Mecânica Clássica e Quântica

Gustavo Benitez Alvarez

Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia
Universidade Federal Fluminense

2026 - Notas de Aula: Aula 6

Formulações da Mecânica Clássica

1. Formulação Newtoniana

2. Formulações Baseadas em Princípios Variacionais
   - Formulação Lagrangiana (Mecânica Clássica ou Analítica)
   - Formulação Hamiltoniana (Mecânica Clássica ou Analítica)

Mecânica Newtoniana: Leis de Newton são Empíricas.

Primeira Lei (Inércia): Todo corpo continua em seu estado de repouso ou de movimento uniforme em uma linha reta, a menos que seja forçado a mudar aquele estado por forças (força resultante externa) aplicadas sobre ele. (Sistema de referência Inercial)

Segunda Lei (Dinâmica): A mudança de movimento é proporcional à força motora imprimida, e é produzida na direção de linha reta na qual aquela força é aplicada.

Força resultante $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(m\vec{v})}{dt}$, onde $\vec{p} = m\vec{v}$ é o momento linear, m é a massa da partícula, $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ é a velocidade linear, t é o tempo. Massa, comprimento e tempo são as grandezas fundamentais. Força é uma grandeza derivada das grandezas fundamentais.

Terceira Lei (Ação e Reação): A toda ação há sempre uma reação oposta e de igual intensidade: as ações mútuas de dois corpos um sobre o outro são sempre iguais e dirigidas em sentidos opostos

O Estado do Sistema é determinado conhecendo a posição $\vec{r} = (x(t), y(t), z(t))$ em cada instante de tempo t. É formulada usando um sistema de referência com eixos cartesianos que podem ser trocadas por outras coordenadas para facilitar a resolução matemática do problema. Para determinar o Estado do Sistema (solução única) é necessário fornecer as Condições Iniciais: $\vec{r}(t = 0) = \vec{r}(0)$ e $\vec{v}(t = 0) = \vec{v}(0)$.

Tópicos

Mecânica Lagrangiana: Princípio Variacional Não Empírico.

Princípio de Ação Mínima de Hamilton: Dentre todas as trajetórias possíveis conectando as coordenadas generalizadas iniciais $q_i(t_1)$ às finais $q_i(t_2)$ do sistema, a trajetória real corresponde aquela que torna nula a primeira variação da Ação $\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)dt = \int_{t_1}^{t_2}(T - U)dt$, ou seja, $\delta\mathcal{A} = 0$.

Minimizar o Funcional Ação é equivalente a resolver as Equações de Euler-Lagrange:

$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}_i}\right) - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_i} = 0$, onde $\mathcal{L} = T - U$, T é a energia cinética e U é a energia potencial.

Para N graus de liberdades, o Estado do Sistema é determinado conhecendo as coordenadas $q_1(t), q_2(t), \ldots, q_N(t)$ em cada instante de tempo t (Espaço de Configuração). É formulada usando um sistema de coordenadas generalizadas q_i.

O Princípio de Mínima Ação de Hamilton é equivalente às Leis de Newton.

Para determinar o Espaço de Configuração do Sistema (solução única) é necessário fornecer as Condições Iniciais: $q_i(t = 0) = q_i(0)$ e $\dot{q}_i(t = 0) = \dot{q}_i(0)$ com $i = 1, \ldots, N$. Portanto, é necessário resolver um sistema de N equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no tempo.

Tópicos

Mecânica Hamiltoniana: Princípio Variacional Não Empírico.

Na formulação Lagrangiana para determinar o Estado do Sistema é necessário resolver um sistema de N equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no tempo.

Este formalismo pode ser modificado matematicamente para ter que resolver um sistema de $2N$ equações diferenciais ordinárias de primeira ordem no tempo. A formulação Hamiltoniana permite fazer esta modificação matemática.

Deve ser ressaltado que do Ponto de Vista Físico, os três formalismos são equivalentes (Newtoniano, Lagrangiano e Hamiltoniano). Isto é, quando aplicado a um problema específico, os três formalismos fornecem a mesma solução. Entretanto, como são formalismos matemáticos diferentes, eles podem apresentar vantagens e desvantagens quando comparados.

Outro destaque que deve ser ressaltado é a ordem cronológica do surgimento destas formulações. Primeiro surgiu a mecânica Newtoniana, posteriormente foi postulada a mecânica Lagrangiana, e depois surgiu o formalismo Hamiltoniano.

O formalismo Lagrangiano usa a Lagrangiana do sistema. O formalismo Hamiltoniano usa a Hamiltoniana do sistema, que pode ser obtida a partir de Lagrangiana.

Entretanto, o formalismo Hamiltoniano estabeleceu os fundamentos para o desenvolvimento da mecânica estatística e a mecânica quântica.

Equações de Hamilton.

O funcional Hamiltoniano pode ser obtido a partir da Lagrangiana por meio da Transformação de Legendre.

