

QUANTIZAÇÃO BOSÔNICA SOB O PONTO DE VISTA DA ANÁLISE COMBINATÓRIA

15 de Outubro de 2017

Aluno: Nicolas Lopes Silva (RA: 21021716)¹

Orientador: Nelson José Rodrigues Faustino (SIAPE: 2286843)²

Conteúdo

1	Introdução	2
2	Começando pela série de Taylor	3
2.1	Teorema de Taylor	3
2.2	Fórmula de Taylor vs. Coeficientes Binomiais	4
3	Exemplos de representações da álgebra de Weyl-Heisenberg	7
3.1	Começando pela regra de Leibniz	7
3.2	O caso do oscilador harmônico clássico	8
3.3	Formulação do segundo princípio de quantização	10
4	O Problema de Ordenação Bosônica	16
4.1	Introdução ao problema	16
4.2	Cálculo dos números de Stirling de segundo tipo	17
4.3	Polinômios de Bell vs. Relação de Dobinski	19

¹email: Nicolas.050874@hotmail.com

²email: nelson.faustino@ufabc.edu.br

1 Introdução

Este trabalho de iniciação científica centrou-se no estudo de estruturas combinatórias inerentes ao *problema de ordenação bosônica* descrito no artigo de K.E. Cahill & R.J. Glauber (cf. [8]) de 1969. Deste estudo, iniciado no trabalho de J. Katriel [13], resultaram para além de vários trabalhos na área (veja por exemplo as referências [2, 19, 4, 5]), uma tese de doutorado (cf. [3]), e um livro de texto editado recentemente (cf. [18]).

O *problema de ordenação bosônica* pode ser formulado em termos do segundo princípio de quantização, introduzido por Paul A.M. Dirac no trabalho *The quantum theory of the emission and absorption of radiation* (cf. [9]). Este consiste essencialmente na identificação canônica de um par de observáveis no espaço das fases em termos de operadores num espaço de Hilbert ($\mathcal{H}$) que descrevem as simetrias da álgebra de Weyl-Heisenberg. Este princípio permite-nos, em particular, obter uma descrição tangível para o modelo atômico proposto por Niels Bohr para o átomo de hidrogênio (cf. [6]), tendo como base a equação de Schrödinger.

Para estabelecermos tal formalismo, iremos adotar ao longo deste relatório a letra I para denotar o operador identidade $I : \psi \mapsto \psi$, e definir ação do comutador $[A, B]$ num elemento ψ do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ por

$$[A, B] : \psi \mapsto A(B\psi) - B(A\psi). \quad (1)$$

A filosofia por detrás deste tipo de abordagem assenta na representação de operadores $N(a^\dagger, a)$ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ como

$$N(a^\dagger, a) = \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^n c_{j,k} (a^\dagger)^j a^k,$$

onde $a^\dagger$ e a denotam os operadores de criação e aniquilação, respetivamente (cf. [5]).

Este tipo de formulação pode ser obtido com base na identificação das observáveis (q, p) do espaço das fases $\mathbb{R}^2$ como $z = q + ip \in \mathbb{C}$, onde $\mathbb{C}$ denota o corpo dos números complexos ([5, seção II.]).

Impondo adicionalmente que a e $a^\dagger$ satisfazem as relações de comutatividade

$$[a, a^\dagger] = I,$$

tem-se que o *segundo princípio de quantização* é uma consequência direta das identificações canônicas (cf. [11, subseções 2.2.1, 2.2.2 & 2.2.3])

$$z \in \mathbb{C} \mapsto a \quad \& \quad \bar{z} \in \mathbb{C} \mapsto a^\dagger.$$

Com base nesta identificação canônica, a dualidade mútua de a e $a^\dagger$ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ corresponde essencialmente à conjugação³ em $\mathbb{C}$ de $z = q + ip$ e

³Em $\mathbb{C}$, a operação de conjugação é definida por $\bar{z} = q - ip$. Adicionalmente, podemos concluir com base na propriedade $\bar{\bar{z}} = z$ que z é o conjugado de $\bar{z}$.

$\bar{z} = q - ip$. Esta permite-nos formalmente identificar $N(a^\dagger, a)$ como um elemento $N(\bar{z}, z)$ da álgebra dos polinômios $\mathbb{C}[\bar{z}, z]$ nas variáveis $\bar{z}$ e z , obtido a partir do *segundo princípio de quantização*.

Os temas tratados ao longo deste relatório foram organizados do seguinte modo:

- (i) Na seção 2, foram introduzidas as principais séries e teoremas que fundamentam o desenvolvimento do projeto. Como a série de Taylor se estrutura no formato exponencial (subseção 2.1), e como o desenvolvimento em série de Taylor se relaciona com a expansão binomial (subseção 2.2).
- (ii) Na seção 3 ilustrámos a representação da álgebra de Weyl-Heisenberg assentes em exemplos considerados nas referências bibliográficas [7], [11] e [12]. Mais propriamente, a representação da álgebra de Weyl-Heisenberg em termos do operador de multiplicação associados à representação dos polinômios mônicos x^n (subseção 3.1) e a fatoração canônica do oscilador harmônico em termos de operadores de escada associados às simetrias de Weyl-Heisenberg (subseção 3.2). Formulámos também o segundo princípio de quantização com recurso à notação ket $|\psi\rangle$ introduzida por Paul A.M. Dirac em [10] (subseção 3.3).
- (iii) Na seção 4 irá ser explicado em detalhe os resultados descritos nos trabalhos [13] & [5] com base no formalismo do desenvolvido ao longo da seção 3. Em particular, foi demonstrado que os *números de Stirling de segundo tipo* (subseção 4.2), assim como os polinômios de Bell (subseção 4.3) aparecem naturalmente associados ao problema de ordenação bosônica, associado ao operador de número $a^\dagger a$ (cf. [3, Chapter 3]).

2 Começando pela série de Taylor

2.1 Teorema de Taylor

Seja f uma função de uma variável, n vezes derivável num intervalo Ω (eventualmente ilimitado) de $\mathbb{R}$.

De acordo com o *Teorema de Taylor* (cf. [17, TEOREMA 9]), uma função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que seja n vezes derivável num ponto $x \in \Omega$ pode ser escrita na forma

$$f(x + y) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x)}{k!} y^k + r_n(y),$$

para todo o $x + y \in \Omega$, desde que a condição $\lim_{y \rightarrow 0} \frac{r_n(y)}{y^n} = 0$ seja satisfeita.

