

# Usando a representação de Heisenberg

José Fernando Perez

Instituto de Física, Universidade de São Paulo  
Caixa Postal 66318, CEP 05389-970, São Paulo, Brasil

Trabalho recebido em 31 de junho de 1995

## Resumo

A representação de Heisenberg da Mecânica Quântica é utilizada para calcular de forma simples, em vários exemplos, propriedades de propagação e alargamento de pacotes de onda. A discussão se dá em nível elementar.

## Abstract

The Heisenberg picture of Quantum Mechanics is used to compute in a simple way the propagation and spread of wave packets in some examples. The presentation is made in an elementary level.

## 1. Introdução

A maioria dos livros textos de Mecânica Quântica, dos mais introdutórios<sup>[1]</sup> aos mais avançados<sup>[2]</sup> dedica um limitado espaço à discussão da representação de Heisenberg. Ela é geralmente apresentada rapidamente, de forma perfunctória, dada talvez uma presumida inutilidade prática. A motivação mais frequentemente invocada para sua introdução é o fato de que as equações de movimento dos operadores quânticos são similares às equações clássicas de Hamilton.

Passa-se ao largo até mesmo da curiosidade histórica que ela deveria suscitar, já que na formulação originalmente utilizada por Heisenberg para introduzir a Mecânica Quântica, a noção de estado quântico de um sistema, representado por sua função de onda, era inexistente, sendo a evolução temporal do sistema físico descrita exclusivamente através da dependência temporal dos observáveis *posição* e *momento*, que eram representados por matrizes.

Nesta despreziosa nota, revisitamos a representação de Heisenberg da Mecânica Quântica com a finalidade de exibir através de exemplos sua utilidade prática ao permitir notável simplificação e generalidade no cálculo da propagação de pacotes de onda no estudo de alguns sistemas. Trata-se da apresentação de uma

experiência didática no ensino de Mecânica Quântica em curso de dois semestres ao nível de graduação no Instituto de Física da Universidade de São Paulo que, esperamos, possa ser estimulante para aqueles envolvidos no desafio do ensino da física quântica.

Concretamente, consideramos sistemas para os quais pode-se resolver exatamente as equações de Heisenberg e a partir da solução mostramos como obter, de forma elementar, informações relevantes sobre a evolução de pacotes de onda. Em particular, e esta pretende ser a principal contribuição desta nota, mostramos como obter as propriedades de alargamento dos pacotes ao longo do tempo. Deve ser salientado que, na maioria dos textos, a discussão sobre o alargamento de pacote de ondas se limita ao caso de uma partícula livre com um estado inicial dado por uma função de onda gaussiana. Nossa técnica, além de evitar cálculos tediosos, permite estudar o alargamento para qualquer estado inicial para todos os sistemas onde se possa resolver exatamente as equações de Heisenberg. Além da simplificação prática resultante, há também um incontestável benefício conceitual com a compreensão do círculo de idéias envolvido.

Na próxima seção, para fixar a notação e colocar o problema em seu contexto, fazemos uma breve ex-

cursão pela representação de Schrödinger. Na seção III fazemos uma apresentação sumária da representação de Heisenberg, chamando a atenção para algumas sutilezas associadas às equações de movimento, que não parecem ter recebido a devida atenção nos textos. Finalmente na seção IV, mostramos como a representação de Heisenberg pode ser usada para resolver exatamente e de forma elementar os problemas relativos à propagação e o alargamento de pacotes de ondas de uma partícula livre, de uma partícula em um campo uniforme e do oscilador harmônico.

