IFUSP/P-03

PROJETORES E A DINÂMICA DO SISTEMA DE PARTICULAS COM VÍNCULOS NÃO LINEARES*

por

C.Marcio do Amaral**
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

A ser submetido na Revista Brasileira de Física

* Pesquisa financiada parcialmente pelo Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq) - Brasil

** Pesquisador do CNPq

Setembro/1973

R E S U M O

Com auxílio de projetores dependentes da configuração, constroi-se um formalismo Lagrangiano-Hamiltoniano para a dinâmica do sistema de partículas sujeito a vínculos não lineares. O formalismo obtido pode ser útil para o tratamento de problemas em que não seja conveniente a eliminação de coordenadas redundantes ou a utilização dos multiplicadores de Lagrange. A existência dos vínculos é representada pelos elementos de matriz dos projetores. A técnica construida permite, de modo geométrico natural, a separação da dinâmica em uma parte intrínseca e em uma parte coletiva e induz um processo de quantização para o sistema de partículas com vínculos holonomicos.

PROJETORES E A DINÂMICA DO SISTEMA DE PARTÍCULAS COM VÍNCULOS NÃO LINEARES

I - INTRODUÇÃO

O tratamento dos vínculos, na mecânica analítica do sistema de partículas se faz, usualmente [1], pelos processos gerais de eliminação das coordenadas redundantes ou dos multiplicadores de Lagrange [1]. Entretanto este último método é inconveniente para a quantização do sistema, porque os momenta canonicamente conjugados aos multiplicadores de Lagrange são nulos, enquanto que o primeiro método - tem a inconveniência de que a eliminação de coordenadas supérfluas, com ajuda dos vínculos, destrói as simetrias inerentes à representação de partícula [2]. Deste modo, é importante a construção de métodos que não contenham as desvantagens dos dois métodos citados. Importantes contribuições neste sentido, foram dadas pelos trabalhos de Lipkin-de Shalit-Talmi[2], Skinner[3], Schwartz[4] e Takahashi[5]. Em particular, Y.Takahashi[6] propôs um formalismo Hamiltoniano, sem os inconvenientes citados, para o sistema de partículas sujeito a um vínculo holonomo linear e Schwartz[4] estendeu os trabalhos de Takahashi para o caso de r vínculos lineares.

O presente trabalho, além de generalizar o formalismo de Takahashi-Schwartz, estabelece uma técnica para o multicorpo, que permite intercambiar o conceito mecânico de vínculo pelo conceito geométrico de projetor. No formalismo aqui construido, não se elimina nenhuma coordenada de partícula, o que permite conservar as simetrias inerentes à representação de partícula. A introdução de referenciais locais, construidos a partir do referencial de laboratório - por meio de transformações matriciais funções da configuração, possibilita a construção de projetores que representem vínculos não lineares.

Com auxílio dos autovetores dos projetores, separa-se a dinâmica do multicorpo em uma dinâmica intrínseca e em uma dinâmica coletiva, esta última ligada diretamente aos vínculos. Este processo de separação é geométrico, simples e natural e difere do usualmente encontrado na literatura, como por exemplo nos trabalhos de Scheid[8], Villars[9], Fink[11]. Por outro lado, com os elementos de matriz dos projetores, constrói-se momenta generalizados e, como consequência, surge uma dinâmica de Lagrange-Hamilton generalizada, onde o projetor tem papel fundamental. Dos parentesis de Poisson modificados, obtidos, quantiza-se o sistema, pelo processo usual da quantização canônica[7].

Neste trabalho se estabelece a estrutura matemática de um formalismo útil para o tratamento de problemas em que não seja conveniente a eliminação de coordenadas redundantes, ou a utilização dos multiplicadores de Lagrange, como é o caso dos processos coletivos no multicorpo nuclear.

II - A BASE LOCAL E A BASE NÃO LOCAL

Consideremos um espaço Euclidiano real, N dimensional E_N, com coordenadas cartesianas ortogonais generalizadas $X^\nu; \nu=1\ldots,N$. Cada ponto $(X^1,\ldots X^N)$ de E_N, pode representar[1], em um dado instante t, um sistema mecânico com um número finito n de graus de liberdade, $n \leq N$. Suponhamos que o sistema considerado esteja sujeito a r vínculos holonomos[1] independentes:

$$\phi^{(J')}(X^1(t),\ldots X^N(t)\ ;\ t) = 0 \qquad J' = 1,\ldots,\ r \leq N \tag{1.II}$$

Na forma diferencial as (1.II) se escreverão:

$$\sum_{\nu=1}^{N} C^{(J')}{}_{\nu}\ \dot{X}^\nu + D^{(J')} = 0 \tag{2.II}$$

onde,

$$C^{(J')}{}_{\nu} = \frac{\partial \phi^{(J')}}{\partial X^\nu}$$

$$D^{(J')} = \frac{\partial \phi^{(J')}}{\partial t} \tag{3.II}$$

$$\dot{X}^\nu = \frac{dX^\nu}{dt}$$

A independência explícita do tempo, corresponderá a $D^{(J')}=0$. É conveniente representar a configuração do sistema mecânico, em E_N, por meio de um vetor cartesiano $\vec{X}(t)$ N-dimensional. Para isto, definamos em E_N uma base ortonormal $\{e_\nu\}$, independente da configuração e do tempo e que chamaremos de base não local.