No caso de f ser infinitamente diferenciável em Ω , e de x ser um ponto interior de Ω , tem-se que a função f admite a representação em série de potências

$$f(x + y) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} y^k \quad (2)$$

se e somente se $\lim_{n \rightarrow \infty} r_n(y) = 0$ para todo o n natural (cf. [17, Capítulo VIII, Seção 4.]). Este último caso corresponde a uma função f , analítica em Ω .

A título de exemplo, consideremos a função exponencial, definida por

$$\exp(x) := e^x.$$

Com base na condição $\exp(0) = 1$ e na relação $\exp^{(n)}(x) = \exp(x)$ ($n \in \mathbb{N}$), tem-se que

$$\exp(y) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{y^k}{k!} \quad (3)$$

corresponde ao desenvolvimento em série de potências da função exponencial em torno de $x = 0$.

Consideremos agora o operador de derivação $\mathbf{D}$ definido por $\mathbf{D} = \frac{d}{dx}$. Observe que $\mathbf{D}^k f(x) = f^{(k)}(x)$ para todo o $k \in \mathbb{N}$, donde se conclui que

$$\frac{f^{(k)}(x)}{k!} y^k = \frac{y^k}{k!} \mathbf{D}^k f(x) = \frac{(y\mathbf{D})^k}{k!} [f(x)].$$

Desta última relação resulta que o lado direito da igualdade (2) pode ser formalmente escrito com base na ação do operador de exponenciação⁴ $\exp(y\mathbf{D})$ na função f (cf. [7, subseção 2.2]):

$$f(x+y) = \exp(y\mathbf{D}) f(x).$$

2.2 Fórmula de Taylor vs. Coeficientes Binomiais

Consideremos agora o caso particular da expansão em série de Taylor do polinômio mônico de grau n , definido por $f(x) = x^n$. Observe-se que a aplicação iterada do operador de derivação $\mathbf{D} = \frac{d}{dx}$ ao polinômio x^n nos dá

$$\mathbf{D}^k [x^n] = n(n-1) \dots (n-(k-1)) x^{n-k}$$

para valores de $k \leq n$ e $\mathbf{D}^k [x^n] = 0$ para valores de $k > n$. Com base na noção de fatorial de um número natural temos, em particular, que para $n \leq k$ se tem a igualdade

$$n(n-1) \dots (n-(k-1)) = \frac{n!}{(n-k)!}.$$

Observe-se que a relação $\mathbf{D}^k [x^n] = 0$ para valores de $k > n$ no garante que a série de Taylor (2) associada ao polinômio mônico $f(x) = x^n$ corresponde a uma polinômio de grau n .

⁴O operador de exponenciação $\exp(y\mathbf{D})$ é definido com base na substituição $y \rightarrow y\mathbf{D}$ na fórmula (3).

Adicionalmente, em termos dos coeficientes binomiais $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ se tem que o k -ésimo termo $\frac{\mathbf{D}^k[x^n]}{k!}y^k$ da série de Taylor de $f(x) = x^n$ é dado por

$$\frac{\mathbf{D}^k[x^n]}{k!}y^k = \binom{n}{k}x^{n-k}, \quad \text{se } k \leq n.$$

Daqui se conclui que

$$\begin{aligned} (x+y)^n &= \exp(y\mathbf{D})[x^n] \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbf{D}^k[x^n]}{k!}y^k \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}y^kx^{n-k}. \end{aligned}$$

Esta última relação permite-nos estabelecer uma conexão interessante entre dois campos aparente distantes: *combinatória* (coeficientes binomiais) e *análise* (fórmula de Taylor) (cf. [7, subseção 2.2] & [15, cf. seção 2]).

Por um lado, os coeficientes binomiais $\binom{n}{k}$ que surgem na fórmula binomial

$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}y^kx^{n-k}$$

nos dão o número de subconjuntos K de um conjunto N , assumindo que N e K são conjuntos de cardinalidade n e k , respetivamente ($k \leq n$). Estes últimos podem ser determinados pela fórmula de recorrência

$$\binom{n}{k} = \binom{n-1}{k-1} + \binom{n-1}{k}.$$

Por outro lado, a representação formal de $(x+y)^n$ como

$$(x+y)^n = \exp(y\mathbf{D})[x^n]$$

nos diz que a operação de translação $f(x) \mapsto f(x+y)$ implícita na representação em série de Taylor dada pela fórmula (2) nos conduz à expansão binomial de ordem n , com base na escolha $f(x) = x^n$, pelo simples fato do k -ésimo termo da série de Taylor $\frac{\mathbf{D}^k[x^n]}{k!}y^k$ poder ser reescrito como o k -ésimo termo $\binom{n}{k}x^ky^{n-k}$ da expansão binomial.

Para este exemplo em concreto, os coeficientes da série de Taylor podem ser calculados de forma combinatória, com base no triângulo de Pascal representado na figura abaixo.

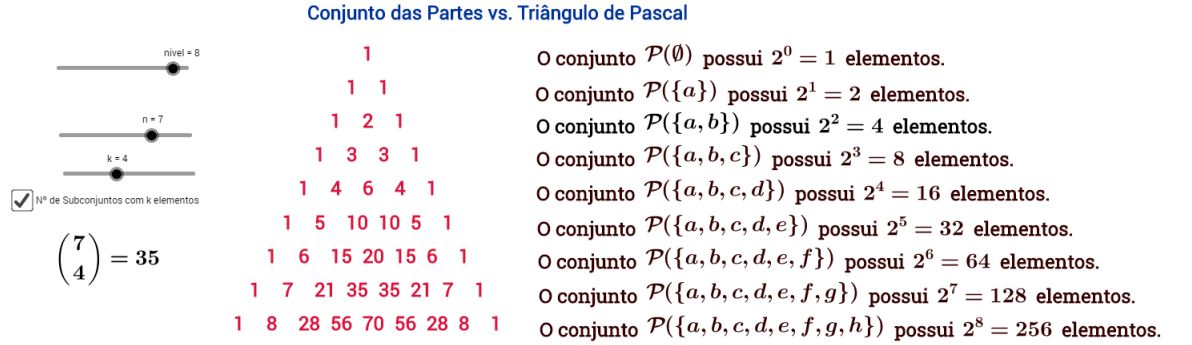


Figura 1: *Interpretação da identidade combinatória (4) para valores de $n = 0, 1, \dots, 8$. Na figura, $\mathcal{P}(N)$ denota o conjunto de todos os subconjuntos K de N com cardinalidade n . Em particular, o número 35 que aparece duas vezes na linha 8 do triângulo de Pascal corresponde ao número de subconjuntos de cardinalidade 4 resp. 5 que é possível formar a partir do conjunto $N = \{a, b, c, d, e, f, g\}$ de cardinalidade 7.*

Adicionalmente, com base na expansão binomial associada a $(x+y)^n$ podemos concluir que para $x = y = 1$, a identidade combinatória

$$2^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \quad (4)$$

nos permite concluir que o número total de subconjuntos K de um conjunto N , de cardinalidade n .

