

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

Invariantes de *Ermakov - Lewis* e a formulação causal da Mecânica Quântica

Gabriel Silveira Ramos

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado para
a obtenção do grau de Bacharel no Curso de Física
Orientador: Prof. Dr. Emerson Gustavo de Souza
Luna

Porto Alegre - RS

Dezembro de 2017

Agradecimentos

Família *Peirano* por me oferecer abrigo no começo da graduação.

Felipe Tomazoni pela amizade, estudos, descontração, e é claro, pela ajuda com o *Abstract*.

Diego Pierozan, Júlia Schreiner, João Paulo Port, Lars Sanhudo, Henrique Mezzomo e Júlio Broliato, tanto pelos momentos de descontração, como pelos de conversa e reflexão.

Minha família em geral, principalmente pelo apoio financeiro oferecido por *Iana Mota, Alex Ferraz e Joanira Broliato*.

Sheila Krigger, pelo amor, e pela ajuda com as referências.

Juliana Harmatiuk, pelos estudos e por me oferecer um *template* tão elegante.

Todos os meus colegas, pelas discussões, resoluções, noites viradas, festas comemoradas e por fim a amizade proporcionada.

Aos professores do instituto de física, em especial *Ricardo Rego*, pela paciência e esforço, e *Emerson Luna*, por me apresentar o tema desse trabalho e me orientar em sua construção.

Nicolas Muller por ser um ótimo professor e amigo.

Família *Krigger* pelo cuidado.

Aos meus pais, *Jomar Ramos* e *Nice Ramos*, por investirem fisicamente e financeiramente o que possuíam (e também o que não possuíam), para eu completar a minha formação.

Resumo

Esse trabalho tem como objetivo utilizar dos conceitos básicos propostos pela formulação causal proposta por *David Bohm* em um problema bem conhecido da forma usual da mecânica quântica, o oscilador harmônico dependente do tempo. Para esse problema, utiliza-se o método das invariantes exatas, que por motivos conceituais nesse trabalho será chamado de *Invariante de Ermakov-Lewis*. Esse invariante é uma grandeza dinâmica que não varia no tempo e pode ser utilizada na resolução do problema do oscilador harmônico dependente do tempo.

Abstract

This work aims to use the basic concepts proposed by *David Bohm's* causal formulation in a well-known problem of the usual form of quantum mechanics, the time-dependent harmonic oscillator. For this problem, we use the exact invariant methods, which for conceptual reasons in this work will be called the *Ermakov-Lewis* Invariant. This invariant is a dynamic quantity that does not vary in time and can be used in solving the problem of the time dependent harmonic oscillator.

Sumário

1	Introdução	6
2	Fundamentos	9
2.1	Dinâmica de <i>Lagrange</i> e <i>Hamilton</i>	9
2.2	A Função de Onda e a Equação de <i>Schrödinger</i>	11
2.3	As Invariantes de Ermakov-Lewis	14
3	A Formulação Causal	16
3.1	Postulados Básicos	16
3.2	Reformulação da equação de <i>Schrödinger</i>	17
3.3	O Potencial Quântico	19
3.4	Analogia com Hidrodinâmica	21
3.5	Versões não lineares da equação de <i>Schrödinger</i>	22
3.5.1	Equação de <i>Bateman-Caldirola-Kanai</i>	22
3.5.2	Equação de <i>Bialynicki-Birula-Mycielski</i>	24
4	Determinação das Invariantes de Ermakov-Lewis na Representação Causal	25
4.1	Invariante resultante da equação de <i>Schrödinger</i> Linear	26
4.2	Invariante resultante da equação de <i>Bateman-Caldirola-Kanai</i>	30
4.3	Invariante resultante da equação de <i>Bialynicki-Birula-Mycielski</i>	32
5	Conclusão	34
A	O Oscilador Harmônico Simples	35
B	A substituição $R^2 = \rho(x, t)$	37

Capítulo 1

Introdução

No começo do século XIX, parte da comunidade científica buscava uma explicação para um conjunto de fenômenos que discordavam (e discordam) da chamada *Física Clássica*, que abrange as leis de *Newton* para o movimento de sistemas de partículas, as equações de *Maxwell*, que governam a propagação de campos eletromagnéticos, e a *Termodinâmica*, responsável pela compreensão das causas e efeitos referentes às mudanças na temperatura, pressão e volume. Esses ramos físicos descrevem o comportamento de sistemas macroscópicos clássicos. As respostas para o entendimento dos fenômenos em questão desencadeou o desenvolvimento da *Mecânica Quântica*, a teoria do mundo microscópico. Enquanto a mecânica clássica configura padrões contínuos e determinísticos, a mecânica quântica é essencialmente discreta e estatística. Os efeitos quânticos são aparentemente indeterminados, eventos atômicos individuais são imprevisíveis, incontroláveis e não possuem causa [1]. A mecânica quântica apenas é bem sucedida no uso da média de *ensemble*, ou seja, na análise estatística dos resultados obtidos de um conjunto de sistemas identicamente preparados.

Em 1935, *A. Einstein*, *B. Podolski* e *N. Rosen* publicaram um artigo contestando a completude da *Mecânica Quântica* [2], onde propunham um experimento mental chamado de **paradoxo EPR**, que tinha como principal objetivo provar que a única interpretação sustentável no universo quântico, é a *realista*, em contraste total com a escola de *Copenhague*.

Uma simplificação do paradoxo EPR, de autoria de *David Bohm* [3], que foca o processo de medição no spin de uma partícula, consiste em um decaimento do méson pi, por exemplo, em um elétron e em um pósitron

$$\pi^0 \rightarrow e^- + e^+ \tag{1.0.1}$$

Se o pión está em repouso, o elétron e o pósitron se movem em direções opostas, devido a conservação do *momentum* linear. Além disso, o pión tem spin 0, de forma que a conservação do *momentum* angular exige que pósitron e elétron estejam na configuração singleto, ou seja, o estado correlacionado do sistema pode ser escrito na forma:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle_- |\downarrow\rangle_+ - |\downarrow\rangle_- |\uparrow\rangle_+] \quad (1.0.2)$$

