representação por \mathcal{H}_φ .

Como consequência de (2.23), o espectro de \hat{p}_1 em \mathcal{H}_φ é dado por:

$$\text{spec } \hat{p}_1 = \mathbb{Z} + \frac{\varphi}{2\pi} \equiv \left\{ n + \frac{\varphi}{2\pi} : n \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (2.24)$$

2.1.1 O Domínio do Operador Momento

Para garantir a interpretação de momento para \hat{p}_1 (no sentido de ser um observável quântico), devemos escolher um domínio de auto-adjunção para $-i\frac{\partial}{\partial x_1}$. A condição de auto-adjunção escreve-se:

$$(\alpha, \hat{p}_1 \beta)_{L^2([0, 2\pi])} = (\hat{p}_1 \alpha, \beta)_{L^2([0, 2\pi])}, \quad (2.25)$$

onde $L^2([0, 2\pi])$ é o espaço de Hilbert das funções de quadrado integrável sobre o compacto $[0, 2\pi]$, ou seja:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha(x_1)} \left[-i \frac{\partial \beta}{\partial x_1} \right] (x_1) &= \int_0^{2\pi} dx_1 \left[\overline{-i \frac{\partial \alpha}{\partial x_1} (x_1)} \right] \beta(x_1) \Rightarrow \\ \Rightarrow \int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha(x_1)} \frac{\partial \beta}{\partial x_1} (x_1) &= - \int_0^{2\pi} dx_1 \frac{\partial \overline{\alpha}}{\partial x_1} (x_1) \beta(x_1). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Efetuada a integração por partes na integral do segundo membro de (2.26) e substituindo o resultado em (2.26), obtemos:

$$\int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha(x_1)} \frac{\partial \beta}{\partial x_1} (x_1) = \int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha(x_1)} \frac{\partial \beta}{\partial x_1} (x_1) - \overline{\alpha(2\pi)}\beta(2\pi) + \overline{\alpha(0)}\beta(0), \quad (2.27)$$

de onde se vê que $-i\frac{\partial}{\partial x_1}$ será auto-adjunto se o seu domínio for constituído de funções satisfazendo a seguinte condição:

$$\overline{\alpha(2\pi)}\beta(2\pi) = \overline{\alpha(0)}\beta(0). \quad (2.28)$$

A condição (2.28) é satisfeita, por exemplo, por funções da forma:

$$\chi_n(x_1) = e^{i(n + \frac{\varphi}{2\pi})x_1}, \quad (2.29)$$

com $n \in \mathbb{Z}$. De fato, χ_n satisfaz:

$$\chi_n(x_1 + 2\pi) = e^{i\varphi} \chi_n(x_1), \quad (2.30)$$

de onde (2.28) segue de maneira direta.

Na notação (2.11) escrevemos a seguinte expressão para as funções em (2.29):

$$\hat{\chi}_n = e^{i(n + \frac{\varphi}{2\pi})\hat{x}_1}. \quad (2.31)$$

Deve-se notar que para cada valor de $\varphi \in [0, 2\pi)$ associamos um domínio de \hat{p}_1 . Existe um contínuo de possibilidades de escolha para o domínio desse operador. Denotaremos o domínio associado a φ por $\mathcal{D}_\varphi(\hat{p}_1)$.

Uma questão natural é saber se (2.23) e (2.28) são compatíveis. Consideremos o espaço linearmente gerado pelas funções $\hat{\chi}_n$ em (2.31). Munido do produto interno $(\cdot, \cdot)_{L^2([0, 2\pi])}$ esse espaço torna-se um espaço de Hilbert. A ação de $e^{i2\pi\hat{p}_1}$ nos elementos da base desse espaço é dada por:

$$e^{i2\pi\hat{p}_1} \hat{\chi}_n = e^{i(n + \frac{\varphi}{2\pi})(\hat{x}_1 + 2\pi)} = e^{i\varphi} e^{i(n + \frac{\varphi}{2\pi})\hat{x}_1} = e^{i\varphi} \hat{\chi}_n, \quad (2.32)$$

o que mostra que o domínio $\mathcal{D}_\varphi(\hat{p}_1)$ de \hat{p}_1 gera a representação irredutível \mathcal{H}_φ da álgebra gerada por \hat{p}_1 e $e^{i\hat{x}_1}$, isto é, da álgebra de observáveis de uma partícula no círculo. O espaço de Hilbert \mathcal{H}_φ constitui uma das *quantizações* possíveis para a partícula no círculo.

2.2 O Cilindro Não-Comutativo

Nesta seção estudaremos o cilindro não-comutativo. Analogamente ao caso da seção (2.1), faremos uso de estruturas já estudadas no caso do plano não-comutativo (capítulo 1). Sob essa perspectiva, o cilindro não-comutativo corresponde a uma sub-álgebra do plano não-comutativo.

O cilindro não-comutativo $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ pode ser definido de maneira direta se partirmos de (2.14) e substituirmos as coordenadas comutativas \hat{x}_0 e \hat{x}_1 definidas em (2.5) pelas *coordenadas não-comutativas* \hat{x}_0 e \hat{x}_1 , que satisfazem a regra de comutação (1.7), isto é:

$$[\hat{x}_0, \hat{x}_1] = i\theta\mathbb{I}, \quad (2.33)$$

onde $\theta > 0$ é a *constante não-comutativa*. Assim como na seção (2.1), tomaremos $R = 1$, onde R é o raio do cilindro. Dessa forma, um elemento genérico de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ pode ser escrito como:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}, \quad (2.34)$$

onde \hat{x}_0 e \hat{x}_1 satisfazem (2.33).

É preciso notar que a regra de comutação (2.33) não é uma relação em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$, pois conforme veremos adiante, \hat{x}_1 não é um elemento do cilindro não-comutativo.

Sejam $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ dois elementos de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} \quad , \quad \hat{\beta} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\beta}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} . \quad (2.35)$$

O produto $\hat{\alpha}\hat{\beta}$ é calculado como segue. Usando a associatividade do produto, escrevemos:

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \sum_{n,m \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} dk \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(k) \tilde{\beta}_m(\omega) e^{in\hat{x}_1} (e^{ik\hat{x}_0} e^{im\hat{x}_1}) e^{i\omega\hat{x}_0} . \quad (2.36)$$

Agora, usando (2.33) em conjunção com a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff [22], isto é:

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots} , \quad (2.37)$$

obtemos:

$$\begin{aligned} e^{ik\hat{x}_0} e^{im\hat{x}_1} &= e^{ik\hat{x}_0+im\hat{x}_1+\frac{1}{2}[ik\hat{x}_0,im\hat{x}_1]} = e^{-i\frac{1}{2}km\theta} e^{ik\hat{x}_0+im\hat{x}_1} e \\ e^{im\hat{x}_1} e^{ik\hat{x}_0} &= e^{im\hat{x}_1+ik\hat{x}_0+\frac{1}{2}[im\hat{x}_1,ik\hat{x}_0]} = e^{i\frac{1}{2}km\theta} e^{ik\hat{x}_0+im\hat{x}_1} \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{ik\hat{x}_0} e^{im\hat{x}_1} = e^{-ikm\theta} e^{im\hat{x}_1} e^{ik\hat{x}_0} . \end{aligned} \quad (2.38)$$

Usando (2.38) em (2.36) encontramos:

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \sum_{n,m \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} dk \int_{\mathbb{R}} d\omega \tilde{\alpha}_n(k) \tilde{\beta}_m(\omega) e^{-ikm\theta} e^{i(n+m)\hat{x}_1} e^{i(k+\omega)\hat{x}_0} . \quad (2.39)$$

Façamos agora a seguinte mudança de variáveis em (2.39):

$$N = n + m \quad , \quad M = m \quad , \quad u = k + \omega \quad , \quad v = \omega . \quad (2.40)$$

O jacobiano J de $(k, \omega) \rightarrow (u, v)$ é:

$$J = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial k}{\partial u} & \frac{\partial k}{\partial v} \\ \frac{\partial \omega}{\partial u} & \frac{\partial \omega}{\partial v} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 . \quad (2.41)$$

Após as devidas substituições, obtemos:

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \sum_{N \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} du \left(\sum_{M \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} dv \tilde{\alpha}_{N-M}(u-v) \tilde{\beta}_M(v) e^{-i(u-v)M\theta} \right) e^{iN\hat{x}_1} e^{iu\hat{x}_0} , \quad (2.42)$$

de onde vemos que os coeficientes do produto $\hat{\alpha}\hat{\beta}$ são dados por uma *convolução deformada* entre os coeficientes de $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$. Quando $\theta \rightarrow 0$, recuperamos o produto de convolução usual entre funções.

Vamos agora considerar $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ do ponto de vista de seus geradores.

De maneira análoga ao caso comutativo, se escolhermos $\tilde{\alpha}_n(\omega) = \delta_{n,1}\delta(\omega)$ e substituirmos em (2.34), obteremos:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \delta_{n,1} \delta(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = e^{i\hat{x}_1}. \quad (2.43)$$

Por outro lado, substituindo $\tilde{\alpha}_n(\omega) = i\delta_{n,0}\delta'(\omega)$ em (2.34) obtém-se:

$$\hat{\alpha} = i \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \delta_{n,0} \delta'(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = i \int_{\mathbb{R}} d\omega \delta'(\omega) e^{i\omega\hat{x}_0} = \hat{x}_0. \quad (2.44)$$

Analogamente ao caso comutativo, podemos caracterizar $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ como sendo a álgebra unital *gerada* por \hat{x}_0 e $e^{i\hat{x}_1}$, com a regra de comutação:

$$\begin{aligned} [\hat{x}_0, e^{i\hat{x}_1}] &= [\hat{x}_0, \mathbb{I}] + i[\hat{x}_0, \hat{x}_1] + \frac{(i)^2}{2!} [\hat{x}_0, \hat{x}_1^2] + \frac{(i)^3}{3!} [\hat{x}_0, \hat{x}_1^3] + \dots = \\ &= -\theta \left(\mathbb{I} + i\hat{x}_1 + \frac{(i\hat{x}_1)^2}{2!} + \dots \right) = -\theta e^{i\hat{x}_1}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

ou seja,

$$[\hat{x}_0, e^{i\hat{x}_1}] = -\theta e^{i\hat{x}_1}, \quad (2.46)$$

que segue diretamente da aplicação de (2.33). A regra de comutação (2.46) é o substituto adequado para (2.33) no caso do cilindro não-comutativo.

Deve-se notar a similaridade entre os comutadores (2.46) e (2.20). O estudo empreendido anteriormente, voltado para a álgebra de observáveis de uma partícula no círculo, será de utilidade para o estudo do cilindro não-comutativo.

Consideremos, por exemplo, a aplicação de (2.46) em conjunção com a série de Lie (1.3):

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} e^{i\hat{x}_1} e^{i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} &= e^{i\hat{x}_1} + \left(\frac{-i2\pi}{\theta} \right) [\hat{x}_0, e^{i\hat{x}_1}] + \frac{\left(\frac{-i2\pi}{\theta} \right)^2}{2!} [\hat{x}_0, [\hat{x}_0, e^{i\hat{x}_1}]] + \dots = \\ e^{i\hat{x}_1} + i2\pi e^{i\hat{x}_1} + \frac{(i2\pi)^2}{2!} e^{i\hat{x}_1} + \dots &= e^{i2\pi} e^{i\hat{x}_1} = e^{i\hat{x}_1}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Vê-se assim que, no caso do cilindro não-comutativo, vale a seguinte relação análoga a (2.22):

$$e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} e^{i\hat{x}_1} e^{i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} = e^{i\hat{x}_1}. \quad (2.48)$$

Em virtude de (2.48), vemos que $e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0}$ pertence ao centro de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$. Pelo lema de Schur, segue que, em uma representação (unitária) irredutível do cilindro não-comutativo, vale a seguinte relação:

$$e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} = e^{-i\varphi\mathbb{I}}, \quad (2.49)$$

onde $\varphi \in [0, 2\pi)$. Dessa forma, se $\text{spec } \hat{x}_0$ denota o espectro da coordenada \hat{x}_0 em uma tal representação, então podemos escrever:

$$\text{spec } \hat{x}_0 = \theta \left(\mathbb{Z} + \frac{\varphi}{2\pi} \right) \equiv \left\{ \theta \left(n + \frac{\varphi}{2\pi} \right) : n \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (2.50)$$

Em conseqüência do resultado (2.49), temos que:

$$e^{i(\omega + \frac{2\pi}{\theta})\hat{x}_0} = e^{i\varphi} e^{i\omega\hat{x}_0}, \quad (2.51)$$

sempre que os operadores em questão agirem em uma representação (unitária) irredutível de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$.

2.3 A Representação de Schrödinger

Realizamos $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ como uma álgebra de operadores agindo no espaço de Hilbert auxiliar $L^2([0, 2\pi])$, com produto interno dado por:

$$(\alpha, \beta) = \int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha(x_1)} \beta(x_1). \quad (2.52)$$

Nesse espaço, $e^{i\hat{x}_1}$ age como operador de multiplicação:

$$(e^{i\hat{x}_1}\alpha)(x_1) = e^{ix_1}\alpha(x_1), \quad (2.53)$$

enquanto que a ação de \hat{x}_0 é dada por:

$$(\hat{x}_0\alpha)(x_1) = i\theta \frac{\partial \alpha}{\partial x_1}(x_1). \quad (2.54)$$

Assim como no caso do operador momento angular (seção 2.1.1), aqui também devemos escolher o domínio de $\hat{x}_0 = i\theta \frac{\partial}{\partial x_1}$ de forma a garantir que esse operador seja auto-adjunto. A condição de auto-adjunção para \hat{x}_0 é a mesma encontrada para \hat{p}_1 (ver equação (2.28)). O domínio de \hat{x}_0 , denotado por $\mathcal{D}_\varphi(\hat{x}_0)$, é o espaço linearmente gerado pelas seguintes funções:

$$\xi_n(x_1) = e^{-i(n + \frac{\varphi}{2\pi})x_1}. \quad (2.55)$$

Pode-se verificar que $\xi_n(x_1 + 2\pi) = e^{-i\varphi} \xi_n(x_1)$, de modo que

$$\overline{\xi_n(2\pi)} \xi_m(2\pi) = \overline{\xi_n(0)} \xi_m(0). \quad (2.56)$$

Em virtude de (2.56), se α e β são funções escritas na base $\{\xi_n\}$, então vale a seguinte relação:

$$\overline{\alpha(2\pi)} \beta(2\pi) = \overline{\alpha(0)} \beta(0), \quad (2.57)$$

que é exatamente a condição de auto-adjunção para \hat{x}_0 .

Observamos também que a ação de $e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0}$ nesse espaço é dada por:

$$\left(e^{-i\frac{2\pi}{\theta}\hat{x}_0} \xi_n \right) (x_1) = e^{2\pi\frac{\partial}{\partial x_1}} e^{-i(n+\frac{\varphi}{2\pi})x_1} = e^{-i(n+\frac{\varphi}{2\pi})(x_1+2\pi)} = e^{-i\varphi} \xi_n(x_1). \quad (2.58)$$

O resultado (2.58) significa que o domínio $\mathcal{D}_\varphi(\hat{x}_0)$ da coordenada temporal gera a representação irreduzível de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ indexada pelo fluxo φ (ver equação (2.49)). Denotaremos essa representação por $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$.

Vamos agora escrever a expressão para o elemento genérico de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$. Note-se inicialmente que somente potências inteiras de $e^{i\hat{x}_1}$ são permitidas. De fato, segue da regra de comutação (2.33) e da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (equação (2.37)) que¹:

$$e^{-i\omega\hat{x}_0} e^{i\alpha\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = e^{i\omega\theta\alpha} e^{i\alpha\hat{x}_1}. \quad (2.59)$$

Façamos agora $\omega \longrightarrow \omega' = \omega + \frac{2\pi}{\theta}$ em (2.59). Usando (2.51) encontramos:

$$e^{-i\omega\hat{x}_0} e^{i\alpha\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0} = e^{i\omega\theta\alpha} e^{i\alpha\hat{x}_1} e^{i2\pi\alpha}, \quad (2.60)$$

resultado esse que, juntamente com (2.59), implica que $\alpha \in \mathbb{Z}$, conforme havíamos adiantado.

Consideremos agora a dependência em \hat{x}_0 (por simplicidade notacional, ignoraremos a presença de $e^{i\hat{x}_1}$ no que segue). Inspirados pela teoria das transformadas de Fourier [30], podemos escrever genericamente:

$$\hat{\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\alpha}(\omega) e^{i\omega\hat{x}_0}. \quad (2.61)$$

Podemos escrever essa integral como uma soma infinita de integrais, cada uma delas tomada sobre um intervalo de comprimento igual a $\frac{2\pi}{\theta}$:

$$\hat{\alpha} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta} + \frac{2\pi}{\theta}m}^{\frac{\pi}{\theta} + \frac{2\pi}{\theta}m} dz \tilde{\alpha}(z) e^{iz\hat{x}_0}. \quad (2.62)$$

¹A dedução é essencialmente a mesma que levou à equação (2.38).

Efetuada agora a mudança de variáveis $\omega = z - \frac{2\pi}{\theta}m$ na integral $\int_{-\frac{\pi}{\theta} + \frac{2\pi}{\theta}m}^{\frac{\pi}{\theta} + \frac{2\pi}{\theta}m} dz \tilde{\alpha}(z) e^{iz\hat{x}_0}$, teremos:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha} &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha} \left(\omega + m \frac{2\pi}{\theta} \right) e^{im \frac{2\pi}{\theta} \hat{x}_0} e^{i\omega \hat{x}_0} = \\ &= \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \sum_{m \in \mathbb{Z}} \tilde{\alpha} \left(\omega + m \frac{2\pi}{\theta} \right) e^{im\varphi} e^{i\omega \hat{x}_0},\end{aligned}\quad (2.63)$$

onde fizemos uso de (2.49).

Notemos agora que função definida por

$$f_{\tilde{\alpha}}(\omega) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \tilde{\alpha} \left(\omega + m \frac{2\pi}{\theta} \right) e^{im\varphi}$$

é quase-periódica:

$$f_{\tilde{\alpha}} \left(\omega + \frac{2\pi}{\theta} \right) = e^{-i\varphi} f_{\tilde{\alpha}}(\omega), \quad (2.64)$$

de onde concluímos que o elemento mais geral de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ pode ser escrito (recuperando a dependência em $e^{i\hat{x}_1}$) como:

$$\hat{\alpha} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega \hat{x}_0}, \quad (2.65)$$

onde $\tilde{\alpha}_n(\omega + \frac{2\pi}{\theta}) = e^{-i\varphi} \tilde{\alpha}_n(\omega)$.

O espectro da coordenada temporal na representação $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ pode ser obtido diretamente pela ação de $\hat{x}_0 = i\theta \frac{\partial}{\partial x_1}$ em (2.55):

$$\hat{x}_0 e^{-i(n + \frac{\varphi}{2\pi})x_1} = \theta \left(n + \frac{\varphi}{2\pi} \right) e^{-i(n + \frac{\varphi}{2\pi})x_1}, \quad (2.66)$$

de onde concluímos que:

$$\text{spec } \hat{x}_0 = \theta \left(\mathbb{Z} + \frac{\varphi}{2\pi} \right) \equiv \left\{ \theta \left(n + \frac{\varphi}{2\pi} \right) : n \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (2.67)$$

O resultado (2.67) deve ser comparado com (2.50).

O espectro do operador momento \hat{P}_1 agindo em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ pode ser obtido se usarmos o fato de que somente potências inteiras de $e^{i\hat{x}_1}$ estão presentes. Usando novamente a série de Lie (equação (1.3)), temos:

$$e^{-in\hat{x}_1} \hat{x}_0 e^{in\hat{x}_1} = \hat{x}_0 - n\theta \mathbb{I}, \quad (2.68)$$

de onde segue que:

$$\hat{x}_0 e^{in\hat{x}_1} = e^{in\hat{x}_1} \hat{x}_0 - n\theta e^{in\hat{x}_1} \Rightarrow [\hat{x}_0, e^{in\hat{x}_1}] = -n\theta e^{in\hat{x}_1}. \quad (2.69)$$

Lembrando agora que $\hat{P}_1 = -\frac{1}{\theta} \text{ad}_{\hat{x}_0} = -\frac{1}{\theta} [\hat{x}_0, \cdot]$, obtemos finalmente:

$$\hat{P}_1 e^{in\hat{x}_1} = n e^{in\hat{x}_1}, \quad (2.70)$$

de onde se vê que o espectro de \hat{P}_1 , denotado por $\text{spec } \hat{P}_1$, é dado por:

$$\text{spec } \hat{P}_1 = \mathbb{Z}. \quad (2.71)$$

Note-se que o termo de fluxo nesse espectro é 0.

OBS: De agora em diante trabalharemos apenas com a representação $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ estudada nesta seção.