Outros tipos de interpretação combinatória podem ser dados para o caso em que x e y são números inteiros, e para o caso em que os monômios x^n são substituídos por sequências polinomiais $p_n(x)$ que satisfazem a identidade binomial

$$p_n(x+y) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} p_k(y) p_{n-k}(x).$$

Para mais detalhes, veja [14, seção 1] e [15, subseção 2.1.].

3 Exemplos de representações da álgebra de Weyl-Heisenberg

3.1 Começando pela regra de Leibniz

A regra de Leibniz, envolvendo a aplicação do operador de derivação $\mathbf{D} = \frac{d}{dx}$ a duas funções deriváveis f e g , corresponde à seguinte fórmula

$$\mathbf{D}(gf) = (\mathbf{D}g)f + g(\mathbf{D}f). \quad (5)$$

Em termos do comutador introduzido na seção 1 Introdução pela fórmula (1), temos que (5) é equivalente a $[\mathbf{D}, gI]f = (\mathbf{D}g)f$.

Para a escolha $g(x) = x^k$ ($k \in \mathbb{N}$) obtemos

$$[\mathbf{D}, x^k I]f = (\mathbf{D}x^k)f = kx^{k-1}f.$$

Em particular, para $k = 1$ a fórmula acima permite-nos obter a correspondência com os geradores canônicos da álgebra de Heisenberg $a^\dagger, a$ e I via a identificação $a^\dagger = xI$ e $a = \mathbf{D}$:

$$[\mathbf{D}, xI] = I.$$

Consideremos agora a aplicação iterada do operador $\mathbf{D}^k$ na função xf . Observe que para $k \geq 2$, $\mathbf{D}^k(xf)$ pode ser calculada via combinação da regra de Leibniz (5) com a fórmula de recorrência $\mathbf{D}^{n+1}(xf) = \mathbf{D}^n(\mathbf{D}(xf))$.

Em concreto:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^k(xf) &= \mathbf{D}^{k-1}(f + x\mathbf{D}f) \\ &= \mathbf{D}^{k-1}f + \mathbf{D}^{k-1}(x\mathbf{D}f) \\ &= \mathbf{D}^{k-1}f + \mathbf{D}^{k-2}(\mathbf{D}f + x\mathbf{D}^2f) \\ &= 2\mathbf{D}^{k-1}f + \mathbf{D}^{k-2}(x\mathbf{D}^2f). \end{aligned}$$

No caso de $k = 2$, temos que a identidade anterior corresponde a

$$\mathbf{D}^2(xf) = 2\mathbf{D}f + x\mathbf{D}^2f.$$

Esta última fórmula é equivalente à identidade $[\mathbf{D}^2, xI] = 2\mathbf{D}$.

No caso de $k = 3$, obtemos que a fórmula anterior nos conduz ainda à sequência de identidades

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^3(xf) &= 2\mathbf{D}^2f + \mathbf{D}(x\mathbf{D}^2f) \\ &= 2\mathbf{D}^2f + \mathbf{D}^2f + x\mathbf{D}(\mathbf{D}^2f). \end{aligned}$$

Assumindo agora, por hipótese de indução que a fórmula

$$\mathbf{D}^{k-1}(xg) = (k-1)\mathbf{D}^{k-2}g + x\mathbf{D}^{k-1}g$$

é verdadeira para $k > 1$, obtemos com base na substituição $g = \mathbf{D}f$ que

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^k(xf) &= \mathbf{D}^{k-1}(f + x\mathbf{D}f) \\ &= \mathbf{D}^{k-1}f + \mathbf{D}^{k-1}(x\mathbf{D}f) \\ &= \mathbf{D}^{k-1}f + (k-1)\mathbf{D}^{k-1}f + x\mathbf{D}^k f \\ &= k\mathbf{D}^{k-1}f + x\mathbf{D}^k f,\end{aligned}$$

Provamos assim, pelo método de indução matemática, que a fórmula

$$\mathbf{D}^k(xf) = k\mathbf{D}^{k-1}f + x\mathbf{D}^k f$$

é verdadeira para todo o $k \in \mathbb{N}$ e, por conseguinte, que a identidade

$$[\mathbf{D}^k, xI] = k\mathbf{D}^{k-1}$$

é verdadeira para todo o $k \in \mathbb{N}$.

No caso de $k = 1$, tem-se a identidade anterior corresponde à identidade utilizada na representação da álgebra de Weyl-Heisenberg.

Em suma, verificamos para $a^\dagger = xI$ e $a = \mathbf{D}$ que as identidades

$$[\mathbf{D}, x^k I] = kx^{k-1}I \quad [\mathbf{D}^k, xI] = k\mathbf{D}^{k-1} \quad (k \in \mathbb{N})$$

nos dão o análogo da regra de derivação $\mathbf{D}(x^k) = kx^{k-1}$ na álgebra dos polinômios $\mathbb{R}[x]$.

3.2 O caso do oscilador harmônico clássico

Consideremos agora o caso em que pretendemos obter a fatoração do Hamiltoniano

$$\mathbf{H}\psi(x) = -\frac{1}{2}\psi''(x) + \frac{x^2}{2}\psi(x)$$

em termos de geradores canônicos da álgebra de Weyl-Heisenberg.

Em termos dos operadores de multiplicação xI e derivação $\mathbf{D} = \frac{d}{dx}$ considerados na subseção 3.1, note-se que este último pode ser formalmente representado como $\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{D}^2 + \frac{x^2}{2}I$.

