

3.1 A partícula não-relativística sem estrutura interna

O leitor interessado nas leis fundamentais da física pode talvez ficar decepcionado com uma aproximação não-relativística. Mas a mecânica quântica não-relativística fornece resultados importantes na física atômica, molecular e de estado sólido. Não seria prudente descrever estas áreas da física a partir de uma teoria relativística. Isto porque a teoria relativística apresenta uma série de problemas difíceis. Para muitos fenômenos é mais fácil começar com uma descrição não-relativística e acrescentar correções depois. Além disso, teremos a oportunidade de aprender certos conceitos no caso não-relativístico.

Vamos então adotar uma descrição do espaço-tempo tal que a simultaneidade seria absoluta e a transformação de coordenadas de um referencial inercial para outro seria dada pelas transformações de Galileu.

Se queremos estudar a mecânica quântica de uma partícula temos que definir o que queremos dizer com a palavra partícula. Classicamente temos uma noção intuitiva de partícula. Mas como o mundo quântico é tão diferente do mundo clássico esta intuição ajuda pouco para montar a teoria quântica da partícula.

O que caracteriza um dado sistema físico? De fato é até difícil de dizer o que é um sistema físico. Me parece que o conjunto de observáveis que podem ser medidos com o sistema são parte da caracterização. Então se queremos dizer o que é uma partícula temos que dizer que grandezas podem ser medidas numa partícula.

A grandeza mais óbvia que pode ser medida numa partícula é a posição da mesma. Então temos a seguinte caracterização: uma partícula é um sistema físico que permite medir o observável posição. Perfeito, - mas, aparentemente só transferimos o problema para outro lugar: agora temos que definir o que queremos dizer com “posição”. A definição de posição pode ser dada com a ajuda das simetrias cinemáticas. Quando submetemos tanto os observáveis como os estados à simetria os resultados experimentais não sofrem alteração. Mas quando submetemos somente os observáveis à simetria teremos alterações dos resultados e justamente estas alterações podem ser usadas para caracterizar certos observáveis.

Nas secções anteriores ficou bastante claro que um observável não é um operador no espaço de Hilbert, mas que o operador é apenas uma representação do observável. Mas na presente secção não mudaremos a representação e vamos permitir uma linguagem menos precisa e falar de observáveis A, B, C, \dots usando os símbolos dos operadores. O leitor saberá que se trata na verdade dos observáveis representados pelos operadores A, B, C, \dots .

A definição de posição não será uma definição escrita em uma linha, mas vamos juntar várias propriedades que juntos definem o observável posição:

- 1) A posição é um observável tridimensional que, com escolha de uma base ortonormal direita $\langle \hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3 \rangle$ compreende três observáveis comesuráveis $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ unidimensionais, formando as componentes na base, e que tomam valores no espaço-valor de distâncias espaciais.
- 2) Na classe de equivalência dos aparatos ou processos físicos existem aparatos cujos vetores marcantes no chassi não dependem do tempo.

3) Existe um grupo de simetrias cinemáticas que atuam sobre a posição como translações, isto é, eles atuam sobre os aparatos que medem $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ como deslocamentos físicos no laboratório.

4) O efeito que estas simetrias têm na ação sobre os $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ é dada pela fórmula

$$\mathcal{T}_{\vec{\theta}} \mathcal{X}^k (\mathcal{T}_{\vec{\theta}})^{-1} = \mathcal{X}^k - \theta^k \mathbf{1} \quad (3.1.1)$$

5) Existe um grupo de simetrias cinemáticas que atuam sobre a posição como rotações.

6) O efeito que estas simetrias têm na ação sobre os $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ é dada pela fórmula

$$\mathcal{R} \mathcal{X}^l \mathcal{R}^{-1} = \left(R^{-1} \right)_k^l \mathcal{X}^k \quad (3.1.2)$$

Falta ainda um aspecto importante na caracterização dos observáveis \mathcal{X}^k : temos que definir o instante da medida. Esta definição fará uso de mais uma simetria cinemática, cuja ação sobre os \mathcal{X}^k consiste na substituição dos aparatos que medem os \mathcal{X}^k por aparatos com a mesma estrutura interna, o mesmo instante marcante t_M mas que diferem dos originais pelo estado de movimento. Chamaremos uma substituição de um observável $\left[\langle \mathcal{C}, \vec{r}_A, \vec{r}_B, \vec{r}_C, t_M \rangle \right]$ que tinha pontos marcantes $\vec{r}_A, \vec{r}_B, \vec{r}_C$ independentes do tempo por $\left[\langle \mathcal{C}, \vec{r}_A + (t-t_0)\vec{v}, \vec{r}_B + (t-t_0)\vec{v}, \vec{r}_C + (t-t_0)\vec{v}, t_M \rangle \right]$ um boost com velocidade \vec{v} e instante isolocal t_0 . Com esta noção podemos acrescentar mais duas condições na definição de posição:

7) Existe um grupo de simetrias cinemáticas que atuam sobre a posição como boosts.