Na base não local, o vetor configuração será:

$$\vec{X}(t) = \sum_{\nu=1}^{N} X^\nu(t)\, e_\nu, \qquad (4.II)$$

e a velocidade de configuração será:

$$\dot{\vec{X}}(t) = \sum_{\nu=1}^{N} \dot{X}^\nu(t)\, e_\nu \qquad (5.II)$$

Definamos em E_N um campo matricial, $S(X^\gamma(t);t)$, regular, função contínua, diferenciável de t e de $X^\gamma(t)$. Por meio deste campo podemos construir, a cada instante, uma outra base, local $\ell_{\gamma'}(X^\gamma(+);t)$, que depende da configuração e do tempo t. A matriz $S(X^\gamma(t);t)$ permite associar, de modo biunívoco, bicontínuo, diferenciável, em cada instante, a base não local $\{e_\nu\}$ à base local $\{\ell_{\gamma'}(X^\gamma(+);t\}$:

$$\{\ell_{\gamma'}(X(+);t = \sum_{\gamma=1}^{N} S(X^\gamma(t);t)\{\ell_\gamma\} \qquad (6'.II)$$

Em termos dos elementos de matriz da S, teremos:

$$\ell_{\mu'}(X^\gamma(+);t) = \sum_{\theta=1}^{N} S^\theta(X^\gamma(t);t)_{\mu'}\, \ell_\theta \qquad (6.II)$$

Doravante, em geral omitiremos os argumentos em X^{ν}, $e_{\nu'}$ e $S^{\mu}{}_{\nu'}$.

Um vetor como $\vec{X}$, poderá ser descrito tanto na base local quanto na não local:

$$\vec{X} = \sum_{\mu=1}^{N} X^{\mu} e_{\mu} = \sum_{\nu'=1}^{N} X^{\nu'} e_{\nu'} \quad , \qquad (7.II)$$

onde as $X^{\nu'}$ são as componentes de $\vec{X}$ na base local.

De (6.II) e (7.II) vem:

$$X^{\nu} = \sum_{\mu'=1}^{N} S^{\nu}{}_{\mu'} X^{\mu'} \qquad (8.II)$$

Vamos impor a condição adicional de que os vetores da base local sejam constantes de movimento.

$$\frac{d\, e_{\nu'}}{dt} = 0 \qquad (9.II)$$

Desta condição, de (6.II) e do fato de que os e_{ν} são vetores constantes, resulta:

$$\frac{d\, S^{\mu}{}_{\nu'}}{dt} = 0 \qquad (10.II)$$

As condições (9.II) e (10.II) são equivalentes e levam a parentesis de Poisson clássicos, constantes de mo vimento, quando os vínculos são lineares; levam também a que a lei de transformação dos $\dot{X}^{\mu'}$ seja a mesma que a dos $X^{\mu'}$. Com os elementos de matriz $S^{\mu}{}_{\nu}$, serão construidos projetores locais, que terão papel importante na formulação de uma dinâmica do N-corpo com vínculos holonomos e a condição (10.II) levará a projetores constantes de movimento.

III - O PROJETOR

De um ponto de vista geométrico, a equação (2.II) pode ser descrita na forma de um produto escalar em E_N:

$$<\vec{C}^{(J')} \mid \vec{X}> = 0 \qquad (1.III)$$

onde os vetores $\vec{C}^{(J')}$ têm componentes contravariantes $C^{(J')\mu}$, quando referidos à base não local $\{e_\mu\}$ e componentes covariantes $C^{(J')}{}_{\nu}$, relacionadas pela expressão:

$$C^{(J')\mu} = \sum_{\nu=1}^{N} C^{(J')}{}_{\nu} \; S^{\nu\mu} = \sum_{\nu=1}^{N} \frac{\partial\phi^{(J')}}{\partial X^{\nu}} \, \delta^{\nu\mu} \qquad (2.III)$$

onde os $\delta^{\nu\mu}$, cujos recíprocos se escrevem $\delta_{\nu\mu}$, valem 1 se $\nu = \mu$ e zero em caso contrário.

Então:

$$\vec{C}^{(J')} = \sum_{\mu=1}^{N} C^{(J')\mu} \, e_\mu = \sum_{\nu,\mu=1}^{N} \frac{\partial\phi^{(J')}}{\partial X^{\nu}} \, \delta^{\nu\mu} \, e_\mu \qquad (3.III)$$

A independência dos r vínculos (1.II), leva à independência linear dos r vetores $\vec{C}^{(J')}$ e, como estes dependem de $\vec{X}$, isto corresponde à existência de um espaço local, linear, r-dimensional E_r, gerado a cada instante pelos r $\vec{C}^{(J')}$ e associado ao vetor configuração $\vec{X}$, naquele instante. Como o espaço vetorial gerado pela base local $\{e_{\nu'}\}$ é N-dimensional, resulta que também se pode associar em cada instante ao $\vec{X}$, um espaço vetorial linear, complementar do E_r, N-r dimensional e que indicaremos por E_{N-r}.

O produto escalar (1.III) torna óbvio, que $\vec{X}$ é ortogonal, em cada instante, ao espaço E_r gerado pelos r $\vec{C}^{(J')}$.

A dimensão de E_{N-r} é o número de graus de liberdade do sistema mecânico sujeitos aos r vínculos (1.III). É claro, que qualquer vetor associado à dinâmica do sistema pode ser descrito pela união das bases de E_r e E_{N-r}, pois podemos associar à dinâmica do sistema, o par de espaços vetoriais ortogonais locais E_{N-r} e E_r e cuja união gera o E_N naquele instante. Então, um vetor qualquer de E_N, pode ser decomposto de modo unívoco na forma:

$$\vec{v} = \sum_{(J')=1}^{r} v^{(J')}\, n_{(J')} + \vec{v}_{/\!/} \qquad (4.\text{III})$$

onde $\vec{v}_{/\!/}$ é a projeção de $\vec{v}$ sobre E_{N-r} e $\sum_{(J')=1}^{r} v^{(J')} n_{(J')}$ é sua projeção sobre E_r.