Dessa forma, se o elétron possuir spin para cima, o pósitron possui spin para baixo, e vice-versa. O corpo teórico da mecânica quântica é incapaz de prever qual combinação é obtida em uma medição, ela apenas prevê que na média teremos a metade de cada caso. Nesse experimento, a distância que as partículas percorrem é arbitrária, ou seja, ao medir o spin do elétron, para cima por exemplo, saberemos o spin do pósitron, para baixo, via conservação do *momentum* angular, sem inferir a esta partícula nenhum processo de medição, esteja ela a 10 m, ou a 10 anos-luz. Agora, o argumento da escola realista com esse experimento é de que o elétron realmente possuía spin para cima (e para baixo no caso do pósitron), no momento em que foram criados, e a interpretação ortodoxa desse problema teria um custo: para que a conservação do *momentum* angular fosse respeitada, o colapso da função de onda pelo experimentador que realizou a medição do spin do elétron deveria se mover com uma velocidade maior do que a da luz, o que *Bohm* chamou mais tarde de *não localidade*. Uma vez que a teoria quântica não prevê o resultado de uma medição com precisão, e a localidade deve ser respeitada, os autores do experimento EPR afirmavam que a mecânica quântica na sua forma atual era incompleta.

A mecânica clássica também assume alguns aspectos estatísticos bem comportados. Por exemplo, ao jogarmos pro ar uma moeda não viciada, teremos igual probabilidade de obter cara ou coroa, entretanto, se soubermos a força aplicada na moeda, a aceleração da gravidade no local, a viscosidade do ar, a altura em que se encontra a moeda a temperatura do ar, entre outras variáveis, é possível determinar com precisão a face revelada pela moeda ao tocar o chão. Com base nesse argumento, após a publicação do paradoxo EPR, a comunidade científica buscou completar a mecânica quântica com o auxílio de novas variáveis que ficaram conhecidas como variáveis ocultas. A teoria mais bem aceita de variáveis ocultas, compatível com a mecânica quântica, é proposta por *David Bohm* [4], que a batizou como *a formulação causal da mecânica quântica*.

Para *David Bohm* a principal carência da teoria quântica é a descrição dos eventos individuais reais da experiência, dos quais os fenômenos estatísticos seriam funções. O desafio era o desenvolvimento de uma teoria dos sistemas materiais individuais [1]. A publicação de sua teoria, inspirou o físico *John Stewart Bell* [5], que mais tarde publicou um artigo que propunha a montagem de um experimento que seria capaz de julgar a compatibilidade de uma teoria de variáveis ocultas locais com a mecânica quântica, compatibilidade nunca verificada até a atualidade, ou seja, para que a teoria de variáveis ocultas seja consistente, ela deve ser essencialmente *não local*.

No desenvolvimento da física, os cientistas sempre buscaram e buscam simetrias, primeiros princípios e grandezas quantitativas às quais pode-se associar um princípio de conservação. Em relação a esse último, vale mencionar o sucesso na descrição de modelos clássicos, quânticos e relativísticos que respeitam a conservação de energia, *momentum* linear e *momentum* angular. O princípio de conservação de grandezas físicas é portanto uma ferramenta poderosa na previsão de fenômenos e entendimento das mesmas. No âmbito da mecânica clássica e da mecânica quântica,

grande parte dos hamiltonianos são dependentes do tempo, e logo, não verificamos nem conservação de *momentum* linear, nem da energia mecânica. Essa limitação inspirou físicos a procurar outras grandezas invariantes em uma evolução temporal.

O trabalho de H. R. Lewis [6] e H. R. Riesenfeld [7] visava encontrar invariantes dinâmicas as quais receberam o nome de *Invariantes Exatas* no problema do *oscilador harmônico dependente do tempo* (OHDT). Para esse sistema, Lewis verificou a seguinte invariante:

$$I = \frac{1}{2} \left[(\dot{q}\alpha - \dot{\alpha}q)^2 + c \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \right]. \quad (1.0.3)$$

Neste caso o OHDT configura um sistema de Ermakov [8] generalizado, sistema físico dotado de uma frequência que não depende apenas do tempo, mas também das variáveis dinâmicas e suas derivadas [9].

Tendo em mente os pontos tratados até o momento, esse trabalho consiste na discussão da formulação causal da mecânica quântica, com uma breve discussão sobre seus princípios e formulações sem nenhuma pretensão de esgotar o assunto, visando verificar e encontrar nesse formalismo (se possível) o que chamaremos de invariantes de *Ermakov-Lewis* na equação de *Schrödinger* linear e em mais duas equações, que serão discutidas no corpo do trabalho. Este estudo foi baseado principalmente nas referências [1] e [10].

Capítulo 2

Fundamentos

Este capítulo tem como objetivo introduzir o arcabouço teórico utilizado no decorrer do trabalho, introduzindo os conceitos básicos das teorias físicas convencionais utilizadas junto da representação causal, que será sucintamente discutida no capítulo 3.

2.1 DINÂMICA DE *Lagrange* E *Hamilton*

Na mecânica clássica o estado físico de um sistema é dado por $\vec{r}(t)$ onde¹:

$$\vec{r}(t) = \langle x(t), y(t), z(t) \rangle, \quad (2.1.1)$$

representa o vetor posição em coordenadas cartesianas, e $\vec{p}(t)$:

$$\vec{p}(t) = \langle p_x(t), p_y(t), p_z(t) \rangle \quad (2.1.2)$$

é o vetor *momentum* linear.

O conhecimento prévio das seis funções mencionadas é equivalente ao total conhecimento de um dado sistema clássico de uma única partícula.

Na falta das funções, devemos coletar as informações referentes ao tempo de extração da medida, ou seja, as condições iniciais, e então fazer uso da segunda lei de *Newton*, dada por

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}, \quad (2.1.3)$$

a fim de determinar $\vec{r}(t)$ e $\vec{p}(t)$.