2.4 Automorfismos de Translação

Nesta seção estudamos os automorfismos de translação de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$. Por analogia com o caso do plano não-comutativo, somos levados a investigar a ação dos momentos não-comutativos \hat{P}_0 e \hat{P}_1 no cilindro não-comutativo. Recordemos que, para o caso de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$, esses operadores são definidos pelas equações (1.12), de onde segue que:

$$\hat{P}_\mu \hat{x}_\nu = \eta_{\mu\nu} \mathbb{1}, \quad (2.72)$$

onde $\mu, \nu \in \{0, 1\}$ e $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}[1, -1]$.

A álgebra do cilindro não-comutativo é uma sub-álgebra do plano não-comutativo. A condição que restringe elementos de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R}^2)$ e define o cilindro não-comutativo $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ é a quase-periodicidade dos coeficientes $\tilde{\alpha}_n(\omega)$ em (2.65). Assim, devemos calcular a ação de uma translação temporal arbitrária em (2.65) e verificar se essa ação preserva o caráter quase-periódico dos coeficientes de Fourier. Temos:

$$\begin{aligned} e^{-i\tau\hat{P}_0} \hat{\alpha} &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega(\hat{x}_0 + \tau\mathbb{1})} = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{i\omega\tau} e^{in\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Para que $e^{-i\tau\hat{P}_0}$ preserve a condição que define o cilindro não-comutativo, os novos coeficientes $\tilde{\alpha}_n(\omega) e^{i\omega\tau}$ devem ser funções quase-periódicas de ω , isto é, devem satisfazer

$$\tilde{\alpha}_n \left(\omega + \frac{2\pi}{\theta} \right) e^{i(\omega + \frac{2\pi}{\theta})\tau} = e^{-i\varphi} \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{i\omega\tau}. \quad (2.74)$$

Como $\tilde{\alpha}_n(\omega + \frac{2\pi}{\theta}) = e^{-i\varphi} \tilde{\alpha}_n(\omega)$, vemos que a condição (2.74) somente será satisfeita se $\tau \in \theta\mathbb{Z}$. Isso mostra que as translações em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$ são potências inteiras da translação mínima dada por: $e^{-i\theta\hat{P}_0}\hat{x}_0 = \hat{x}_0 + \theta\mathbb{I}$.

Não existe nenhuma restrição à ação das translações espaciais em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1)$.

2.5 Funcionais Positivos e Produtos Internos

Assim como no caso do plano não-comutativo, podemos construir funcionais lineares positivos em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ através da definição de símbolo de um operador. Seja $\hat{\alpha}$ um elemento de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ escrito na forma (2.65). Como o espectro de \hat{x}_0 é $\theta(\mathbb{Z} + \frac{\varphi}{2\pi})$ e o espectro de $e^{i\hat{x}_1}$ é S^1 , o símbolo de $\hat{\alpha}$ é a função $\alpha : \theta(\mathbb{Z} + \frac{\varphi}{2\pi}) \times S^1 \rightarrow \mathbb{C}$ definida por:

$$\alpha\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_n(\omega) e^{inx_1} e^{i\omega\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right)}. \quad (2.75)$$

Podemos mostrar que $\hat{\alpha}$ determina $\tilde{\alpha}_n$ (e portanto α) de maneira unívoca. Sejam $|n\rangle$ os auto-estados normalizados de \hat{x}_0 na representação irredutível indexada por φ , isto é:

$$\hat{x}_0 |n\rangle = \theta\left(n + \frac{\varphi}{2\pi}\right) |n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.76)$$

Considerando a equação (2.46), isto é:

$$\hat{x}_0 e^{i\hat{x}_1} = e^{i\hat{x}_1} \hat{x}_0 - \theta e^{i\hat{x}_1}, \quad (2.77)$$

e aplicando-a no auto-estado $|n\rangle$ de \hat{x}_0 , encontramos:

$$\hat{x}_0 e^{i\hat{x}_1} |n\rangle = \theta\left(n - 1 + \frac{\varphi}{2\pi}\right) e^{i\hat{x}_1} |n\rangle, \quad (2.78)$$

de onde se vê que

$$e^{i\hat{x}_1} |n\rangle = f_n |n - 1\rangle, \quad (2.79)$$

onde f_n é um fator de proporcionalidade. Note-se agora que, como $e^{i\hat{x}_1}$ é um operador que preserva a norma, então o fator f_n é uma fase. Sem perda de generalidade, podemos tomar $f_n = 1$ (para todos os valores de n). Assim, podemos escrever:

$$e^{i\hat{x}_1} |n\rangle = |n - 1\rangle. \quad (2.80)$$

Seja agora $\hat{\alpha}$ um elemento de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$, escrito na forma (2.65). Calculemos o elemento de matriz de $\hat{\alpha}$ na base dos auto-vetores de \hat{x}_0 :

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{\alpha}|n\rangle &= \sum_{l \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_l(\omega) \langle m|e^{il\hat{x}_1} e^{i\omega\hat{x}_0}|n\rangle = \\ &= \sum_{l \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_l(\omega) \delta_{m, n-l} e^{i\omega\theta\left(n + \frac{\varphi}{2\pi}\right)} = \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_{n-m}(\omega) e^{i\omega\theta\left(n + \frac{\varphi}{2\pi}\right)}. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Se definirmos $m' = n - m$ e fizermos as devidas substituições em (2.81), obteremos:

$$\langle n - m' | \hat{\alpha} | n \rangle = \int_{-\frac{\pi}{\theta}}^{\frac{\pi}{\theta}} d\omega \tilde{\alpha}_{m'}(\omega) e^{i\omega\theta(n + \frac{\varphi}{2\pi})}. \quad (2.82)$$

Para “extrair” o coeficiente $\tilde{\alpha}_{m'}(\omega)$ de (2.82), devemos multiplicar ambos os lados dessa equação por $e^{-i\omega'\theta(n + \frac{\varphi}{2\pi})}$ e somar sobre n . Ao fazer isso, vamos utilizar as seguintes identidades, que podem ser encontradas em [32]:

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{2\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i(\omega - \omega')\theta n} &= \delta_{S^1}(\omega - \omega'), \\ \delta_{S^1}(\omega - \omega') &= \sum_{s \in \mathbb{Z}} \delta\left(\omega - \omega' - \frac{2\pi}{\theta}s\right), \end{aligned} \quad (2.83)$$

onde $\delta_{S^1}(\omega - \omega')$ é a delta periódica, de período $\frac{2\pi}{\theta}$. Obtemos assim:

$$\tilde{\alpha}_m(\omega) = \frac{\theta}{2\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i\omega\theta(n + \frac{\varphi}{2\pi})} \langle n - m | \hat{\alpha} | n \rangle, \quad (2.84)$$

o que mostra que podemos calcular os coeficientes $\tilde{\alpha}_m(\omega)$ de maneira unívoca a partir de $\hat{\alpha}$. De posse desses coeficientes, podemos calcular o símbolo α a partir da definição (2.75).

A aplicação inversa é obtida de maneira similar. O resultado escreve-se:

$$\tilde{\alpha}_n(\omega) = \frac{\theta}{(2\pi)^2} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{-i\omega\theta(m + \frac{\varphi}{2\pi})} \int_0^{2\pi} dx_1 e^{-inx_1} \alpha\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right), \quad (2.85)$$

o que mostra que, dado o símbolo α (ver equação (2.75)), podemos determinar univocamente os coeficientes $\tilde{\alpha}_n(\omega)$ que definem o elemento $\hat{\alpha}$ de $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ (ver equação (2.65)).

O funcional positivo $S_{\theta(m + \frac{\varphi}{2\pi})}$ é definido a partir do símbolo:

$$S_{\theta(m + \frac{\varphi}{2\pi})}(\hat{\alpha}) = \int_0^{2\pi} dx_1 \alpha\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right). \quad (2.86)$$

A positividade de (2.86) segue de:

$$S_{\theta(m + \frac{\varphi}{2\pi})}(\hat{\alpha}^* \hat{\beta}) = \int_0^{2\pi} dx_1 \overline{\alpha\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right)} \beta\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right), \quad (2.87)$$

pois se escolhermos $\hat{\alpha} = \hat{\beta}$, obteremos:

$$S_{\theta(m + \frac{\varphi}{2\pi})}(\hat{\alpha}^* \hat{\alpha}) = \int_0^{2\pi} dx_1 \left| \alpha\left(\theta\left(m + \frac{\varphi}{2\pi}\right), e^{ix_1}\right) \right|^2 \geq 0. \quad (2.88)$$

Analogamente ao caso do plano não-comutativo, o mapa positivo (2.86) induz uma família de formas sesqui-lineares em $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$ através de:

$$\begin{aligned} (\hat{\alpha}, \hat{\beta})_{\theta(m+\frac{\varphi}{2\pi})} &= S_{\theta(m+\frac{\varphi}{2\pi})}(\hat{\alpha}^* \hat{\beta}) = \\ &= \int_0^{2\pi} dx_1 \alpha^* \left(\theta \left(m + \frac{\varphi}{2\pi} \right), e^{ix_1} \right) \beta \left(\theta \left(m + \frac{\varphi}{2\pi} \right), e^{ix_1} \right). \end{aligned} \quad (2.89)$$

2.6 A Equação de Schrödinger Discreta

Nesta seção construiremos o espaço de Hilbert quanto-mecânico para o caso de um sistema definido em um cilindro não-comutativo. Consideraremos somente o caso de uma Hamiltoniana independente do tempo.

Verificamos na seção (2.4) que as translações temporais contínuas não preservam a álgebra do cilindro não-comutativo. Por essa razão, não podemos impor a equação de Schrödinger usual (ver seção 1.3.2) no caso do cilindro. Lembremos também que o operador

$$e^{-i\theta\hat{P}_0} = e^{i\text{ad}_{x_1}} \quad (2.90)$$

e suas potências inteiras preservam $\mathcal{A}_\theta(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}})$. Tendo esses fatos em vista, consideremos a seguinte forma equivalente da equação de Schrödinger usual:

$$e^{-i\tau(\hat{P}_0 - \hat{H})}\hat{\psi} = \hat{\psi}. \quad (2.91)$$

Como estamos supondo uma Hamiltoniana independente do tempo, temos que $[\hat{P}_0, \hat{H}] = 0$, de modo que podemos escrever (2.91) na forma:

$$e^{-i\tau\hat{P}_0}\hat{\psi} = e^{-i\tau\hat{H}}\hat{\psi}. \quad (2.92)$$

Agora, levando em conta a observação inicial com relação à ação do operador de translação temporal, somos levados a postular a seguinte alternativa à equação de Schrödinger usual:

$$e^{-i\theta\hat{P}_0}\hat{\psi} = e^{-i\theta\hat{H}}\hat{\psi}. \quad (2.93)$$

As soluções de (2.93) formam o espaço de Hilbert $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$ dos estados físicos:

$$\mathcal{H}_{\theta,\varphi} = \left\{ \hat{\psi} \in \mathcal{A}_\theta \left(\mathbb{R} \times S^1, e^{i\frac{\varphi}{2\pi}} \right) : e^{-i\theta\hat{P}_0}\hat{\psi} = e^{-i\theta\hat{H}}\hat{\psi} \right\}. \quad (2.94)$$

Os elementos de $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$ podem ser escritos genericamente na forma:

$$\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H} \left(e^{i\hat{x}_1^L}, \hat{P}_1 \right)} \hat{\chi} \left(e^{i\hat{x}_1} \right). \quad (2.95)$$

De fato, verifica-se que (2.95) satisfaz (2.93):

$$\begin{aligned}
e^{-i\theta\hat{P}_0}\hat{\psi} &= e^{-i\theta\hat{P}_0} \left[e^{-i\hat{x}_0^R\hat{H}(e^{i\hat{x}_1^L},\hat{P}_1)}\hat{\chi}(e^{i\hat{x}_1}) \right] = e^{-i(\hat{x}_0^R+\theta)\hat{H}(e^{i\hat{x}_1^L},\hat{P}_1)}\hat{\chi}(e^{i\hat{x}_1}) = \\
&= e^{-i\theta\hat{H}(e^{i\hat{x}_1^L},\hat{P}_1)} \left[e^{-i\hat{x}_0^R\hat{H}(e^{i\hat{x}_1^L},\hat{P}_1)}\hat{\chi}(e^{i\hat{x}_1}) \right] = e^{-i\theta\hat{H}(e^{i\hat{x}_1^L},\hat{P}_1)}\hat{\psi}. \tag{2.96}
\end{aligned}$$

Deve-se notar a analogia entre (2.95) e (1.67), esta última sendo válida para o caso do plano não-comutativo.

No próximo capítulo consideraremos Hamiltonianas dependentes não apenas de \hat{P}_1 e $e^{i\hat{x}_1^L}$, mas também dos graus de liberdade usuais da mecânica quântica. Como esses últimos correspondem a coordenadas comutativas, os espaços de Hilbert associados a essas Hamiltonianas “mistas” têm a forma de um produto tensorial entre o espaço $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$ estudado no presente capítulo (associado ao grau de liberdade extra) e o espaço \mathcal{H}_θ estudado no primeiro capítulo, associado aos graus de liberdade usuais. Esse último é equivalente a $L^2(Q)$, onde Q denota o espaço de configurações usual.

Capítulo 3

Teoria Formal de Espalhamento

3.1 Formalismo Dependente do Tempo

Nesta seção nós apresentamos o formalismo dependente do tempo para a teoria de espalhamento, no caso de evoluções discretas. Introduzimos as funções de Green retardada e adiantada, os estados *in* e *out* e obtemos as *equações integrais* para esses estados. Introduzimos os conceitos de operador de espalhamento e de matriz de espalhamento, que constituem as peças centrais da teoria. As fórmulas obtidas para o caso discreto guardam grande semelhança com as fórmulas análogas válidas para o caso usual. Ao longo de todo o capítulo tomaremos $\hbar = 1$.

Estamos interessados no caso de um sistema quântico cujo espaço de configurações é da forma $\tilde{Q} = Q \times S^1$, onde a dimensão compacta S^1 corresponde a um grau de liberdade extra, que não comuta com a coordenada temporal. O fator Q corresponde aos graus de liberdade usuais (comutativos).

Seja \hat{H} a Hamiltoniana que descreve o sistema quântico em estudo. Um caso de grande interesse para esta Tese é aquele em que \hat{H} pode ser escrita na forma:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^d \frac{\hat{p}_j^2}{2M} + \frac{\hat{P}_1^2}{2M} + \hat{V}(\vec{q}), \quad (3.1)$$

onde $\vec{q} = (\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_d)$ e $\vec{p} = (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_d)$ representam os operadores de posição e momento usuais da Mecânica Quântica e \hat{P}_1 é o operador momento definido em (1.12). A Hamiltoniana (3.1) depende não apenas dos graus de liberdade usuais, mas também do grau de liberdade extra (compacto), que não comuta com o tempo. É exatamente a dependência de \hat{H} com relação a \hat{P}_1 que levará à discretização da evolução temporal do sistema descrito por (3.1).

3.1.1 Hamiltonianas e Espaços de Hilbert

A Hamiltoniana total (3.1) é a soma de um termo cinético com um termo potencial. O termo cinético, isto é,

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0(\vec{p}, \hat{P}_1) = \sum_{j=1}^d \frac{\hat{p}_j^2}{2M} + \frac{\hat{P}_1^2}{2M},$$

será chamado de Hamiltoniana livre.

Tanto a Hamiltoniana livre quanto a Hamiltoniana total desempenham um papel importante na teoria de espalhamento. Os auto-estados da Hamiltoniana livre correspondem aos possíveis estados iniciais e finais do sistema, enquanto que a Hamiltoniana total é responsável pela dinâmica do sistema. Recordemos agora que, conforme visto nas seções 1.3 e 2.5, a construção dos espaços de Hilbert no formalismo do tempo congelado depende da escolha de uma Hamiltoniana. Dessa forma, podemos associar um espaço de Hilbert a \hat{H}_0 (denotado por $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$) e um a \hat{H} (denotado por $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$), dando assim origem a uma aparente multiplicidade de espaços de Hilbert de estados físicos. A solução para essa questão reside na seguinte observação: podemos mapear os elementos de $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$ nos elementos de $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$ de uma tal forma que a norma dos vetores é preservada. Os observáveis agindo nos dois espaços também podem ser mapeados uns nos outros, de tal forma que o valor dos elementos de matriz é preservado na passagem de um espaço para o outro.

Em nossa formulação da teoria de espalhamento trabalharemos apenas com operadores agindo em $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$. É importante ter em mente que, de acordo com as observações feitas acima, existe um único espaço de Hilbert (os espaços de Hilbert associados a diferentes Hamiltonianas são equivalentes entre si).

Especificaremos agora a relação entre os elementos de $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$ e os elementos de $\mathcal{H}_{\theta,\varphi}$. Recordemos que, se $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$, então podemos escrever (ver equação (2.95)):

$$\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0(\vec{p}, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\vec{q}, e^{i\hat{x}_1}) , \quad (3.2)$$

onde, assim como antes, $\vec{q} = (\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_d)$ e $\vec{p} = (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_d)$ são os operadores de Heisenberg usuais.

Por sua vez, se $\hat{\phi} \in \mathcal{H}_{\theta,\varphi}$, então podemos escrever:

$$\hat{\phi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}(\vec{q}, \vec{p}, e^{i\hat{x}_1^L}, \hat{P}_1)} \hat{\chi}(\vec{q}, e^{i\hat{x}_1}) . \quad (3.3)$$

Assim, dado um elemento $\hat{\phi} \in \mathcal{H}_{\theta,\varphi}$ como em (3.3), definimos o seu correspondente $\hat{\psi} \in \mathcal{H}_{\theta,\varphi}^0$ através de:

$$\hat{\psi} = \mathcal{U}\hat{\phi}, \quad (3.4)$$

onde \mathcal{U} é o operador unitário definido por:

$$\mathcal{U} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0(\vec{p}, \hat{P}_1)} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}(\vec{q}, \vec{p}, e^{i\hat{x}_1^L}, \hat{P}_1)}. \quad (3.5)$$

O operador \mathcal{U} também pode ser usado para mapear observáveis agindo em $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}$ em observáveis agindo em $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0$. Em particular, se \hat{H} é a Hamiltoniana total agindo em $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}$, o seu correspondente \hat{H}' agindo em $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0$ escreve-se:

$$\hat{H}' = \mathcal{U} \hat{H} \mathcal{U}^\dagger = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{H} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}_0}. \quad (3.6)$$

Note-se que a ação de \hat{H}' em um elemento arbitrário $\hat{\psi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{\chi}$ de $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0$ é dada por:

$$\hat{H}' \hat{\psi} = \hat{H}' e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{\chi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{H} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{\chi} = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} (\hat{H} \hat{\chi}) \in \mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0, \quad (3.7)$$

o que mostra que \hat{H}' preserva $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0$.