Supondo que o comutador $[A, B] = AB - BA$ definido pela fórmula (1) na seção 1 é diferente de zero, temos em particular as seguintes identidades:

$$\begin{aligned}(A - B)(A + B) &= A(A + B) - B(A + B) \\ &= A^2 + AB - BA - B^2 \\ &= A^2 + [A, B] - B^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(A + B)(A - B) &= A(A - B) + B(A - B) \\ &= A^2 - AB + BA - B^2 \\ &= A^2 - [A, B] - B^2.\end{aligned}$$

Somando as duas equações anteriores, temos que

$$(A - B)(A + B) + (A + B)(A - B) = 2(A^2 - B^2).$$

Em particular, para as substituições $A = xI$ e $B = \mathbf{D}$, obtemos a seguinte fórmula de fatoração para $\mathbf{H}$:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(xI - \mathbf{D})(xI + \mathbf{D}) + \frac{1}{2}(xI + \mathbf{D})(xI - \mathbf{D})$$

Por outro lado, atendendo à bilinearidade do anti-comutador, podemos expandir $[xI + \mathbf{D}, xI - \mathbf{D}]$ como

$$\begin{aligned} [xI + \mathbf{D}, xI - \mathbf{D}] &= [xI, xI - \mathbf{D}] + [\mathbf{D}, xI - \mathbf{D}] \\ &= [xI, xI] - [xI, \mathbf{D}] + [\mathbf{D}, xI] - [\mathbf{D}, \mathbf{D}]. \end{aligned}$$

Adicionalmente, com base nas propriedades de comutatividade

$$[\mathbf{D}, \mathbf{D}] = [xI, xI] = 0$$

e nas identidades⁵

$$-[xI, \mathbf{D}] = [\mathbf{D}, xI] = I,$$

concluimos que

$$[xI + \mathbf{D}, xI - \mathbf{D}] = 2I$$

Escolhendo agora $a^\dagger$ e a como sendo

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI - \mathbf{D}) \quad \text{e} \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI + \mathbf{D})$$

podemos concluir $a^\dagger$, a e I correspondem aos geradores canônicos da álgebra de Weyl-Heisenberg. Em particular, a relação $aa^\dagger = a^\dagger a + I$ que resulta da identidade $[a, a^\dagger] = I$ permite-nos ainda reescrever $\mathbf{H}$ como

$$\mathbf{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}.$$

De seguida iremos ilustrar a equação

$$\mathbf{H}\psi(x) = \varepsilon\psi(x),$$

para o caso de escolhermos ψ como sendo a função Gaussiana

$$\psi(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

⁵Observe que o comutador definido pela fórmula (1) satisfaz as identidades $[A, A] = [B, B] = 0$ e $[A, B] = -[B, A]$.

A regra de Leibniz dada pela fórmula (5) permite-nos obter a seguinte regra de derivação : $\mathbf{D}\psi(x) = -x\psi(x)$. Esta última fórmula é equivalente à *propriedade de vácuo* associada ao operador de escada $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI + \mathbf{D})$:

$$a\psi(x) = 0.$$

Desta última equação e da fatoração canônica $\mathbf{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}$, podemos concluir que função Gaussiana definida acima satisfaz a equação

$$\mathbf{H}\psi(x) = \frac{1}{2}\psi(x),$$

Em suma: para a escolha $\psi(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ obtemos $\varepsilon = \frac{1}{2}$.

3.3 Formulação do segundo princípio de quantização

Suponhamos que $a^\dagger$ e a denotam os operadores de escada que satisfazem a relação de comutatividade

$$[a, a^\dagger] = I. \quad (6)$$

e k um número inteiro.

Definimos por *espaço de Fock* o conjunto de todos os vetores de estado $\{|k\rangle : k \in \mathbb{N}_0\}$ descritos em termos da *propriedade de vácuo* $a|0\rangle = 0$, e das propriedades de criação e aniquilação:

$$a^\dagger |k\rangle = |k+1\rangle, \quad a |k\rangle = k |k-1\rangle \quad (k \in \mathbb{N}) \quad (7)$$

Com base nas relações (7) resulta que os vetores de estado $|k\rangle$ são autovetores de $aa^\dagger$ resp. $a^\dagger a$, associados ao autovalor $k+1$ resp. k :

$$aa^\dagger |k\rangle = (k+1) |k\rangle \quad \text{e} \quad a^\dagger a |k\rangle = k |k\rangle \quad (8)$$

Ou seja, o operador de criação $a^\dagger$ aumenta em 1 o número de partículas com autovalor k , enquanto que o operador de aniquilação a , reduz em 1 o número de partículas com autovalor k . Observe ainda que a propriedade de autovalor descrita acima nos permite interpretar $|k\rangle$ como um estado quântico associado a k partículas.

Desta última sequência de relações, podemos facilmente concluir pela definição de comutador que $[a, a^\dagger] |k\rangle = |k\rangle$. Por outro lado, se considerarmos o anti-comutador $aa^\dagger + a^\dagger a$, obtemos que

$$\frac{1}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) |k\rangle = \left(k + \frac{1}{2}\right) |k\rangle,$$

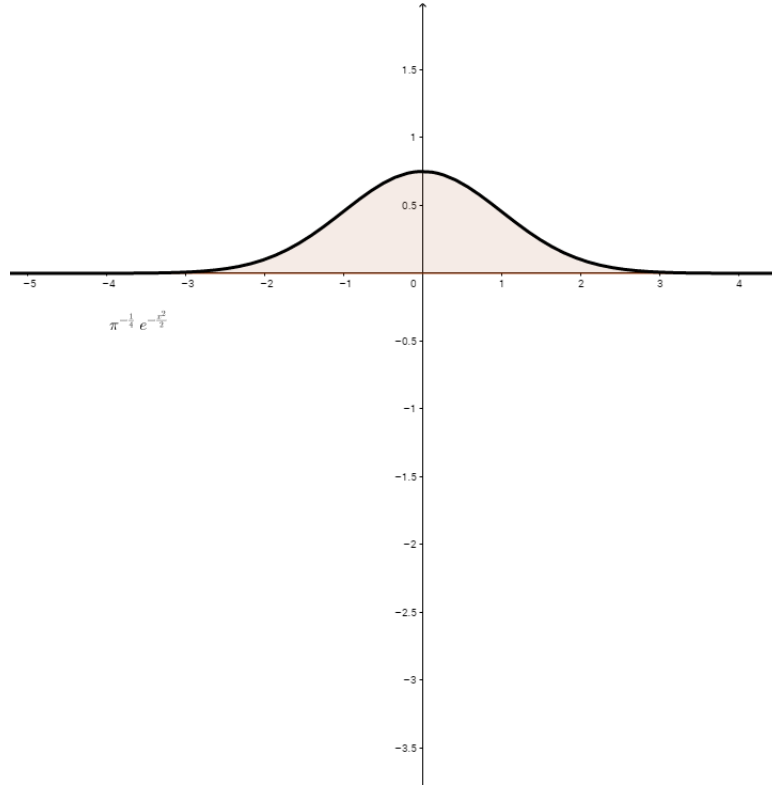


Figura 2: A função Gaussiana nos dá uma solução nula para o operador de aniquilação $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI + \mathbf{D})$. Com base na fatoração $\mathbf{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}$, podemos concluir que o valor $\varepsilon = \frac{1}{2}$ que resulta da substituição $\psi(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ na equação $\mathbf{H}\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$ pode ser interpretado como a energia associada ao estado fundamental do átomo de hidrogênio. Observe ainda que $|\psi(x)|^2 = \pi^{-\frac{1}{2}} e^{-x^2}$ descreve uma distribuição normal $N(\mu, \sigma^2)$, de esperança $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 = \frac{1}{2}$. Esta última interpretação vai ao encontro da interpretação estatística para mecânica quântica proposta por Born (cf. [12, Seção 1.4]). Para mais detalhes, veja a referência [1].

ou seja que os autovetores de $aa^\dagger + a^\dagger a$ são essencialmente os vetores de estado $|k\rangle$ que resultam da construção formal do espaço de Fock (cf. [11, subseção 2.2.3]).