Esse procedimento confere à mecânica racional o formalismo *newtoniano*. Uma forma alterna-

¹No corpo do trabalho, grande parte dos problemas resolvidos são unidimensionais. Porém, a generalização para 3 dimensões é direta. Logo, sempre que for citado a variável x , significa a posição unidimensional em coordenadas cartesianas. Existem, é claro, casos durante o texto em que a generalização para três dimensões foi realizada. Nesse caso, empregou-se, também em coordenadas cartesianas, o vetor posição \vec{r} .

tiva na descrição de um sistema clássico é o uso do formalismo *lagrangiano* [11] na formulação do problema. Ele provém da definição da quantidade lagrangiana \mathcal{L} do sistema, que em alguns casos pode ser escrita na forma

$$\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t) \doteq T - U, \quad (2.1.4)$$

onde T é a energia cinética do sistema (que pode depender de q_i e \dot{q}_i), enquanto U é a energia potencial (que pode depender de q_i e eventualmente do tempo t). Nesta notação q_i é a coordenada generalizada, com $i = 1, 2, \dots, n$, onde n é o chamado *grau de liberdade* e o ponto indicado acima de uma coordenada generalizada representa uma derivação temporal. A fim de simplificar as deduções a seguir², não associamos uma dependência explícita do tempo à $\mathcal{L}(q, \dot{q}; t)$, além disso, consideramos o caso onde $n = 1$, fazendo com que $q_1 \doteq q$ e $\dot{q}_1 \doteq \dot{q}$. Nesse formalismo, utilizamos a equação de movimento de *Euler-Lagrange*, que diz

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (2.1.5)$$

Assim como no caso da segunda lei de *Newton*, recaímos em uma equação diferencial ordinária de segunda ordem. Definimos a quantidade de movimento generalizada como

$$p \doteq \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 \right] = m \dot{q} \quad (2.1.6)$$

A equação de movimento de *Lagrange* é expressa por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = - \frac{\partial}{\partial q} U = F = \dot{p} \quad (2.1.7)$$

Definimos a quantidade \mathcal{H}

$$\mathcal{H}(q, p; t) = p \dot{q} - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t) \quad (2.1.8)$$

A diferencial total

$$d\mathcal{H} = p d\dot{q} + \dot{q} dp - \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} dq}_{\dot{p} dq} - \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} d\dot{q}}_{p d\dot{q}} \quad (2.1.9)$$

Daí

$$d\mathcal{H} = \dot{q} dp - \dot{p} dq \quad (2.1.10)$$

Escrevendo a equação (2.1.8) como uma função unicamente das variáveis p e q , $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p; t)$ verificamos o diferencial total

$$d\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} dq + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} dp \quad (2.1.11)$$

²De fato essas considerações afetam radicalmente a generalidade do formalismo, entretanto, não teremos nenhuma perda que afete o escopo desse trabalho

Comparando as equações (2.1.10) e (2.1.11), identificamos as equações canônicas de *Hamilton*:

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \quad (2.1.12)$$

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \quad (2.1.13)$$

A função \mathcal{H} é o chamado *hamiltoniano* do sistema e em um sistema conservativo, podemos escrever

$$\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + U(q) \quad (2.1.14)$$

O uso do hamiltoniano e das equações de movimento fornecidas por essa quantidade, configura o formalismo *hamiltoniano* da mecânica racional. As vantagens da formulação clássica de *Hamilton* é evidenciada pelo próprio hamiltoniano, que em geral, é a energia total do sistema, possuindo um sentido físico mais usual que a lagrangiana, além disso, recaímos em duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, diferentemente da equação de *Euler-Lagrange* e da equação de *Newton*. Nos casos mais simples, os três formalismos são equivalentes, embora a escolha de um, ou de outro, facilite ou dificulte a análise do sistema escolhido.

Outra grandeza referente a dinâmica de *Hamilton-Lagrange* de suma importância no desenvolvimento desse trabalho é o funcional *ação*, S , que está intimamente ligado ao princípio de *Hamilton* e à lagrangiana do sistema. Esse funcional é definido pela expressão:

$$S = S[q(t)] = \int_{t_0}^t \mathcal{L}(q_i(t), \dot{q}_i(t)) dt \quad (2.1.15)$$

Essa grandeza traduz o caráter integral da dinâmica racional, e é equivalente as representações até então apresentadas, ou seja, as derivadas funcionais de S em relação às componentes de $q(t)$ são dadas explicitamente por

$$\frac{\delta S}{\delta q(t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right). \quad (2.1.16)$$

2.2 A FUNÇÃO DE ONDA E A EQUAÇÃO DE *Schrödinger*

A teoria quântica possui uma conexão à teoria clássica pelo processo matemático de 'quantização', onde as variáveis clássicas são substituídas por operadores, e uma relação de conjugação canônica é estabelecida. Esse processo gera um novo objeto matemático, que é onde aplicamos os operadores de interesse: a *função de onda* $\psi(\vec{r}, t)$. Essa função possui suma importância na mecânica quântica, pois diferentemente da mecânica clássica onde o estado físico era dado pelas componentes do vetor posição e do vetor *momentum* linear, o estado físico de um sistema quântico é dado pela função de onda.

A função de onda possui uma série de propriedades centrais no desenvolvimento do caráter estatístico intrínseco à quântica iniciando pelo seu módulo quadrado que descreve a probabilidade

de encontrar a partícula entre a posição \vec{r} e $\vec{r} + d\vec{r}$ no instante t . Temos

$$P(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} \quad (2.2.1)$$

Ou seja, se é de nosso interesse analisar a probabilidade de encontrar a partícula entre os pontos a e b , denotada P_{ab} . A probabilidade, no caso unidimensional, é expressa por:

$$P_{ab} = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx \quad (2.2.2)$$

Essa é a chamada interpretação de *Born* [12].

Para a função de onda discutida até o momento utilizamos a chamada 'representação da posição', que é uma das bases que podemos escrever a função de onda. A verdade é que existem várias bases para denotar a função de onda, que pode ser escrita de uma forma mais geral como $|\psi\rangle$. Essa é a notação de *brackets* introduzida por *P. Dirac* [13] onde a função de onda é um *vetor* que pode ser projetado em uma dada *base*. Na representação da posição, por exemplo, que nada mais é que uma base para representar a função de onda, projetamos a função de onda na representação da posição a partir do produto interno dado por

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (2.2.3)$$

Os termos 'vetor', 'produto interno' e 'base' não são utilizados em vão, pois $|\psi\rangle$ está contida em um espaço vetorial N -dimensional denominado espaço de *Hilbert* \mathcal{H} , onde todas as regras vetoriais são empregadas. A principal operação nesse espaço é o produto interno $\langle f | g \rangle$ que resulta em um número complexo. Na representação da posição, escrevemos o produto interno como:

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f(x)^* g(x) dx \quad (2.2.4)$$

O espaço de *Hilbert* é o espaço vetorial das funções quadrado-integráveis, disso decorre que $f(x) \in \mathcal{H}$ se e somente se:

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \quad (2.2.5)$$

Felizmente isso condiz com a interpretação de *Born*, pois como o módulo quadrado da função de onda descreve uma densidade de probabilidade, o mesmo deve ser normalizado, garantindo pertinência no espaço de Hilbert. Daí

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (2.2.6)$$

Todos os observáveis de interesse são representados por operadores lineares hermitianos atuando no espaço \mathcal{H} . Daí, decorre definir o *operador momentum linear canônico* na representação de posição:

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p} \doteq -i\hbar\nabla \quad (2.2.7)$$

Nessa equação, $i \doteq \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária, \hbar é a constante de *Planck* racionalizada por 2π :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0545718 \cdot 10^{-34} \frac{J}{s}.$$

Por fim, ∇ é o operador gradiente em coordenadas cartesianas:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \hat{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \hat{e}_z \quad (2.2.8)$$

A rigor, todas as variáveis clássicas de interesse são relacionadas ou ao *momentum* linear, ou a posição da partícula, ou a ambos. O processo de quantização consiste em escrever a quantidade clássica a ser mensurada, a qual chamaremos de *observável*, em função da posição e do *momentum* e por fim realizar a substituição do respectivo operador, que pode variar de acordo a representação adotada. Ou seja:

$$A(p, x) \rightarrow \hat{A}(\hat{p}, \hat{x}) \quad (2.2.9)$$

Denotaremos o operador correspondente á variável clássica A, por \hat{A} .

O resultado da medida do observável \hat{A} , é algum dos seus autovalores a , dados pela equação:

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (2.2.10)$$

Nessa equação, $|a\rangle$ é o autovetor ou autoestado correspondente ao autovalor a , real³. Na representação da posição, podemos escrever $\langle x|a\rangle = \psi_a(x)$. As autofunções correspondentes a autovalores distintos a, a' , são ortonormais. Isto é:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{a'}^*(x) \psi_a(x) dx = \delta_{a'a} \quad (2.2.11)$$

A consequência direta da ortonormalidade consiste no fato de que o conjunto de todos os autoestados é *completo*, no sentido que podemos escrever a função de onda como uma combinação linear dos seus autoestados, ou seja:

$$\psi(x) = \sum_a c_a \psi_a(x), \quad (2.2.12)$$

onde c_a são números complexos. Temos $c_a = \langle a|\psi\rangle$, onde os c_a , são componentes do vetor $|\psi\rangle$ em respeito a base $|a\rangle$ em \mathcal{H} . Agora, se considerarmos a medida de \hat{A} , em um sistema devidamente normalizado, a probabilidade de medirmos a é dada por $|c_a|^2$.

A média de *ensemble* de um observável, ou o chamado *valor esperado* do observável \hat{A} é dado por:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_a a |c_a|^2 \quad (2.2.13)$$

Na mecânica quântica, o hamiltoniano clássico também pode ser expresso em função de operadores,

³Assumimos um espectro discreto e ignoramos a possível degenerescência, onde auto-estados diferentes correspondem ao mesmo auto-valor

resultando no *operador hamiltoniano* $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r}; t) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\hat{r}, t), \quad (2.2.14)$$

A equação diferencial que determina a evolução temporal do estado físico é a *equação de Schrödinger*:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t); \quad (2.2.15)$$

que pode ser escrita em função do operador hamiltoniano:

$$i\hbar \dot{\psi} = \hat{\mathcal{H}} \psi \quad (2.2.16)$$

Em contrapartida á dinâmica clássica, temos uma equação diferencial parcial de primeira ordem em relação ao tempo, em segunda ordem em relação a posição e complexa. Essa equação possui duas propriedades importantes:

(i) As soluções admitem uma superposição linear. Se ψ_1 e ψ_2 são soluções, então:

$$\psi(x, t) = c_1 \psi_1(x, t) + c_2 \psi_2(x, t) \quad (2.2.17)$$

é solução também. Nessa expressão c_1 e c_2 são constantes complexas.

(ii) A hermiticidade de $\hat{\mathcal{H}}$ implica na conservação da probabilidade:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 0 \quad (2.2.18)$$

Ou seja, a densidade de probabilidade é constante no tempo.

2.3 AS INVARIANTES DE ERMAKOV-LEWIS

Para resolver a equação de *Schrödinger*, é necessária a formulação do hamiltoniano do sistema que, em geral, é dependente do tempo em sistemas mais complexos. Essa dependência temporal tende a complicar a resolução da equação, ou impossibilitar a mesma. Na grande gama de problemas dependentes do tempo, recaímos em sistemas não integráveis, que exigem do método da *perturbação dependente do tempo* para que se possa extrair informação física do sistema em questão. Esse método é o mais utilizado na falta de uma solução exata e portanto é um método aproximativo.

Tendo em mente as dificuldades encontradas em um hamiltoniano dependente do tempo, é de grande interesse a busca por variáveis dinâmicas constantes no tempo. Dessa necessidade emerge o conceito de *invariante exata*, ou *constante de movimento exata*. Essa invariante, sugestivamente notada por I , deve ser invariante no tempo, ou seja:

$$\frac{dI}{dt} = 0 \quad (2.3.1)$$

Por exemplo, no problema do *oscilador harmônico* discutido no Apêndice A, verificamos a conservação da energia mecânica, logo, hamiltoniano não varia com o tempo. Uma modelagem mais abrangente do problema é o OHDT, onde agora, a energia mecânica não é conservada, a frequência angular depende do tempo. Nesse problema, consideramos a energia potencial:

$$V(x, t) = \frac{1}{2} m \omega^2(t) x^2 \quad (2.3.2)$$

Felizmente, para esse sistema, a conservação do *momentum* angular [14] confere a conservação de outra variável dinâmica I:

$$I = \frac{1}{2} \left[(\dot{q}\alpha - \dot{\alpha}q)^2 + c \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \right] \quad (2.3.3)$$

onde c é uma constante arbitrária e as coordenadas generalizadas q e α possuem as restrições

$$\ddot{q} + q\omega^2(t) = 0 \quad \ddot{\alpha} + \omega^2(t)\alpha = \frac{c}{\alpha^3} \quad (2.3.4)$$

Elevando I á um patamar de operador obtemos com sucesso um novo método para a resolução exata do OHDT unidimensional.