3.1.2 Funções de Green

Assim como da Mecânica Quântica usual, no caso de evoluções discretas também podemos definir as funções de Green retardada e avançada. No caso da Hamiltoniana livre \hat{H}_0 , nós introduzimos a função de Green retardada (livre) através de:

$$G^+(M - N) = \begin{cases} -ie^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} & , \text{ para } M - N > 0, \\ 0 & , \text{ para } M - N \leq 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

Note-se que o limite do contínuo (correspondente a $\theta \rightarrow 0$, $M - N \rightarrow \infty$ e $\theta(M - N) = \tau$) é a função de Green retardada (usual) $G^+(\tau)$, dada por:

$$G^+(\tau) = \begin{cases} -ie^{-i\tau\hat{H}_0} & , \text{ para } \tau > 0, \\ 0 & , \text{ para } \tau < 0, \end{cases} \quad (3.9)$$

satisfazendo a condição:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} G^+(\tau) - \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G^+(\tau) = -i\mathbb{I}.$$

Seguindo a mesma linha, podemos introduzir os análogos discretos das outras funções de Green da teoria de espalhamento usual. Por exemplo, para a função de Green avançada $G^-(M - N)$, nós escrevemos:

$$G^-(M - N) = \begin{cases} 0 & , \text{ para } M - N \geq 0, \\ ie^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} & , \text{ para } M - N < 0. \end{cases} \quad (3.10)$$

As funções de Green associadas à Hamiltoniana total \hat{H}' , denotadas por $\mathcal{G}^+(M - N)$ e $\mathcal{G}^-(M - N)$, podem ser obtidas (formalmente) a partir de (3.8) e (3.10), pela substituição de \hat{H}_0 por \hat{H} . Elas escrevem-se:

$$\mathcal{G}^+(M - N) = \begin{cases} -ie^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} & , \text{ para } M - N > 0, \\ 0 & , \text{ para } M - N \leq 0, \end{cases} \quad (3.11)$$

e

$$\mathcal{G}^-(M - N) = \begin{cases} 0 & , \text{ para } M - N \geq 0, \\ ie^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} & , \text{ para } M - N < 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

As funções de Green definidas acima possuem a mesma interpretação física do caso usual. De fato, se

$$\hat{\psi}(N) = e^{-i\theta N \hat{P}_0} \hat{\psi} = e^{-iN\theta \hat{H}_0} \hat{\psi}$$

denota uma função de onda livre no instante de tempo $N\theta$ (aqui $\hat{\psi} = \hat{\psi}(\vec{q}, e^{i\hat{x}})$), então

$$\hat{\psi}(M) = e^{-i(M-N)\hat{H}_0} \hat{\psi}(N) = iG^+(M - N)\hat{\psi}(N) , \text{ se } M > N \quad (3.13)$$

e

$$\hat{\psi}(M) = e^{-i(M-N)\hat{H}_0} \hat{\psi}(N) = -iG^-(M - N)\hat{\psi}(N) , \text{ se } M < N , \quad (3.14)$$

o que mostra que $G^+(M - N)$ propaga funções de onda (livres) em direção ao futuro, assim como $G^-(M - N)$ propaga na direção do passado. Afirmções análogas valem para as funções de Green (3.11) e (3.12), ou seja, se

$$\hat{\psi}(N) = e^{-i\theta N \hat{P}_0} \hat{\psi} = e^{-iN\theta \hat{H}'} \hat{\psi}$$

denota uma função de onda (em interação) no instante de tempo $N\theta$, então

$$\hat{\psi}(M) = e^{-i(M-N)\hat{H}'} \hat{\psi}(N) = i\mathcal{G}^+(M - N)\hat{\psi}(N) , \text{ se } M > N \quad (3.15)$$

e

$$\hat{\psi}(M) = e^{-i(M-N)\hat{H}'} \hat{\psi}(N) = -i\mathcal{G}^-(M - N)\hat{\psi}(N) , \text{ se } M < N . \quad (3.16)$$

Podemos mostrar por cálculo direto que:

$$\begin{aligned} G^+(M)^\dagger &= G^-(-M) , \\ \mathcal{G}^+(M)^\dagger &= \mathcal{G}^-(-M)^\dagger . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Construímos estados *in* e *out* assim como no caso usual. Se $\hat{\psi}$ é uma função de onda cuja evolução é controlada pela Hamiltoniana \hat{H}' , definimos:

$$\hat{\psi}_{in}(M) = i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^+(M - N) \hat{\psi}(N) \quad (3.18)$$

e

$$\hat{\psi}_{out}(M) = -i \lim_{\substack{N \rightarrow \infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^-(M - N) \hat{\psi}(N). \quad (3.19)$$

Podemos mostrar que $\hat{\psi}_{in}$ (bem como $\hat{\psi}_{out}$) é um estado livre. De fato, como $e^{-i\theta\hat{P}_0}$ comuta com $G^+(M - N)$, temos:

$$\begin{aligned} e^{-i\theta\hat{P}_0} \hat{\psi}_{in}(M) &= i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^+(M - N) e^{-i\theta\hat{P}_0} \hat{\psi}(N) = \\ &= i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^+(M - N) e^{-i\theta\hat{H}'} \hat{\psi}(N) = i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^+(M - N) e^{-i\theta(N+1)\hat{H}'} \hat{\psi} = \\ &= \lim_{\substack{N' \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{-i\theta(M-N'+1)\hat{H}_0} e^{-i\theta N' \hat{H}'} \hat{\psi} = e^{-i\theta\hat{H}_0} \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} e^{-i\theta N \hat{H}'} \hat{\psi} = \\ &= e^{-i\theta\hat{H}_0} i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} G^+(M - N) \hat{\psi}(N) = e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}_{in}(M), \end{aligned} \quad (3.20)$$

ou seja,

$$e^{-i\theta\hat{P}_0} \hat{\psi}_{in}(M) = e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}_{in}(M). \quad (3.21)$$

Fazendo uso da definição de estados *in*, podemos converter a equação de Schrödinger em uma equação do tipo “integral”. A idéia consiste em considerar a “derivada” de $G^+(M - N)\hat{\psi}(N)$ com respeito a N e “integrá-la” com relação a esse parâmetro inteiro. A expressão (3.18) para o estado *in* emergirá naturalmente desse procedimento.

No caso discreto o papel da derivada será exercido pela diferença finita Δ_N . Assim, consideremos a expressão

$$\Delta_N \left[iG^+(M - N)\hat{\psi}(N) \right] = iG^+(M - N - 1)\hat{\psi}(N + 1) - iG^+(M - N)\hat{\psi}(N) \quad (3.22)$$

e tomemos como ponto de partida a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} iG^+(M - N - 1)\hat{\psi}(N + 1) - iG^+(M - N)\hat{\psi}(N) &= \\ = iG^+(M - N - 1)(e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I})\hat{\psi}(N) + i[G^+(M - N - 1) - G^+(M - N)]\hat{\psi}(N). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Agora vamos “integrar” a equação (3.23) com relação a N . No caso discreto a integração corresponde a somar sobre os valores do parâmetro inteiro N . Assim, devemos considerar a família discreta de equações (3.23), onde cada equação da família corresponde a um determinado valor de N , para em seguida somar (membro a membro) todas as equações dessa família. O lado esquerdo dessa soma pode ser calculado rapidamente, se notarmos que as equações associadas a dois valores sucessivos do parâmetro N contém parcelas “intermediárias” que cancelam-se duas a duas, de modo que somente as contribuições provenientes das extremidades “sobrevivem”. Por exemplo, para o caso de $N = 0$ e $N = 1$ temos:

$$\begin{aligned} & \overbrace{iG^+(M-2)\hat{\psi}(2) - iG^+(M-1)\hat{\psi}(1)}^{N=1} + \overbrace{iG^+(M-1)\hat{\psi}(1) - iG^+(M)\hat{\psi}(0)}^{N=0} = \\ & = iG^+(M-2)\hat{\psi}(2) - iG^+(M)\hat{\psi}(0). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Generalizando o resultado (3.24) para todos os elementos da família de equações (3.23), obtemos o seguinte resultado para o primeiro membro da soma em questão:

$$\begin{aligned} & i \sum_{N \in \mathbb{Z}} \left[G^+(M-N-1)\hat{\psi}(N+1) - G^+(M-N)\hat{\psi}(N) \right] = \\ & i \lim_{N \rightarrow \infty} G^+(M-N-1)\hat{\psi}(N+1) - i \lim_{L \rightarrow -\infty} G^+(M-L)\hat{\psi}(L) = \\ & = -i \lim_{L \rightarrow -\infty} G^+(M-L)\hat{\psi}(L) = -\psi_{in}(M), \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde usamos o fato de que, como M é finito, o termo

$$i \lim_{N \rightarrow \infty} G^+(M-N-1)\hat{\psi}(N+1)$$

em (3.25) é identicamente nulo, como se vê a partir da definição (3.8) de função de Green retardada.

Vamos agora analisar a primeira parcela do segundo membro de (3.23). Pela definição (3.8) de função de Green retardada, vemos que essa parcela é não-nula apenas para valores positivos do argumento de $G^+(M-N-1)$, ou seja, sempre que $M-N-1 > 0$. A soma dos termos desse tipo reduz-se portanto a

$$i \sum_{N \in \mathbb{Z}} G^+(M-N-1) (e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N) = \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N-1)\hat{H}_0} (e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N). \quad (3.26)$$

Com relação à segunda parcela do segundo membro de (3.23), a condição necessária para haverem contribuições não-nulas é $M-N > 0$. Quando $M-N = 1$, a função de Green $G^+(M-N-1)$ é nula, enquanto que $G^+(M-N) = -ie^{-i\theta\hat{H}_0}$. Quando $M-N > 1$,

tanto $G^+(M-N-1)$ quanto $G^+(M-N)$ são não-nulas. O resultado da soma dos termos desse tipo é dado por:

$$\begin{aligned}
& i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^+(M-N-1) - G^+(M-N)] \hat{\psi}(N) = \\
& = \underbrace{i(G^+(0) - G^+(1))\hat{\psi}(M-1)}_{M-N=1} + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N-1)\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}_0}) \hat{\psi}(N) = \\
& = -e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1) + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N-1)\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}_0}) \hat{\psi}(N). \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Vamos agora somar os resultados (3.26) e (3.27):

$$\begin{aligned}
& i \sum_{N \in \mathbb{Z}} G^+(M-N-1) (e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N) + \\
& + i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^+(M-N-1) - G^+(M-N)] \hat{\psi}(N) = \\
& = \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N-1)\hat{H}_0} (e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N) + \\
& - e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1) + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N-1)\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}_0}) \hat{\psi}(N) = \\
& = -e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1) + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N). \quad (3.28)
\end{aligned}$$

Usando o fato de que o resultado (3.25) deve ser igual a (3.28) escrevemos:

$$-\psi_{in}(M) = -e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1) + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N). \quad (3.29)$$

Somando e subtraindo o termo

$$A = \hat{\psi}(M) - e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1)$$

ao segundo membro de (3.29) obtemos:

$$\begin{aligned}
-\psi_{in}(M) & = -\hat{\psi}(M) + \sum_{N < M-1} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N) + \\
& + \underbrace{\hat{\psi}(M) - e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1)}_A. \quad (3.30)
\end{aligned}$$

O termo A , isto é, a última parcela em (3.30), pode ser escrito como

$$A = \hat{\psi}(M) - e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}(M-1) = e^{-i\theta(M-(M-1))\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(M-1), \quad (3.31)$$

o que mostra que A tem a *mesma forma* do elemento genérico sob o símbolo de soma no segundo membro de (3.30). De fato, A corresponde ao caso $N = M - 1$ desse termo genérico. Assim, podemos incorporar A a essa soma, o que corresponde a escrever:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(M) &= \hat{\psi}_{in}(M) + \sum_{N < M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N) = \\ &= \hat{\psi}_{in}(M) + i \sum_{N < M} G^+(M-N) (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) \hat{\psi}(N).\end{aligned}\quad (3.32)$$

O limite do contínuo de (3.32), correspondente a $\theta \rightarrow 0$, $M \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $M\theta = \tau$ e $N\theta = t$, é dado por:

$$\hat{\psi}(\tau) = \hat{\psi}_{in}(\tau) - i \int_{-\infty}^{\tau} dt e^{-i(\tau-t)\hat{H}_0} (\hat{H}' - \hat{H}_0) \hat{\psi}(t), \quad (3.33)$$

que é exatamente o resultado da Mecânica Quântica .

Para o caso da função de Green avançada, podemos obter uma equação integral mediante um procedimento análogo ao caso anterior. Nesse caso tomamos como ponto de partida a identidade

$$\begin{aligned}-iG^-(M-N)\hat{\psi}(N) + iG^-(M-(N-1))\hat{\psi}(N-1) &= \\ = -iG^-(M-N)(e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I})\hat{\psi}(N-1) + \\ -i[G^-(M-N) - G^-(M+1-N)]\hat{\psi}(N-1)\end{aligned}\quad (3.34)$$

e somamos (3.34) sobre todos os valores de $N \in \mathbb{Z}$. Assim como no caso anterior, o primeiro membro pode ser calculado rapidamente. Usando a definição (3.19) de estado *out* obtemos:

$$\begin{aligned}i \sum_{N \in \mathbb{Z}} \left[-G^-(M-N)\hat{\psi}(N) + G^-(M+1-N)\hat{\psi}(N-1) \right] &= \\ = -i \lim_{N \rightarrow \infty} G^-(M-N)\hat{\psi}(N) + i \lim_{L \rightarrow -\infty} G^-(M+1-L)\hat{\psi}(L-1) &= \hat{\psi}_{out}(M),\end{aligned}\quad (3.35)$$

uma vez que, pela definição (3.10) de função de Green avançada, o termo

$$i \lim_{L \rightarrow -\infty} G^-(M+1-L)\hat{\psi}(L-1)$$

é identicamente nulo.

Com relação ao segundo membro de (3.34), analisaremos as duas parcelas separadamente. A primeira parcela apresenta contribuições não-nulas sempre que $M - N < 0$. O

resultado da soma das contribuições desse tipo é dado por:

$$\begin{aligned}
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} G^-(M - N)(e^{-i\theta \hat{H}'} - \mathbb{I})\hat{\psi}(N - 1) = \\
& = \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0}(e^{-i\theta \hat{H}'} - \mathbb{I})\hat{\psi}(N - 1). \tag{3.36}
\end{aligned}$$

Quanto à segunda parcela, as contribuições não-nulas também advêm dos termos correspondentes a $M - N < 0$. A soma dos termos desse tipo é dada por:

$$\begin{aligned}
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^-(M - N) - G^-(M + 1 - N)] \hat{\psi}(N - 1) = \\
& = \underbrace{-i(G^-(-1) - G^-(0))\hat{\psi}(M)}_{M-N=-1} + \sum_{N > M+1} [e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} - e^{-i\theta(M+1-N)\hat{H}_0}] \hat{\psi}(N - 1) = \\
& = e^{i\theta \hat{H}_0} \hat{\psi}(M) + \sum_{N > M+1} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} [\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0}] \hat{\psi}(N - 1). \tag{3.37}
\end{aligned}$$

Agora vamos subtrair e somar $\hat{\psi}(M)$ ao segundo membro de (3.37):

$$\begin{aligned}
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^-(M - N) - G^-(M + 1 - N)] \hat{\psi}(N - 1) = \\
& = \hat{\psi}(M) + \sum_{N > M+1} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0}) \hat{\psi}(N - 1) + \\
& + e^{i\theta \hat{H}_0} \hat{\psi}(M) - \hat{\psi}(M). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

Note-se agora que a soma das duas últimas parcelas do segundo membro de (3.38) pode ser escrita como:

$$e^{i\theta \hat{H}_0} \hat{\psi}(M) - \hat{\psi}(M) = e^{-i\theta(M-(M+1))\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0}) \hat{\psi}((M + 1) - 1), \tag{3.39}$$

o que mostra que esse termo pode ser incorporado ao símbolo de soma no segundo membro de (3.38). Escrevemos então:

$$\begin{aligned}
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^-(M - N) - G^-(M + 1 - N)] \hat{\psi}(N - 1) = \\
& = \hat{\psi}(M) + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0}) \hat{\psi}(N - 1). \tag{3.40}
\end{aligned}$$

Somando (3.36) e (3.40) obtemos:

$$\begin{aligned}
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} G^-(M-N)(e^{-i\theta \hat{H}'} - \mathbb{I})\hat{\psi}(N-1) + \\
& -i \sum_{N \in \mathbb{Z}} [G^-(M-N) - G^-(M+1-N)] \hat{\psi}(N-1) = \\
& = \hat{\psi}(M) + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0}(e^{-i\theta \hat{H}'} - e^{-i\theta \hat{H}_0})\hat{\psi}(N-1) = \\
& = \hat{\psi}(M) + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0}(\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0} e^{i\theta \hat{H}'})\hat{\psi}(N). \tag{3.41}
\end{aligned}$$

Lembrando que (3.35) deve ser igual a (3.41), escrevemos:

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}(M) & = \hat{\psi}_{out}(M) - \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0}(\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0} e^{i\theta \hat{H}'})\hat{\psi}(N) = \\
& = \hat{\psi}_{out}(M) + i \sum_{N > M} G^-(M-N)(\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}_0} e^{i\theta \hat{H}'})\hat{\psi}(N). \tag{3.42}
\end{aligned}$$

O limite do contínuo de (3.42) corresponde à equação integral usual para $\hat{\psi}(\tau)$:

$$\hat{\psi}(\tau) = \hat{\psi}_{out}(\tau) + i \int_{\tau}^{\infty} dt e^{-i(\tau-t)\hat{H}_0}(\hat{H}' - \hat{H}_0)\hat{\psi}(t). \tag{3.43}$$

Partindo agora de (3.32) e (3.42) e realizando as substituições formais

$$\begin{aligned}
\hat{\psi} & \longleftrightarrow \hat{\psi}_{in} \quad , \quad \hat{H}' \longleftrightarrow \hat{H}_0 \quad , \quad \text{para (3.32)} \quad , \\
\hat{\psi} & \longleftrightarrow \hat{\psi}_{out} \quad , \quad \hat{H}' \longleftrightarrow \hat{H}_0 \quad , \quad \text{para (3.42)} \quad , \tag{3.44}
\end{aligned}$$

obtemos as equações

$$\hat{\psi}(M) = \hat{\psi}_{in}(M) - \sum_{N < M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'}(e^{i\theta \hat{H}'} e^{-i\theta \hat{H}_0} - \mathbb{I})\hat{\psi}_{in}(N) \tag{3.45}$$

e

$$\hat{\psi}(M) = \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'}(\mathbb{I} - e^{-i\theta \hat{H}'} e^{i\theta \hat{H}_0})\hat{\psi}_{out}(N), \tag{3.46}$$

com limites do contínuo idênticos às correspondentes equações da Mecânica Quântica, isto é:

$$\hat{\psi}(\tau) = \hat{\psi}_{in}(\tau) - i \int_{-\infty}^{\tau} dt e^{-i(\tau-t)\hat{H}'}(\hat{H}' - \hat{H}_0)\hat{\psi}_{in}(t) \tag{3.47}$$

e

$$\hat{\psi}(\tau) = \hat{\psi}_{out}(\tau) + i \int_{\tau}^{\infty} dt e^{-i(\tau-t)\hat{H}'} (\hat{H}' - \hat{H}_0) \hat{\psi}_{out}(t). \quad (3.48)$$

As equações (3.45) e (3.46) não são interessantes do ponto de vista prático, pois pressupõem um conhecimento prévio das funções de Green completas do problema. Elas não constituem um bom ponto de partida para cálculos perturbativos, por exemplo¹.

É importante enfatizar que os resultados (3.45) e (3.46) podem ser obtidos (diretamente) pelo mesmo tipo de manipulação que levou aos resultados (3.32) e (3.42). O “truque” (3.44) constitui apenas um “atalho mental” para a resposta certa. O cálculo explícito envolve os seguintes passos: em primeiro lugar escrevemos

$$\hat{\psi}(M) = i \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty \\ N \in \mathbb{Z}}} \mathcal{G}^+(M-N) \hat{\psi}_{in}(N), \quad (3.49)$$

e em seguida verificamos que a evolução temporal de (3.49) é controlada por \hat{H}' . O próximo passo consiste em escrever uma equação a diferenças finitas envolvendo

$$i\mathcal{G}^+(M-N) \hat{\psi}_{in}(N).$$

O passo final consiste em “integrar” essa equação, de maneira análoga aos casos mostrados acima. O resultado desse procedimento é exatamente a equação (3.45).

A equação (3.46) pode ser expressa de uma forma alternativa. A manipulação nesse caso consiste simplesmente em partir de (3.46) e escrever:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(M) &= \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N>M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}'} e^{i\theta\hat{H}_0}) \hat{\psi}_{out}(N) = \\ &= \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N>M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) e^{i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}_{out}(N) = \\ &= \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N-1>M-1} e^{-i\theta(M-(N-1))\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{out}(N-1) = \\ &= \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N \geq M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{out}(N). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Chamamos a atenção para a semelhança entre (3.50) e (3.45). A equação (3.50) será útil na próxima seção, quando estudarmos a relação entre a matriz de espalhamento e a matriz de transição.

¹Mesmo no caso da Mecânica Quântica usual essa observação permanece válida.

3.1.3 Operadores de Möller e Matriz de Espalhamento

Consideremos agora as equações (3.45) e (3.46). Vamos inserir (3.14) em (3.45):

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(M) &= \hat{\psi}_{in}(M) - \sum_{N < M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) e^{-i\theta(N-M)\hat{H}_0} \hat{\psi}_{in}(M) = \\ &=: \Omega^{(+)} \hat{\psi}_{in}(M),\end{aligned}\tag{3.51}$$

onde o operador de Möller (ou operador de onda) $\Omega^{(+)}$ é dado por:

$$\begin{aligned}\Omega^{(+)} &= \mathbb{I} - \sum_{N \in \mathbb{Z}} \mathcal{G}^+(M-N) (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) G^-(N-M) = \\ &= \mathbb{I} - \sum_{L > 0} e^{-i\theta L \hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) e^{i\theta L \hat{H}_0}.\end{aligned}\tag{3.52}$$

Escrevendo a soma acima explicitamente, vemos que os termos cancelam-se dois a dois, com excessão do termo situado “no infinito”, ou seja:

$$\Omega^{(+)} = \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{i\theta N \hat{H}'} e^{-i\theta N \hat{H}_0}.\tag{3.53}$$

Por sua vez, se inserirmos (3.13) em (3.46) encontraremos:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(M) &= \hat{\psi}_{out}(M) + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}'} e^{i\theta\hat{H}_0}) e^{-i\theta(N-M)\hat{H}_0} \hat{\psi}_{out}(M) = \\ &=: \Omega^{(-)} \hat{\psi}_{out}(M),\end{aligned}\tag{3.54}$$

onde o operador de Möller (ou operador de onda) $\Omega^{(-)}$ é dado por:

$$\begin{aligned}\Omega^{(-)} &= \mathbb{I} + \sum_{N > M} \mathcal{G}^-(M-N) (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}'} e^{i\theta\hat{H}_0}) G^+(N-M) = \\ &= \mathbb{I} + \sum_{N > M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (\mathbb{I} - e^{-i\theta\hat{H}'} e^{i\theta\hat{H}_0}) e^{-i\theta(N-M)\hat{H}_0}.\end{aligned}\tag{3.55}$$

Expandindo a soma acima nós obtemos :

$$\Omega^{(-)} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{i\theta N \hat{H}'} e^{-i\theta N \hat{H}_0}.\tag{3.56}$$

Podemos “inverter” (3.51) e (3.54). Por exemplo, usando (3.12) em (3.32) encontramos:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{in}(M) &= \hat{\psi}(M) - \sum_{N < M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) e^{-i\theta(N-M)\hat{H}'} \hat{\psi}(M) = \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty, \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{i\theta N \hat{H}_0} e^{-i\theta N \hat{H}'} \hat{\psi}(M) = \Omega^{(+)\dagger} \hat{\psi}(M),\end{aligned}\tag{3.57}$$

enquanto que a substituição de (3.11) em (3.42) fornece:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{out}(M) &= \hat{\psi}(M) - \sum_{N>M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}_0} (e^{-i\theta\hat{H}_0} e^{i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I}) e^{-i\theta(N-M)} \hat{\psi}(M) = \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N \in \mathbb{Z}}} e^{i\theta N \hat{H}_0} e^{-i\theta N \hat{H}'} \hat{\psi}(M) = \Omega^{(-)\dagger} \hat{\psi}(M).\end{aligned}\quad (3.58)$$

Chamamos atenção para algumas propriedades importantes dos operadores de Möller. Por exemplo, usando (3.51) e (3.57) encontramos:

$$\hat{\psi}_{in}(M) = \Omega^{(+)\dagger} \Omega^{(+)} \hat{\psi}_{in}(M), \quad (3.59)$$

enquanto (3.54) e (3.58) fornecem:

$$\hat{\psi}_{out}(M) = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(-)} \hat{\psi}_{out}(M). \quad (3.60)$$

Usando o fato de que tanto os estados *in* quanto os estados *out* formam bases completas para o espaço de Hilbert dos estados, obtemos:

$$\Omega^{(+)\dagger} \Omega^{(+)} = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(-)} = \mathbb{I}. \quad (3.61)$$

Apesar de (3.61), os operadores de Möller não são necessariamente unitários. Podemos deduzir as condições necessárias para garantir a unitariedade. O operador de espalhamento é unitário mesmo nas situações em que Ω^\pm não são.