A formulação acima permite-nos descrever de uma forma canônica os polinômios mônicos⁶ x^k associados à álgebra dos polinômios (veja subseção 3.1), assim como determinar uma fatoração canônica para o oscilador harmônico clássico (veja subseção 3.2).

Num contexto mais genérico, podemos facilmente concluir que a relação de comutatividade (6) nos permite descrever os autovetores de

$$\frac{1}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a) = a^\dagger a + \frac{1}{2}I$$

como vetores de estado $|k\rangle$ definidos em termos da equação formal (cf. [12, *Theorem 11.2*])⁷

$$|k\rangle = (a^\dagger)^k |0\rangle, \quad (9)$$

onde $|0\rangle$ é um vetor unitário. Em termos da notação bra-ket de Dirac, introduzida em [10], isto é equivalente a assumir que $|0\rangle$ satisfaz a condição $\langle 0|0\rangle = 1$.

De fato, multiplicando ambos os lados da equação $aa^\dagger = I + a^\dagger a$ à direita por $(a^\dagger)^{k-1}$ ($k - 1 \geq 0$), obtemos que

$$a(a^\dagger)^k = (a^\dagger)^{k-1} + a^\dagger(a^\dagger)^{k-1}.$$

De modo análogo, se multiplicarmos ambos os lados da equação $aa^\dagger = I + a^\dagger a$ à esquerda por a^{k-1} ($k - 1 \geq 0$), obtemos que

$$a^k a^\dagger = a^{k-1} + (a^{k-1} a^\dagger)a.$$

Usando indução sobre $k \in \mathbb{N}$ podemos concluir, à semelhança do que obtivemos para $\mathbf{D}$ e $x^k I$ resp. $\mathbf{D}^k$ resp. xI na subseção 3.1 que as igualdades

$$\begin{aligned} a(a^\dagger)^k &= k(a^\dagger)^{k-1} + (a^\dagger)^k a \\ a^k a^\dagger &= k a^{k-1} + a^\dagger a^k \end{aligned} \quad (10)$$

são sempre verdadeiras, para todo o $k \in \mathbb{N}$. Em termos do comutador $[\cdot, \cdot]$ introduzido em (1), as relações acima são equivalentes a

$$[a, (a^\dagger)^k] = k(a^\dagger)^{k-1} \quad \text{e} \quad [a^k, a^\dagger] = k a^{k-1}.$$

⁶Observe que $x^{k+1} = (xI)x^k$ e $\mathbf{D}(x^k) = kx^{k-1}$.

⁷Em diversos livros de texto e artigos (veja p.e. [8, seção II.] & [11, Capítulo 2]) é comum introduzir $|k\rangle$ com base na fórmula $|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{k!}} |0\rangle$. Com base na demonstração do *Theorem 11.2* podemos concluir que a multiplicação dos coeficientes $\frac{1}{\sqrt{k!}}$ por $(a^\dagger)^k |0\rangle$ nos permitem construir vetores de estado $|k\rangle$ que satisfazem a propriedade de normalização $\langle k|k\rangle = 1$.

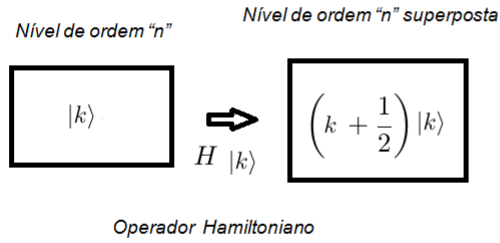


Figura 3: Os operadores de estado $|k\rangle$ são autovetores do operador $\mathbf{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}I$, associado ao autovalor $k + \frac{1}{2}$. A título de curiosidade: a constante $\frac{1}{2}$, que pode ser interpretada como a energia mínima do átomo de hidrogênio no seu estado fundamental, está intimamente relacionada com o princípio de incerteza de Heisenberg $(\Delta_\psi a^\dagger)(\Delta_\psi a) \geq \frac{1}{2}$ (cf. [12, p. 70]).

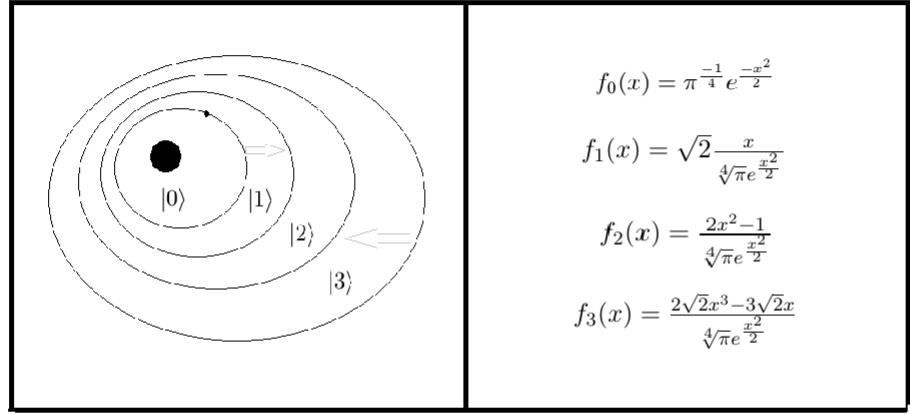


Figura 4: *À esquerda:* Ilustração dos níveis de energia atômicos associados ao vetor de estado $|k\rangle$ gerados a partir da equação $|k\rangle = (a^\dagger)^k |0\rangle$. *À direita:* Função Gaussiana ($f_0(x)$) e funções de Hermite de ordem $k = 1, 2, 3$. No caso dos níveis de energia corresponderem aos autovalores do Hamiltoniano $\mathbf{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}I$, o segundo princípio de quantização nos garante que os operadores de escada $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI - \mathbf{D})$ e $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(xI + \mathbf{D})$ nos permitem descrever os vetores de estado $|k\rangle$ em termos das funções $f_k(x)$.