Entretanto, esse recurso funciona muito bem na forma tradicional da mecânica quântica. Uma vez que a formulação causal é bem estabelecida, o principal objetivo desse trabalho é a determinação das invariantes *exatas*, I , no sistema OHDT, um sistema de *Ermakov*, por isso adotamos o nome de Invariante de *Ermakov-Lewis* na formulação causal da mecânica quântica. Esse formalismo terá seus postulados básicos, equações de evolução temporal, entre outras propriedades brevemente discutidas no próximo capítulo.

Capítulo 3

A Formulação Causal

Os pioneiros no desenvolvimento das ideias centrais da formulação causal foram o físico francês, titular do prêmio nobel em física de 1929, *Louis de Broglie* e o físico alemão *Erwin Madelung*, isso em 1927, entretanto, a axiomatização e teorização das ideias propostas por *de Broglie-Madelung* foi concretizada em 1952 por *David Bohm*. De acordo com os fundadores, a novidade da mecânica quântica não deveria forçar uma reformulação dos conceitos pré estabelecidos dos sistemas físicos previamente conhecidos, mas sim, suplementar o novo tipo de campo físico matematicamente descrito pela função de onda de *Schrödinger*. A onda guia a partícula, que performa movimentos quânticos contrariando a concepção clássica de propagação. A distribuição de probabilidades quântica é evidenciada pois a órbita da partícula tende a convergir onde a onda é mais intensa. Logo, a especificação do estado individual sistemático **deve** possuir ambos os aspectos: não onda ou partícula, mas ambos. A composição onda-partícula deve evoluir continuamente de acordo a leis determinísticas.

A interpretação de *Born* condiz perfeitamente com os dados experimentais, entretanto, *de Broglie-Bohm* não excluíram a probabilidade de que a função de onda possuísse outras propriedades que não fossem exclusivamente estatísticas, tendo isso em mente, veremos primeiro os postulados fundamentais da formulação causal da mecânica quântica.

3.1 POSTULADOS BÁSICOS

Os postulados básicos da formulação causal da mecânica quântica são quatro no total, listados abaixo.

- (I). Um sistema físico individual compreende uma onda propagando no espaço-tempo somada a uma partícula que move-se continuamente sob orientação da onda.
- (II). A onda é matematicamente descrita por $\psi(\vec{r}, t)$, uma função de onda que é solução da equação de *Schrödinger*. O vetor \vec{r} representa a posição em coordenadas cartesianas.
- (III). O movimento da partícula é extraído de $\vec{r}(t)$ solução da equação:

$$\vec{v}_q \doteq \vec{f} = \frac{1}{m} \nabla S(\vec{r}, t)|_{\vec{r}=\vec{r}(t)} \quad (3.1.1)$$

Onde $S(\vec{r}, t)$ é a ação clássica definida anteriormente e também a fase de $\psi(\vec{r}, t)$ (a menos de um fator \hbar) e \vec{v}_q é a velocidade quântica. Para resolver esta equação, temos de especificar a condição inicial $\vec{r}(0) = \vec{r}_0$. Essa especificação constitui a única informação extra introduzida pela teoria que não é contida na função de onda.

(IV). A probabilidade da partícula em um respectivo *ensemble* estar contida em um volume d^3x centrado em \vec{r} no tempo t é dada por

$$R^2(\vec{r}, t) d^3x, \quad (3.1.2)$$

onde $R^2(\vec{r}, t) = |\psi|^2$.

Uma vez introduzidos os postulados básicos, o próximo passo é reformular a equação de *Schrödinger*.

3.2 REFORMULAÇÃO DA EQUAÇÃO DE *Schrödinger*

Motivados por introduzir o conceito de partícula na mecânica quântica, iremos decompor a equação de *Schrödinger* em duas equações reais. Para isso escrevemos a função de onda na forma polar unidimensional

$$\psi(x, t) = R(x, t) e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} \quad (3.2.1)$$

Nessa forma da função de onda, $R(x, t)$ é a chamada função amplitude e $S(x, t)$ é a função fase, ambas as funções são reais. A substituição de (3.2.1) na equação de *Schrödinger* constitui um processo de transformação de uma equação diferencial parcial complexa em duas equações diferenciais reais parciais, dando a equação (3.2.1) um aspecto de transformação, por isso essa equação é conhecida como *transformada de Madelung*.

Realizando a transformação de *Madelung* teremos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} R(x, t) e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x, t) e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} + V(\vec{r}, t) R(x, t) e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} \quad (3.2.2)$$

Realizando a derivação característica em ambos os lados da equação

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} \left[\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{iR(x, t)}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right], \quad (3.2.3)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = e^{\frac{iS(x,t)}{\hbar}} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{iR(x, t)}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (3.2.4)$$

Substituindo os resultados (3.2.3) e (3.2.4) em (3.2.2) e multiplicando por $\exp\{-\frac{iS(x,t)}{\hbar}\}$, obtém-se

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} - R \frac{\partial S}{\partial t} = -i \left[\frac{\hbar}{m} \frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\hbar}{2m} R \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} R \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) \right] \quad (3.2.5)$$

Podemos associar o primeiro colchete no lado direito da equação com a parte complexa $i\hbar \frac{\partial R}{\partial t}$ e o segundo colchete com a parte real $R \frac{\partial S}{\partial t}$. Multiplicando a parte complexa por $2R$

$$-2R \frac{\partial R}{\partial t} = \frac{2R}{m} \frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{R^2}{m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (3.2.6)$$

Perceba que para o lado esquerdo da equação (3.2.6):

$$\frac{\partial}{\partial t} R^2 = 2R \frac{\partial R}{\partial t} \quad (3.2.7)$$

O lado direito é a derivada do produto de $R^2 \frac{\partial S}{\partial x}$, teremos a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} R^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{R^2}{m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (3.2.8)$$

Analisando a parte real resultante da transformação (3.2.5), podemos multiplicar a mesma por R^{-1} , gerando

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) = 0 \quad (3.2.9)$$

Podemos generalizar as equações (3.2.8) e (3.2.9) em três dimensões, gerando:

$$\frac{\partial}{\partial t} R^2 + \nabla \cdot \left(\frac{R^2 \nabla S}{m} \right) = 0 \quad (3.2.10)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} = 0 \quad (3.2.11)$$

As equações (3.2.10) e (3.2.11) configuram um par de equações diferenciais parciais acopladas onde os campos R e S se co-determinam. Veremos adiante que a primeira trata-se na realidade de uma equação de conservação, explicitada na forma da equação da continuidade, e a segunda, em uma das formas das equações de *Euler* referente a mecânica dos fluídos.