Note que o formalismo Lagrangiano usa as variáveis q_i (coordenadas generalizadas) e $\dot{q}_i$ (velocidades generalizadas), já que a Lagrangiana depende destas variáveis $\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$.

O formalismo Hamiltoniano usa as variáveis q_i (coordenadas generalizadas) e p_i (momentos conjugados), já que o Hamiltoniano dependerá destas variáveis $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$.

Então, partindo do formalismo Lagrangiano, primeiro é necessário fazer esta troca de variáveis: $\dot{q}_i$ por p_i. Lembrando que o momento conjugado da coordenada generalizada q_i foi definido como $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$, assim temos p_i em função das variáveis q_i, $\dot{q}_i$ e t.

Precisamos da transformação inversa $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ para poder trocar $\dot{q}_i$ por p_i na Lagrangiana e obter o novo funcional Hamiltoniano que dependa de q_i e p_i.

Existe um teorema matemático (Teorema da Função Implícita) que garante a existência destas duas transformações de variáveis $p_i = p_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ e $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$.

Equações de Hamilton.

O Teorema da Função Implícita estabelece que estas duas transformações de variáveis $p_i = p_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ e $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ existem num ponto $(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ do Espaço de Configuração do sistema se se verificam as seguintes duas condições:

i) as funções $p_i = p_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ e $\frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_i}$ são contínuas na vizinhança deste ponto,

ii) a Matriz Hessiana avaliada neste ponto definida como $W_{k,i} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_i}$ é não singular, ou seja, $\det(W) \neq 0$ neste ponto.

Assim, a dinâmica do sistema pode agora ser descrita com o novo funcional Hamiltoniano definido como:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t). \qquad (1)$$

Note que partindo do Lagrangiano e usando a transformação inversa $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ é possível obter o Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$. Lembrando que este Hamiltoniano é semelhante ao funcional $\mathcal{E}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ da Aula 5 (**Integral de Jacobi**), o qual depende das variáveis q_i, $\dot{q}_i$ e não das variáveis q_i, p_i.

Então, as novas equações de movimento do sistema podem ser obtidas calculando o diferencial total de primeira ordem em ambos lados da Equação (1).

Equações de Hamilton.

Sabendo que o diferencial total para qualquer função $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ é

$$d\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} dp_j \right] + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} dt \text{ (diferencial do lado esquerdo).} \quad (2)$$

Logo, o diferencial total da Lagrangiana $\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ é

$$d\mathcal{L} = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j \right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt. \quad (3)$$

E o diferencial do termo $\sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i$ é

$$d\left[\sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i \right] = \sum_{j=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \left[p_i \delta_{ij} d\dot{q}_i + \dot{q}_i \delta_{ij} dp_i \right] = \sum_{j=1}^{N} \left[p_j d\dot{q}_j + \dot{q}_j dp_j \right]. \quad (4)$$

Portanto, o diferencial do lado direito da Equação (1) é igual à Eq. (4) - Eq. (3)

$$d\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N} [\underbrace{\left(p_j - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right)}_{=0 \Rightarrow p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}} d\dot{q}_j + \dot{q}_j dp_j - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} dq_j] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt = \sum_{j=1}^{N} \left[\dot{q}_j dp_j - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} dq_j \right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt.$$

Equações de Hamilton.

Usando as Equações de Euler-Lagrange $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = 0$, segue que $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}\right) = \dot{p}_j$. Então, o diferencial do lado direito da Equação (1) pode ser reescrito como:

$$d\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N}\left[\dot{q}_j dp_j - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} dq_j\right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt = \sum_{j=1}^{N}\left[\dot{q}_j dp_j - \dot{p}_j dq_j\right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt. \tag{5}$$

Como o diferencial de ambos lados da Equação (1) devem ser iguais, então comparando as Equações (2) e (5) obtemos as **Equações de Hamilton** ou **Equações Canônicas de Hamilton**:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}, \tag{6}$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}. \tag{7}$$

Também, é obtida outra equação

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}, \tag{8}$$

a qual está relacionada com a derivada total de $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ com respeito ao tempo.

Equações de Hamilton.

Lembrando que a derivada total de $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ com respeito ao tempo é

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \dot{p}_j \right]. \tag{9}$$

Substituindo as Equações de Hamilton ($\dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}$ e $\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}$) na Equação (9) obtemos:

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N} \left[\underbrace{-\dot{p}_j \dot{q}_j + \dot{q}_j \dot{p}_j}_{=0} \right] = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}. \tag{10}$$

Portanto, se a Lagrangiana do sistema não depende explicitamente do tempo, então a Hamiltoniana também não depende explicitamente do tempo, e se conserva.

Assim, na formulação Hamiltoniana as variáveis **q** e **p** são independentes entre si, e são chamadas de **variáveis canônicas conjugadas**, as quais formam o chamado **Espaço de Fase** do sistema. Isto é, o estado do sistema é determinado pelas coordenadas generalizadas q_i e seus momentos canônicos conjugados p_i em cada instante de tempo t.