8) Observáveis $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ que cumprem as condições 1) – 7) são de posição no instante t_0 , se os boosts com instante isolocal t_0 deixarem os $\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3$ inalterdos:

$$\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0) \mathcal{X}^l (t_0) (\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0))^{-1} = \mathcal{X}^l (t_0) \quad (3.1.3)$$

As exigências 1) – 8) definem o observável posição.

Uma vez que definimos o instante de medida devemos botar o indicador do instante de medida (t_0) também nas equações (3.1.1) e (3.1.2). Escrevendo, por exemplo, a (3.1.1) para uma translação infinitesimal $\vec{\theta}$ obtemos a definição do momento linear da partícula no instante t_0 :

$$\left(\mathbf{1} - i \mathcal{P}_k(t_0) \theta^k \right) \mathcal{X}^l (t_0) \left(\mathbf{1} + i \mathcal{P}_k(t_0) \theta^k \right) = \mathcal{X}^l (t_0) - \theta^l \mathbf{1} \quad (3.1.4)$$

Na verdade esta equação sozinha não define ainda os momentos lineares no instante t_0 . Isto porque os $\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0)$ não formam um conjunto irreduzível de observáveis. Mais tarde teremos que acrescentar o comportamento de outros observáveis sob translações para definir os momentos lineares completamente. Os momentos angulares associados aos pontos 5) e 6) da definição de posição também dependerão do tempo.

Vamos representar a partícula no espaço de Hilbert de tal forma que o estado, uma vez preparado seja representado por um operador densidade ρ independente do tempo.

Esta representação é chamada de representação de Heisenberg. Os três componentes da posição seriam então representados por operadores $\mathcal{X}^1(t), \mathcal{X}^2(t), \mathcal{X}^3(t)$ dependentes do tempo. Com estas funções valor-operador podemos definir operadores de velocidade como derivadas:

$$v^l(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{d\mathcal{X}^l(t)}{dt} = \dot{\mathcal{X}}^l(t) \quad (3.1.5)$$

Os operadores $\dot{\mathcal{X}}^l(t)$ são auto-adjuntos e podem representar observáveis. Mas infelizmente não temos nenhuma prescrição ou indicação como seria a estrutura de um medidor de velocidade da mecânica quântica. A definição operacional de velocidade da mecânica clássica não serve para uma partícula quântica. A prescrição clássica prevê duas medidas de posição em instantes t e $t+\varepsilon$. Quanticamente a medida no instante t destrói o estado de modo que a medida no instante $t+\varepsilon$ não teria sentido. O procedimento clássico pode, no entanto, ser aplicado num ensemble. Imagine que preparamos N vezes a partícula no mesmo estado. Em $N/2$ exemplares medimos a posição no instante t , Nos demais exemplares medimos no instante $t+\varepsilon$. Desta forma a destruição do estado pela medida no instante t não afeta as medidas no instante $t+\varepsilon$ porque estas seriam feitas com outros exemplares. **Infelizmente este tipo de medida num ensemble não corresponde à medida de um observável! A medida de um observável deve ser feita num exemplar de sistema dando um resultado.** Mas esta medida em ensemble pelo menos pode ser usado para identificar um medidor de velocidade.

Suponha que algum físico experimental genial conseguiu construir um medidor do observável velocidade. Podemos reconhecer este medidor da seguinte forma: preparamos um ensemble de sistemas num estado ρ , Numa parte destes sistemas medimos com o tal medidor obtendo valores individuais, das quais podemos formar médias; $\overline{v^l}$. Numa outra parte medimos valores médios de posição para diversos instantes. Destas últimas podemos determinar a derivada temporal. Se o medidor do físico experimental genial for mesmo um medidos de velocidade devemos encontrar

$$\frac{d}{dt} \overline{X^l} = \overline{V^l} \quad (3.1.6)$$

Isto deve valer para todos os estados. A verificação experimental da fórmula (3.1.6) seria o teste para provar que o aparato mede de fato o observável velocidade.