Os r $n_{(J')}$ são vetores de módulo 1, construídos a partir dos r vetores $\vec{C}^{(J')}$, por meio da relação:

$$\eta_{(J')} = \sum_{(L')=1}^{r} \frac{\vec{C}^{(L')}}{\left[<C^{(J')} \mid C^{(J')}> \right]^{1/2}} \; g_{(J'L')} = \qquad (5.III)$$

$$= \sum_{(L')=1}^{r} \eta^{(L')} \; g_{(J'L')} \quad ,$$

onde $g_{(J'L')}$ é o recíproco de:

$$g^{(J'L')} = \frac{<\vec{C}^{(J')} \mid \vec{C}^{(L')}>}{|\vec{C}^{(J')}| \; |\vec{C}^{(L')}|} \qquad (6.III)$$

e onde

$$|\vec{C}^{(L')}| = \left[<\vec{C}^{(L')} \mid \vec{C}^{(L')}> \right]^{1/2} \qquad (7.III)$$

Construamos um operador, Λ, que permita associar a cada $\vec{v}$ de E_N, sua projeção $\vec{v}_{/\!/}$, definida em (4.III).

Então:

$$\Lambda \, \vec{v} = \vec{v}_{/\!/} = \vec{v} - \sum_{(J')=1}^{r} v^{(J')} \; \eta_{(J')} \qquad (8.III)$$

Λ é um projetor, dependente da configuração do sistema a cada instante. Se I é a identidade em E_N, então o projetor que projeta v sobre o espaço ortogonal, E_r, local será:

$$\begin{aligned} I - \Lambda &= Q \\ Q^2 &= Q \end{aligned} \qquad (9.III)$$

Para todo $\vec{v}$ de E_N, teremos:

$$Q\ \vec{v} = \sum_{(J')=1}^{r} v^{(J')}\ \eta_{(J')} \qquad (9'.III)$$

De (5.III), podemos escrever:

$$Q\ \vec{v} = \sum_{(J'L')=1}^{r} v^{(J')}\ g_{(J'L')}\ \eta^{(L')} =$$

$$= \sum_{(L')=1}^{r} v_{(L')}\ \eta^{(L')} \quad , \qquad (10.III)$$

com

$$v_{(L')} = \sum_{(M')=1}^{r} g_{(L'M')}\ v^{(M')} =$$

$$= \sum_{(M')=1}^{r} < \eta_{(L')}\ |\ \eta_{(M')} > v^{(M')} =$$

$$= < \eta_{(L')}\ |\ Q\ \vec{v} > \qquad (11.III)$$

onde $< \eta_{(L')} \mid \eta_{(M')}>$ é o produto escalar dos unitários $\eta_{(L')}$, $\eta_{(M')}$ referidos à base não local $\{e_\nu\}$.

Como $\eta_{(L')}$ pertence a E_r, que é ortogonal, localmente, a E_{N-r}, também podemos escrever:

$$v_{(L')} = < \eta_{(L')} | \Lambda\ \vec{v} + Q\ \vec{v} > = < \eta_{(L')}\ |\ \vec{v} > \qquad (12.III)$$

Então, de (8.III) virá:

$$\Lambda \vec{v} = \vec{v} - \sum_{(L')=1}^{r} v^{(L')} \eta_{(L')} =$$

$$= \vec{v} - \sum_{(L'M')=1}^{r} g^{(L'M')} v_{(M')} \eta_{(L')} \qquad (13.III)$$

Por conveniência, expressemos os projetores - no formalismo "bra-ket" de Dirac[7].

$$\Lambda | v = | v > - \sum_{(L'M')=1}^{r} g^{(L'M')} | \eta_{(M')} >< \eta_{(L')} | \vec{v} > =$$

$$= \left[I - \sum_{(L'M')=1}^{r} g^{(L'M')} | \eta_{(M')} >< \eta_{(L')} | \right] | \vec{v} > \qquad (14.III)$$

De (9.III) e da arbitrariedade do $| \vec{v} >$, obtem-se:

$$Q = \sum_{(L'M')=1}^{r} g^{(L'M')} | \eta_{(M')} >< \eta_{(L')} | \qquad (15.III)$$

É interessante observar que o projetor Q é construido somente com auxilio dos r vetores $\vec{C}^{(J')}$, logo Λ também o é. Isto significa, que do conhecimento dos víncu - los do N-corpo e de uma maneira geométrica, conveniente, de representá-los, é possível a construção de dois projetores, Λ e Q, locais, que projetam a dinâmica do sistema em dois sub espaços complementares, locais. Se $\vec{X}$ é o vetor configu- ração do sistema em um dado instante, somente as velocida - des $\Lambda \dot{\vec{X}}$ serão permitidas e proíbidas serão as $Q \dot{\vec{X}}$. Como os projetores vão ser constantes de movimento, poderemos escrever:

$$Q \dot{\vec{X}} = \frac{d}{dt} Q \vec{X} = 0 \qquad (16.III)$$

Quando o sistema mecânico está restrito pelos r vínculos holonomos (1.III), a dinâmica do sistema livre equivalente, se efetuará no espaço $\Lambda E_N = E_{N-r}$, pois este espaço é livre de restrições vinculares. A dinâmica será proibida no $Q E_N = E_r$. Chamaremos o espaço E_r de espaço vincular local. Os espaços E_r e E_{N-r} estão imeros no espaço N-dimensional E_N, de modo que os projetores Λ e Q são descritíveis em termos das bases local e não local.

IV - A CONEXÃO ENTRE O PROJETOR E A BASE LOCAL

Como E_r e E_{N-r}, são espaços ortogonais, cuja união gera o E_N, o operador Q será um operador hermitiano, observável, que admite E_r e E_{N-r} como autoespaços associados, respectivamente, aos autovalores 1 e zero. Q admite r autovetores associados ao autovalor 1 e N-r autovetores associados ao autovalor nulo. Todos estes N autovetores são locais e, com eles, podemos construir uma base local. A rigor, uma infinidade de bases locais devido à degenerescência dos autovalores. Como a cada instante temos o projetor Q, a cada instante teremos uma base local, construida com os autovetores de Q. Como os r $\eta_{(J')}$ são autovetores de Q associados ao autovalor 1, podemos escolhê-los como r vetores da base local e os demais N-r, sendo quaisquer vetores ortonormais de E_{N-r}, (que serão autovetores de Q associados ao autovalor zero).