Outra propriedade importante dos operadores de Möller é a chamada *intertwining property* [33]:

$$\Omega^{(+)} e^{-i\theta\hat{H}_0} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N \in \mathbb{Z}}} U(\theta)^{-N} U_0(\theta)^{N+1} = \lim_{\substack{N' \rightarrow \infty \\ N' \in \mathbb{Z}}} U(\theta)^{-(N'-1)} U_0(\theta)^{N'} = e^{-i\theta\hat{H}'} \Omega^{(+)}, \quad (3.62)$$

onde $U(\theta) = e^{-i\theta\hat{H}'}$ e $U_0(\theta) = e^{-i\theta\hat{H}_0}$.

Seguindo uma estratégia análoga à que levou a (3.62), podemos mostrar que:

$$\Omega^{(-)} e^{-i\theta\hat{H}_0} = e^{-i\theta\hat{H}'} \Omega^{(-)}. \quad (3.63)$$

Como consequência de (3.62) e (3.63), se $\hat{\psi}^0(E)$ é um auto-estado de $e^{-i\theta\hat{H}_0}$ com auto-valor $e^{-i\theta E}$, então $\Omega^{(\pm)} \hat{\psi}_0(E)$ é um auto-estado de $e^{-i\theta\hat{H}}$ com o mesmo auto-valor $e^{-i\theta E}$:

$$e^{-i\theta\hat{H}} \Omega^{(\pm)} \hat{\psi}_0(E) = \Omega^{(\pm)} e^{-i\theta\hat{H}_0} \hat{\psi}_0(E) = e^{-i\theta E} \Omega^{(\pm)} \hat{\psi}_0(E). \quad (3.64)$$

Estamos agora em posição de definir um dos conceitos centrais da teoria de espalhamento. Inserindo (3.51) em (3.58) encontramos:

$$\hat{\psi}_{out}(M) = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \hat{\psi}_{in}(M) =: S \hat{\psi}_{in}(M), \quad (3.65)$$

o que define o operador de espalhamento S :

$$S = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)}. \quad (3.66)$$

Deve-se notar que S é um operador que associa estados livres (*in*) a estados livres (*out*). Usando as expressões (3.53) e (3.56) para os operadores de Möller, encontramos:

$$S = \lim_{\substack{M \rightarrow \infty, \\ N \rightarrow -\infty, \\ M, N \in \mathbb{Z}}} e^{iM\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} e^{-iN\theta\hat{H}_0}. \quad (3.67)$$

Em virtude da propriedade de “intertwining” (equação (3.62)), pode-se mostrar que:

$$e^{-i\theta\hat{H}_0} S = S e^{-i\theta\hat{H}_0}. \quad (3.68)$$

Nesse momento faz-se necessário um breve comentário sobre a notação a ser utilizada de agora em diante. O estado livre $\hat{\psi}_{in}(M)$ é especificado por um conjunto de números quânticos (que será denotado por α). Esse conjunto de números quânticos está associado a um conjunto de observáveis que comutam entre si e com \hat{H}_0 . Considerações análogas são válidas para o caso dos estados livres de saída $\hat{\psi}_{out}(M)$, que são especificados por um conjunto de números quânticos denotado por β . É importante enfatizar que os índices *in* e *out* não constituem diferenças de fato entre $\hat{\psi}_{in}(M)$ e $\hat{\psi}_{out}(M)$. Assim, o índice *in* indica que $\hat{\psi}_{in}(M)$ é o estado livre que comparece em (3.32), enquanto que o índice *out* indica que $\hat{\psi}_{out}(M)$ é o estado livre que comparece em (3.42).

Tendo em vista as observações feitas acima, denotaremos os estados *in* e *out*, caracterizados respectivamente pelos números quânticos α e β , pelos símbolos $\hat{\psi}_\alpha^0(M)$ e $\hat{\psi}_\beta^0(M)$.

O elemento de matriz de S entre os estados livres caracterizados pelos números quânticos α e β é chamado de matriz de espalhamento (ou matriz S) e denotado por $S_{\beta\alpha}$:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \langle \hat{\psi}_\beta^0(M) | S | \hat{\psi}_\alpha^0(M) \rangle = \langle e^{-i\theta M \hat{H}_0} \hat{\psi}_\beta | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} | e^{-i\theta M \hat{H}_0} \hat{\psi}_\alpha \rangle = \\ &= \langle \hat{\psi}_\beta | e^{i\theta M \hat{H}_0} \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} e^{-i\theta M \hat{H}_0} | \hat{\psi}_\alpha \rangle = \langle \hat{\psi}_\beta | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} | \hat{\psi}_\alpha \rangle, \end{aligned} \quad (3.69)$$

onde, na última igualdade, usou-se a equação (3.68).

O resultado (3.69) mostra que a matriz de espalhamento é independente do tempo.

3.2 Formalismo Independente do Tempo

Nesta seção fazemos uso da transformada de Fourier (no tempo) para escrever expressões úteis para a matriz de espalhamento. Seremos levados naturalmente a introduzir a noção de matriz de transição $T_{\beta\alpha}$, onde β e α são os mesmos números quânticos que caracterizam a matriz de espalhamento (3.69). A determinação de $S_{\beta\alpha}$ reduz-se ao cálculo de $T_{\beta\alpha}$. A equação fundamental para $T_{\beta\alpha}$ é a *Equação de Lippman-Schwinger Discreta*. O resultado mais importante desta seção é a demonstração de que, em processos de espalhamento (com evoluções discretas) descritos por Hamiltonianas da forma (3.1), a probabilidade de transição entre um estado inicial com energia E_i e um estado final com energia $E_f \neq E_i$ é não-nula. Esse resultado constitui uma generalização da relação usual entre a matriz de espalhamento e a matriz de transição. No caso usual a matriz de espalhamento depende da matriz de transição na superfície de energia (“energy shell”), o que significa que $E_i = E_f$. Essa restrição decorre da presença de uma delta de conservação da energia. No caso discreto, em vez de uma delta de conservação, temos a presença de uma delta periódica, de período igual a $\frac{2\pi}{\theta}$, o que dá origem à possibilidade de violação da conservação da energia.

3.2.1 Transformadas de Fourier no Tempo

Definimos a transformada de Fourier (no tempo) de uma função de onda $\hat{\psi}(M)$ através da seguinte fórmula:

$$\hat{\psi}(E) = \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} \hat{\psi}(M) e^{i\theta M E}. \quad (3.70)$$

Note-se que no limite do contínuo a definição (3.70) reduz-se a:

$$\hat{\psi}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\psi}(t) e^{itE}, \quad (3.71)$$

que corresponde à expressão para a transformada de Fourier (no tempo) de uma função de onda da Mecânica Quântica .

A definição (3.70) nos permite trocar de “descrição” (tempo \rightarrow energia).

Podemos também aplicar essa definição às funções de Green. Por exemplo, para o caso da função de Green retardada (livre) temos:

$$G^+(E) = \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} G^+(M) e^{i\theta M E} = -i\theta \sum_{M > 0} e^{i\theta M (E - \hat{H}_0)}. \quad (3.72)$$

A série em (3.72) é a soma dos elementos de uma progressão geométrica de razão igual a $e^{i\theta(E - \hat{H}_0)}$. Para garantir sua convergência, introduzimos um “fator de convergência”

adequado. A expressão modificada escreve-se:

$$G^+(E) = -i\theta \sum_{M>0} e^{i\theta M(E+i\epsilon-\hat{H}_0)}, \quad (3.73)$$

onde pressupõe-se o limite em que $\epsilon \rightarrow 0^+$ (ϵ é sempre positivo). Em aplicações específicas envolvendo $G^+(E)$, a prática comum consiste em “carregar” ϵ até o final dos cálculos, quando então podemos tomar o limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ de maneira segura. Nas expressões que seguem não explicitaremos o limite em ϵ .

Note-se que agora a norma da razão em (3.73) satisfaz a desigualdade

$$\left| \left| e^{i\theta(E+i\epsilon-\hat{H}_0)} \right| \right| = e^{-\theta\epsilon} < 1.$$

Usando a expressão

$$S = a + a\hat{q} + a\hat{q}^2 + \dots = a \frac{1}{\mathbb{I} - \hat{q}}$$

para a soma dos termos de uma progressão geométrica de razão \hat{q} , encontramos:

$$G^+(E) = -i\theta \frac{e^{i\theta(E+i\epsilon-\hat{H}_0)}}{\mathbb{I} - e^{i\theta(E+i\epsilon-\hat{H}_0)}} = \frac{\theta}{i} \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}_0-E-i\epsilon)} - \mathbb{I}}. \quad (3.74)$$

No caso da função de Green avançada (livre), temos:

$$\begin{aligned} G^-(E) &= \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} G^-(M) e^{i\theta M E} = i\theta \sum_{M < 0} e^{i\theta M(E-i\epsilon-\hat{H}_0)} = \\ &= i\theta \frac{e^{-i\theta(E-i\epsilon-\hat{H}_0)}}{\mathbb{I} - e^{-i\theta(E-i\epsilon-\hat{H}_0)}} = i\theta \frac{1}{e^{i\theta(E-i\epsilon-\hat{H}_0)} - \mathbb{I}}, \end{aligned} \quad (3.75)$$

onde um fator de convergência apropriado foi inserido.

No limite comutativo ($\theta \rightarrow 0$) as expressões (3.74) e (3.75) reduzem-se a:

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} G^+(E) = \frac{1}{E + i\epsilon - \hat{H}_0} \quad \text{e} \quad \lim_{\theta \rightarrow 0} G^-(E) = \frac{1}{E - i\epsilon - \hat{H}_0}, \quad (3.76)$$

que reconhecemos como sendo as expressões da Mecânica Quântica para as funções de Green da Teoria de Espalhamento.

As transformadas de Fourier das funções de Green associadas à Hamiltoniana total são análogas às expressões (3.74) e (3.75), com \hat{H}' no lugar de \hat{H}_0 .

Podemos aplicar a definição (3.70) aos dois membros das equações (3.32), (3.42), (3.45) (3.46) e (3.50), transformando-as assim em equações (integrais) independentes do tempo para as funções de Green. Antes de mais nada, vamos introduzir uma notação conveniente.

Lembrando a definição (3.51) de $\Omega^{(+)}$, denotaremos o estado $\hat{\psi}(M)$ em (3.45) por $\hat{\psi}^+(M)$. Analogamente, tendo em vista a definição (3.54) de $\Omega^{(-)}$, denotaremos o estado $\hat{\psi}(M)$ em (3.50) por $\hat{\psi}^-(M)$.

A transformada de Fourier de $\hat{\psi}^\pm(M)$ será denotada por $\hat{\psi}^\pm(E)$, enquanto que a transformada de Fourier de $\hat{\psi}_{in}(M)$ e de $\hat{\psi}_{out}(M)$ serão denotadas respectivamente por $\hat{\psi}_{in}(E)$ e $\hat{\psi}_{out}(E)$.

Em virtude de (3.51) e (3.54), temos:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}^+(E) &= \Omega^{(+)}\hat{\psi}_{in}(E), \\ \hat{\psi}^-(E) &= \Omega^{(-)}\hat{\psi}_{out}(E),\end{aligned}\tag{3.77}$$

dado que os operadores de onda são independentes do tempo.

Além disso, a equação (3.65) implica que:

$$\hat{\psi}_{out}(E) = S\hat{\psi}_{in}(E).\tag{3.78}$$

Vamos agora aplicar (3.70) aos dois membros de (3.45):

$$\begin{aligned}\theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta E} \hat{\psi}^+(M) &= \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta E} \hat{\psi}_{in}(M) + \\ &- \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta E} \sum_{N < M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(N),\end{aligned}\tag{3.79}$$

ou equivalentemente:

$$\hat{\psi}^+(E) = \hat{\psi}_{in}(E) - \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} \sum_{N < M} e^{i\theta(M-N)(E-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(N) e^{iN\theta E}.\tag{3.80}$$

Efetuada a mudança de variáveis

$$A = M - N \quad \text{e} \quad B = N\tag{3.81}$$

em (3.80) obtemos:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}^+(E) &= \hat{\psi}_{in}(E) - \theta \sum_{A > 0} \sum_{B \in \mathbb{Z}} e^{i\theta A(E-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(B) e^{i\theta B E} = \\ &= \hat{\psi}_{in}(E) - \theta \sum_{A > 0} e^{i\theta A(E-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \sum_{B \in \mathbb{Z}} e^{i\theta B E} \hat{\psi}_{in}(B) = \\ &= \hat{\psi}_{in}(E) - \sum_{A > 0} e^{i\theta A(E-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(E),\end{aligned}\tag{3.82}$$

onde, para obter a última igualdade, usamos a definição (3.70). A soma sobre o índice A corresponde à soma dos termos de uma série geométrica de razão $e^{i\theta(E-\hat{H}')}$. Para garantir a sua convergência, faz-se necessário modificar a expressão original, introduzindo um “fator de convergência”, da mesma maneira como procedemos em (3.73). A expressão modificada escreve-se:

$$\hat{\psi}^+(E) = \hat{\psi}_{in}(E) - \sum_{A>0} e^{i\theta A(E+i\epsilon-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(E), \quad (3.83)$$

o que leva ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^+(E) &= \hat{\psi}_{in}(E) - \frac{e^{i\theta(E+i\epsilon-\hat{H}')}}{\mathbb{I} - e^{i\theta(E+i\epsilon-\hat{H}')}} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(E) = \\ &= \hat{\psi}_{in}(E) - \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}'-E-i\epsilon)} - \mathbb{I}} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{in}(E). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Podemos calcular de maneira análoga a transformada de Fourier da equação (3.50). Nesse caso temos:

$$\hat{\psi}^-(E) = \hat{\psi}_{out}(E) + \theta \sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{i\theta ME} \sum_{N \geq M} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{out}(N). \quad (3.85)$$

Efetuando-se a mudança de variáveis (3.81), obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^-(E) &= \hat{\psi}_{out}(E) + \theta \sum_{A \leq 0} \sum_{B \in \mathbb{Z}} e^{i\theta(M-N)(E-\hat{H}')} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) e^{i\theta NE} \hat{\psi}_{out}(N) = \\ &= \hat{\psi}_{out}(E) + \theta \sum_{A \leq 0} e^{i\theta A(E-\hat{H}'-i\epsilon)} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \sum_{B \in \mathbb{Z}} \hat{\psi}_{out}(B) e^{i\theta BE} = \\ &= \hat{\psi}_{out}(E) + \sum_{A \leq 0} e^{i\theta A(E-\hat{H}'-i\epsilon)} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{out}(E), \end{aligned} \quad (3.86)$$

onde novamente um fator de convergência adequado foi inserido. O resultado do cálculo é:

$$\hat{\psi}^-(E) = \hat{\psi}_{out}(E) + \frac{1}{\mathbb{I} - e^{i\theta(\hat{H}'-E+i\epsilon)}} (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_{out}(E). \quad (3.87)$$

Consideremos agora o caso em que o estado *in* e o estado *out* são idênticos, isto é, não apenas possuem a mesma energia E , mas também os mesmos números quânticos, denotados pelo símbolo α . Denotemos esse estado por $\hat{\psi}_\alpha^0(E)$. Os estados $\hat{\psi}^+(E)$ e

$\hat{\psi}^-(E)$ serão denotados, respectivamente, por $\hat{\psi}_\alpha^+(E)$ e $\hat{\psi}_\alpha^-(E)$. Subtraindo (3.87) de (3.84) encontramos:

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_\alpha^+(E) - \hat{\psi}_\alpha^-(E) = \\ & = - \left(\frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}'-E-i\epsilon)} - \mathbb{I}} + \frac{1}{\mathbb{I} - e^{i\theta(\hat{H}'-E+i\epsilon)}} \right) (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_\alpha^0(E). \end{aligned} \quad (3.88)$$

Consideremos agora a seguinte identidade (ver equação (2.83)):

$$\sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta(E-U)} = \frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E-U), \quad (3.89)$$

onde $\delta_{S^1}(E-U)$ é a delta periódica de período igual a $\frac{2\pi}{\theta}$. Seu análogo operatorial escreve-se:

$$\sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta(E-\hat{H}')} = \frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E-\hat{H}'). \quad (3.90)$$

Podemos escrever (3.90) na seguinte forma alternativa:

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{M > 0} e^{iM\theta(E+i\epsilon-\hat{H}')} + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{M \leq 0} e^{iM\theta(E-i\epsilon-\hat{H}')} = \frac{2\pi}{\theta} \delta(E-\hat{H}') \Rightarrow \\ & \Rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}'-E-i\epsilon)} - \mathbb{I}} + \frac{1}{\mathbb{I} - e^{i\theta(\hat{H}'-E+i\epsilon)}} \right) = \frac{2\pi}{\theta} \delta(E-\hat{H}'), \end{aligned} \quad (3.91)$$

cujo limite comutativo corresponde a uma identidade da teoria de espalhamento usual [33]:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{E-\hat{H}'-i\epsilon} - \frac{1}{E-\hat{H}'+i\epsilon} \right) = 2\pi i \delta(E-\hat{H}'). \quad (3.92)$$

Substituindo (3.91) em (3.88) chegamos a:

$$\hat{\psi}_\alpha^+(E) - \hat{\psi}_\alpha^-(E) = -\frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E-\hat{H}') (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_\alpha^0(E). \quad (3.93)$$

Façamos agora $E = E_\alpha$ em (3.93), isto é:

$$\hat{\psi}_\alpha^+(E_\alpha) - \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) = -\frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E_\alpha - \hat{H}') (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha). \quad (3.94)$$

Consideremos também um estado *out* com energia E_β e números quânticos β . A ação de $\Omega^{(-)}$ nesse estado produz $\hat{\psi}_\beta^-(E_\beta)$. A matriz de espalhamento entre esses estados escreve-se:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} | \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) \rangle = \langle \Omega^{(-)} \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \Omega^{(+)} \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) \rangle = \\ &= \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^+(E_\alpha) \rangle. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Usando (3.94) em (3.95), encontramos:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) \rangle + \\ &- \frac{2\pi}{\theta} \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \delta_{S^1}(E_\alpha - \hat{H}') (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Recordando agora (3.64) e (3.90), vemos que:

$$\begin{aligned} \delta_{S^1}(E_\alpha - \hat{H}') | \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) \rangle &= \delta_{S^1}(E_\alpha - \hat{H}') \Omega^{(-)} | \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) \rangle = \\ = \left(\frac{\theta}{2\pi} \sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta(E_\alpha - \hat{H}')} \right) \Omega^{(-)} | \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) \rangle &= \frac{\theta}{2\pi} \left(\sum_{M \in \mathbb{Z}} e^{iM\theta(E_\alpha - E_\beta)} \right) \Omega^{(-)} | \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) \rangle = \\ &= \delta_{S^1}(E_\alpha - E_\beta) | \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) \rangle, \end{aligned} \quad (3.97)$$

de modo que

$$\langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \delta_{S^1}(E_\alpha - \hat{H}') = \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \delta_{S^1}(E_\alpha - E_\beta), \quad (3.98)$$

onde usamos a hermiticidade de \hat{H}' .