## 2. A representação de Schrödinger

Na chamada representação de Schrödinger da Mecânica Quântica, que von Neumann posteriormente demonstrou ser equivalente à de Heisenberg, o estado no instante  $t$  de um sistema de uma partícula movendo-se em uma dimensão, é representado por uma função  $\psi_t(x)$  da coordenada espacial  $x$ , que contém toda informação sobre a estatística de medidas das diversas grandezas físicas que podem ser efetuadas sobre o sistema. Dessa função exigiremos a condição de normalização

$$\int |\psi_t(x)|^2 dx = 1$$

o que permite, em particular, interpretar  $|\psi_t(x)|^2$  como a densidade da distribuição de probabilidade das medidas de posição efetuadas no instante  $t$ . Assim os diversos parâmetros da distribuição de probabilidade como o valor médio  $\langle q \rangle_t$  e variância  $(\Delta q)_t^2$  das medidas de posição no instante  $t$  são dados respectivamente por

$$\langle q \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_t(x)|^2 dx$$

$$(\Delta q)_t^2 = \langle q^2 \rangle_t - \langle q \rangle_t^2,$$

onde

$$\langle q^n \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n |\psi_t(x)|^2 dx$$

A distribuição de probabilidades associada a medidas do momento  $p$  são, por sua vez, calculadas a partir transformada de Fourier de  $\psi_t$ :

$$\bar{\psi}_t(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_t(x) \exp(-i\frac{kx}{\hbar}) dx.$$

A densidade de probabilidade associada a medidas do momento é dada por  $|\bar{\psi}_t(k)|^2$  e assim a média e

variância de medidas de  $p$  são calculadas através de

$$\langle p \rangle_t = \int k |\bar{\psi}_t(k)|^2 dk$$

$$(\Delta p)_t^2 = \langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2,$$

onde

$$\langle p^n \rangle_t = \int k^n |\bar{\psi}_t(k)|^2 dk$$

De uma maneira geral, cada grandeza física é representada por operador  $A$ . No caso particular dos operadores de posição e momento eles são dados por

$$(p\phi)(x) = \frac{\hbar}{i} \phi'(x) \quad \text{e} \quad (q\phi)(x) = x\phi(x).$$

A estatística medidas da grandeza física associada ao operador  $A$  no estado instantâneo  $\psi_t$  tem sua média e variância dadas respectivamente por

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi_t, A\psi_t \rangle$$

$$(\Delta A)_t^2 = \langle A^2 \rangle_t - \langle A \rangle_t^2$$

onde  $\langle \psi, \phi \rangle$  representa o produto escalar

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int \bar{\psi}(x) \phi(x) dx$$

e

$$\langle A^n \rangle_t = \langle \psi_t, A^n \psi_t \rangle.$$

A evolução temporal do sistema é definida a partir da equação de Schrödinger:

$$i\hbar \dot{\psi}_t = H \psi_t$$

onde  $H$  é Hamiltoniana do sistema

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

Em nossa notação o ponto é usado para a derivada temporal

$$\dot{\psi}_t(x) \equiv \frac{d\psi_t}{dt}(x)$$

ao passo que a derivada em relação à variável espacial é representada pela linha

$$\phi'(x) = \frac{d\phi}{dx}(x)$$

Para calcular as propriedades de um sistema no instante  $t$  a partir do conhecimento do conhecimento de um dado estado inicial  $\psi_0$ , é necessário resolver a equação de Schrödinger com essa condição inicial, determinando-se  $\psi_t$ .

Em princípio a solução da equação pode ser escrita sob a forma

$$\psi_t = \left[ \exp - \frac{iHT}{\hbar} \right] \psi_0$$

onde a exponencial de um operador  $A$  é formalmente definido através da série

$$\exp A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

De maneira geral, obter fórmulas fechadas para  $\psi_t$  a partir de  $\psi_0$  é impossível e mesmo quando possível, como por exemplo para uma partícula livre, não é fácil obter-se informação sobre a estatística de medidas das diversas grandezas físicas em  $\psi_t$  a partir das correspondentes estatísticas em  $\psi_0$ . Um dos objetivos deste trabalho é o de demonstrar que através do uso da representação de Heisenberg é possível evitar-se o cálculo de  $\psi_t$  e ainda assim obter-se resultados sobre a estatística de medidas sobre  $\psi_t$  a partir das correspondentes informações para o estado inicial  $A_t$ .