Especificamente, indiquemos a base local $\{e_\nu\}$, como constituida pelos N-r primeiros vetores $e_{j'}$; $j'=1,\ldots,N-r$; e os demais r vetores coincidindo com os r $\eta_{(J')}$ e que indicaremos por $e_{J'}$, isto é:

$$\eta_{(J')} \equiv e_{J'} , \quad J' = N-r+1,\ldots,N .$$

De (6.II), teremos:

$$e_{j'} = \sum_{\nu=1}^{N} S^{\nu}{}_{j'}\, e^{\nu} \quad , \qquad (1.IV)$$

$$\ell_{J'} \equiv \eta_{(J')} = \sum_{\gamma=1}^{N} S^{\gamma}{}_{J'}\, \ell_{\gamma} \quad , \qquad (2.IV)$$

com:

$$Q\ell_{j'} = 0 \quad , \quad Q\ell_{J'} = \ell_{J'} \qquad (3.IV)$$

A partir da base não local $\{\ell_\gamma\}$, há uma infinidade de transformações $S^{\mu}{}_{\gamma'}$ que levam a bases locais e que geram o projetor Q, pois a degenerescência permite isto. Entretanto, o projetor Q é o único e é construtível com elementos de matriz da S e de sua inversa S^{-}, como veremos.

A velocidade $\vec{\dot{X}}$, permitida ao sistema, está contida no espaço livre de vínculos E_{N-r} e, então, será um autovetor de Q associado ao autovalor nulo. De (1.IV) e (2.IV), juntamente com (8.II) e sua inversa, obtem-se:

$$\dot{X}^{\gamma} = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{\gamma}{}_{j'}\, \dot{X}^{j'} + \sum_{j'=N-r+1}^{N-r} S^{\gamma}{}_{J'}\, \dot{X}^{J'} \quad , \qquad (4.IV)$$

e

$$x^{j'} = \sum_{\gamma=1}^{N} S^{-1j'}{}_{\gamma}\, x^{\gamma} ,$$

$$X^{J'} = \sum_{\gamma=1}^{N} S^{-1J'}{}_{\gamma}\, X^{\gamma} . \qquad (5.IV)$$

Intrinsecamente, podemos escrever:

$$\vec{X} = \sum_{\gamma=1}^{N} X^{\gamma}\, \ell_{\gamma} = \sum_{\gamma'=1}^{N} X^{\gamma'}\, \ell_{\gamma'} \qquad (6.IV)$$

De (4.IV) e de condição (10.II), tem-se:

$$\dot{X}^{\gamma} = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{\gamma}{}_{j'}\, \dot{x}^{j'} + \sum_{J'=N-r+1}^{N} S^{\gamma}{}_{J'}\, \dot{X}^{J'} \qquad (4'.IV)$$

O mesmo prevalece para as (5.IV).

A cada instante, as condições de vínculo - (1.II), ou suas equivalentes (1.III), serão representadas nas novas coordenadas $X^{\gamma'}$, pelas condições restritivas:

$$\dot{X}^{J'} = 0 \qquad (7.IV)$$

Como a cada instante, E_r é proibido à dinâmica do sistema , podemos impor a condição de contôrno:

$$X^{J'} = 0 \qquad (7'.IV)$$

Indicando, por Q' a representação matricial do operador Q na base constituida por seus autovetores e por Q a sua representação matricial na base não local $\{\ell_{\gamma}\}$, teremos:

$$Q' = S^{-1}\, Q\, S, \qquad (8.IV)$$

onde os elementos de matriz da S são dados em (6.II).

É claro que a forma matricial da Q' será:

$$Q' = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & \ddots & & & 0_r \\ & & 0 & & \\ 0 & & & 1 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \qquad (9.IV)$$

Invertendo (8.IV) e considerando a forma diagonal simples da (9.IV), teremos para elementos de matriz da Q:

$$Q^{\mu}{}_{\gamma} = \sum_{J'=N-r+1}^{N} S^{\mu}{}_{J'}\, S^{-1J'}{}_{\gamma} \qquad (10.IV)$$

onde $\mu,\gamma = 1,\ldots,N$.

Os índices μ,γ referem-se à base não local $\{\ell_{\gamma}\}$, enquanto que os índices J' estão associados à sub-base local, $\{\ell_{J'} \equiv \eta_{(J')}\}$, que gera localmente E_r.

A (10.IV) é relevante, pelo fato de evidenciar que o projetor Q é construtível com elementos de matriz da S e de sua inversa S^{-1}.

Na base dos autoestados de Q, as coordenadas dinamicamente permitidas pelos vínculos, são as N-r $X^{j'}$ Elas definem pontos do espaço livre de vínculos, local, E_{N-r}. Os projetores Q e Λ separam, de modo natural, o espaço das configurações do N-corpo em dois sub-espaços complementares. Em um deles, E_{N-r}, a dinâmica do sistema é livre, isenta, de vínculos; no outro, E_r, a dinâmica é proibida, é o espaço vincular. O espaço das velocidades tem a mesma estrutura, porque valem as (5.II) e (10.II).