Substituindo (3.98) em (3.96), obtemos:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) \rangle + \\ &- \frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E_\alpha - E_\beta) \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Podemos simplificar (3.99) se recordarmos (3.61), isto é: $\Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(-)} = \mathbb{I}$. Usando esse resultado, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^-(E_\alpha) \rangle &= \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(-)} | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle = \\ &= \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle = \delta_{\beta,\alpha} \delta(E_\beta - E_\alpha). \end{aligned} \quad (3.100)$$

Substituindo (3.100) em (3.99) e recordando novamente que $\hat{\psi}_\beta^-(E_\beta) = \Omega^{(-)} \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)$, podemos ainda escrever:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \delta_{\beta,\alpha} \delta(E_\beta - E_\alpha) + \\ &- \frac{2\pi}{\theta} \delta_{S^1}(E_\alpha - E_\beta) \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | (\Omega^{(-)})^\dagger (e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I}) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Tomando-se ainda como ponto de partida a equação (3.94) com β em lugar de α e substituindo-a em (3.95) obtém-se:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta,\alpha}\delta(E_\beta - E_\alpha) + \frac{2\pi}{\theta}\langle\delta_{S^1}(E_\beta - \hat{H}')|(e^{i\theta\hat{H}'}e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I})\hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)|\hat{\psi}_\alpha^+(E_\alpha)\rangle. \quad (3.102)$$

Usando a hermiticidade dos operadores \hat{H}' e \hat{H}_0 , podemos escrever:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta,\alpha}\delta(E_\beta - E_\alpha) + \frac{2\pi}{\theta}\langle\hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)|(e^{i\theta\hat{H}_0}e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I})\delta_{S^1}(E_\beta - \hat{H}')|\hat{\psi}_\alpha^+(E_\alpha)\rangle. \quad (3.103)$$

Usando agora o fato de que $\hat{\psi}_\alpha^+(E_\alpha) = \Omega^{(+)}\hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha)$ é um auto-vetor de $\delta_{S^1}(E_\beta - \hat{H}')$ com auto-valor $\delta_{S^1}(E_\beta - E_\alpha)$, escrevemos:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta,\alpha}\delta(E_\beta - E_\alpha) + \frac{2\pi}{\theta}\delta_{S^1}(E_\beta - E_\alpha)\langle\hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)|(e^{i\theta\hat{H}_0}e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I})\Omega^{(+)}|\hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha)\rangle. \quad (3.104)$$

As equações (3.101) e (3.104) definem a matriz de transição $T_{\beta\alpha}$ da teoria de espalhamento com evoluções discretas. Explicitamente, temos:

$$\begin{aligned} T_{\beta\alpha} &= -\frac{i}{\theta}\langle\hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)|(\Omega^{(-)})^\dagger(e^{i\theta\hat{H}'}e^{-i\theta\hat{H}_0} - \mathbb{I})|\hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha)\rangle = \\ &= \frac{i}{\theta}\langle\hat{\psi}_\beta^0(E_\beta)|(e^{i\theta\hat{H}_0}e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I})\Omega^{(+)}|\hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha)\rangle, \end{aligned} \quad (3.105)$$

de modo que podemos escrever:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta,\alpha}\delta(E_\beta - E_\alpha) - 2\pi i\delta_{S^1}(E_\beta - E_\alpha)T_{\beta\alpha}. \quad (3.106)$$

A equação (3.106) constitui uma generalização do resultado correspondente da teoria quântica usual. A presença da delta periódica de período $\frac{2\pi}{\theta}$ permite transições entre estados cujas energias diferem entre si por múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{\theta}$.

É instrutivo deduzir as fórmulas (3.101) e (3.104) através de um método diferente, onde não se faz menção à transformada de Fourier. Consideremos o operador de evolução na descrição de interação:

$$U_I(\theta, M, N) = e^{iM\theta\hat{H}_0}e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'}e^{-iN\theta\hat{H}_0}. \quad (3.107)$$

Usando (3.53), vemos que

$$U_I(\theta, M, -\infty) = e^{iM\theta\hat{H}_0}e^{-iM\theta\hat{H}'}\Omega^{(+)}. \quad (3.108)$$

Usando (3.62) e (3.108), temos:

$$U_I(\theta, M+1, -\infty) - U_I(\theta, M, -\infty) = e^{iM\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-iM\theta\hat{H}_0}. \quad (3.109)$$

Consideremos (3.109) para valores sucessivos do inteiro M :

M = 2 :

$$U_I(\theta, 3, -\infty) - U_I(\theta, 2, -\infty) = e^{i2\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-i2\theta\hat{H}_0},$$

M = 1 :

$$U_I(\theta, 2, -\infty) - U_I(\theta, 1, -\infty) = e^{i\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-i\theta\hat{H}_0}, \quad (3.110)$$

e somemos essas duas equações membro a membro. O resultado escreve-se:

$$U_I(\theta, 3, -\infty) - U_I(\theta, 1, -\infty) = \sum_{k=1}^2 e^{ik\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-ik\theta\hat{H}_0}, \quad (3.111)$$

de onde podemos extrair as seguintes observações: na soma dos primeiros membros (lados esquerdos) das equações associadas a valores sucessivos de M , as parcelas “intermediárias” cancelam-se duas a duas, de modo que somente sobrevivem as “extemidades”; o segundo membro (lado direito) dessas equações possui a *mesma forma* para todos os valores de M , de modo que a sua soma pode ser escrita como a soma (sobre os valores de M) de um termo genérico (dependente de M). Generalizando esse resultado, podemos escrever:

$$U_I(\theta, J+1, -\infty) - U_I(\theta, -L, -\infty) = \sum_{k=-L}^J e^{ik\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-ik\theta\hat{H}_0}. \quad (3.112)$$

Vamos agora tomar os limites $J, L \rightarrow \infty$ em (3.112). Lembrando a definição (3.67) do operador de espalhamento e usando a condição de fronteira

$$\lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ L \in \mathbb{Z}}} U_I(\theta, -L, -\infty) = \mathbb{I}, \quad (3.113)$$

obtemos

$$S = \mathbb{I} + \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-ik\theta\hat{H}_0}, \quad (3.114)$$

de modo que o elemento de matriz de S na base livre (matriz S) é dado por:

$$\begin{aligned}
S_{\beta\alpha} &= \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle + \\
&+ \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{ik\theta(E_\beta - E_\alpha)} \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle = \\
&= \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle + \\
&+ \frac{2\pi}{\theta} \delta(E_\beta - E_\alpha) \langle \hat{\psi}_\beta^0(E_\beta) | \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} | \hat{\psi}_\alpha^0(E_\alpha) \rangle, \quad (3.115)
\end{aligned}$$

que é idêntica a (3.104).

Um procedimento análogo ao que levou a (3.115) permite obter a equação (3.101).

Equação de Lippman-Schwinger Discreta

Façamos agora $J + 1 = 0$ e $N \rightarrow \infty$ em (3.112). Temos:

$$\Omega^{(+)} = \mathbb{I} + \sum_{k=-\infty}^{-1} e^{ik\theta\hat{H}_0} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} e^{-ik\theta\hat{H}_0}. \quad (3.116)$$

Aplicando os dois membros da equação (3.116) em um estado *in* com energia E (denotado aqui por $|\hat{\psi}(E)\rangle$), obtemos:

$$\Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle = |\hat{\psi}(E)\rangle + \sum_{k=-\infty}^{-1} e^{ik\theta(\hat{H}_0 - E)} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle. \quad (3.117)$$

Introduzindo um fator de convergência apropriado, somos levados à seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
\Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle &= |\hat{\psi}(E)\rangle + \sum_{k=-\infty}^{-1} e^{ik\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle \implies \\
\implies \Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle &= |\hat{\psi}(E)\rangle + \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I}} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)} |\hat{\psi}(E)\rangle. \quad (3.118)
\end{aligned}$$

Multiplicando essa equação por $\frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right)$ pela esquerda, obtemos:

$$\begin{aligned}
T |\hat{\psi}(E)\rangle &= \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle + \\
&+ \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I}} T |\hat{\psi}(E)\rangle, \quad (3.119)
\end{aligned}$$

onde introduzimos a notação

$$T|\hat{\psi}(E)\rangle := \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)}|\hat{\psi}(E)\rangle.$$

A equação (3.119) é o análogo discreto da equação de Lippman-Schwinger da Mecânica Quântica usual, podendo por isso ser chamada de *Equação de Lippman-Schwinger Discreta*.

A equação (3.119) pode ser iterada, levando à *série de Born*:

$$T|\hat{\psi}(E)\rangle = (\hat{W} + \hat{W}G^+(E)\hat{W} + \hat{W}G^+(E)\hat{W}G^+(E)\hat{W} + \dots)|\hat{\psi}(E)\rangle, \quad (3.120)$$

onde $\hat{W} \equiv \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right)$ é o análogo discreto da interação e $G^+(E)$ é a transformada de Fourier da função de Green retardada, mostrada em (3.74).

Podemos resolver (3.118) e (3.119) formalmente. Multipliquemos (3.118) por

$$\left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I} \right)$$

pela esquerda para obter:

$$\begin{aligned} \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)}|\hat{\psi}(E)\rangle &= \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle + \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \Omega^{(+)}|\hat{\psi}(E)\rangle \\ \implies \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} \right) \Omega^{(+)}|\hat{\psi}(E)\rangle &= \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle. \end{aligned} \quad (3.121)$$

Adicionando e subtraindo o termo $e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} |\hat{\psi}(E)\rangle$ ao lado direito de (3.121) e multiplicando a equação resultante por $\left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} \right)^{-1}$ pela esquerda, obtém-se:

$$\Omega^{(+)}|\hat{\psi}(E)\rangle = |\hat{\psi}(E)\rangle + \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} \right)^{-1} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle. \quad (3.122)$$

Multiplcando (3.122) por $\frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right)$, encontramos

$$\begin{aligned} T|\hat{\psi}(E)\rangle &= \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle + \\ &+ \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} \right)^{-1} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle. \end{aligned} \quad (3.123)$$

A equação (3.123) pode ser simplificada, se notarmos que o produto de operadores

$$\left(e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} - e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} \right)^{-1} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \quad (3.124)$$

pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
& \left\{ e^{i\theta(\hat{H}_0 - E - i\epsilon)} \left[\mathbb{I} - e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} \right] \right\}^{-1} = \\
& = \left(\mathbb{I} - e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} \right)^{-1} e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}_0)} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) = \\
& = \left(\mathbb{I} - e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} \right)^{-1} \left(e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} - e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}_0)} \right) = \\
& = \left(\mathbb{I} - e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} \right)^{-1} e^{i\theta(E + i\epsilon - \hat{H}')} \left(\mathbb{I} - e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} \right) = \\
& = \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}' - E - i\epsilon)} - \mathbb{I}} \left(\mathbb{I} - e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} \right). \tag{3.125}
\end{aligned}$$

Substituindo o resultado (3.125) na equação (3.123), encontramos:

$$\begin{aligned}
T|\hat{\psi}(E)\rangle &= \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle + \\
&+ \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) \frac{1}{e^{i\theta(\hat{H}' - E - i\epsilon)} - \mathbb{I}} \left(\mathbb{I} - e^{i\theta\hat{H}'} e^{-i\theta\hat{H}_0} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle. \tag{3.126}
\end{aligned}$$

No limite comutativo ($\theta \rightarrow 0$), temos:

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} T|\hat{\psi}(E)\rangle = (\hat{H}' - \hat{H}_0)|\hat{\psi}(E)\rangle + (\hat{H}' - \hat{H}_0) \frac{1}{E + i\epsilon - \hat{H}'} (\hat{H}' - \hat{H}_0)|\hat{\psi}(E)\rangle, \tag{3.127}$$

que é o resultado da Mecânica Quântica usual.

3.2.2 Aproximação de Born

Nos casos em que o termo de interação pode ser considerado como uma pequena perturbação, podemos proceder como no caso usual e truncar (3.120) no primeiro termo da série. Esse procedimento define a aproximação de Born para o operador de transição:

$$T|\hat{\psi}(E)\rangle \simeq T_{Born}|\hat{\psi}(E)\rangle = \hat{W}|\hat{\psi}(E)\rangle \equiv \frac{i}{\theta} \left(e^{i\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta\hat{H}'} - \mathbb{I} \right) |\hat{\psi}(E)\rangle. \tag{3.128}$$

A aproximação de Born será útil no próximo capítulo, quando discutirmos o exemplo do potencial delta uni-dimensional, no caso de evoluções discretas.

3.3 Conexão com o Formalismo Usual

Recordemos a definição (3.67) de operador de espalhamento:

$$S = \lim_{\substack{M \rightarrow \infty, \\ N \rightarrow -\infty, \\ M, N \in \mathbb{Z}}} e^{iM\theta\hat{H}_0} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}'} e^{-iN\theta\hat{H}_0}. \tag{3.129}$$

Substituindo $\hat{H}' = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{H} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}_0}$ em (3.129), encontramos:

$$S = e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \left(\lim_{\substack{M \rightarrow \infty, \\ N \rightarrow -\infty, \\ M, N \in \mathbb{Z}}} e^{iM\theta \hat{H}_0} e^{-i\theta(M-N)\hat{H}} e^{-iN\theta \hat{H}_0} \right) e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}_0}. \quad (3.130)$$

O limite entre parênteses em (3.130) envolve apenas a Hamiltoniana “original” \hat{H} . Por simplicidade notacional, no que segue denotaremos esse operador por \tilde{S} .

Usando (3.130) no cálculo da matriz de espalhamento $\mathcal{S}_{\beta\alpha}$, vemos que os termos dependentes de \hat{x}_0^R cancelam-se:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\phi}(E_\beta) | S | \hat{\phi}(E_\alpha) \rangle &= \left(e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{\chi}(E_\beta), e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \tilde{S} e^{i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} e^{-i\hat{x}_0^R \hat{H}_0} \hat{\chi}(E_\alpha) \right) = \\ &= \langle \chi(E_\beta), \tilde{S} \chi(E_\alpha) \rangle, \end{aligned} \quad (3.131)$$

onde os vetores $\hat{\chi}(E_\alpha)$ em (3.131) satisfazem:

$$\hat{H}_0 \hat{\chi}(E_\alpha) = E_\alpha \hat{\chi}(E_\alpha). \quad (3.132)$$

A equação (3.131) mostra que o cálculo de $S_{\beta\alpha}$ reduz-se ao cálculo de um elemento de matriz que guarda semelhanças formais com o seu análogo da teoria de espalhamento usual. De fato, o cálculo de $\langle \chi(E_\beta), \tilde{S} \chi(E_\alpha) \rangle$ envolve apenas \hat{H} , $\hat{\chi}(E_\alpha)$ e $\hat{\chi}(E_\beta)$, que são independentes de \hat{x}_0 . Apesar disso, \tilde{S} é um operador de espalhamento associado a evoluções discretas, sendo portanto totalmente diferente do seu análogo usual. As conseqüências dessa afirmação serão melhor exploradas no próximo capítulo, quando analisaremos um exemplo específico.

Capítulo 4

Um Exemplo Simples

4.1 O Potential Delta Repulsivo

Nesta seção consideramos o caso de uma partícula quântica descrita pela seguinte Hamiltoniana independente do tempo:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2M} + V \delta(\hat{x}), \quad (4.1)$$

onde \hat{x} é o operador de posição usual para uma partícula movendo-se em uma reta, \hat{p} é o momento conjugado a \hat{x} , \hat{P}_1 é o momento definido em (1.12) e V é uma constante real e positiva que pode ser interpretada como sendo a medida da intensidade do potencial delta. Assim como no capítulo 3, tomaremos $\hbar = 1$.

A solução para o problema do espalhamento por uma barreira delta uni-dimensional pode ser encontrada em textos didáticos sobre Mecânica Quântica. Veja por exemplo a referência [34].

A Hamiltoniana total \hat{H} pode ser vista como uma *soma direta* de duas parcelas:

$$\hat{H} \simeq \hat{H}_1 \otimes \text{id}_{\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0} + \text{id}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \frac{\hat{P}_1^2}{2M}, \quad (4.2)$$

onde \hat{H}_1 é a Hamiltoniana usual de uma partícula sob a ação de uma barreira delta uni-dimensional, isto é:

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V \delta(\hat{x}), \quad (4.3)$$

e onde $\mathcal{H}_{\theta, \varphi}^0$ é o espaço de Hilbert formado pelas soluções da equação $e^{-i\theta\hat{P}_0}\hat{\psi} = e^{-i\theta\frac{\hat{P}_1^2}{2M}}\hat{\psi}$, ou seja, por combinações lineares de vetores da forma $e^{in\hat{x}_1}$, com $n \in \mathbb{Z}$.

O espaço de Hilbert dos estados físicos tem estrutura de produto tensorial. Em particular, os auto-vetores de \hat{H} são da forma:

$$|\psi_k, n\rangle := \psi_k(x) \otimes e^{in\hat{x}_1} \equiv \psi_k(x) e^{in\hat{x}_1}, \quad (4.4)$$

onde¹

$$\psi_k(x) = \Theta(x) \frac{ik}{ik - MV} e^{ikx} + \Theta(-x) \left(e^{ikx} + \frac{MV}{ik - MV} e^{-ikx} \right) \quad (4.5)$$

é auto-vetor de \hat{H}_1 com auto-valor $\frac{k^2}{2M}$. Aqui $\Theta(x)$ é a função degrau.

O espectro de \hat{H}_1 é degenerado. Tanto ψ_k quanto ψ_{-k} estão associados ao mesmo auto-valor $\frac{k^2}{2M}$. O *auto-espaço* associado à energia $\frac{k^2}{2M}$ é bi-dimensional. Como o potencial de interação é uma função par, existe uma maneira elegante de construir uma base ortogonal para esse espaço vetorial, que consiste em definir os autovetores de \hat{H}_1 com paridade bem definida. O operador de paridade é definido por:

$$\mathbb{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (4.6)$$

A Hamiltoniana \hat{H}_1 é a soma de dois termos que não alteram a paridade de $\psi(x)$, de modo que: $[\hat{H}_1, \mathbb{P}] = 0$. Segue que \hat{H}_1 e \mathbb{P} podem ser diagonalizados simultaneamente. Os auto-vetores pares (simétricos), denotados por $\psi_{k,S}$, e os auto-vetores ímpares (anti-simétricos), denotados por $\psi_{k,A}$, são definidos respectivamente por:

$$\psi_{k,S}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\psi_k(x) + \psi_k(-x)) \quad \text{e} \quad \psi_{k,A}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\psi_k(x) - \psi_k(-x)). \quad (4.7)$$

Usando (4.5) em (4.7) podemos escrever:

$$\psi_{k,S}(x) = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \begin{cases} \frac{1}{ik - MV} [k \cos(kx) + MV \sin(kx)] & , \quad \text{se } x \geq 0, \\ \frac{1}{ik - MV} [k \cos(kx) - MV \sin(kx)] & , \quad \text{se } x < 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

e

$$\psi_{k,A}(x) = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \sin(kx). \quad (4.9)$$

Os auto-vetores correspondentes da Hamiltoniana total \hat{H} escrevem-se:

$$|\psi_{k,S}, n\rangle = \frac{i}{\pi\sqrt{2}} \begin{cases} \frac{1}{ik - MV} [k \cos(kx) + MV \sin(kx)] e^{in\hat{x}_1} & , \quad \text{se } x \geq 0, \\ \frac{1}{ik - MV} [k \cos(kx) - MV \sin(kx)] e^{in\hat{x}_1} & , \quad \text{se } x < 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

¹Veja o apêndice A para detalhes.

e

$$|\psi_{k,A}, n\rangle = \frac{i}{\pi\sqrt{2}} \sin(kx) e^{in\hat{x}_1}. \quad (4.11)$$

Conjuntamente, os auto-vetores (4.10) e (4.11) formam uma base completa para o espaço de Hilbert dos estados físicos. A relação de completeza assume a seguinte forma:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^\infty dk (|\psi_{k,S}, n\rangle\langle\psi_{k,S}, n| + |\psi_{k,A}, n\rangle\langle\psi_{k,A}, n|) = \mathbb{I}. \quad (4.12)$$

Note-se que o momento de integração k em (4.12) assume apenas valores positivos. Na representação de coordenadas (4.12) assume a seguinte forma²:

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in(u-v)} \int_0^\infty dk \left[\overline{\psi_{k,S}(x)} \psi_{k,S}(y) + \overline{\psi_{k,A}(x)} \psi_{k,A}(y) \right] = \delta_{S^1}(u-v) \delta(x-y), \quad (4.13)$$

onde $\delta_{S^1}(u-v)$ denota a função delta periódica de período igual a 2π .

4.1.1 Matriz de Transição na Aproximação de Born

No contexto do formalismo independente do tempo, o estudo de processos de espalhamento inicia-se pelo cálculo da matriz de transição $T_{\beta\alpha}$. Aqui vamos considerar apenas a aproximação de Born, dada pela equação (3.128).