O Professor Jens Mund tem propostas concretas como se pode implementar um medidor de velocidade e este assunto é interessante. Mas para o presente problema não precisamos conhecer os detalhes de um medidor de velocidade. Basta que tenhamos o critério (3.1.6) para reconhece-lo.

O que precisamos saber é como o $\dot{\mathcal{X}}^l(t_0)$ é alterado por um boost no instante t_0 . Seja ε um lapso de tempo infinitesimal. Podemos escrever

$$\dot{\mathcal{X}}^l(t_0) = \frac{1}{\varepsilon} \{ \mathcal{X}^l(t_0 + \varepsilon) - \mathcal{X}^l(t_0) \} \quad (3.1.7)$$

e com a (3.1.3)

$$\mathcal{B}_v(t_0) \dot{\mathcal{X}}^l(t_0) (\mathcal{B}_v(t_0))^{-1} = \frac{1}{\varepsilon} \left\{ \underline{\underline{\mathcal{B}_v(t_0) \mathcal{X}^l(t_0 + \varepsilon) (\mathcal{B}_v(t_0))^{-1}}} - \mathcal{X}^l(t_0) \right\} \quad (3.1.8)$$

Se aplicarmos um boost no instante $t_0 + \varepsilon$ a um medidor de posição no instante $t_0 + \varepsilon$ os vetores posição das marcas $\vec{r}_A, \vec{r}_B, \vec{r}_C$ no chassi sofrem a seguinte alteração

$$\vec{r}_{ABC} \mapsto \vec{r}_{ABC} + \vec{v}(t - t_0 - \varepsilon) \quad (3.1.9)$$

Se aplicarmos em seguida uma translação no instante $t_0 + \varepsilon$ com vetor deslocamento $\varepsilon \vec{v}$ as arcas focam em $\vec{r}_{ABC} + \vec{v}(t - t_0)$, então como se tivéssemos feito um boost com instante isocal t_0 . Então podemos escrever o termo sublinhado da fórmula (3.1.8) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0) \mathcal{X}^l(t_0 + \varepsilon) (\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0))^{-1} &= \\ &= \mathcal{J}_{\varepsilon \vec{v}}(t_0 + \varepsilon) \mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0 + \varepsilon) \mathcal{X}^l(t_0 + \varepsilon) (\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0 + \varepsilon))^{-1} (\mathcal{J}_{\varepsilon \vec{v}}(t_0 + \varepsilon))^{-1} \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Substituindo este resultado na (3.1.8) obtemos

$$\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0) \dot{\mathcal{X}}^l(t_0) (\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0))^{-1} = \dot{\mathcal{X}}^l(t_0) - v^l \mathbf{1} \quad (3.1.11)$$

Vamos introduzir um gerador $\mathcal{C}_l(t_0)$ também para a simetria de boost e escrever $\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0)$ para \vec{v} infinitesimal na forma

$$\mathcal{B}_{\vec{v}}(t_0) = \mathbf{1} - i \mathcal{C}_l(t_0) v^l \quad (3.1.12)$$

Para \vec{v} infinitesimal a (3.1.11) toma a forma

$$(\mathbf{1} - i C_l(t_0) v^l) \dot{\mathcal{X}}^l(t_0) (\mathbf{1} + i C_l(t_0) v^l) = \dot{\mathcal{X}}^l(t_0) - v^l \mathbf{1} \quad (3.1.13)$$

Com a definição de partícula não-relativística introduzimos grandezas como posição, velocidade, momento linear, momento angular e geradores de boost. Agora precisamos dos comutadores dos operadores que representam estas grandezas. Na determinação destes comutadores usaremos sempre grandezas definidas para o mesmo instante t_0 . Então podemos simplificar a notação e escrever simplesmente $\mathcal{X}^l, \dot{\mathcal{X}}^l, \mathcal{P}_k, \mathcal{J}_k, \mathcal{C}_l$ no lugar de $\mathcal{X}^l(t_0), \dot{\mathcal{X}}^l(t_0), \mathcal{P}_k(t_0), \mathcal{J}_k(t_0), \mathcal{C}_l(t_0)$. Das fórmulas (3.1.1), (3.1.12) e (3.1.3) obtemos imediatamente:

$$[\mathcal{P}_k, \mathcal{X}^l] = -i \delta_k^l \mathbf{1} \quad (3.1.14)^1$$

$$[\mathcal{C}_k, \dot{\mathcal{X}}^l] = -i \delta_k^l \mathbf{1} \quad (3.1.15)$$

$$[\mathcal{C}_k, \mathcal{X}^l] = 0 \quad (3.1.16)$$

¹ Os operadores \mathcal{P}_k e \mathcal{X}^l são illimitados e portanto não são definidos em todo o espaço de Hilbert mas apenas num subconjunto denso. Por esta razão a regra de comutação dever-se-ia escrever na forma $[\mathcal{P}_k, \mathcal{X}^l] \subset -i \delta_k^l \mathbf{1}$, o que significa que a gráfico do operador $[\mathcal{P}_k, \mathcal{X}^l]$ é um subconjunto do gráfico do operador $-i \delta_k^l \mathbf{1}$. Pode-se evitar este tipo de complicação formulando tudo somente com os operadores unitários das simetrias e não com os geradores.

As regras de comutação para \mathcal{J}_k e \mathcal{P}_k , que deduzimos na secção 2.5 de forma geral, continuam válidas também para o caso particular de uma partícula. Além disso podemos deduzir regras análogas para os geradores de boost. A dedução é idêntica a aquela dada na secção 2.5 para \mathcal{J}_k e \mathcal{P}_k . Vale então

$$[\mathcal{J}_m, \mathcal{C}_k] = i \mathcal{C}_n \delta^{na} \epsilon_{amk} \quad (3.1.17)$$

$$[\mathcal{C}_l, \mathcal{C}_k] = 0 \quad (3.1.18)$$

Mas, tendo tanto translações como boosts como simetrias, aparece uma nova possibilidade: podemos combinar boosts e translações. Se submetermos um aparato de medida primeiramente a um boost e depois a uma translação obtemos a mesma mudança do que fazendo estas substituições na ordem inversa. Portanto o operador

$$(\mathbf{1} + i \mathcal{C}_l v^l)(\mathbf{1} + i \mathcal{P}_k \theta^k)(\mathbf{1} - i \mathcal{C}_l v^l)(\mathbf{1} - i \mathcal{P}_k \theta^k) \quad (3.1.19)$$

com \vec{v} e $\vec{\theta}$ infinitesimais deve descrever a simetria que não altera nenhum observável e ele deve diferir do operador identidade apenas por um fator de fase:

$$(\mathbf{1} + i \mathcal{C}_l v^l)(\mathbf{1} + i \mathcal{P}_k \theta^k)(\mathbf{1} - i \mathcal{C}_l v^l)(\mathbf{1} - i \mathcal{P}_k \theta^k) = e^{i\Lambda(\vec{v}, \vec{\theta})} \mathbf{1} \quad (3.1.20).$$

Até agora conseguimos eliminar estes fatores de fase sempre. As vezes isto resultava na eliminação da liberdade de somar constantes nos geradores. Esta vez a situação é diferente; o fator de fase na fórmula (3.1.20) não pode ser eliminado e ele terá maior importância. Escrevendo, como sempre, o fator de fase como série de Taylor e comparando termo por termo obtemos:

$$[\mathcal{P}_k, \mathcal{C}_l] = i m_{kl} \mathbf{1} \quad (3.1.21)$$

onde m_{kl} são coeficientes reais oriundos da expansão do fator de fase. m_{kl} toma valores no espaço valor de temos multiplicado duas vezes com o espaço valor dual das distancias, ou seja, m_{kl} pode ser medido em s m^{-2} .

Conjugando a (3.1.21) com um operador unitário que representa uma rotação percebemos com as fórmulas (2.5.50) e (3.1.17) que $[\mathcal{P}_k, \mathcal{C}_l]$ se comporta numa rotação como as componentes de um tensor covariante, enquanto o lado direito da (3.1.21) não sofre nada. Então os m_{kl} são componentes de um tensor que é invariante sob rotações. Sabemos que em três dimensões os únicos tensores covariantes que são invariantes sob rotações são os múltiplos do tensor métrico. Então podemos escrever