A equivalência entre as (1.II) e (7.IV) pode ser explicitada se escrevemos:

$$X^{J'} = \phi^{(J')}\left(X^{1}\ldots X^{N},t\right) = 0 \qquad (11.IV)$$

Analogamente, temos.

$$\dot{X}^{J'} = \frac{d\phi^{J'}}{dt} = \langle \eta^{(J')} | \dot{\vec{X}} \rangle = 0 \qquad (11'.IV)$$

De (9.III), resulta:

$$\dot{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \ddots_{N-r} & & \\ & & 1 & \\ 0 & & 0 & 0 \\ & & \ddots_{r} & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \qquad (12.IV)$$

O sistema de coordenadas $X^{\gamma'}$, associado à base definida em (1.IV), (2.IV), (3.IV), será chamado o sistema de coordenadas naturais do N-corpo no instante t. Uma vez construido este sistema, anular r coordenadas $X^{J'}$ a cada instante, equivale impor r vínculos holonomos ao sistema mecânico, representado pelas $X^{\gamma'}$. A existência dos projetores Q e Λ, corresponde à possibilidade física de construir dois sistemas de coordenadas, que descrevam dois sub-espaços locais, ortogonais, um deles estando associado à estrutura de vínculos do sistema, (e sendo vedado à dinâmica, quando impomos a este, r vínculos holonomos), o outro estando associado à estrutura intrínseca do sistema.

O fato de que vínculos holonomos sejam restrições coletivas ao N-corpo e o fato de que, em coordenadas naturais, os vínculos holonomos sejam expressos pelas relações (11.IV) nos leva a considerar, quando conveniente, um dos projetores, como o projetor sobre o espaço das coordenadas coletivas e o outro, como o projetor sobre o espaço interno ou espaço das coordenadas intrínsecas no N-corpo. Dentro desta interpretação, a existência de r vínculos corresponde a ter-se r valores fixados de coordenadas coletivas, (nulos por conveniência), na representação de coordenadas naturais. Quando quebrarmos as condiçoes restritivas de vínculo e mantivermos a mesma dimensão, para os graus de liberdade internos, teremos dois sub-espaços complementares, ortogonais, a cada instante, um deles associado à dinâmica interna e outro associado à dinâmica coletiva do sistema. É interessante observar, que um sistema com uma dinâmica coletiva lentamente variável no tempo, pode ser aproximado, na ordem zero, por um sistema dinâmico sujeito a r vínculos holonomos.

As coordenadas coletivas interpretadas pelas

$X^{J'}$ não são ortogonais, porque os $\eta_{(J')}$ não são ortogonais em geral, mas podem ser ortogonalizadas, é claro, se conveniente.

V - AS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO DO N-CORPO

Ao procurarmos expressar a dinâmica do N-corpo isolado, por meio de uma Lagrangiana L $(\vec{X}(t), \dot{\vec{X}}(t))$, devemos levar em conta que, devido à existência de vínculos, as - coordenadas X^γ não são independentes. É óbvio que o uso das coordenadas naturais $X^{j'}$ e $X^{J'}$, dadas por (5.IV), é mais - conveniente para a simplificação do tratamento matemático do problema, que a utilização das coordenadas X^γ. Entretanto, para passar das coordenadas X^γ para as naturais $X^{\gamma'}$, necessita-se de uma transformação como a (8.II) e, da teoria analítica da mecânica, sabemos que, enquanto as equações de Lagrange são invariantes por transformações arbitrárias de coordenadas, o mesmo não ocorre para as equações de Hamilton, que necessitam de restrições adicionais. O que ocorre é que o caso Hamiltoniano é um caso particular de problema Lagrangiano[1], isto é, aquele em que a Lagrangiana deve estar normalizada à forma:

$$L = \sum_{\gamma=1}^{N} p_\gamma \dot{X}^\gamma - H , \qquad (1.V)$$

onde H é a função Hamiltoniana do sistema.

A invariância da L e da H por transformações - de coordenadas, como as (8.II), leva a que seja invariante o produto escalar:

$$<\vec{p} \mid \vec{X}> = \sum_{\gamma=1}^{N} p_\gamma \dot{X}^\gamma \qquad (2.V)$$

De (4'.IV) e da invariância da (2.V), vem:

$$p_\gamma = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{-1j'}{}_\gamma\, p_{j'} + \sum_{J'=N-r+1}^{N} S^{-1J'}{}_\gamma\, p_{J'} \qquad (3.V)$$

Nas coordenadas naturais, levando em contas as condições vinculares (7.IV) e (7'.IV), obtem-se ãs usuais equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{X}j'} - \frac{\partial L'}{\partial Xj'} = 0 \qquad (4.V)$$

$j' = 1,\ldots,N-r.$

A invariância da Lagrangiana, pelas transformações de coordenadas (8.II) ẽ indicada por:

$$L'(X^{j'}, \dot{X}^{j'}) = L(X^\gamma, \dot{X}^\gamma) \qquad (5.V)$$

As coordenadas naturais constituem um sistema em que as equações de movimento são mais simples, mas ẽ no sistema de coordenadas X^γ que queremos representar a dinâmica do N-corpo. Para isto devemos transformar as (4.V) para a representação de coordenadas X^γ. De (4.IV), calculando-se $\frac{\partial X^\gamma}{\partial X^{j'}}$, obtem-se:

$$\frac{\partial X^{\gamma}}{\partial X^{j'}} = S^{\gamma}{}_{j'} + \sum_{k'=1}^{N-r} S^{\gamma}{}_{k',j'}\, X^{k'} =$$

$$= S^{\gamma}{}_{j'} + \sum_{k'=1}^{N-r} \sum_{\mu=1}^{N} S^{\gamma}{}_{k',j'}\, S^{-1k'}{}_{\mu} X^{\mu} , \qquad (6.V)$$

onde usamos a (5.IV) e indicamos $S^{\gamma}{}_{k',j'} = \dfrac{\partial S^{\gamma}{}_{k'}}{\partial X^{j'}}$

De modo anālogo obtem-se:

$$\frac{\partial \dot{X}^{\gamma}}{\partial \dot{X}^{j'}} = S^{\gamma}{}_{j'} \qquad (7.V)$$

Em (7.V) não aparece o tẽrmo $\dfrac{\partial S^{\gamma}{}_{k'}}{\partial \dot{X}_{j'}}$, porque os $S^{\gamma}{}_{j'}$ não dependem explicitamente dos $\dot{X}_{j'}$.