Denotando os auto-valores de \hat{H}_0 por $|p, l\rangle$ podemos escrever:

$$\hat{H}_0 |p, l\rangle = \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{l^2}{2M} \right) |p, l\rangle. \quad (4.14)$$

Para calcular o elemento de matriz de T_{Born} entre os estados $|q, m\rangle$ e $|p, l\rangle$, vamos inserir a relação de completeza (4.12) em (3.128). Teremos:

$$\begin{aligned} \langle p, l | T_{Born} | q, m \rangle &= \frac{2\pi i}{\theta} \delta_{ml} \times \\ &\times \int_0^\infty dk \left(e^{i\theta \frac{(p^2 - k^2)}{2M}} - 1 \right) \left(\tilde{\psi}_{k,S}(p) \overline{\tilde{\psi}_{k,S}(q)} + \tilde{\psi}_{k,A}(p) \overline{\tilde{\psi}_{k,A}(q)} \right), \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde $\tilde{\psi}_{k,S}$ e $\tilde{\psi}_{k,A}$ são as transformadas de Fourier de $\psi_{k,S}$ e $\psi_{k,A}$, respectivamente. As funções $\psi_{k,S}$ e $\psi_{k,A}$ são dadas por³

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{k,S}(q) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{ik}{ik - MV} (\delta(k+q) + \delta(k-q)) + \\ &+ \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{iMV}{ik - MV} \left(\frac{\mathcal{P}}{k+q} + \frac{\mathcal{P}}{k-q} \right), \end{aligned} \quad (4.16)$$

²Ver Apêndice A

³Ver Apêndice A.

e

$$\tilde{\phi}_{k,A}(q) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\delta(k-q) - \delta(k+q)) , \quad (4.17)$$

onde $\frac{\mathcal{P}}{k}$ denota a distribuição *Parte Principal de Cauchy*, definida por [33]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\mathcal{P}}{k} f(k) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{-\delta} dk \frac{f(k)}{k} + \int_{\delta}^{\infty} dk \frac{f(k)}{k} \right) . \quad (4.18)$$

Em [35] encontramos a seguinte definição alternativa para $\frac{\mathcal{P}}{k}$:

$$\frac{\mathcal{P}}{k} = \frac{1}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\frac{1}{k+i\delta} + \frac{1}{k-i\delta} \right) . \quad (4.19)$$

Como o integrando de (4.15) se anula para $k = \pm p$, a contribuição para essa integral proveniente de $\tilde{\psi}_{k,A}(p) \tilde{\psi}_{k,A}(q)$ é nula, devido à presença do fator $(\delta(k-p) - \delta(k+p))$. Pela mesma razão, os termos em $\tilde{\psi}_{k,S}(p) \tilde{\psi}_{k,S}(q)$ que envolvem $\delta(k-p)$ e $\delta(k+p)$ também não contribuem para (4.15). Os termos remanescentes levam à seguinte expressão para a matriz de transição:

$$\begin{aligned} \langle p, l | T_{Born} | q, m \rangle &= \\ &= \delta_{ml} \frac{iMV}{2\pi\theta} \int_0^{\infty} dk \left[k \left(\frac{e^{\frac{i\theta}{2M}(p^2-k^2)} - 1}{k^2 + M^2V^2} \right) \right] (\delta(k+q) + \delta(k-q)) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+p} + \frac{\mathcal{P}}{k-p} \right) + \\ &+ \delta_{ml} \frac{iM^2V^2}{2\pi^2\theta} \int_0^{\infty} dk \left(\frac{e^{\frac{i\theta}{2M}(p^2-k^2)} - 1}{k^2 + M^2V^2} \right) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+q} + \frac{\mathcal{P}}{k-q} \right) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+p} + \frac{\mathcal{P}}{k-p} \right) . \end{aligned} \quad (4.20)$$

A primeira parcela em (4.20) é calculada diretamente, devido à presença das distribuições delta. Escrevamos separadamente essa integral, denotada aqui por I . Como o integrando dessa parcela é uma função par da variável de integração, podemos escrever:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[k \left(\frac{e^{\frac{i\theta}{2M}(p^2-k^2)} - 1}{k^2 + M^2V^2} \right) \right] (\delta(k+q) + \delta(k-q)) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+p} + \frac{\mathcal{P}}{k-p} \right) = \\ &= \left[q \left(\frac{e^{\frac{i\theta}{2M}(p^2-q^2)} - 1}{q^2 + M^2V^2} \right) \right] \left(\frac{\mathcal{P}}{q+p} + \frac{\mathcal{P}}{q-p} \right) . \end{aligned} \quad (4.21)$$

Note-se que, se tomarmos $\frac{p^2}{2M} = \frac{q^2}{2M} + \frac{2\pi}{\theta}n$, com $n \in \mathbb{Z}$ e $n \neq 0$, a contribuição (4.21) se anula, o que significa que esse termo não viola a conservação da energia.

Vamos agora analisar a segunda integral em (4.20), denotada aqui por J . Como o integrando é uma função par da variável de integração k , podemos escrever:

$$J = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\frac{e^{i\frac{\theta}{2M}(p^2-k^2)} - 1}{k^2 + M^2V^2} \right) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+q} + \frac{\mathcal{P}}{k-q} \right) \left(\frac{\mathcal{P}}{k+p} + \frac{\mathcal{P}}{k-p} \right) \quad (4.22)$$

Argumentamos que a integral (4.22) é bem definida. Ela contém a informação física sobre as transições que não conservam a energia. Para ver que (4.22) converge, deve-se notar que o fator

$$f(k) = \left(e^{i\frac{\theta}{2M}(p^2-k^2)} - 1 \right)$$

presente no integrando de (4.22) é uma função oscilatória e limitada da variável de integração k . Para valores grandes de k o integrando comporta-se como $\frac{1}{k^4}$. Além disso, o integrando é regular sobre toda a região de integração (recordemos que a parte principal de Cauchy fornece a prescrição para tratar os pólos em $k = \pm q$ e $k = \pm p$).

Do ponto de vista qualitativo, observamos que se o valor da energia final $\frac{p^2}{2M}$ for muito diferente da energia inicial $\frac{q^2}{2M}$, a matriz de transição comporta-se como $\frac{1}{p}$. A probabilidade de transição associada, que corresponde ao quadrado do módulo da amplitude de transição, se comportará como $\frac{1}{p^2}$, indicando que as transições que não conservam a energia ocorrem com probabilidades que decrescem rapidamente com o aumento da diferença entre a energia inicial e a energia final.

Conclusão

Nesta Tese nós exploramos alguns aspectos dinâmicos de sistemas quânticos com coordenadas não-comutativas. Especificamente, estudamos algumas conseqüências decorrentes da hipótese de não-comutatividade entre a coordenada temporal e uma coordenada espacial compacta (topologicamente equivalente a um círculo). A primeira conseqüência observada foi a discretização do espectro da coordenada temporal. Esse fato implica em certas restrições para a forma dos elementos da álgebra que descreve o cilindro não-comutativo. Por sua vez, essas restrições impõem limitações à ação das translações temporais sobre os elementos dessa álgebra. De fato, conforme vimos no capítulo 2 da Tese, somente translações temporais múltiplas inteiras de uma translação temporal *mínima* (θ) são permitidas no cilindro não-comutativo.

Evoluções temporais discretizadas têm sido estudadas por outros autores. Como exemplo, citamos Chaichian et al. [20], que recentemente consideraram teorias quânticas de campos definidas no cilindro não-comutativo. No contexto da gravitação clássica em (2+1) dimensões podemos citar [11, 12]. Nesses trabalhos os autores consideraram partículas movendo-se em um espaço-tempo tri-dimensional, interagindo gravitacionalmente. Como conseqüência, obtiveram coordenadas não-comutativas e evoluções discretizadas.

Na abordagem adotada nesta Tese, evoluções discretas significam que a Hamiltoniana (que usualmente é identificada como sendo o gerador das evoluções unitárias) está definida somente *módulo* $\frac{2\pi}{\theta}$. Na teoria usual as evoluções são dadas pela ação de um grupo de transformações unitárias a um parâmetro, isto é: $\tau \mapsto U(\tau)$. O gerador das evoluções é obtido a partir de $U(\tau)$ por derivação em τ : $\hat{H} = i\frac{dU}{d\tau}|_{\tau=0}$. No caso em que as evoluções são discretizadas, não podemos tomar a derivada com relação a τ . Além disso, se \hat{H} é um gerador da evolução discreta, isto é, se $U(\theta) = e^{-i\theta\hat{H}}$, então qualquer elemento da família discreta $\hat{H}_n = \hat{H} + \frac{2\pi}{\theta}n$, com $n \in \mathbb{Z}$, também é um gerador.

Os fatos descritos acima levam a conseqüências importantes na teoria de espalhamento. De fato, seja \hat{H} a Hamiltoniana independente do tempo que descreve a evolução temporal de um sistema quântico no cilindro não-comutativo (conforme discutido no parágrafo anterior, \hat{H} poderia ser qualquer elemento da família discreta \hat{H}_n). Seja \hat{H}_0 a Hamiltoniana livre, que descreve o sistema no limite em que os seus constituintes encontram-se suficientemente afastados uns dos outros, podendo ser considerados livres. Seja $|\alpha\rangle$ o estado

inicial (livre) do sistema (se o sistema for constituído de uma única partícula de spin zero, o índice α pode ser substituído pelo momento k da partícula). Na linguagem da teoria de espalhamento, o estado $|\alpha\rangle$ é um estado *in*. Associamos um estado $|\alpha, +\rangle \equiv \Omega^+|\alpha\rangle$ ao estado *in* $|\alpha\rangle$. A evolução temporal de $|\alpha, +\rangle$ é controlada pela Hamiltoniana total \hat{H} , ou seja, $|\alpha, +\rangle$ é um estado *em interação*. Sabe-se da teoria de espalhamento usual que os operadores de Möller $\Omega^{(\pm)}$ “mediam” as evoluções geradas por \hat{H} e \hat{H}_0 , ou seja, satisfazem a seguinte propriedade de *intertwining*: $\hat{H}\Omega^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}\hat{H}_0$. Porém, de acordo com a equação (3.62), no caso discreto a propriedade de *intertwining* escreve-se:

$$e^{-i\theta\hat{H}}\Omega^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)}e^{-i\theta\hat{H}_0} .$$

Como consequência, o operador de espalhamento $S = (\Omega^{(-)})^\dagger\Omega^{(+)}$ satisfaz a seguinte propriedade:

$$e^{-i\theta\hat{H}_0}S = Se^{-i\theta\hat{H}_0} ,$$

em contraste com a relação da teoria usual, isto é: $\hat{H}_0S = S\hat{H}_0$.

A relação acima nos informa que o operador de espalhamento comuta com a evolução livre discreta, dada por $U_0(\theta) = e^{-i\theta\hat{H}_0}$, mas não diferencia \hat{H}_0 de suas translações por múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{\theta}$, isto é, dos operadores da forma $\hat{H}_{0,n} = \hat{H}_0 + \frac{2\pi}{\theta}n$, com $n \in \mathbb{Z}$.

Esse aspecto da teoria de espalhamento com evoluções discretas introduz um caráter periódico inexistente na teoria usual. De fato, o principal resultado desta Tese consistiu na verificação de que, no caso de evoluções discretas, a superfície de energia (*energy shell*) é composta de camadas espaçadas por múltiplos inteiros de $\frac{2\pi}{\theta}$. Especificamente, transições entre um estado *in* com energia E_α e um estado *out* com energia E_β são permitidas sempre que $E_\beta - E_\alpha = \frac{2\pi}{\theta}n$, com $n \in \mathbb{Z}$. Essa conclusão foi obtida da seguinte maneira: partindo da definição do operador de espalhamento, dado em termos dos operadores de Möller $\Omega^{(\pm)}$, obtivemos a relação entre a matriz de espalhamento $S_{\beta\alpha}$ e a matriz de transição $T_{\beta\alpha}$. Essa relação escreve-se:

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - 2\pi i\delta_{S^1}(E_\beta - E_\alpha)T_{\beta\alpha} ,$$

onde $\delta_{S^1}(E_\beta - E_\alpha)$ denota a delta periódica de período igual a $\frac{2\pi}{\theta}$. Deve-se notar o contraste com a teoria usual, onde em vez de uma delta periódica, temos uma delta de Dirac usual, o que corresponde à conservação da energia.

A busca por consequências fenomenológicas da não-conservação da energia em processos de espalhamento constitui o próximo passo deste programa de pesquisas. A aplicação simples discutida no capítulo 4 da Tese tem o mérito de mostrar que as equações da teoria de espalhamento, obtidas no capítulo 3, possuem soluções em casos específicos de interesse físico. Além disso, mesmo um sistema tão simples como o descrito por um potencial delta uni-dimensional já evidencia uma característica importante das evoluções discretas: as amplitudes de transição que não conservam a energia são funções decrescentes do inteiro

n presente em $E_{\beta,n} = E_{\alpha} + \frac{2\pi}{\theta}n$. Essa observação corrobora a intuição física subjacente ao problema, pois em vista dos dados experimentais conhecidos atualmente, seria de se esperar que transições que não conservam a energia fossem fortemente suprimidas.

Com relação ao problema discutido no capítulo 4, há diversos pontos que devem ser discutidos. Em primeiro lugar, lembramos que a análise foi baseada no análogo discreto da *aproximação de Born*. Essa aproximação consiste em truncar a série de Born no seu primeiro termo, que corresponde ao análogo discreto da *interação*, sendo dado por $\hat{W} \equiv \frac{i}{\theta}(e^{i\theta\hat{H}_0}e^{-i\theta\hat{H}} - \mathbb{I})$. Note-se que, no limite em que a interação $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$ vai a zero, o análogo discreto (\hat{W}) da interação também se anula. No caso de um potencial do tipo delta, a intensidade do potencial é dada pelo valor numérico da constante V presente em $\hat{V}(x) = V\delta(x)$. Assim, se V for suficientemente pequeno, podemos considerar o próprio potencial $\hat{V}(x)$ como sendo uma pequena perturbação.

Além do aspecto discutido acima, é importante notar que, assim como no caso usual, a aproximação de Born no caso discreto é não-diagonal na base dos estados livres, levando portanto a transições entre esses estados. Isso significa que a aproximação de Born carrega a informação física essencial da teoria de espalhamento com evoluções discretas.

Tendo argumentado em favor da validade da aproximação de Born, procedemos à análise qualitativa do comportamento da amplitude de transição como função das energias inicial E_{α} e final E_{β} . Constatamos que as transições que não conservam a energia decrescem rapidamente com o aumento da diferença entre E_{α} e E_{β} . Deve-se também notar que as primeiras transições fora da superfície de energia correspondem a $E_{\beta,\pm 1} = E_{\alpha} \pm \frac{2\pi}{\theta}$. Se o parâmetro não-comutativo θ for suficientemente pequeno, as transições que não conservam a energia estarão situadas em regiões inacessíveis à verificação experimental. Assim, para valores muito pequenos do parâmetro da não-comutatividade, as transições que violam a superfície de energia ocorrem com probabilidade muito pequena, e situam-se em regiões muito afastadas dos espectros observados em laboratório.

Aplicações físicas do formalismo de espalhamento com evoluções discretas podem levar, nos casos mais modestos, a limites superiores para o valor da constante θ . Quanto maior for a confiança nos dados experimentais relativos à estrutura do espectro de um sistema (dentro de uma determinada faixa de energia), menor será a expectativa de se encontrar transições “proibidas” por conservação da energia (nessa mesma faixa). Esse fato limita a faixa de valores fisicamente aceitáveis para a constante θ . Em conexão com as observações feitas até o momento, é importante lembrar que o parâmetro livre da teoria de espalhamento com evoluções discretas é na verdade $\frac{\theta}{R}$, onde R é o raio do cilindro não-comutativo. É interessante observar que, se θ e R forem grandezas da mesma ordem, o quociente $\frac{\theta}{R}$ pode assumir um valor apreciavelmente diferente de zero, o que mostra que, mesmo em um regime de pequena não-comutatividade, as propriedades não-triviais que caracterizam as evoluções discretas podem ainda ser apreciáveis.

Enfatizamos que as estimativas obtidas para o comportamento das amplitudes de

transição (capítulo 4) significam, em particular, que as integrais relevantes para a solução do problema do potencial delta estão bem definidas do ponto de vista matemático. Apesar de não termos resolvido de maneira explícita essas integrais, podemos considerar o problema como resolvido. Para usar o jargão, o problema do espalhamento (na aproximação de Born) para o potencial delta foi reduzido ao cálculo de quadraturas. Embora seja desejável ter em mãos uma fórmula explícita para a matriz de transição, uma análise qualitativa, baseada nas estimativas do comportamento de $T_{\beta\alpha}$ como função dos parâmetros do problema, constituem por si só um indício de que os resultados obtidos até o momento representam realmente efeitos não-triviais.

A busca por modelos simples, que possibilitem o cálculo explícito das amplitudes de transição, constitui o primeiro passo no sentido de um melhor entendimento das consequências físicas das evoluções discretas. Uma possível lista de problemas fisicamente relevantes começaria pelos problemas exatamente solúveis da Mecânica Quântica usual. Podemos citar como exemplos o problema da barreira quadrada em uma dimensão espacial, ou ainda o potencial de Yukawa em 2 dimensões espaciais. Em um momento posterior, podemos considerar potenciais de posto finito [22]. Esses consistem em interações que reduzem-se, em alguma base conveniente, a uma matriz de dimensão finita. Como caso particular (posto 1), citamos os potenciais separáveis, que possuem aplicações na Física Nuclear, por exemplo [36]. Um fato interessante acerca dos potenciais de posto finito é que eles podem ser usados para aproximar potenciais compactos [37]. Esses últimos encontram aplicações físicas que são discutidas em [36, 37].

Tendo discutido os aspectos mais importantes desta Tese, nos voltamos agora para certos pormenores que também merecem destaque. Em primeiro lugar, destacamos a construção do formalismo de tempo congelado para a Mecânica Quântica Não-Comutativa. Essa abordagem se mostrou natural para tratar sistemas caracterizados pela não-comutatividade entre o tempo e o espaço. Diferentemente do caso usual, no formalismo do tempo congelado o papel do tempo é exercido por uma coordenada não-comutativa, isto é, um operador agindo em um espaço de Hilbert “auxiliar”. No caso específico em que somente uma coordenada espacial não comuta com a coordenada temporal, a análise da estrutura algébrica do modelo é simplificada. Considerando uma regra de comutação “canônica” para as coordenadas não-comutativas do espaço-tempo, verificamos que a álgebra das coordenadas é matematicamente equivalente à álgebra de Heisenberg para um sistema com um único grau de liberdade (um operador de posição e um operador de momento).

A passagem do plano não-comutativo para o cilindro não-comutativo se deu em analogia com o caso comutativo, isto é, a álgebra do cilindro não-comutativo foi definida como sendo a sub-álgebra do plano não-comutativo constituída de elementos invariantes por translações da forma: $\hat{x}_1 \mapsto \hat{x}_1 + 2\pi n$, com $n \in \mathbb{Z}$. Tomando essa definição como ponto de partida, identificamos a forma de um elemento genérico do cilindro não-comutativo. De posse dessa informação, verificamos que somente translações temporais múltiplas in-

teiras de θ são possíveis no cilindro não-comutativo. Esse fato se generaliza para qualquer sistema cuja Hamiltoniana dependa do grau de liberdade (extra) não-comutativo, representado por $e^{i\hat{x}_1}$.

Um aspecto particularmente importante diz respeito à construção do espaço de Hilbert dos estados físicos. O primeiro passo nesse sentido consistiu em construir uma família de formas sesqui-lineares positivo-definidas no cilindro não-comutativo. Essa família foi obtida a partir da definição de *símbolo* de um elemento do cilindro não-comutativo. Verificamos que as formas sesqui-lineares assim obtidas são degeneradas, ou seja, possuem vetores não-triviais de norma nula. Além disso, os espaços métricos definidos por cada uma dessas formas sesqui-lineares são independentes entre si. Diferentemente da estratégia algébrica usual para resolver esse problema (construção GNS [29]), na nossa abordagem o espaço de Hilbert foi baseado nas soluções da equação de Schrödinger discreta. O sub-espaço do cilindro não-comutativo formado por essas soluções possui somente o zero como vetor de norma nula. A restrição de cada uma das formas sesqui-lineares a esse sub-espaço define um espaço de Hilbert. Além disso, esses espaços de Hilbert são equivalentes entre si. A aplicação que permite a identificação entre esses espaços de Hilbert é a evolução temporal.

De modo a enfatizar o último dos pontos apresentados acima, lembramos que a translação temporal restrita ao sub-espaço das soluções da equação de Schrödinger é um operador unitário. Nesse sub-espaço a translação temporal se reduz à evolução temporal discreta, gerada pela família discreta \hat{H}_n de operadores Hamiltonianos (ver terceiro parágrafo da Conclusão). Como operadores unitários preservam a norma dos vetores, somos levados ao resultado já citado de que a translação temporal é uma isometria, quando restrita ao espaço das soluções da equação de Schrödinger discreta.