$$[\mathcal{P}_k, \mathcal{C}_l] = i m \delta_{kl} \mathbf{1} \quad (3.1.22)$$

Conjugando com a dinâmica vemos que o valor m é uma propriedade da partícula independente do tempo. Devemos avaliar quais aspectos desta constante têm realmente um significado físico. Estamos construindo a representação do sistema partícula num espaço de Hilbert. Devemos nos lembrar que a representação não é única. Sempre podemos mudar uma representação por outra com uma conjugação anti-unitária. Nesta operação ambos os geradores \mathcal{P}_k e \mathcal{C}_l mudam de sinal, de tal forma que o lado esquerdo da (3.1.22) fica inalterado. Mas o fator i no lado direito fornece uma troca de sinal numa conjugação anti-unitária. Então o sinal de m deve mudar. Portanto o sinal de m não tem sentido físico e é apenas uma questão de escolha. Vamos escolher

$m > 0$. Com esta escolha, mudanças de representação anti-unitárias não podem ser mais feitas e os sinais de todos os geradores começam a ter significado físico.

Para poder prosseguir, temos que caracterizar a partícula mais. Queremos descrever uma partícula sem estrutura interna. Não ter estrutura interna significa que um conhecimento da posição da partícula já teria todo que se pudesse saber do seu estado, pois não existe nenhuma condição interna que poderia ser questionada. Na linguagem da mecânica quântica isto significa que os observáveis $\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0)$ formam um conjunto completo de observáveis comesuráveis. Lembramos que isto significa que qualquer observável comesurável com os $\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0)$ deve ser uma função destes. Com esta caracterização da falta de estrutura interna em mente vamos rever os comutadores que foram deduzidos. De novo vamos suprimir a indicação do instante (t_0) . A fórmula (3.1.16) implica então que os geradores de boosts são funções das posições. Vamos supor que estas funções sejam analíticas:

$$\mathcal{E}_l = c_l^{(0)} \mathbf{1} + c_{la}^{(1)} \mathcal{X}^a + c_{lab}^{(2)} \mathcal{X}^a \mathcal{X}^b + \dots \quad (3.1.23)$$

Inserindo esta expansão na (3.1.22) e usando a (3.1.14) obtemos

$$-i c_{la}^{(1)} \delta_k^a \mathbf{1} - i c_{lab}^{(2)} \delta_k^a \mathcal{X}^b - i c_{lab}^{(2)} \mathcal{X}^a \delta_k^b - \dots = i m \delta_{kl} \quad (3.1.24)$$

As potências dos operadores de posição devem certamente ser linearmente independentes e podemos comparar termos ordem por ordem. Desta forma obtemos

$$c_{lk}^{(1)} = -m \delta_{lk} \quad \text{e} \quad c^{(n)} = 0 \quad \text{para} \quad n > 1 \quad (3.1.25)$$

Vamos inserir este resultado na fórmula (3.1.15)

$$\left[-m \delta_{ka} \mathcal{X}^a, \dot{\mathcal{X}}^l \right] = -i \delta_k^l \mathbf{1} \quad (3.1.26)$$

Esta regra de comutação tem muita semelhança com a (3.1.14). Para torna-la ainda mais parecida vamos multiplicar a (3.1.26) com a métrica e com a métrica inversa, trocar a ordem no comutador e escrever o fator m junto com o $\dot{\mathcal{X}}^l$:

$$\left[\delta_{nl} m \dot{\mathcal{X}}^l, \mathcal{X}^r \right] = -i \delta_n^r \mathbf{1} \quad (3.1.27)$$

Para facilitar a comparação com a (3.1.14) vamos mudar os nomes dos índices:

$$\left[\delta_{ka} m \dot{\mathcal{X}}^a, \mathcal{X}^l \right] = -i \delta_k^l \mathbf{1} \quad (3.1.28)$$

Agora podemos subtrair esta fórmula da (3.1.14) e obtemos

$$\left[\left(\mathcal{P}_k - \delta_{ka} m \dot{\mathcal{X}}^a \right), \mathcal{X}^l \right] = 0 \quad (3.1.29)$$

Como a partícula supostamente não tem estrutura interna, esta igualdade implica que $\mathcal{P}_k - \delta_{ka} m \dot{\mathcal{X}}^a$ pode ser escrito como uma função da posição:

$$\mathcal{P}_k(t_0) - \delta_{ka} m \dot{\mathcal{X}}^a(t_0) = \mathcal{A}_k \left(\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0), t_0 \right) \quad (3.1.30)$$