Se levarmos as (6.V) e (7.V) nas (4.V), obteremos:

$$\frac{d}{dt} \sum_{\gamma=1}^{N} S^{\gamma}{}_{j'} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{\gamma}} - \sum_{\gamma=1}^{N} S^{\gamma}{}_{j'} +$$

$$+ \sum_{k'=1}^{N-r} S^{\gamma}{}_{k',j'}\, X^{j'} \frac{\partial L}{\partial X^{\gamma}} = 0 \qquad (8.V)$$

Se expressarmos $X^{j'}$ em função dos X^{γ}, multiplicaremos as (8.V) por $S^{-1j'}{}_{\Theta}$ e somarmos em j', levarmos em conta as (9.III) e (10.IV), obteremos:

$$\sum_{\gamma=1}^{N} \Lambda^{\gamma}{}_{\theta} \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{\gamma}} - \frac{\partial L}{\partial X^{\gamma}} \right] =$$

$$= \sum_{\gamma,p=1}^{N} \sum_{j',k'=1}^{N-r} S^{-1j'}{}_{\theta}\, S^{\gamma}{}_{k',j'}\, S^{-1k'}{}_{p}\, X^{p} \frac{\partial L}{\partial X^{\gamma}} \qquad (9.V)$$

As (9.V) são as equações de Euler-Lagrange para o N-corpo sujeito a r vínculos holonomos da forma (1.II). Os $\Lambda^{\gamma}{}_{\theta}$, são elementos de matriz de Λ, definidos em (9.III)e da forma:

$$\Lambda^{\gamma}{}_{\theta} = g^{\gamma}{}_{\theta} - Q^{\gamma}{}_{\theta} \quad , \qquad (10.V)$$

onde $g^{\gamma}{}_{\theta}$ será 1 se $\gamma=\theta$ e zero em caso contrário.

A contração de $\Lambda^{\gamma}{}_{\theta}$ com $g_{\mu\gamma} = \langle \ell_{\mu} \mid \ell_{\gamma} \rangle$, dá:

$$\langle \ell_{\mu} |\Lambda| \ell_{\theta} \rangle = \Lambda_{\mu}{}^{\theta} = g_{\mu\gamma} \Lambda^{\gamma}{}_{\theta} \qquad (11.V)$$

Em (9.V), em lugar dos $S^{-1j'}{}_{\theta}$, poderíamos introduzir o braket $\langle \ell^{j'} | \ell_{\theta} \rangle = \sum_{\gamma'=1}^{N} g^{j'\gamma'} \langle \ell_{\gamma'} | \ell_{\theta} \rangle$.

As equações de movimento (9.V) são equações - que envolvem as N coordenadas X^{γ}, com as restrições que estas coordenadas contêm, pois os vínculos estão explicitados pela presença dos elementos de matriz do projetor Λ.

Quando o campo matricial S não depender da configuração do sistema, o segundo membro de (9.V) será nulo .

Este é o importante caso dos vínculos lineares, isto é:

$$X^{j'} = \sum_{\theta=1}^{N} S^{-1j'}{}_{\theta}\, X^{\theta}$$

$$j' = 1,\ldots,N-r. \qquad (12.V)$$

$$\frac{\partial S^{\gamma'}{}_{\theta}}{\partial X^{\mu'}} = 0$$

$$\theta',\mu' = 1,\ldots,N$$

As condições (12.V) levam a que as (9.V) coincidam com as equações de Takahashi-Schwartz[4,6]. Os momenta permitidos na dinâmica do N-corpo sujeito aos vínculos (1.II), não obtidos de (3.V), com a condição subsidiária:

$$P_{J'} = 0, J' = N-r+1,\ldots,N \qquad (13.V)$$

Esta condição é equivalente à (7.IV) e decorre do fato da matriz jacobiana $\frac{\partial P_{J'}}{\partial \dot{X}^{L'}}$, $J',L' = N-r+1,\ldots N$, ser não singular.

Então virá:

$$p_{\gamma} = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{-1j'}{}_{\gamma}\, p_{j'} = \sum_{j'} S^{-1j'} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{j'}} =$$

$$= \sum_{j',\mu=1} S^{-1j'}{}_{\gamma} \frac{\partial \dot{X}^{\mu}}{\partial \dot{X}^{j'}} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{\mu}} = \sum_{j',\mu=1} S^{-1j'}{}_{\mu} S^{\mu}{}_{j'} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{\mu}} =$$

$$= \sum_{\mu=1}^{N} \Lambda^{\mu}{}_{\gamma} \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^{\mu}}, \qquad (14.V)$$

onde se usou as (7.V).

Se os vínculos forem quebrados, isto é, se por questão de conveniência, ou de informação experimental, tivéssemos que separar a dinâmica do N-corpo em uma dinâmica intrínseca e em uma dinâmica coletiva, associadas respectivamente aos projetores Λ e Q então, neste caso, a fórmula (14.V) teria termos adicionais associados ao projetor Q, isto é:

$$p_\gamma = \sum_{\mu=1}^{N} \Lambda^\mu{}_\gamma \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^\mu} + \sum_{\mu=1}^{N} Q^\mu{}_\gamma \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^\mu} \quad . \qquad (14.V)$$

Neste caso, informações sobre a dinâmica coletiva deveriam ser dadas, de modo a se poder construir o projetor Q.