Mencionaremos agora algumas possibilidades de aplicação do formalismo desenvolvido nesta Tese. Conforme já mencionamos, potenciais de posto finito parecem ser uma escolha natural para a interação, do ponto de vista prático. Sendo problemas exatamente solúveis no caso usual, é natural esperar que seu tratamento no caso de evoluções discretas apresente uma relativa simplicidade computacional. Uma combinação bastante atrativa de simplicidade matemática e relevância fenomenológica é dada pelo problema da *oscilação de neutrinos* [39, 40]. De maneira extremamente resumida, trata-se aqui do cálculo da probabilidade de transição entre estados bem definidos de *sabor* para o caso dos neutrinos. No caso do problema dos neutrinos solares, por exemplo, somente dois sabores são relevantes para a discussão: neutrinos do elétron e neutrinos do múon. A interação entre a matéria solar e os neutrinos é dada por uma matriz 2×2 .

Outro problema bastante interessante que pretendemos considerar é o chamado modelo de *Jaynes – Cummings* da ótica quântica. De maneira resumida, trata-se aqui da interação entre um “átomo de 2 níveis” e um fóton, descrito em termos de um campo eletromagnético quantizado (*single mode*).

Outra possibilidade, já levantada em [2], consiste em estudar espalhamentos múltiplos

em um contexto cosmológico. Em um cenário onde não há conservação da energia, é natural esperar que, no limite de infinitas colisões sucessivas, o estado final seja descrito por uma distribuição de probabilidades para as diversas energias possíveis.

Para finalizar, mencionamos que é natural considerar as extensões da teoria de espalhamento para situações mais gerais, envolvendo muitos corpos e campos quânticos. Aplicações interessantes poderiam ser sugeridas pelos desenvolvimentos formais nessas áreas. Esta Tese é apenas o passo inicial no sentido de um programa de pesquisas envolvendo não-comutatividade do tipo tempo-espaço e evoluções discretas.

Apêndice A

O Problema de Auto-Valores

Neste apêndice nós resolvemos o problema de auto-vetores para a Hamiltoniana (4.1).

A.1 Auto-Vetores de $\hat{H}_1 = -\frac{\partial_1^2}{2M} + V\delta(x)$

Em primeiro lugar, mostraremos que os vetores (4.5) satisfazem a equação de Schrödinger independente do tempo para o caso do potencial delta repulsivo.

Como o potencial delta anula-se para todo $x \neq 0$, nessa região a equação de auto-valores assume a forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 2ME\psi(x) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Esse fato implica que as auto-funções de $\hat{H} = -\frac{\partial^2}{2M} + V\delta(x)$ devem reduzir-se a uma combinação linear de funções exponenciais nas regiões afastadas da origem. Considerando o caso de um fluxo de partículas provenientes do “infinito” (movendo-se no sentido positivo do eixo x), podemos escrever:

$$\psi(x < 0) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad , \quad \psi(x > 0) = Be^{ikx} \quad , \quad (\text{A.2})$$

onde A e B são constantes complexas a serem determinadas pela aplicação das condições de contorno na origem.

As condições de contorno impostas sobre a função de onda e sobre a sua derivada são as seguintes: a função de onda $\psi(x)$ deve ser contínua em toda parte, enquanto que a sua derivada espacial é descontínua na origem, onde se localiza o centro espalhador.

O valor da descontinuidade na derivada de ψ pode ser obtido se integrarmos a equação de Schrödinger ao longo do segmento de reta $[-\epsilon, \epsilon]$ contendo a origem:

$$-\frac{1}{2M} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \delta(x)\psi(x) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x). \quad (\text{A.3})$$

De acordo com o Teorema fundamental do Cálculo [30] temos:

$$-\frac{1}{2M} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) = -\frac{1}{2M} \left[\frac{d\psi}{dx}(\epsilon) - \frac{d\psi}{dx}(-\epsilon) \right], \quad (\text{A.4})$$

enquanto que a propriedade de “filtragem” da delta de Dirac nos permite escrever:

$$V \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \delta(x)\psi(x) = V\psi(0). \quad (\text{A.5})$$

Temos então:

$$-\frac{1}{2M} \frac{d\psi}{dx}(\epsilon) + \frac{1}{2M} \frac{d\psi}{dx}(-\epsilon) + V\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x). \quad (\text{A.6})$$

Tomemos agora o limite em que $\epsilon \rightarrow 0$. Usando a hipótese de continuidade da função de onda, temos que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) = 0. \quad (\text{A.7})$$

O resultado “intuitivo” (A.7) pode ser provado através da aplicação do Teorema do Valor Médio [30], por exemplo. De fato, esse teorema estabelece que a integral de uma função contínua $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sobre um intervalo da forma $[a, b]$ satisfaz a seguinte propriedade:

$$\int_a^b dx f(x) = (b - a) f(\xi), \quad (\text{A.8})$$

onde $a \leq \xi \leq b$. No caso em que $a = -\epsilon$, $b = \epsilon$ e $f(x) = \psi(x)$, podemos escrever:

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) = 2\epsilon \psi(\xi), \quad (\text{A.9})$$

onde $-\epsilon \leq \xi \leq \epsilon$.

Quando $\epsilon \rightarrow 0$, o valor de ξ também tende a zero, como consequência da condição $-\epsilon \leq \xi \leq \epsilon$. Por outro lado, da continuidade de ψ segue que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(\xi) = \psi(\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \xi) = \psi(0),$$

de forma que temos então:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [2\epsilon \psi(\xi)] = 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(\xi) = 0, \quad (\text{A.10})$$

conforme antecipado em (A.7).

Usando (A.7) em (A.6) no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$, podemos escrever:

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{\epsilon \rightarrow 0^+} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{\epsilon \rightarrow 0^-} = 2MV\psi(0), \quad (\text{A.11})$$

o que mostra que a descontinuidade da derivada da função de onda é controlada pela intensidade do potencial, dada pelo parâmetro V , pela massa da partícula e pelo valor de ψ na origem.

Usando a hipótese de continuidade de ψ na origem, em conjunção com (A.2) e (A.11), somos levados a:

$$\begin{cases} 1 + A & = & B \\ ikB - ik(1 - A) & = & 2MV\psi(0), \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

de onde podemos concluir que:

$$A = \frac{MV}{ik} \psi(0) \quad , \quad B = 1 + \frac{MV}{ik} \psi(0). \quad (\text{A.13})$$

Usando agora (A.2), vemos que $\psi(0) = A + 1 = B$. Usando esse resultado em (A.13) segue que:

$$A = \frac{MV}{ik - MV} \quad , \quad B = \frac{ik}{ik - MV}, \quad (\text{A.14})$$

de modo que a função de onda ψ escreve-se:

$$\psi_k(x) = \Theta(x) \frac{ik}{ik - MV} e^{ikx} + \Theta(-x) \left(e^{ikx} + \frac{MV}{ik - MV} e^{-ikx} \right), \quad (\text{A.15})$$

em conformidade com (4.5). Aqui $\Theta(x)$ é a função degrau.

A função de onda ψ não é normalizável. Ela representa um fluxo estável de partículas incidindo na barreira de potencial. Podemos verificar a validade da condição de conservação da probabilidade para esse fluxo. Lembremos que a quantidade $|A|^2$ é interpretada como a probabilidade de reflexão, enquanto que $|B|^2$ é interpretada como a probabilidade de transmissão. Usando (A.14) verifica-se que:

$$|A|^2 + |B|^2 = 1, \quad (\text{A.16})$$

fato esse que expressa a unitariedade da evolução gerada pela Hamiltoniana \hat{H}_1 .

Conforme discutido no Capítulo 4, a Hamiltoniana \hat{H}_1 comuta com o operador de paridade. Em virtude desse fato, podemos definir as auto-funções simétricas (pares) e anti-simétricas (ímpares) de \hat{H}_1 , denotadas respectivamente por $\psi_{kS}(x)$ e $\psi_{kA}(x)$.

A.2 Ortonormalidade

Nesta seção nós mostraremos que os auto-vetores de \hat{H}_1 que tomam parte na relação de completiza (4.12) formam um conjunto ortonormal (no sentido da delta de Dirac).

Para os auto-vetores anti-simétricos escrevemos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{qA}(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(kx) \sin(qx) = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx [e^{i(k+q)x} - e^{i(k-q)x} - e^{i(q-k)x} + e^{-i(k+q)x}] = \delta(k-q) - \delta(k+q). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Porém, como somente auto-vetores associados a valores positivos de k e q comparecem na relação de completiza (4.12), vê-se que o termo $\delta(k+q)$ em (A.17) é nulo. Temos então:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{qA}(x) = \delta(k-q). \quad (\text{A.18})$$

Para os auto-vetores simétricos temos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{qS}(x) &= \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Theta(x) \left(\frac{k \cos(kx) + MV \sin(kx)}{-ik - MV} \right) \left(\frac{q \cos(qx) + MV \sin(qx)}{iq - MV} \right) + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Theta(-x) \left(\frac{k \cos(kx) - MV \sin(kx)}{-ik - MV} \right) \left(\frac{q \cos(qx) - MV \sin(qx)}{iq - MV} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

onde omitiu-se as duas integrais contendo “termos cruzados” da forma $\Theta(x) \Theta(-x)$ nos seus integrandos, pois essas são identicamente nulas.

Desenvolvendo o produto em (A.19) e usando a definição da função degrau Θ chegamos a:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{qS}(x) &= \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{kq \cos(kx) \cos(qx) + M^2V^2 \sin(kx) \sin(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)} + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{kMV \cos(kx) \sin(qx) + qMV \sin(kx) \cos(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)} + \\ &+ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \frac{kq \cos(kx) \cos(qx) + M^2V^2 \sin(kx) \sin(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)} + \\ &- \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \frac{kMV \cos(kx) \sin(qx) + qMV \sin(kx) \cos(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

As integrais ao longo do semi-eixo negativo serão transformadas em integrais ao longo do semi-eixo positivo. Para tanto, introduziremos a seguinte mudança de variáveis:

$$u = -x \quad \Rightarrow \quad du = -dx,$$

a ser aplicada apenas às integrais sobre o intervalo $(-\infty, 0)$. Os integrandos que envolvem o produto de um seno por um cosseno mudarão de sinal. Os integrandos que envolvem produtos de seno por seno ou cosseno por cosseno permanecerão com o mesmo sinal. Verificamos que as duas integrais sobre $(-\infty, 0)$ são iguais às duas integrais sobre $(0, \infty)$, de modo que podemos escrever:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{qS}(x) = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{kq \cos(kx) \cos(qx) + M^2 V^2 \sin(kx) \sin(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)} + \\ &+ \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{kMV \cos(kx) \sin(qx) + qMV \sin(kx) \cos(qx)}{(-ik - MV)(iq - MV)}. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

O problema foi reduzido ao cálculo de integrais envolvendo os seguintes produtos de funções trigonométricas:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad & \int_0^{\infty} dx \cos(kx) \cos(qx) = \\ &= \frac{1}{4} \left[\pi \delta(k+q) + i \frac{\mathcal{P}}{k+q} + \pi \delta(k-q) + i \frac{\mathcal{P}}{k-q} + \pi \delta(q-k) + i \frac{\mathcal{P}}{q-k} + \right. \\ & \left. + \pi \delta(k+q) + i \frac{\mathcal{P}}{-k-q} \right] = \frac{\pi}{2} (\delta(k+q) + \delta(k-q)), \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

onde usamos a seguinte identidade distribucional envolvendo a delta de Dirac e a parte principal de Cauchy [33]:

$$\int_0^{\infty} dx e^{ikx} = i \frac{\mathcal{P}}{k} + \pi \delta(k). \quad (\text{A.23})$$

Como $k, q > 0$, obtemos:

$$\int_0^{\infty} dx \cos(kx) \cos(qx) = \frac{\pi}{2} \delta(k-q); \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} (\text{b}) \quad & \int_0^{\infty} dx \sin(kx) \sin(qx) = \\ &= -\frac{1}{4} \left[\pi \delta(k+q) + i \frac{\mathcal{P}}{k+q} - \pi \delta(k-q) - i \frac{\mathcal{P}}{k-q} - \pi \delta(q-k) - i \frac{\mathcal{P}}{q-k} + \right. \\ & \left. + \pi \delta(k+q) + i \frac{\mathcal{P}}{-k-q} \right] = \frac{\pi}{2} (\delta(k-q) - \delta(k+q)). \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Como $k, q > 0$, obtemos novamente:

$$\int_0^\infty dx \sin(kx) \sin(qx) = \frac{\pi}{2} \delta(k - q); \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} (\text{c}) \quad & \int_0^\infty dx \sin(kx) \cos(qx) = \\ & \frac{1}{4i} \left[\pi \delta(k + q) + i \frac{\mathcal{P}}{k + q} + \pi \delta(k - q) + i \frac{\mathcal{P}}{k - q} - \pi \delta(k - q) - i \frac{\mathcal{P}}{q - k} + \right. \\ & \left. - \pi \delta(k + q) - i \frac{\mathcal{P}}{-k - q} \right] = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{P}}{k + q} + \frac{\mathcal{P}}{k - q} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Usando (A.22), (A.25) e (A.27) em (A.21) podemos escrever:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^\infty dx \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{qS}(x) &= \frac{k^2}{k^2 + M^2 V^2} \delta(k - q) + \frac{M^2 V^2}{k^2 + M^2 V^2} \delta(k - q) + \\ &- \frac{1}{\pi} \frac{k M V}{(ik + MV)(iq - MV)} \left(\frac{\mathcal{P}}{k + q} + \frac{\mathcal{P}}{q - k} \right) + \\ &- \frac{1}{\pi} \frac{q M V}{(ik + MV)(iq - MV)} \left(\frac{\mathcal{P}}{k + q} + \frac{\mathcal{P}}{k - q} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Devemos verificar que a soma dos termos em (A.28) envolvendo a parte principal de Cauchy anula-se identicamente, enquanto distribuições agindo em um espaço de funções teste adequado. Para tanto, iniciamos agrupando as duas parcelas que aparecem na última linha de (A.28) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2 &= \\ -\frac{1}{\pi} \underbrace{\left[\frac{k + q}{(ik + MV)(iq - MV)} \right]}_{\mathcal{D}_1} \frac{\mathcal{P}}{k + q} &+ \frac{1}{\pi} \underbrace{\left[\frac{k - q}{(ik + MV)(iq - MV)} \right]}_{\mathcal{D}_2} \frac{\mathcal{P}}{k - q}. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Apliquemos agora a distribuição \mathcal{D}_1 em uma função teste $\varphi(q, k)$:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{D}_1, \varphi \rangle &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dq dk \left[\frac{k + q}{(ik + MV)(iq - MV)} \right] \frac{\mathcal{P}}{k + q} \varphi(q, k) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\epsilon}^\infty dk \left[\frac{k + q}{(ik + MV)(iq - MV)} \right] \frac{\varphi(q, k)}{k + q} + \right. \\ &+ \left. \int_{-\infty}^\epsilon dk \left[\frac{k + q}{(ik + MV)(iq - MV)} \right] \frac{\varphi(q, k)}{k + q} \right\} = \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \int_{-\infty}^\infty dk \frac{\varphi(q, k)}{(ik + MV)(iq - MV)}. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Por sua vez, se aplicarmos \mathcal{D}_1 em $\varphi(q, k)$ encontraremos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{D}_2, \varphi \rangle &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq dk \left[\frac{k-q}{(ik+MV)(iq-MV)} \right] \frac{\mathcal{P}}{k-q} \varphi(q, k) = \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\epsilon}^{\infty} dk \left[\frac{k-q}{(ik+MV)(iq-MV)} \right] \frac{\varphi(q, k)}{k-q} + \right. \\
&\quad \left. + \int_{-\infty}^{\epsilon} dk \left[\frac{k-q}{(ik+MV)(iq-MV)} \right] \frac{\varphi(q, k)}{k-q} \right\} = \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\varphi(q, k)}{(ik+MV)(iq-MV)}. \tag{A.31}
\end{aligned}$$

Somando (A.30) e (A.31), vemos que $\mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2$ é identicamente nula. Usando esse resultado em (A.28), obtemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{qS}(x) = \frac{k^2}{k^2 + M^2V^2} \delta(k-q) + \frac{M^2V^2}{k^2 + M^2V^2} \delta(k-q) = \delta(k-q). \tag{A.32}$$

A.3 Transformadas de Fourier

Nesta seção calculamos as transformadas de Fourier dos auto-vetores de (4.1).

Para os auto-vetores anti-simétricos temos:

$$\tilde{\psi}_{kA}(q) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx i \sin(kx) e^{-ixq}. \tag{A.33}$$

Escrevendo a função seno em termos de funções exponenciais temos:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_{kA}(q) &= \frac{1}{4\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{i(k-q)x} - e^{-i(k+q)x}) = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (\delta(k-q) - \delta(k+q)). \tag{A.34}
\end{aligned}$$

Para os auto-vetores simétricos temos:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_{kS}(p) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{kS}(x) e^{-ixp} = \\
&= \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 dx \frac{1}{ik-MV} [ik \cos(kx) - iMV \sin(kx)] e^{-ixp} + \\
&\quad + \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{1}{ik-MV} [ik \cos(kx) + iMV \sin(kx)] e^{-ixp} \tag{A.35}
\end{aligned}$$

Podemos agrupar as integrais que envolvem a função $\cos(kx)$ em uma única integral:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{kS}(p) &= \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{ik \cos(kx)}{ik - MV} e^{-ixp} \\ &+ \frac{iMV}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{\sin(kx)}{ik - MV} e^{-ixp} - \frac{iMV}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 dx \frac{\sin(kx)}{ik - MV} e^{-ixp}. \quad (\text{A.36})\end{aligned}$$

A integral sobre o semi-eixo real negativo pode ser transformada em uma integral sobre o semi-eixo real positivo. Para tanto, introduzimos a seguinte mudança de variáveis:

$$u = -x \quad \Rightarrow \quad du = -dx,$$

de onde segue que:

$$-\frac{iMV}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 dx \frac{\sin(kx)}{ik - MV} e^{-ixp} = \frac{iMV}{2\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} du \frac{\sin(ku)}{ik - MV} e^{iup}. \quad (\text{A.37})$$

Podemos então escrever:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{kS}(p) &= \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{ik}{ik - MV} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx) e^{-ixp} + \\ &+ \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{iMV}{ik - MV} \int_0^{\infty} dx 2 \sin(kx) \cos(px). \quad (\text{A.38})\end{aligned}$$

A integral na primeira linha de (A.38) pode ser simplificada se usarmos a fórmula de Euler para a função exponencial:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx) e^{-ixp} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx) [\cos(px) - i \sin(px)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx) \cos(px), \quad (\text{A.39})\end{aligned}$$

devido à ortogonalidade entre $\cos(kx)$ e $\sin(px)$, para quaisquer valores de k e p .

Assim:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{kS}(p) &= \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{ik}{ik - MV} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(kx) \cos(px) + \\ &+ \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{iMV}{ik - MV} \int_0^{\infty} dx \sin(kx) \cos(px) = \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{ik}{ik - MV} \int_0^{\infty} dx \cos(kx) \cos(px) + \\ &+ \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{iMV}{ik - MV} \int_0^{\infty} dx \sin(kx) \cos(px). \quad (\text{A.40})\end{aligned}$$

Usando (A.22) e (A.27) em (A.40), encontramos:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{kS}(p) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{ik}{ik - MV} (\delta(k+p) + \delta(k-p)) + \\ &+ \frac{1}{2\pi\sqrt{\pi}} \frac{iMV}{ik - MV} \left(\frac{\mathcal{P}}{k+p} + \frac{\mathcal{P}}{k-p} \right),\end{aligned}\quad (\text{A.41})$$

completando assim essa seção.

A.4 Relação de Completeza

Nesta seção nós demonstraremos a relação de completeza (4.13).

Para os auto-vetores anti-simétricos de \hat{H}_1 temos:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dk \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{kA}(y) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \sin(kx) \sin(ky) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dk \left(e^{ik(x+y)} + e^{-ik(x+y)} - e^{ik(x-y)} - e^{ik(y-x)} \right) = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[\pi\delta(x+y) + i\frac{\mathcal{P}}{x+y} + \pi\delta(x+y) + i\frac{\mathcal{P}}{-x-y} + \right. \\ &\quad \left. -\pi\delta(x-y) - i\frac{\mathcal{P}}{x-y} - \pi\delta(y-x) - i\frac{\mathcal{P}}{y-x} \right].\end{aligned}\quad (\text{A.42})$$

As contribuições envolvendo a Parte Principal de Cauchy cancelam-se duas a duas, levando a:

$$\int_0^\infty dk \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{kA}(y) = \frac{1}{2} (\delta(x-y) - \delta(x+y)). \quad (\text{A.43})$$

Para os auto-vetores simétricos é conveniente estudar separadamente cada um dos quatro arranjos possíveis para os sinais de x e y , isto é: $(x, y > 0)$, $(x > 0, y < 0)$, $(x < 0, y > 0)$ e $(x, y < 0)$. A razão é que $\psi_{kS}(x)$ é uma função definida por partes (a sua expressão matemática para $x > 0$ difere da sua expressão para $x < 0$). O cálculo explícito para um dos casos ilustrará o procedimento a ser aplicado em todos os casos. Consideremos então o caso em que $x, y > 0$. Temos:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dk \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{kS}(y) &= \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \left[\frac{k \cos(kx) + MV \sin(kx)}{-ik - MV} \right] \left[\frac{k \cos(ky) + MV \sin(ky)}{ik - MV} \right] = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk [\cos \varphi_k \cos(kx) + \sin \varphi_k \sin(kx)] [\cos \varphi_k \cos(ky) + \sin \varphi_k \sin(ky)],\end{aligned}\quad (\text{A.44})$$

onde o ângulo φ_k é definido por:

$$\sin \varphi_k = \frac{MV}{\sqrt{k^2 + M^2V^2}} \quad \text{e} \quad \cos \varphi_k = \frac{k}{\sqrt{k^2 + M^2V^2}} \quad (\text{A.45})$$

Note-se que, como $k \geq 0$ e $MV > 0$, segue que $0 < \varphi_k \leq \frac{\pi}{2}$.