### 3. A representação de Heisenberg

Na descrição de Heisenberg o estado de um sistema físico é considerado fixo e o que evolue são os observáveis. Assim ao invés de nos perguntarmos qual a estatística de medidas da posição  $q$  e do momento  $p$ , ou mais genericamente de um observável  $A$ , efetuadas no estado evoluído  $\psi_t$  a pergunta que se coloca é a seguinte: qual a estatística de medidas dos observáveis evoluídos  $p_t$ ,  $q_t$  e  $A_t$  quando efetuadas no estado  $\psi_0$  que agora é considerado como imutável (historicamente devemos ressaltar que Heisenberg sequer mencionava ou mesmo concebia uma noção de estado do sistema, portanto não podia, tampouco, falar de sua evolução!). Com qualquer das duas opções deseja-se obter a mesma resposta!

Na representação de Heisenberg, o operador evoluído para o instante  $t$  é dado por

$$A_t = \left[ \exp \frac{iHt}{\hbar} \right] A \left[ \exp - \frac{iHt}{\hbar} \right]$$

Da definição segue a condição inicial:

$$A_0 = A$$

O operador  $A_t$  é definido exatamente para ter a propriedade buscada:

A estatística de medidas de  $A_t$  no estado  $\psi_0$  é a mesma obtida para as medidas de  $A$  no estado  $\psi_t$ .

Essa propriedade é garantida pela fórmula

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi_t, A \psi_t \rangle = \langle \psi_0, A_t \psi_0 \rangle$$

que é uma consequência imediata da definição de  $A_t$ . Fórmulas análogas valem para potências de  $A$ , como consequência da propriedade fundamental

$$(AB)_t = A_t B_t \quad (1)$$

que garante que a evolução de um operador produto é dada pelo produto dos operadores evoluídos. Assim, o valor médio do quadrado de  $A$  é dado por

$$\langle A^2 \rangle_t = \langle \psi_t, A^2 \psi_t \rangle = \langle \psi_0, (A_t)^2 \psi_0 \rangle = \langle \psi_0, (A_t^2) \psi_0 \rangle$$

e a variância das medidas de  $A$  em  $\psi_t$  é dada por

$$(\Delta A)_t^2 = \langle (A_t)^2 \rangle_0 - \langle A_t \rangle_0^2$$

A Hamiltoniana é claramente um operador especial nessa formulação. Em particular ela é uma constante do movimento:

$$H_t = H \quad (2)$$

Outra consequência importante desse fato é invariância temporal da relação de comutação dos operadores de posição e momento, pois

$$[q_t, p_t] = [q, p]_t = [ih]_t = ih$$

Esta propriedade é crucial para a solução das equações de Heisenberg para os operadores  $q_t, p_t$ .

Finalmente, concluímos esta breve excursão pela representação de Heisenberg com a equação diferencial que define a evolução temporal de um operador. A partir da definição obtém-se

$$A_t = \frac{d}{dt} \left\{ \exp \frac{iHt}{\hbar} A \exp - \frac{iHt}{\hbar} \right\} = \frac{i}{\hbar} [H, A_t]$$

Note que nesta última fórmula o comutador do lado direito pode ser substituído, usando-se (1) e (2) por

$$[H, A_t] = [H_t, A_t] = [H, A_t]_t,$$

o que será usado na próxima seção. É interessante observar que, também neste ponto, a totalidade dos textos tende a não mencionar uma sutileza importante escondida na fórmula acima. De fato, nas situações práticas,