Em particular, com base das equações (10), concluímos que

$$a \left((a^\dagger)^k |0\rangle \right) = [a, (a^\dagger)^k] |0\rangle = k(a^\dagger)^{k-1} |0\rangle.$$

Desta última relação facilmente se concluir que os vetores de estado definidos pela equação (9) satisfazem automaticamente as propriedades de criação e aniquilação (7).

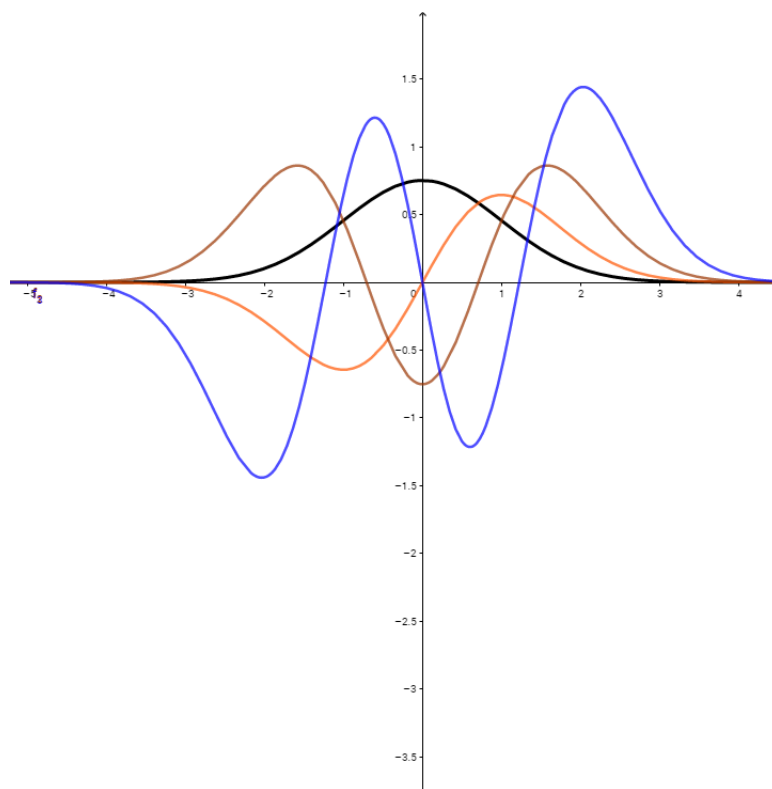


Figura 5: Gráficos da função Gaussiana (a preto) e das funções de Hermite de ordem 1 (a laranja), ordem 2 (a marrom) e ordem 3 (a azul).

4 O Problema de Ordenação Bosônica

4.1 Introdução ao problema

Primeiro, comecemos por observar que as propriedades de criação e aniquilação descritas pelo sistema de equações (7) nos permitem mostrar que os vetores de estado $|k\rangle$ também formam um sistema de autovetores para os operadores $(a^\dagger)^j(a)^j$ e $(a^\dagger a)^n$, respetivamente.

Para o primeiro caso, temos que

$$(a^\dagger)^j(a)^j |k\rangle = \begin{cases} \frac{k!}{(k-j)!} |k\rangle & , \text{ se } j \leq k \\ 0 & , \text{ se } j > k \end{cases} \quad (j, k \in \mathbb{N}_0). \quad (11)$$

pode ser facilmente obtida a partir das identidades⁸ $a^j |k\rangle \frac{k!}{(k-j)!} |k-j\rangle$ ($j \leq k$) e $a^j |k\rangle = 0$ ($j > k$).

Por outro lado, com base na propriedade de autovalor, associada a $a^\dagger a$, podemos também concluir de forma indutiva que

$$(a^\dagger a)^n |k\rangle = k^n |k\rangle$$

é verdadeira para todos⁹ os $k, n \in \mathbb{N}_0$.

Ou seja: os vetores de estado $|k\rangle$ são também autovetores de $(a^\dagger)^j(a)^j$, para todos os $j \leq k$ naturais, e de $(a^\dagger a)^j$ para todo o $j \in \mathbb{N}$.

Observe que no caso de $j = 2$, o número k^2 pode ser escrito como a *soma dos k primeiros números ímpares*¹⁰:

$$k^2 = \sum_{j=0}^{k-1} (2j+1).$$

A igualdade acima¹¹ pode ser reescrita na forma¹²

$$k^2 = k(k-1) + k = \frac{k!}{(k-2)!} + \frac{k!}{(k-1)!}.$$

⁸Estas propriedades são o análogo das propriedade de derivação.

⁹De acordo com os nossos resultados obtidos anteriormente, $0^0 := 0$, para $j = k = 0$.

¹⁰Esta é uma ilustração clássica do método de indução matemática, aprendida no curso de Bases Matemáticas.

¹¹Para calcularmos o somatório acima, usámos a propriedade $\sum_{j=1}^{k-1} j = \frac{(k-1)k}{2}$.

¹²Este exemplo corresponde a uma interpretação alternativa de um dos casos ilustrado no **Example 1.19** de [18].

Reescrevendo agora a igualdade anterior em termos dos operadores $(a^\dagger a)^2$ e $(a^\dagger)^j (a)^j$ ($j = 1, 2$), concluímos que

$$(a^\dagger a)^2 |k\rangle = (a^\dagger)^2 (a)^2 |k\rangle + a^\dagger a |k\rangle.$$

Esta última igualdade diz-nos que podemos determinar o autovalor de $(a^\dagger a)^2$ como uma combinação linear dos autovalores dos operadores $(a^\dagger)^2 (a)^2$ e $a^\dagger a$, respetivamente. Como iremos ver de seguida, esta combinação linear é um caso particular da identidade¹³,

$$k^n = \sum_{j=1}^n S(n, j) \frac{k!}{(k-j)!}, \quad (12)$$

onde $S(n, j)$ denotam os *números de Stirling de segundo tipo*.

4.2 Cálculo dos números de Stirling de segundo tipo

Suponhamos agora por hipótese de indução em n que $(a^\dagger a)^n$ pode ser escrito como combinação linear de $(a^\dagger)^j (a)^j$ ($1 \leq j \leq n$):

$$(a^\dagger a)^n = \sum_{j=1}^n S(n, j) (a^\dagger)^j (a)^j \quad (13)$$

Primeiro, comecemos por observar que a fórmula

$$a^\dagger a (a^\dagger)^j = j (a^\dagger)^j a + (a^\dagger)^{j+1} a$$

é uma consequência direta da relação de comutatividade $[a, (a^\dagger)^j] = j (a^\dagger)^{j-1}$, obtida a partir de (10).