Os momenta generalizados do presente formalismo, são os (14.V). Êles contêm a presença dos vínculos, representada pelos elementos de matriz do projetor Λ. Quando não houver vínculos, $\Lambda^\mu{}_\gamma = \delta^\mu{}_\gamma$ e teremos os momenta conjugados aos X^γ do problema variacional livre de vínculos. Quando o projetor não depender da configuração, como é o caso de vínculos lineares, teremos os momenta formalismo de Takahashi-Schwartz[4,6]. A obtenção das equações de Hamilton será feita por processo análogo àquele de obtenção das equações (9.V). Partindo-se das equações de Hamilton no sistema natural intrínseco:

$$\dot{p}_{j'} = -\frac{\partial H'}{\partial X^{j'}} \; ; \quad \dot{X}^{j'} = \frac{\partial H'}{\partial p_{j'}}$$

$$H'\,(X^{j'};\, p_{j'}) = H(X^{\gamma},\, p_{\gamma}) \qquad (15.V)$$

$$j' = 1,\ldots,N-r.$$

$$P_{J'} = 0, \; J' = N-r+1,\ldots,N$$

De (14.V), com auxílio de (10.II, (6.V) e procedendo como no caso Lagrangiano, teremos:

$$\dot{p}_{\mu} = -\sum_{\gamma=1}^{N} \Lambda^{\gamma}{}_{\mu} + {}_{j',k',\rho}\; S^{-1j'}{}_{\mu}\; S^{\gamma}{}_{k',j'}\; S^{-1k'}{}_{\rho}\; X^{\rho} \;\frac{\partial H}{\partial X^{\gamma}} \qquad (17.V)$$

$j',k' = 1,\ldots,N-r; \; \rho,\mu,\gamma = 1,\ldots,N$

O aparecimento da parcela em X^{θ} em (17.V), deve-se ao fato de que valem as (6.V).

Analogamente, de (4.IV) e (7.IV) vem:

$$\dot{X}^{\mu} = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{\mu}{}_{j'}\, \dot{X}^{j'} \qquad (18.V)$$

$$\frac{dS^{\mu}{}_{j'}}{dt} = 0$$

Na passagem para a representação de coordenadas X^{γ}, leva-se em conta a validade de:

$$\dot{X}^{j'} = \frac{\partial H'}{\partial p_{j'}}$$

$$\dot{p}_{j'} = \frac{\partial H'}{\partial X_{j'}} \qquad (18'.V)$$

$$H'(X^{j'};\ p_{j'}) = H\ (X^{\gamma};\ p_{\gamma})$$

$$j' = 1,\ldots,\ N-r;\quad \gamma = 1,\ldots,N\qquad ,$$

pois na representação Hamiltoniana livre, $X^{j'}$, $p_{j'}$, as equações de Hamilton são as usuais.

Então:

$$\dot{X}^{\mu} = \sum_{\gamma,j'} S^{\mu}{}_{j'} \frac{\partial p\gamma}{\partial p_{j'}} \frac{\partial H}{\partial p\gamma} =$$

$$= \sum_{\gamma,j'} S^{\mu}{}_{j'}\ S^{-1j'}{}_{\gamma} \frac{\partial H}{\partial p\gamma} =$$

$$= \sum_{\gamma=1}^{N} \Lambda^{\mu}{}_{\gamma} \frac{\partial H}{\partial p\gamma}$$

onde usamos as (9.III), (10.IV), (3.V), juntamente com a condição restritiva $p_{j'} = 0$, (13.V).

As equações (17.V) e (19.V) constituem o sistema de equações de Hamilton do N-corpo, com vínculos holonomos.

Há um aspecto não simétrico nestas equações e esta assimetria está contida na não existência, em (19.V), de uma parcela análoga àquela em $S^{\gamma}{}_{k',j'}$ que aparece em (17.V). Esta ausência decorre simplesmente da independência explícita dos $S^{\gamma}{}_{k'}$ nas $\dot{x}^{j'}$, como se vê em (5.II). O aspecto simétrico existiria, se as $S^{\mu}{}_{\gamma'}$ fossem funções, não só dos x^{γ}, mas também dos $\dot{x}^{\gamma}$, o que poderia ser considerada em um formalismo mais completo que o presente.

VI - A QUANTIZAÇÃO DA DINÂMICA DO N-CORPO COM r VÍNCULOS HOLONOMICOS

Sabemos (7), que a quantização canônica de um sistema clássico se obtem, substituindo-se os parentesis de Poisson clássicos, pelos correspondentes comutadores e as variáveis dinâmicas clássicas, fundamentais, x^{γ}, p_{γ}, canonicamente conjugadas, pelos correspondentes operadores hermitianos. Entretanto as x^{γ}, definidas em (4.IV), não são independentes porque existem as restrições vinculares. O mesmo ocorrendo com as p_{γ} definidas em (3.V). Como a mecânica Hamiltoniana intrínseca é construida com N-r variáveis $x^{j'}$ e N-r momenta independentes, cartesianos retangulares, os correspondentes parentesis de Poisson clássicos satisfazem às regras usuais:

$$\begin{aligned}
&\{x^{j'}, x^{k'}\} = 0 \\
&\{p_{j'}, p_{k'}\} = 0 \qquad\qquad (1.VI)\\
&\{x^{j'}, p_{k'}\} = \delta^{j'}{}_{k'} \\
&j', k' = 1, \ldots, N-r
\end{aligned}$$

Se em (1.VI), levarmos as relações entre os $X^{j'}$, $p_{k'}$ e os X^{γ}, p_{μ}, isto é, se usarmos em (1.VI) as (5.IV), (7'.IV) a inversa da (3.V) juntamente com a (13.V), obteremos:

$$\{X^{\gamma}, X^{\mu}\} = 0$$

$$\{p_{\mu}, p_{\mu}\} = 0$$

$$\{X^{\gamma}, p_{\mu}\} = \Lambda^{\gamma}{}_{\mu} + \sum_{\rho,k',j'} S^{-1k'}{}_{\mu}\, S^{\gamma}{}_{j',k'} S^{-1j'}{}_{\rho} X^{\rho} \qquad (2.VI)$$

$\rho,\mu,\gamma=1,\ldots,N$; $k',j'=1\ldots,N-r$

No caso de transformação lineares, teremos $S^{\gamma}{}_{j',k'}= 0$ e desta condição, decorrem parentesis de Poisson mais simples, da forma:

$$\left.\begin{aligned} &\{X^{\gamma} , X^{\mu}\} = 0 \\ &\{p^{\gamma} , p_{\mu}\} = 0 \\ &\{X^{\gamma} , p_{\mu}\} = \Lambda^{\gamma}{}_{\mu} \end{aligned}\right\} \qquad (2'.VI)$$

onde os $\Lambda^{\gamma}{}_{\mu}$ não dependem dos X^{γ}.