como as descritas na próxima seção, as equações de Heisenberg são usadas para determinar o operador evoluído  $A_t$ . Cabe portanto a questão, como calcular o comutador  $[H, A_t]$  se ainda não sabemos quem é  $A_t$ ? A fórmula acima responde a essa questão:  $[H, A_t]$  é dado por  $[H, A]_t$ . Do ponto de vista prático isso significa que primeiro devemos calcular o comutador  $[H, A]$ , o que é possível conhecendo-se  $A$  e  $H$ , e evoluí-lo para o instante  $t$ . A equação de Heisenberg seria de uma inutilidade ímpar se não fosse possível identificar o operador  $[H, A]_t$ ! Diga-se de passagem que essa dificuldade não é específica da Mecânica Quântica, sendo também amplamente ignorada nos livros textos de Mecânica Clássica ao tratarem o problema análogo da evolução temporal dos observáveis no formalismo dos colchetes de Poisson.

#### 4. Propagação e alargamento de pacotes de onda

Nesta seção iremos considerar alguns exemplos de sistemas onde as equações de Heisenberg para os operadores de posição e momento são explicitamente solúveis. A partir da solução dessas equações iremos deduzir propriedades relativas ao alargamento de pacotes de onda desses sistemas.

##### 4.1 A partícula livre

As equações de Heisenberg para uma partícula livre podem ser calculadas imediatamente. Dada a hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (3)$$

obtemos

$$\dot{q}_t = \frac{i}{\hbar} [H, q_t] = \frac{i}{\hbar} [H, q]_t = \frac{p_t}{m}, \quad (4)$$

$$\dot{p}_t = 0. \quad (5)$$

Trata-se de um par de equações diferenciais acopladas de primeira ordem no tempo, que têm de ser resolvidas a partir das condições iniciais

$$q_0 = q \quad \text{e} \quad p_0 = p.$$

Elas são idênticas, na forma, às correspondentes equações de Hamilton para o mesmo sistema. Embora elas tenham significados completamente diferentes, as soluções são obtidas da mesma forma. Da segunda equação do par tiramos que  $p_t$  é uma constante do movimento

$$p_t = p_0 = p. \quad (6)$$

Essa informação pode ser usada na primeira equação

$$\dot{q}_t = \frac{p}{m}$$

que pode portanto ser resolvida, pois o segundo membro é independente do tempo:

$$q_t = q + \frac{p}{m}t \quad (7)$$

Deve ser observado que embora as soluções sejam formalmente idênticas às correspondentes soluções das equações de Hamilton,  $q_t$  e  $p_t$  são operadores:

$$(p_t \varphi)(x) = (p \varphi)(x) = \frac{\hbar}{i} \varphi'(x)$$

e

$$(q_t \varphi)(x) = x \varphi(x) + \frac{\hbar}{mi} t \varphi'(x) = q + \frac{d}{dx}$$

Vamos agora mostrar como a partir da solução (6), (7) podemos investigar as propriedades do estado evoluído. De fato, seja um estado inicial do sistema dado por  $\psi_0$ . Da discussão acima concluímos que os valores médios da posição e do momento no instante  $t$  são dados por

$$\langle q \rangle_t = \langle q \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p \rangle_0$$

e

$$\langle p \rangle_t = \langle p \rangle_0$$

Esses resultados mostram que os centros dos pacotes, tanto no que se refere à posição como no que se refere ao momento, evoluem classicamente.

Vamos calcular agora a evolução das larguras dos pacotes. Inicialmente, o óbvio: a dispersão do momento permanece constante ao longo do tempo, pois

$$\langle p^2 \rangle_t = \langle p^2 \rangle_0$$

e portanto

$$(\Delta p)_t = \sqrt{\langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2} = (\Delta p)_0.$$