Multiplicando agora na fórmula acima ambos os membros da igualdade por a^j , à direita obtemos que

$$a^\dagger a (a^\dagger)^j a^j = j (a^\dagger)^j a^j + (a^\dagger)^{j+1} a^{j+1}.$$

Aplicando agora o operador $a^\dagger a$ a ambos os lados da igualdade (13), resulta que

$$\begin{aligned} (a^\dagger a)^{n+1} &= \sum_{j=1}^n S(n, j) a^\dagger a (a^\dagger)^j (a)^j \\ &= \sum_{j=1}^n \left(j S(n, j) (a^\dagger)^j (a)^j + S(n, j) (a^\dagger)^{j+1} (a)^{j+1} \right). \end{aligned}$$

¹³Os coeficientes $\frac{k!}{(k-j)!}$ correspondem aos fatoriais regressivos (en: *falling factorials*) considerados na literatura (veja p.e. [3, p. 13]).

Reagrupando os termos do somatório acima, concluímos que a fórmula

$$(a^\dagger a)^{n+1} = \sum_{j=1}^{n+1} S(n+1, j) (a^\dagger)^j (a)^j$$

é verdadeira se e somente se as constantes $S(n+1, j)$ são determinadas a partir das relações de recorrência

$$S(n+1, j) = \begin{cases} S(n, 1) & , \text{ se } j = 1 \\ jS(n, j) + S(n, j-1) & , \text{ se } 2 \leq j \leq n \\ S(n, n) & , \text{ se } j = n+1 \end{cases} \quad (j, n \in \mathbb{N}). \quad (14)$$

O diagrama triangular superior abaixo dá-nos uma interpretação combinatória da identidade (13).

	$a^\dagger a$		$(a^\dagger a)^2$		$(a^\dagger a)^3$		$(a^\dagger a)^4$		$(a^\dagger a)^5$	...
$a^\dagger a$	1	$\xrightarrow{\times 1}$	1	$\xrightarrow{\times 1}$	1	$\xrightarrow{\times 1}$	1	$\xrightarrow{\times 1}$	1	...
		$\searrow \times 1$		$\searrow +$		$\searrow +$		$\searrow +$		
$(a^\dagger)^2 (a)^2$			1	$\xrightarrow{\times 2}$	3	$\xrightarrow{\times 2}$	7	$\xrightarrow{\times 2}$	15	...
				$\searrow \times 1$		$\searrow +$		$\searrow +$		
$(a^\dagger)^3 (a)^3$					1	$\xrightarrow{\times 3}$	6	$\xrightarrow{\times 3}$	25	...
						$\searrow \times 1$		$\searrow +$		
$(a^\dagger)^4 (a)^4$							1	$\xrightarrow{\times 4}$	10	...
								$\searrow \times 1$		
$(a^\dagger)^5 (a)^5$									1	...
...										...

Observe que o coluna n do diagrama representa coeficientes $S(n, j)$ ($1 \leq j \leq n$) enquanto que a linha j ($j \geq 1$) descreve os coeficientes $S(n+1, j)$ obtidos a partir da relação de recorrência (14).

No caso da linha 1 temos $S(1, 1) = 1$. Para $n \in \mathbb{N}$ os coeficientes $S(n+1, 1)$ resp. $S(n+1, n+1)$ são gerados multiplicando o coeficiente obtido na linha anterior (coeficiente $S(n, 1)$) resp. na diagonal anterior (coeficiente $S(n, n)$) por 1. No caso da linha j ($j \geq 2$), os coeficientes $S(n+1, j)$ podem ser calculados pela soma do coeficiente $S(n, j)$ obtido na coluna anterior multiplicado por j com o coeficiente $S(n, j-1)$ que situa acima do coeficiente $S(n, j)$.

Com base nas relações de recorrência acima, podemos facilmente inferir que os números $S(n, j)$ da combinação linear (13) correspondem aos *números de Stirling de segundo tipo* (cf. [16, capítulo 6] & [18, Capítulo 1]), i.e.

$$S(n, j) = \left\{ \begin{matrix} n \\ j \end{matrix} \right\}.$$

Em particular, estes números satisfazem as igualdades $\left\{ \begin{smallmatrix} n \\ 1 \end{smallmatrix} \right\} = \left\{ \begin{smallmatrix} n \\ n \end{smallmatrix} \right\} = 1$.

Podemos ainda concluir, com base nas identidades (11), que a equação

$$(a^\dagger a)^n |k\rangle = \sum_{j=1}^n S(n, j) (a^\dagger)^j (a)^j |k\rangle$$

obtida a partir da combinação linear (13) nos conduz à fórmula (12).

4.3 Polinômios de Bell vs. Relação de Dobiński

Nesta seção iremos interpretar os resultados obtidos em [13], tendo como referência os resultados do capítulo 3 da tese de doutorado de Pawel Blasiak (cf. [3]).

Começemos por observar que, com base fórmula (11), podemos concluir que a série de potências $\sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{j!} (a^\dagger)^j (a)^j |k\rangle$ é finita. Em particular:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{j!} (a^\dagger)^j (a)^j |k\rangle = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} y^j |k\rangle = (1+y)^k |k\rangle$$

Usando a função logaritmo, esta última identidade pode ser reescrita na seguinte forma (cf. [7, subseção 2.4.]):

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{j!} (a^\dagger)^j (a)^j |k\rangle = \exp(k \ln(1+y)) |k\rangle = \exp(\ln(1+y) a^\dagger a) |k\rangle.$$

Voltemos agora a nossa para o operador de exponenciação $\exp(u a^\dagger a)$, definido por

$$\exp(u a^\dagger a) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} (a^\dagger a)^n.$$

Começemos por observar que a igualdade

$$\exp(u a^\dagger a) |k\rangle = \exp(\ln(1+y) a^\dagger a) |k\rangle$$

apenas se verifica se somente se $y = e^u - 1$.