Para obter uma solução única para a equação de *Schrödinger*, para todo t , devemos especificar a função de onda inicial $\psi_0(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, 0)$ para todo \vec{r} . Equivalentemente, devemos especificar:

$$R_0(\vec{r}) = R(\vec{r}, 0), \quad S_0(\vec{r}) = S(\vec{r}, 0) \quad (3.2.12)$$

3.3 O POTENCIAL QUÂNTICO

Temos interesse em associar fisicamente a função de onda ψ que se propaga no espaço à uma partícula de massa m sujeita a trajetória $\vec{r} = \vec{r}(t)$. Para ver essa conexão, tratamos a equação (3.2.9) como um caso particular da generalização da teoria de *Hamilton-Jacobi* [1], que possui uma equação geral na forma:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V + V'(\{\partial_i S\}) \quad (3.3.1)$$

Uma breve comparação entre as equações (3.2.11) e (3.3.1) revela um termo adicional, que será definido como se segue

$$Q(\vec{r}, t) \doteq -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\vec{r}, t)}{R(\vec{r}, t)} \quad (3.3.2)$$

A função Q é chamada de *potencial quântico*. Utilizando essa notação, obtemos:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{r}, t) + Q(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.3.3)$$

Agora, vamos analisar a equação unidimensionalmente. Sabendo que $(\partial S/\partial x)^2 = v_q^2 m^2$, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} S + \frac{1}{2} m v_q^2 + Q + V = 0 \quad (3.3.4)$$

Que pode facilmente ser reescrita na forma:

$$-\frac{1}{m}(Q+V) = \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} v_q^2 \quad (3.3.5)$$

Derivando ambos os lados da equação em relação a posição, obtemos:

$$-\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q+V) = \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial t} \frac{1}{m} \right] + \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} v_q^2 \right] \quad (3.3.6)$$

Vamos analisar os dois colchetes à direita da igualdade separadamente. Para o primeiro, utilizamos propriedades intrínsecas às derivadas parciais para escrever:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x \partial t} \frac{1}{m} = \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial x} \frac{1}{m} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \right) = \frac{\partial v_q}{\partial t} \quad (3.3.7)$$

Para o segundo termo entre colchetes da equação (3.3.6), teremos:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} v_q^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q \quad (3.3.8)$$

Disso, obtemos o análogo de uma das equações de *Euler* para os fluidos na formulação quântica-

causal:

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q + V) \quad (3.3.9)$$

Essa equação pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial m v_q}{\partial t} + m v_q \frac{\partial v_q}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\partial}{\partial x} (V + Q) \quad (3.3.10)$$

Um rearranjo dos termos explicita a forma:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} \right] \frac{\partial S}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} (V + Q) \quad (3.3.11)$$

A atribuição do operador característico à derivada convectiva ou hidrodinâmica:

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.3.12)$$

Devolve uma forma da segunda lei de *Newton*:

$$\frac{d}{dt} (m \dot{x}) = -\frac{\partial}{\partial x} (V + Q) \quad (3.3.13)$$

Nesse caso, a partícula em questão move-se sob efeito de uma força quântica, em adição de uma força clássica. Perceba que mesmo quando $V = 0$, a equação de movimento da partícula é dada por:

$$m \ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x} Q \quad (3.3.14)$$

Disso concluímos que a partícula livre classicamente, não é livre quanticamente, uma vez que o potencial quântico é não nulo.

O potencial quântico Q possui quatro propriedades bem específicas, são elas:

- **Dependência com a Amplitude R :** Na definição de *intensidade*, I , de uma onda ψ , associamos I ao quadrado da amplitude, $I \propto R^2$. Tendo isso em mente, observamos que o potencial quântico independe da intensidade:

$$Q(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2(aR)}{aR} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \quad (3.3.15)$$

Ou seja, uma partícula quântica não responde à intensidade de uma onda, mas sim da sua forma.

- **Comparação com o Potencial Clássico V :** Um potencial clássico permanece distante do processo que o mesmo influencia, por isso, é uma função das coordenadas. O potencial quântico deriva do estado quântico total e do infinito conjunto de condições iniciais associadas ao mesmo problema físico.

- **Superposição:** O movimento de uma partícula associado à superposição de duas ondas na região de sobreposição (*overlap*) é muito diferente do movimento gerado pela combinação das componentes das ondas. Não é simplesmente um tipo de superposição linear [1]. Entretanto, no caso em que as ondas não se sobrepõem apreciavelmente, o potencial quântico efetivo pode ser simplesmente expresso na forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R_1}{R_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R_2}{R_2}. \quad (3.3.16)$$

O potencial Q não possui precedentes clássicos, entretanto, *Bohm* propôs uma analogia do potencial quântico com uma onda de radar, onde esse potencial seria um potencial 'informativo'. Nessa analogia, comparamos um dado sistema físico como um navio controlado a distância, embora o navio navegue pelo mar utilizando de sua energia interna, pode-se controlar o seu movimento por ondas de radar, mesmo que a energia de uma onda de radar seja insignificante frente a energia contida no navio em si. Essa analogia tenta explicar o comportamento de uma partícula imersa no potencial quântico, embora a partícula se mova com a sua própria energia, ela é guiada por Q , nesse sentido, Q não é um potencial usual que age em partículas atraindo-as ou repelindo-as, mas sim guiando-as.

3.4 ANALOGIA COM HIDRODINÂMICA

Uma das primeiras interpretações da equação de *Schrödinger* é conferida a *Madelung* [15] em seus trabalhos realizados em meados de 1926. A sua ideia consiste em aplicar a sua transformação na equação diferencial de *Schrödinger*, e a partir da definição concisa de v_q dada por (3.1.1) e $\rho = R^2$, recair na equação (3.3.9). Além disso, podemos substituir ρ e v_q na equação (3.2.8), obtendo a equação da continuidade. Ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v_q \rho(x, t)] = 0, \quad (3.4.1)$$

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q + V) \quad (3.4.2)$$

Observe que a separação da equação de *Schrödinger* resulta em duas equações de forte significado físico: (3.3.9), que é amplamente utilizada em física de fluidos e uma análise mais profunda revelou uma analogia heurística com a segunda lei de *Newton* e (3.3.15), que tem suas aplicações extrapoladas na física, revelando a conservação de certas quantidades, por exemplo, na *Teoria Eletromagnética*, a equação verifica a conservação de carga elétrica [16], no âmbito da Hidrodinâmica, verificamos a conservação de massa, e por final, na Mecânica Quântica usual, verificamos a conser-

vação de probabilidades, via interpretação de *Born*. Na formulação causal, vamos interpretar $\rho(x, t)$ com uma mescla de Hidrodinâmica e MQ, onde o papel físico de ρ é dual, pode ser interpretado como uma densidade de matéria distribuída em um espaço homogêneo e isotrópico, coeso, mas também, como uma distribuição estatística contínua para a posição de um *ensemble* de partículas como visava *Born*.