Por outro lado

$$\langle q^2 \rangle_t = \left\langle \left( q + \frac{t}{m} p \right)^2 \right\rangle_0 = \left\langle q^2 + \frac{t^2}{m^2} p^2 + \frac{t}{m} (qp + pq) \right\rangle_0$$

$$\langle q^2 \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle qp + pq \rangle_0$$

de onde obtemos

$$\begin{aligned}
 (\Delta q)_t^2 &= \langle q^2 \rangle_t - \langle q \rangle_0^2 = \\
 \langle q^2 \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle qp + pq \rangle_0 - \left( \langle q \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p \rangle_0 \right)^2 &= \\
 = [\langle q^2 \rangle_0 - \langle q \rangle_0^2] + \frac{t^2}{m^2} [\langle p^2 \rangle_0 - \langle p \rangle_0^2] + & \\
 \frac{t}{m} [\langle qp + pq \rangle_0 - 2\langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0] . &
 \end{aligned}$$

Essa fórmula pode reescrita

$$(\Delta q)_t^2 = (\Delta q)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p)_0^2 + \frac{t}{m} [\langle qp + pq \rangle_0 - 2\langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0]$$

Esta fórmula, que é válida para todo estado inicial, é nos livros textos deduzida somente para estados iniciais dados por uma função gaussiana. Em particular, reobtemos o resultado já folclórico e intuitivamente correto de que, para grandes tempos, a largura do pacote de onda é dada por

$$(\Delta q)_t \simeq \frac{t}{m} (\Delta p)_0$$

ou seja, pelo produto da incerteza da velocidade no instante inicial pelo tempo  $(\Delta q)_t \simeq t(\Delta v)_0$ .

Na realidade a fórmula exata contempla três contribuições, a largura original do pacote composta com o alargamento devido à incerteza na velocidade inicial e mais um termo de origem puramente quântica (devido ao fato de que, em geral,  $\langle qp + pq \rangle_0 - 2\langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0 \neq 0$ ).

### 4.2 Partícula em campo uniforme

Consideremos a Hamiltoniana de uma partícula na presença de um campo uniforme, isto é força constante  $F$ ,

$$H = \frac{p^2}{2m} - Fq . \tag{8}$$

As equações de Heisenberg são dadas por

$$\dot{q}_t = \frac{p_t}{m} , \tag{9}$$

$$\dot{p}_t = F . \tag{10}$$

Elas também podem ser resolvidas analiticamente. De (10) obtemos

$$p_t = p_0 + Ft = p + Ft .$$

Essa informação pode ser inserida na primeira equação,

$$\dot{q}_t = \frac{p + Ft}{m} \tag{11}$$

que pode portanto ser resolvida:

$$q_t = q + \frac{p}{m}t + \frac{F}{2m}t^2 \tag{12}$$

Os valores médios da posição e do momento no instante  $t$  podem ser calculados:

$$\langle q \rangle_t = \langle q \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p \rangle_0 + \frac{F}{2m}t^2$$

e

$$\langle p \rangle_t = \langle p \rangle_0 + Ft$$

Novamente os resultados mostram que os centros dos pacotes, tanto no que se refere à posição como no que se refere ao momento, evoluem classicamente.

Vamos calcular agora a evolução das larguras dos pacotes. A dispersão do momento permanece constante ao longo do tempo, apesar do centro do pacote evoluir classicamente, pois

$$\langle p^2 \rangle_t = \langle (p + Ft)^2 \rangle_0 + \langle p^2 \rangle_0 + 2Ft \langle p \rangle_0 + F^2t^2$$

e portanto

$$(\Delta p)_t^2 = \langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2 =$$

$$\langle p^2 \rangle_0 + 2Ft \langle p \rangle_0 + F^2t^2 - (\langle p \rangle_0 + Ft)^2 =$$

$$\langle p^2 \rangle_0 - \langle p \rangle_0^2 = (\Delta p)_0^2$$

Por outro lado

$$\langle q^2 \rangle_t = \left\langle \left( q + \frac{t}{m}p + \frac{F}{2m}t^2 \right)^2 \right\rangle_0 =$$

$$= \langle q^2 \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle qp + pq \rangle_0 + \left( \frac{F}{2m}t^2 \right)^2 +$$