Como iremos verificar de seguida, para $y = e^u - 1$ a função exponencial

$$\exp(xy) = e^{x(e^u-1)}$$

codificada pela igualdade $\exp(u a^\dagger a) |k\rangle = \exp(\ln(1+y) a^\dagger a) |k\rangle$ corresponde à função geratriz associada aos polinômios de Bell

$$B_n(x) = \sum_{j=1}^n S(n, j) x^j.$$

Por uma questão de simplicidade, considere a combinação linear (13) associada aos operadores xI e $\mathbf{D}$, definidos na seção 3.1:

$$(x\mathbf{D})^n = \sum_{j=1}^n S(n, j)x^j\mathbf{D}^j.$$

Desta última identidade, obtemos a seguinte sequência de igualdades:

$$\begin{aligned} (x\mathbf{D})^n (e^x) &= \sum_{j=1}^n S(n, j)x^j\mathbf{D}^j (e^x) \\ &= \sum_{j=1}^n S(n, j)x^j e^x \\ &= e^x B_n(x). \end{aligned} \tag{15}$$

Por outro lado, para $x = e^y$, temos por aplicação da regra da cadeia que

$$x\mathbf{D} = x \frac{d}{dx} = \frac{d}{dy}.$$

Desta última relação resulta que a ação de $\exp(u x\mathbf{D})$ numa função g nos conduz a

$$\exp(u x\mathbf{D}) g(x) = \exp\left(u \frac{d}{dy}\right) g(e^y).$$

No caso de a função $f(y) = g(e^y)$ ser analítica (cf. [17, Capítulo VIII, Seção 4.]), podemos concluir com base na expansão em série de Taylor que o lado direito da igualdade acima é igual a

$$f(y + u) = g(e^{y+u}) = g(xe^u).$$

Revertendo a mudança de variável temos, em particular, para a escolha $g(x) = e^x$ que

$$\exp(u x\mathbf{D}) (e^x) = e^{xe^u}.$$

Usando a expansão em série de potências da função exponencial deduzida na subseção 3.1

$$\begin{aligned} e^{xe^u} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} e^{ku} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \frac{k^n}{n!} u^n. \end{aligned}$$

Logo, se

$$G(x, u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} B_n(x)$$

define a função geratriz associada aos polinômios de Bell, concluímos com base na identidade (15) que

$$G(x, u) = e^{-x} \exp(u x \mathbf{D})(e^x) = e^{x(e^u - 1)}.$$

Finalmente, comparando o desenvolvimento em série de potências de $G(x, u)$ e $e^{x(e^u - 1)}$, termo a termo, concluímos que

$$B_n(x) = e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} k^n.$$

Esta última fórmula é conhecida na literatura por *fórmula de Dobiński*¹⁴.

Referências

- [1] Ballentine, L. E. (1970). *The statistical interpretation of quantum mechanics*. Reviews of Modern Physics, 42(4), 358. ^{11}
[DOI: 10.1103/RevModPhys.42.358]
- [2] Blasiak, P., et al. (2003). *The general boson normal ordering problem*. Physics Letters A, 309(3), 198-205. ^{2}
[DOI: 10.1016/S0375-9601(03)00194-4]
- [3] Blasiak, P. (2005). *Combinatorics of boson normal ordering and some applications*. Tese de Doutorado: Universidade Paris VI & Academia Polonesa de Ciências. Cracôvia (Polônia) (103 páginas) ^{2,3,17,19,21}
[URL: arXiv:quant-ph/0507206]
- [4] Blasiak, P., et al. (2006). *Representations of monomiality principle with Sheffer-type polynomials and boson normal ordering*. Physics Letters A, 352(1), 7-12. ^{2}
[DOI: 10.1016/j.physleta.2005.11.052]
- [5] Blasiak, P., Horzela, A., Penson, K. A., Solomon, A. I., & Duchamp, G. H. (2007). *Combinatorics and Boson normal ordering: A gentle introduction*. American Journal of Physics, 75(7), 639-646. ^{2,3}
[DOI: 10.1119/1.2723799]
- [6] Brown, H.R. (1981). *O debate Einstein-Bohr sobre a mecânica quântica*. Cadernos de História e Filosofia da Ciência, n. 2, pp. 51-89. ^{2}

¹⁴Ao contrário da dedução da fórmula de Dobiński obtida em [3, Chapter 3], a dedução aqui apresentada foi baseada no formalismo de cálculo umbral apresentado em [7, Seção 3] e em [14].

- [7] Cartier, P. (2000). *Mathemagics*. In: Planat M. (eds) Noise, Oscillators and Algebraic Randomness. Lecture Notes in Physics, vol 550. Springer, Berlin, Heidelberg. ^{3,4,5,19,21}
[DOI: 10.1007/3-540-45463-2_2]
- [8] Cahill, K. E., & Glauber, R. J. (1969). *Ordered expansions in boson amplitude operators*. Physical Review, 177(5), 1857. ^{2,12}
[DOI: 10.1103/PhysRev.177.1857]
- [9] Dirac, P. A. (1927, March). *The quantum theory of the emission and absorption of radiation*. In Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences (Vol. 114, No. 767, pp. 243-265). The Royal Society. ^{2}
[DOI: 10.1098/rspa.1927.0039]
- [10] Dirac, P. A. M. (1939, July). *A new notation for quantum mechanics*. In Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society (Vol. 35, No. 3, pp. 416-418). Cambridge University Press. ^{3,12}
[DOI: 10.1017/S0305004100021162]
- [11] Gazeau, J. P. (2009). *Coherent states in quantum physics*. Wiley. ^{2,3,12}
[ISBN: 978-3-527-40709-5]
- [12] Hall, B. C. (2013). *Quantum theory for mathematicians* (Vol. 267). New York: Springer. ^{3,11,12,13}
[ISBN: 10.1007/978-1-4614-7116-5]
- [13] Katriel, J. (1974). *Combinatorial aspects of boson algebra*. Lettere Al Nuovo Cimento (1971–1985), 10(13), 565-567. ^{2,3,19}
[DOI: 10.1007/BF02784783]
- [14] Kisil, V. V. (2002). *Polynomial Sequences of Binomial Type and Path Integrals*. Annals of Combinatorics, 6(1), 45-56. ^{6,21}
[DOI: 10.1007/s00026-002-8029-9]
- [15] Kisil, V. V. (2002). *Tokens: An algebraic construction common in combinatorics, analysis, and physics*, Func. An.: Proc. of the Ukr. Math. Congress-2001, Kiev, 2002. p. 146-155. ^{5,6}
[arXiv: math/0201012]
- [16] Knuth, D. E., Graham, R. L., & Patashnik, O. (1994). *Concrete Mathematics: A Foundation for Computer Science*. 2nd edition. Adison Wesley. ^{18}
[ISBN: 0201558025]

- [17] Lima, E. L. (2000). *Curso de Análise, vol. 2.* (6a edição). Projeto Euclides, IMPA. ^{3,4,20}
- [18] Mansour, T., & Schork, M. (2015). *Commutation Relations, Normal Ordering, and Stirling Numbers.* CRC Press. ^{2,16,18}
[ISBN: 9781466579880]
- [19] Méndez, M. A., et al. (2005). *Combinatorial approach to generalized Bell and Stirling numbers and boson normal ordering problem.* Journal of mathematical physics, 46(8), 083511. ^{2}
[DOI: 10.1063/1.1990120]