Usando a conhecida identidade trigonométrica

$$\cos(a - b) = \cos a \cos b + \sin a \sin b,$$

temos:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{kS}(y) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \cos(\varphi_k - kx) \cos(\varphi_k - ky) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \{ e^{i[2\varphi_k - k(x+y)]} + e^{-i[2\varphi_k - k(x+y)]} + e^{ik(x-y)} + e^{-ik(x-y)} \} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \cos[2\varphi_k - k(x+y)] + \frac{1}{4\pi} \left[\pi\delta(x-y) + i\frac{\mathcal{P}}{x-y} + \pi\delta(y-x) + i\frac{\mathcal{P}}{y-x} \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \cos[2\varphi_k - k(x+y)] + \frac{1}{2}\delta(x-y), \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

sendo agora necessário calcular a integral remanescente em (A.46). Essa escreve-se:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dk \cos[2\varphi_k - k(x+y)] &= \\ &= \int_0^\infty dk \{ \cos(2\varphi_k) \cos[k(x+y)] + \sin(2\varphi_k) \sin[k(x+y)] \} = \\ &= \int_0^\infty dk \{ [\cos^2(\varphi_k) - \sin^2(\varphi_k)] \cos[k(x+y)] + 2 \sin \varphi_k \cos \varphi_k \sin[k(x+y)] \} = \\ &= \int_0^\infty dk \left(\frac{k^2 - M^2V^2}{k^2 + M^2V^2} \right) \cos[k(x+y)] + \\ &+ \int_0^\infty dk \left(\frac{2kMV}{k^2 + M^2V^2} \right) \sin[k(x+y)]. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Por conveniência notacional introduziremos os símbolos I_1 e I_2 para designar as integrais que aparecem na última linha de (A.47). Assim:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty dk \left(\frac{k^2 - M^2V^2}{k^2 + M^2V^2} \right) \cos[k(x+y)], \\ I_2 &= \int_0^\infty dk \left(\frac{2kMV}{k^2 + M^2V^2} \right) \sin[k(x+y)]. \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Vamos calcular I_1 e I_2 separadamente. Para tanto, usaremos a estratégia de escrever tais integrais em termos de outras integrais que possam ser resolvidas através da aplicação do Teorema dos Resíduos. De maneira geral, procuraremos reduzir o cálculo de I_1 e I_2 ao cálculo de integrais do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx}, \quad (\text{A.49})$$

onde $f(k)$ é uma função da variável real cuja “extensão” para o plano complexo $f(z)$ satisfaz a seguinte condição:

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} |f(z)| = 0. \quad (\text{A.50})$$

A.4.1 Cálculo de I_1

Note-se inicialmente que o integrando de I_1 é par. Podemos então escrever:

$$I_1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\frac{k^2 - M^2 V^2}{k^2 + M^2 V^2} \right) \cos[k(x+y)]. \quad (\text{A.51})$$

Somando e subtraindo o termo $M^2 V^2 \cos[k(x+y)]$ ao integrando de I_1 , podemos decompor essa integral em duas outras integrais:

$$I_1 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cos[k(x+y)] - M^2 V^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\cos[k(x+y)]}{k^2 + M^2 V^2}. \quad (\text{A.52})$$

A primeira parcela em (A.52) pode ser resolvida de maneira direta, se usarmos a decomposição da função cosseno em termos de funções exponenciais:

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \cos[k(x+y)] = \pi \delta(x+y) = 0, \quad (\text{A.53})$$

devido à hipótese de que $x, y > 0$.

A segunda integral em (A.52) é do tipo (A.49). Podemos expressá-la da seguinte maneira:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\cos[k(x+y)]}{k^2 + M^2 V^2} = \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2 V^2}. \quad (\text{A.54})$$

Por outro lado, a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2 V^2}$$

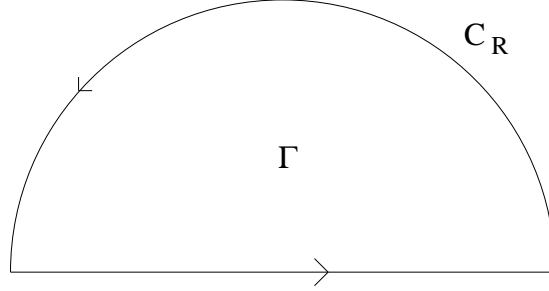


Figura A.1: Domínio de integração no plano complexo.

pode ser calculada através da aplicação do Teorema dos Resíduos [41]. De fato, seja Γ a curva fechada mostrada na figura (A.1).

Consideremos a integral da função

$$fz = \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2}$$

ao longo de Γ , no limite em que o raio R do semi-círculo C_R tende ao infinito. Aplicando o Teorema dos resíduos a esse caso escrevemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2V^2} + \lim_{|z| \rightarrow \infty} \int_{C_R} dz \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} = 2\pi i \text{Res}(iMV), \quad (\text{A.55})$$

onde $\text{Res}(iMV)$ denota o resíduo do integrando de (A.55) no ponto $z = iMV$.

A integral ao longo do semi-círculo C_R pode ser estimada da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \left| \int_{C_R} dz \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \right| &\leq \int_0^\pi d\phi R \left| \frac{e^{i(x+y)R \cos \phi - (x+y)R \sin \phi}}{z^2 + M^2V^2} \right| \leq \\ &\leq R \int_0^\pi d\phi \frac{e^{-(x+y)R \sin \phi}}{|z^2 + M^2V^2|} = \leq R \int_0^\pi d\phi \frac{e^{-(x+y)R \sin \phi}}{|z + iMV| |z - iMV|}. \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Usando a identidade[22]

$$||a| - |b|| \leq |a - b|,$$

temos:

$$\frac{1}{|z \pm iMV|} \leq \frac{1}{|R - MV|}, \quad (\text{A.57})$$

de modo que podemos escrever:

$$\left| \int_{C_R} dz \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \right| \leq \frac{R}{|R - MV|^2} \int_0^\pi d\phi e^{-(x+y)R \sin \phi}. \quad (\text{A.58})$$

Para calcular a integral no segundo membro de (A.58), efetuamos a seguinte mudança de variáveis:

$$\omega = \phi - \frac{\pi}{2} \quad , \quad \omega = d\phi ,$$

que nos permite escrever:

$$\int_0^{\pi} d\phi e^{-(x+y)R \sin \phi} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\omega e^{-(x+y)R \cos \omega} . \quad (\text{A.59})$$

Como o integrando em (A.59) é uma função par de ϕ , escrevemos:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\omega e^{-(x+y)R \cos \omega} = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\omega e^{-(x+y)R \cos \omega} . \quad (\text{A.60})$$

Observemos agora que $\cos \phi \geq (1 - \frac{2}{\pi}\phi) \geq 0$ na região de integração $[0, \frac{\pi}{2}]$. Essa afirmação pode ser verificada graficamente, se plotarmos $g(\phi) = \cos \phi$ e $h(\phi) = (1 - \frac{2}{\pi}\phi)$ no mesmo sistema de eixos cartesianos. Assim:

$$\begin{aligned} e^{-(x+y)R \cos \phi} &\leq e^{(x+y)R(\frac{2}{\pi}\phi-1)} \implies \\ \implies \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi e^{-(x+y)R \cos \phi} &\leq \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi e^{(x+y)R(\frac{2}{\pi}\phi-1)} . \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

Efetuada agora a mudança de variáveis $u = \frac{2}{\pi}\phi - 1$ na integral do segundo membro de (A.61), escrevemos:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi e^{-(x+y)R \cos \phi} \leq \frac{\pi}{2} \int_{-1}^0 du e^{(x+y)Ru} = \frac{\pi}{2} \left[\frac{1 - e^{-(x+y)R}}{(x+y)R} \right] , \quad (\text{A.62})$$

de modo que

$$\begin{aligned} \left| \int_{C_R} dz \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \right| &\leq \frac{R\pi}{|R - MV|^2} \left[\frac{1 - e^{-(x+y)R}}{(x+y)R} \right] = \\ &= \frac{\pi}{(x+y)|R - MV|^2} (1 - e^{-(x+y)R}) . \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

No limite em que $|z| = R \rightarrow \infty$ obtemos:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left| \int_{C_R} dz \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \right| \leq \pi \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{(1 - e^{-(x+y)R})}{(x+y)|R - MV|^2} = 0 . \quad (\text{A.64})$$

O resultado (A.64) deve ser substituído em (A.55). Resta calcular o resíduo de $f(z) = \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2}$ em $z = iMV$. Esse escreve-se:

$$\text{Res}f(iMV) = \frac{e^{iMV(x+y)}}{iMV + iMV} = \frac{e^{-MV(x+y)}}{2iMV} , \quad (\text{A.65})$$

de modo que temos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2V^2} = \frac{\pi}{MV} e^{-MV(x+y)}, \quad (\text{A.66})$$

de modo que (A.54) pode ser escrita como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\cos[k(x+y)]}{k^2 + M^2V^2} = \frac{\pi}{MV} e^{-MV(x+y)}, \quad (\text{A.67})$$

levando finalmente a:

$$I_1 = -M^2V^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\cos[k(x+y)]}{k^2 + M^2V^2} = -\pi MV e^{-MV(x+y)}. \quad (\text{A.68})$$

A.4.2 Cálculo de I_2

Assim como no caso anterior, o integrando de I_2 é uma função par da variável de integração. Podemos então escrever a seguinte expressão para essa integral:

$$I_2 = MV \int_{-\infty}^{\infty} dk k \frac{\sin[k(x+y)]}{k^2 + M^2V^2} = MV \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2V^2}. \quad (\text{A.69})$$

Considerando a integral de

$$f(z) = z \frac{e^{z(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \quad (\text{A.70})$$

ao longo da curva Γ mostrada na figura 1, podemos escrever:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2V^2} + \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_R} dz z \frac{e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} = 2\pi i \text{Res}(iMV) \quad (\text{A.71})$$

Seguindo a mesma linha do cálculo de I_1 , vamos estimar a integral sobre o semi-círculo C_R :

$$\begin{aligned} & \left| \int_{C_R} dz \frac{z e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2V^2} \right| \leq \int_0^\pi d\phi R |Re^{i\phi}| \left| \frac{e^{i(x+y)R \cos \phi - (x+y)R \sin \phi}}{z^2 + M^2V^2} \right| \\ & \leq \frac{R^2}{|R - MV|^2} \int_0^\pi d\phi e^{-(x+y)R \sin \phi} = \frac{2R^2}{|R - MV|^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi e^{-(x+y)R \cos \phi} \leq \\ & \leq \frac{2R^2}{|R - MV|^2} \frac{\pi}{2R(x+y)} (1 - e^{-(x+y)R}) = \\ & = \frac{R}{|R - MV|^2} \frac{\pi}{(x+y)} (1 - e^{-(x+y)R}), \end{aligned} \quad (\text{A.72})$$

de modo que no limite em que $R \rightarrow \infty$ temos:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left| \int_{C_R} dz \frac{z e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2 V^2} \right| \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{R}{|R - MV|^2} \frac{\pi}{(x+y)} (1 - e^{-(x+y)R}) = 0. \quad (\text{A.73})$$

Assim, temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2 V^2} = 2\pi i \text{Res}(iMV), \quad (\text{A.74})$$

onde $\text{Res}(iMV)$ denota o resíduo de $\frac{z e^{iz(x+y)}}{z^2 + M^2 V^2}$ em $z = iMV$, dado por:

$$\text{Res}(iMV) = \frac{iMV}{iMV + iMV} e^{iMV(x+y)} = \frac{1}{2} e^{-MV(x+y)} \quad (\text{A.75})$$

Segue que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k e^{ik(x+y)}}{k^2 + M^2 V^2} = i\pi e^{-MV(x+y)} \quad (\text{A.76})$$

O valor de I_2 é dado então por:

$$I_2 = MV \text{Im}(i\pi e^{-MV(x+y)}) = \pi MV e^{-MV(x+y)} \quad (\text{A.77})$$

Substituindo (A.68) e (A.77) em (A.47), encontramos:

$$\int_0^{\infty} dk \cos[2\varphi_k - k(x+y)] = I_1 + I_2 = 0, \quad (\text{A.78})$$

de modo que a equação (A.46) é equivalente a

$$\int_0^{\infty} dk \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{kS}(y) = \frac{1}{2} \delta(x-y). \quad (\text{A.79})$$

Combinando (A.79) e (A.43) para o caso em que $x, y > 0$, obtemos finalmente a forma da relação de completeza para os auto-valores de \hat{H}_1 na representação de coordenadas:

$$\int_0^{\infty} dk \overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{kS}(y) + \int_0^{\infty} dk \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{kA}(y) = \delta(x-y). \quad (\text{A.80})$$

Levando também em conta o número quântico associado ao grau de liberdade extra, encontramos:

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in(u-v)} \int_0^{\infty} dk \left[\overline{\psi_{kS}(x)} \psi_{kS}(y) + \overline{\psi_{kA}(x)} \psi_{kA}(y) \right] = \delta_{S^1}(u-v) \delta(x-y), \quad (\text{A.81})$$

em conformidade com (4.13). Note-se que $\delta_{S^1}(u-v)$ em (A.81) é uma delta periódica de período igual a 2π .

Referências Bibliográficas

- [1] Balachandran A. P., Govindarajan T. R., Molina C. and Teotonio-Sobrinho P., *Unitary Quantum Physics with Time-Space Noncommutativity*, JHEP **0410** 072 (2004) [hep-th/0406125].
- [2] Balachandran A. P., Govindarajan T. R., Martins A. G. and Teotonio-Sobrinho P., *Time-Space Noncommutativity: Quantised Evolutions*, JHEP **0411** 068 (2004) [hep-th/0410067].
- [3] Balachandran A. P., Govindarajan T. R., Martins A. G., Molina C. and Teotonio-Sobrinho P., *Unitary quantum physics with time-space non-commutativity*, J.Phys.Conf.Ser. **24**, 179-202 (2005).
- [4] Douglas M. R. and Nekrasov N. A., *Noncommutative Field Theory*, Rev.Mod.Phys. **73**, 977-1029 (2001).
- [5] Jackiw R., Nucl.Phys.Proc.Suppl. **108**, 30 (2002) [hep-th/0110057]; *Letter of Heisenberg to Peierls (1930)*, Wolfgang Pauli, Scientific Correspondence, Vol. II, p.15, Ed. Karl von Meyenn, Springer-Verlag (1985); *Letter of Pauli to Oppenheimer (1946)*, Wolfgang Pauli, Scientific Correspondence, Vol. III, p.380, Ed. Karl von Meyenn, Springer-Verlag (1993).
- [6] Kursunoglu B. N. and Wigner E. P. (editors), *Reminiscences about a great physicist : Paul Adrien Maurice Dirac*, Cambridge University Press (1987).
- [7] Reif F., *Foundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Mcgraw-Hill (1965).
- [8] Madore J., *An introduction to Noncommutative Geometry and its Physical Applications*, Cambridge University Press (2000).
- [9] Snyder H. S., *Quantized Space-Time*, Phys. Rev. **71**, 38-41 (1947).
- [10] Yang C. N., *On Quantized Space-Time*, Phys. Rev. **72**, 874 (1947).

- [11] Matschull H.-J., Welling M., *Quantum Mechanics of a Point Particle in 2+1 Dimensional Gravity*, Class. Quant. Grav. **15**, 2981-3030 (1998) [gr-qc/9708054].
- [12] 't Hooft G., *Canonical Quantization of Gravitating Point Particles in 2+1 Dimensions*, Class. Quant. Grav. **10**, 1653-1664 (1993) [gr-qc/9305008] ; 't Hooft G., *Quantization of Point Particles in 2+1 Dimensional Gravity and Space-Time Discreteness*, Class. Quant. Grav. **13**, 1023-1040 (1996) [gr-qc/9601014].
- [13] Seiberg N. and Witten E., *String Theory and Noncommutative Geometry*, JHEP 9909, 032 (1999) [hep-th/9908142].
- [14] Connes A., *Noncommutative geometry* , Academic Press (1994).
- [15] Gracia-Bondía J. M, Várilly J. C. and Figueroa H., *Elements of noncommutative geometry*, Birkhäuser (2001).
- [16] Girotti H. O., Gomes M., Rivelles V. O. and da Silva A. J., *A Consistent Noncommutative Field Theory: the Wess-Zumino Model*, Nucl.Phys. B587, 299-310 (2000) [hep-th/0005272].
- [17] Gomis J. and Mehen T., *Space-Time Noncommutative Field Theories And Unitarity*, Nucl.Phys. B **591**, 265-276 (2000) [hep-th/0005129].
- [18] Bahns D., *Unitary Quantum Field Theory on the Noncommutative Minkowski space*, Fortsch.Phys. **51**, 658-663 (2003) [hep-th/0212266].
- [19] Doplicher S., Fredenhagen K. and Roberts J., *Space-time quantization induced by classical gravity*, Phys. Lett. B **331**, 39-44 (1994); Doplicher S., Fredenhagen K. and Roberts J., *The quantum structure of space-time at the Planck scale and quantum fields*, Comm. Math. Phys. **172**, 187-220 (1995) [hep-th/0303037].
- [20] Chaichian M., Demichev A., Presnajder P., Tureanu A., *Space-time noncommutativity, discreteness of time and unitarity*, Eur. Phys. J. C **20**, 767-772 (2001) [hep-th/0007156].
- [21] Greiner W. and Reinhardt J., *Fields quantization* , Springer (1996).
- [22] Barata J. C. A., *Notas de aula do Curso de Física-Matemática*, IFUSP (2006).
- [23] Alvarez-Gaume L., Vazquez-Mozo M. A., *General Properties of Noncommutative Field Theories*, Nucl.Phys. B668 (2003) 293-321 [hep-th/030509].

- [24] Chaichian M., Presnajder P., Tureanu A., *New concept of relativistic invariance in NC space-time: twisted Poincaré symmetry and its implications*, Phys.Rev.Lett. 94 (2005) 151602 [hep-th/0409096].
- [25] Weinberg S., *The Quantum Theory of Fields, Vol. I: Foundations*, Cambridge University Press (1995).
- [26] Aschieri P., Blohmann C., Dimitrijevic M., Meyer F., Schupp P. and Wess J., *A Gravity Theory on Noncommutative Spaces*, Class.Quant.Grav. 22 (2005) 3511-3532 [hep-th/0504183].
- [27] Chaichian M., Nishijima K., Tureanu A., *Spin-Statistics and CPT Theorems in Noncommutative Field Theory*, Phys.Lett. B568 (2003) 146-152 [hep-th/0209008].
- [28] Waldmann S., *Deformation Quantization: Observable Algebras, States and Representation Theory* [hep-th/0303080].
- [29] Haag R., *Local Quantum Physics. Field, Particles, Algebras*. 2nd. ed, Springer (1996).
- [30] Kaplan W., traduzido por Frederic Tsu, *Cálculo Avançado*, Edgard Blücher (1972).
- [31] Schulman L. S., *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons (1981).
- [32] Kleinert H., *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, World Scientific (1990).
- [33] Newton R. G., *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill (1966).
- [34] Griffiths D. J., *Introduction to Quantum Mechanics*, Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall (1995).
- [35] Merzbacher E., *Quantum Mechanics*, New York and London: John Wiley & Sons (1961).
- [36] Weinberg S., *Systematics Solution of Multiparticle Scattering Problems*, Phys. Rev. **133**, B232-B256 (1963) ; Scadron M, and Weinberg S., *Potential Theory Calculations by the Quasiparticle Method*, Phys. Rev. **133**, B1589-B1596 (1963).
- [37] Scadron M., Weinberg S. and Wright J., *Functional Analysis and Scattering Theory*, Phys. Rev. **135**, B202-B207 (1964).
- [38] Goldberger M. L. and Watson K. M, *Collision Theory*, John Wiley & Sons (1964).

- [39] Wolfenstein L., *Neutrino Oscillations in Matter*, Phys. Rev. D, **17**, 2369-2374 (1978).
- [40] Kuo T. K. and Pantaleone J., *Neutrino Oscillations in Matter*, Rev. Mod. Phys., **61**, 937-979 (1989).
- [41] Arfken G. B. and Weber H. J., *Mathematical Methods for Physicists*, 4th ed., Academic Press (1995).