$$2 \frac{F}{2m} t^2 \langle q + \frac{t}{m}p \rangle_0$$

de onde obtemos

$$(\Delta q)_t^2 = \langle q^2 \rangle_t - \langle q \rangle_t^2 =$$

$$\langle q^2 \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle qp + pq \rangle_0 - \left( \langle q \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p \rangle_0 \right)^2 =$$

$$= [\langle q^2 \rangle_0 - \langle q \rangle_0^2] + \frac{t^2}{m^2} [\langle p^2 \rangle_0 - \langle p \rangle_0^2] +$$

$$\frac{t}{m} [\langle qp + pq \rangle_0 - 2\langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0] .$$

Obtemos assim o mesmo resultado que o obtido para uma partícula livre:

$$(\Delta q)_t^2 = (\Delta q)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p)_0^2 + \frac{t}{m} [\langle qp + pq \rangle_0 - 2\langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0]$$

Esta fórmula, novamente, é válida para todo estado inicial, e para grandes tempos. Em particular, para grandes tempos obtemos o mesmo resultado para a largura do pacote de onda

$$(\Delta q)_t \simeq \frac{t}{m} (\Delta p)_0$$

ou seja, pelo produto da incerteza da velocidade no instante inicial pelo tempo  $(\Delta q)_t \simeq t(\Delta v)_0$ .

Sumarizando, para uma partícula submetida a uma força constante o pacote se propaga sem deformação no que tange à distribuição dos momentos embora seu valor médio satisfaça a uma evolução clássica. Quanto à distribuição da posição, o seu centro satisfaz a equação clássica ao passo que o pacote se alarga, com a largura aumentando (para grandes tempos) proporcionalmente ao tempo com um coeficiente de proporcionalidade dado pela incerteza inicial de velocidade.

#### 4.3 Outros exemplos e limitações

Um exemplo também ilustrativo é o de um oscilador harmônico. Com a hamiltoniana dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 \frac{q^2}{2}$$

as equações de Heisenberg são dadas por

$$\dot{q}_t = \frac{p_t}{m}, \quad (13)$$

$$\dot{p}_t = -m\omega^2 q_t. \quad (14)$$

Elas podem ser resolvidas através da fórmula clássica

$$q_t = q \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t$$

e

$$p_t = p \cos \omega t + m\omega q \sin \omega t$$

com o que obtemos novamente uma evolução clássica para os valores médios de posição e momento. A largura

da distribuição de posição pode ser obtida de forma análoga, levando a:

$$(\Delta q)_t^2 = (\Delta q)_0^2 \cos^2 \omega t + \frac{(\Delta p)_0^2}{(m\omega)^2} \sin^2 \omega t + \left( \frac{1}{2} \langle qp + pq \rangle_0 - \langle q \rangle_0 \langle p \rangle_0 \right) \frac{\sin 2\omega t}{m\omega}.$$

De maneira geral o método funcionará para sistemas cujas equações de Heisenberg possam ser resolvidas de maneira formalmente idêntica às correspondentes equações clássicas de Hamilton. São todos sistemas com equações lineares de movimento. Um outro exemplo, que deixamos como exercício, é o de uma partícula em 3 dimensões na presença de um campo magnético uniforme.

De maneira geral, o método não será de muita utilidade para sistemas com potenciais  $V(q)$  que envolvam potenciais maiores do que a segunda de  $q$ , como por exemplo o de um oscilador anarmônico

$$V(q) = \lambda q^4.$$

Nesse caso as equações de Heisenberg não tem solução igual à clássica!

#### Referências

1. Como exemplo podemos citar o livro de S. Gasiorowicz, *Física Quântica*, Guanabara Dois (1979) Rio de Janeiro.
2. O texto clássico de L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique Quantique*, Mir (1966) Moscou dedica uma brevíssima seção ao tema, explicitando que a representação de Heisenberg não será utilizada no livro e que ela é apresentada tendo em vista as aplicações ulteriores na teoria relativística".