A quantização canônica se obtem, substituindo-se as (2.VI), pelos correspondentes comutadores:

$$\left[X^{\gamma}\ ,\ X^{\mu}\right] = 0$$

$$\left[p_{\gamma}\ ,\ p_{\mu}\right] = 0 \qquad (3.VI)$$

$$\left[X^{\gamma}\ ,\ p_{\mu}\right] =$$

$$= i\hbar\left(\Lambda^{\gamma}{}_{\mu} + \sum_{\rho,k',j'=1} S^{-1k'}{}_{\mu} S^{\gamma}{}_{j',k'}\, S^{-1j'}{}_{\rho} X^{\rho}\right)$$

Os operadores X^{γ}, p_{μ} são os operadores fundamentais, do presente formalismo, para a quantização do N-corpo com vínculos holonomicos. Todos demais operadores serão funções de X^{γ} e p_{μ} e, eventualmente do tempo, como - parâmetro.

A forma do operador p_{μ} deve ser construida a partir de:

$$p_{\gamma} = \sum_{j'=1}^{N-r} S^{-1j'}{}_{\gamma}\, p_{j'} \quad , \qquad (4.VI)$$

$\gamma=1,\ldots,N$ $\qquad p_{j'} = 0$

$J'=N-r+1,\ldots,N$

e do fato de que nas coordenadas naturais intrínsecas, o operador associado a $p_{j'}$, é o usual:

$$p_{j'} = -\ i\hbar\,\frac{\partial}{\partial X^{j'}} \qquad (4'.VI)$$

Levando-se as (4'.VI) em (4.VI) juntamente - com as (6.V) temos:

$$p_\gamma = -i\hbar \left[\Lambda^\mu{}_\gamma + \sum_{k',j',\rho} S^{-1j'}{}_\gamma \; S^\mu{}_{k',j'} \; S^{-1k'}{}_\rho X^\rho \frac{\partial}{\partial X^\mu} \right] \qquad (5.VI)$$

$j',k' = 1,\ldots,N-r;\quad \gamma,\rho = 1,\ldots,N.$

O operador Hamiltoniano na representação X^γ é obtido do operador:

$$H'(X^{j'}, p_{j'}; t) = \sum_{j',k'=1}^{N} \frac{1}{2m_{j'}} p_{j'} \delta^{j'k'} p_{k'} + V(X^{j'}; t), \qquad (6.VI)$$

usando-se a invariância $H'(X^{j'}; p_{j'}; t) = H(X^\gamma, p_\mu; t)$; as (5.IV), com a restrição $X^{J'} = 0$ e as (4'.VI), juntamente - com as (6.V).

É claro que a equação de Schrödinger correspon dente terá a forma usual:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi\rangle = H(X^\gamma, p_\gamma, t) |\phi\rangle \qquad (7.VI)$$

onde a $H(X^\gamma, p_\gamma; t)$ é construida a partir de (6.VI).

É interessante ressalvar que, no caso de vín - culos fisicamente importantes, o formalismo obtido se sim - plifica bastante, como é o caso do N-corpo no referencial de centro de massa, e o problema quântico do N-corpo com famílias hiper-completas de estados(10). As aplicações destes formalismo virão em posteriores trabalhos.

O caso do N-corpo em rotação, pode ser descrito por vínculos não lineares que, entretanto, levam a um formalismo inteiramente análogo ao descrito por vínculos lineares.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. LANCZOS,C.- Variational principles of mechanics. Toronto, University Press, 1966.

2. LIPKIN,H.J.; DE SHALIT,A. & TALMI,I.- On the description of collective motion by the use of superfluous co-ordinates. Nuovo Cim.,2:773-798, 1955.

3. SKINNER,R.- A quantum mechanical description of collective motions. Canad.J.Phys.,34:901-913, 1956.

4. SCHWARTZ,M.- Lagrangian and Hamiltonian formalisms with supplementary conditions. J.Math.Phys.,5:903-907, 1964.

5. TAKAHASHI,Y.- A canonical formalism with a linear supplementary condition. Part 1-2. Phys.Lett.,1:278-280, 1962.

6. TAKAHASHI,Y.- A Hamiltonian formalism with a linear supplementary condition and its application to field theory and many body system. Physica,31:205-221, 1965.

7. DIRAC,P.A.M.- The principles of quantum mechanics. Oxford, Clarendon Press, 1966.

8. SCHEID,W., & GREINER,W.- Theory of projection of spurious center of mass and rotational states from many-body nuclear wave functions. Ann.Phys.(New York)48:493--525, 1968.

9. VILLARS,F.M.H. & COOPER,G.- Unified theory of nuclear rotations. Am.Phys.(New York)56:224-258, 1970.

10. FINK,B. et alii - Spurious rotational states in deformed nuclear shell models. Ann.Phys(New York)69:375--399, 1972.

11. ABARENKOV,I.V.- On the orthogonalized plane wave method. Phys.Stat.Sol.,50B:465-470, 1972.

12. LICHNEROWICZ,A.- Linear algebra and analysis. San Francisco, Holden-Day, 1967.