3.5 VERSÕES NÃO LINEARES DA EQUAÇÃO DE *Schrödinger*

3.5.1 Equação de *Bateman-Caldirola-Kanai*

Sabe-se que o hamiltoniano do oscilador harmônico simples¹ configura um sistema conservativo. A busca pela caracterização do sistema físico do oscilador harmônico amortecido ou dissipativo, OHA, é um problema ainda em discussão, entretanto, não faltam modelos *fenomenológicos* precisos e concisos na descrição deste problema. Um dos primeiros modelos de OHA foi desenvolvido pelos físicos, *H. Bateman* [17], *P. Caldirola* [18] e *E. Kanai* [19], em suas publicações realizadas em 1931, 1941 e 1948 respectivamente. Eles propunham um lagrangiano [20]

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = e^{\frac{\lambda t}{m}} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right], \quad (3.5.1)$$

onde λ é uma constante arbitrária.

Ao aplicarmos a transformação de *Legendre* dada por (2.1.8), com

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = p = e^{\frac{\lambda t}{m}} m \dot{q}, \quad (3.5.2)$$

obtemos o hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(p, q, t) = \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\lambda t}{m}} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 e^{\frac{\lambda t}{m}} \quad (3.5.3)$$

Após a publicação dos trabalhos citados, a comunidade científica acreditou por algum tempo que a equação (3.5.3) correspondia ao hamiltoniano real do OHA, uma vez explicitada a sua dependência com o tempo, entretanto, a atual interpretação desse sistema é de um oscilador harmônico de massa variável.

Substituindo os operadores canônicos, escrevendo um potencial geral $V(\vec{r}, t)$ e utilizando da equação de *Schrödinger*, podemos escrever

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{\lambda t}{m}} + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) e^{\frac{\lambda t}{m}}, \quad (3.5.4)$$

¹Verificar equação (A.0.5)

que nada mais é que a versão da equação de *Schrödinger* de *Bateman-Caldirola-Kanai*, equação BCK.

Temos interesse em verificar o funcionamento da formulação causal em equações não lineares, logo, aplicamos a transformação de *Madelung* na equação BCK. Substituindo as derivadas (3.2.3) e (3.2.4) em (3.5.4), separando a parte real e imaginária, e aplicando alguns passos algébricos, encontramos as expressões na forma causal-hidrodinâmica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v_q \rho(x, t)] e^{-\frac{\lambda t}{m}} = 0, \quad (3.5.5)$$

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q e^{-\frac{\lambda t}{m}} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q e^{-\frac{\lambda t}{m}} + V e^{\frac{\lambda t}{m}}) \quad (3.5.6)$$

Para que as equações (3.5.5) e (3.5.6) possuam uma forma semelhante as equações (3.4.1) e (3.4.2), definimos duas grandezas físicas, o potencial quântico efetivo de *Bateman-Caldirola-Kanai*, Q_{BCK} , e a velocidade de *Bateman-Caldirola-Kanai*, v_{BCK} :

$$Q_{BCK} \doteq e^{-\frac{2\lambda t}{m}} Q \quad v_{BCK} \doteq e^{-\frac{\lambda t}{m}} v_q \quad (3.5.7)$$

Agora, multiplicamos a expressão (3.5.6) por $\exp\{-\lambda t/m\}$, verificando que:

$$\overbrace{e^{-\frac{\lambda t}{m}} \frac{\partial v_q}{\partial t}} + e^{-\frac{\lambda t}{m}} v_q \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{\lambda t}{m}} v_q = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (e^{-\frac{2\lambda t}{m}} Q + V) \quad (3.5.8)$$

para o termo destacado,

$$\frac{\partial v_{BCK}}{\partial t} = e^{-\frac{\lambda t}{m}} \left[\frac{\partial v_q}{\partial t} - \frac{\lambda v_q}{m} \right] \rightarrow e^{-\frac{\lambda t}{m}} \frac{\partial v_q}{\partial t} = \frac{\partial v_{BCK}}{\partial t} + \frac{\lambda v_q}{m} \quad (3.5.9)$$

Agora, a substituição das definições (3.5.7) e dos passos (3.5.9) nas equações (3.5.5) e (3.5.8), resulta em

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v_{BCK} \rho(x, t)] = 0, \quad (3.5.10)$$

$$\frac{\partial v_{BCK}}{\partial t} + v_{BCK} \frac{\partial}{\partial x} v_{BCK} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q_{BCK} + V) = -\frac{\lambda}{m} v_{BCK} \quad (3.5.11)$$

Que são as equações necessárias para a determinação de invariantes exatas.

3.5.2 Equação de Bialynicki-Birula-Mycielski

Em 1976, *I. Bialynicki-Birula e J. Mycielski* [21] publicaram um artigo divulgando outra forma não linear da equação de *Schrödinger* de suma importância. *I. Bialynicki-Birula-Mycielski* perceberam que a adição de um termo logarítmico no hamiltoniano do OHDT gerava uma equação diferencial exata, onde a solução seria um *sóliton*², sem perda alguma da homogeneidade espacial. A equação é escrita na forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + \left[V(\vec{r}, t) - \frac{\lambda\hbar}{2} \ln(\psi * \psi) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.5.12)$$

Nessa expressão λ é uma constante arbitrária.