Neste momento introduzimos a citação do instante de novo para poder destacar que a função \mathcal{A}_k pode ter uma dependência explícita do tempo. Então vimos que a relação entre momento linear e velocidade tem necessariamente a forma

$$\mathcal{P}_k(t_0) = \delta_{ka} m \dot{\mathcal{X}}^a(t_0) + \mathcal{A}_k(\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0), t_0) \quad (3.1.31)$$

Falta determinar a dinâmica da partícula. É natural escolher como conjunto de variáveis dinâmicas um conjunto que contenha os operadores $\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0)$. Com esta escolha o operador Hamiltoniano deve cumprir a relação

$$\dot{\mathcal{X}}^l = i[\mathcal{H}, \mathcal{X}^l] \quad (3.1.32)$$

Vamos comparar esta igualdade com a igualdade que resulta quando calculamos o comutador do operador $\dot{\mathcal{X}}^a \dot{\mathcal{X}}^b \delta_{ab} m/2$ com \mathcal{X}^l . Com a fórmula (3.1.27) obtemos

$$\begin{aligned} \left[\frac{m}{2} \dot{\mathcal{X}}^a \dot{\mathcal{X}}^b \delta_{ab}, \mathcal{X}^l \right] &= \\ &= \frac{m}{2} \delta_{ab} [\dot{\mathcal{X}}^a, \mathcal{X}^l] \dot{\mathcal{X}}^b + \frac{m}{2} \delta_{ab} \dot{\mathcal{X}}^a [\dot{\mathcal{X}}^b, \mathcal{X}^l] = -i \dot{\mathcal{X}}^l \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

Multiplicando esta igualdade com i e subtraindo-a da (3.1.32) obtemos

$$\left[\left(\mathcal{H} - \frac{m}{2} \dot{\mathcal{X}}^a \dot{\mathcal{X}}^b \delta_{ab} \right), \mathcal{X}^l \right] = 0 \quad (3.1.34)$$

Como a partícula não tem estrutura interna esta igualdade implica que $\mathcal{H} - \frac{m}{2} \dot{\mathcal{X}}^a \dot{\mathcal{X}}^b \delta_{ab}$ é uma função dos $\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0)$:

$$\mathcal{H}(t_0) - \frac{m}{2} \dot{\mathcal{X}}^a(t_0) \dot{\mathcal{X}}^b(t_0) \delta_{ab} = \mathcal{U}(\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0), t_0) \quad (3.1.35)$$

Isto determina a forma geral do operador Hamiltoniano de uma partícula não-relativística sem estrutura interna:

$$\mathcal{H}(t_0) = \frac{m}{2} \dot{\mathcal{X}}^a(t_0) \dot{\mathcal{X}}^b(t_0) \delta_{ab} + \mathcal{U}(\mathcal{X}^1(t_0), \mathcal{X}^2(t_0), \mathcal{X}^3(t_0), t_0) \quad (3.1.36)$$

Para calcular o comportamento temporal do sistema, esta maneira de escrever o Hamiltoniano ainda não é muito apropriado, porque as regras de comutação das velocidades podem ser muito complicadas. É conveniente reescrever o operador em termos dos momentos lineares:

$$\mathcal{H} = \frac{\delta^{ab}}{2m} (\mathcal{P}_a - \mathcal{A}_a(\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3)) (\mathcal{P}_b - \mathcal{A}_b(\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3)) + \mathcal{U}(\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3) \quad (3.1.37)$$

Suprimimos de novo a dependência temporal para poder escrever uma fórmula que caiba numa linha, mas é claro que os operadores dependem do tempo e que \mathcal{A}_a e \mathcal{U} podem ter dependências explícitas do tempo.

Reconhecemos imediatamente a correspondência deste operador de Hamilton com a função de Hamilton da mecânica clássica de uma partícula não-relativística eletricamente carregada num campo eletromagnético externo.

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qU \quad (3.1.38)$$

Para uma partícula carregada com carga q podemos considerar os produtos de carga com potencial vetor e potencial escalar como as “sombras clássicas” que os verdadeiros objetos $\mathcal{A}_a(\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3)$ e $\mathcal{U}(\mathcal{X}^1, \mathcal{X}^2, \mathcal{X}^3)$ deixam no setor de fenômenos que permitem uma descrição clássica da partícula. O operador (3.1.37) foi deduzido sem a ajuda da correspondente expressão clássica.