Diferentemente do caso da ESBCK, não teremos divergências na equação da continuidade obtida via transformação de *Madelung*, tendo em vista que o termo logaritmo adicional não afeta a parte imaginária da equação, o que não ocorre na parte real, como podemos ver no termo destacado abaixo:

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} - R \frac{\partial S}{\partial t} = -i \left[\frac{\hbar}{m} \frac{\partial R}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\hbar}{2m} R \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} R \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) - \underbrace{\frac{\lambda\hbar}{2} \ln(\rho)} \right] \quad (3.5.13)$$

Realizando substituições semelhantes às utilizadas na equação de *Schrödinger* linear, obteremos as duas equações necessárias para a verificação ou não das invariantes de *Ermakov-Lewis*, a equação da continuidade (3.4.1) e a equação:

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q - \frac{\lambda\hbar}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (Q + V). \quad (3.5.14)$$

Podemos observar que a equação acima é análoga à equação de Euler de um fluido ideal. Fisicamente significa que o pacote de onda associado ao sistema físico em questão não se distorce. Daí a referência dos autores aos *sólitons*.

²Sóliton é um pacote de ondas solitárias auto-reforçadoras que mantém a sua forma enquanto se propaga a uma velocidade constante e mantém sua forma invariante após uma colisão.

Capítulo 4

Determinação das Invariantes de Ermakov-Lewis na Representação Causal

Neste capítulo, vamos utilizar de toda a teoria proposta preliminarmente a fim de encontrar as invariantes exatas na formulação causal da mecânica quântica em três casos; equação de *Schrödinger* linear, a equação de *Bateman-Caldirola-Kanai* e a equação de *Bialynicki-Birula-Mycielski*. O procedimento é análogo nos três casos, tendo isso em mente, temos duas considerações [10]:

- [I] Deve-se especificar a densidade de massa linear no instante inicial em todos os casos, para isso, fora escolhido uma distribuição gaussiana normalizada em torno de $q(0)$. Logo

$$\rho(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma(0)}} e^{[x-q(0)]^2/\sigma(0)} \quad (4.0.1)$$

- [II] Sabe-se que o potencial quântico não age sobre as partículas como um potencial usual atraindo ou repelindo as mesmas, mas sim guiando-as. Tendo isso em mente, vamos considerar que o valor esperado da força quântica é nula em todos os instantes:

$$\left\langle \frac{\partial Q}{\partial x} \right\rangle = 0 \quad (4.0.2)$$

Logo, se considerarmos uma aceleração quântica ela deve ser nula na média, de forma que [22]:

$$-\frac{1}{m} \frac{\partial Q}{\partial x} = k(t)[x - q(t)] \quad (4.0.3)$$

Nessa equação, teremos para o valor esperado da posição: $q(t) = \langle x \rangle$

4.1 INVARIANTE RESULTANTE DA EQUAÇÃO DE *Schödinger* LINEAR

Para o potencial do OHDT, teremos as equações:

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q \frac{\partial}{\partial x} v_q + \omega^2(t)x = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} Q(x, t) \quad (4.1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} [v_q \rho(x, t)] = 0, \quad (4.1.2)$$

Levando em conta a definição do potencial quântico Q , e que $R^2 = \rho(x, t)$, podemos escrever

$$-\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} Q(x, t) = \frac{\hbar^2}{4m^2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^3 \right] = k(t)[x - q(t)] \quad (4.1.3)$$

onde os detalhes da substituição podem ser verificadas no *Apêndice B*.

Levando em consideração a condição [I], dada pela equação (4.0.1) e a equação (4.1.3), consideramos um problema de valor inicial dado por:

$$\frac{\hbar^2}{4m^2} \left[\frac{1}{\rho(x, 0)} \underbrace{\frac{\partial^3 \rho(x, 0)}{\partial x^3}}_3 - \frac{2}{\rho^2(x, 0)} \underbrace{\frac{\partial \rho(x, 0)}{\partial x}}_1 \underbrace{\frac{\partial^2 \rho(x, 0)}{\partial x^2}}_2 + \frac{1}{\rho(x, 0)^3} \left(\underbrace{\frac{\partial \rho(x, 0)}{\partial x}}_1 \right)^3 \right] = k(0)[x - q(0)], \quad (4.1.4)$$

Definindo as quantidades:

$$\begin{cases} A \doteq \pi \sigma(0), \\ B \doteq x - q(0), \\ C \doteq \sigma(0). \end{cases}$$

Teremos para as derivadas 1, 2 e 3 destacadas em (4.1.4) respectivamente

$$\frac{\partial \rho(x, 0)}{\partial x} = -\frac{2}{\sqrt{AC}} B e^{-B^2/C}, \quad (4.1.5)$$

$$\frac{\partial^2 \rho(x, 0)}{\partial x^2} = -\frac{2}{\sqrt{AC}} e^{-B^2/C} \left(1 - \frac{2B^2}{C} \right), \quad (4.1.6)$$

e,

$$\frac{\partial^3 \rho(x, 0)}{\partial x^3} = -\frac{4}{\sqrt{AC^2}} B e^{-B^2/C} \left(\frac{2B^2}{C} - 3 \right) \quad (4.1.7)$$

A substituição dessas derivadas em (4.1.4) resulta em

$$k(0) = \frac{\hbar^2}{m^2 \sigma^2(0)} \quad (4.1.8)$$

Dessa forma, para seguir adiante, vamos supor que as dependências em t dos termos k e ρ possam ser escritas como

$$k(t) = \left[\frac{\hbar}{m\sigma(t)} \right]^2, \quad \rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma(t)}} e^{-\frac{[x-q(t)]^2}{\sigma(t)}}. \quad (4.1.9)$$

Uma vez com a distribuição de massa bem estabelecida, podemos realizar a derivação parcial em relação ao tempo e a posição, a fim de introduzir essas quantidades na equação (4.1.2), obtendo informações sobre a velocidade quântica v_q . Considere a forma expandida da equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_q \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial v_q}{\partial x} = 0 \quad (4.1.10)$$

Teremos as derivadas de ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\rho \dot{\sigma}}{2\sigma} + \rho \left[\frac{\dot{\sigma}^2}{\sigma^2} [x - q(t)]^2 + \frac{2\dot{q}}{\sigma} [x - q(t)] \right] \quad (4.1.11)$$

e

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = -\frac{2\rho}{\sigma} [x - q(t)] \quad (4.1.12)$$

Substituindo:

$$\frac{\partial v_q}{\partial x} - \frac{2v_q}{\sigma} [x - q(t)] = \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{[x - q(t)]^2}{\sigma^2} \dot{\sigma}^2 - \frac{2\dot{q}}{\sigma} [x - q(t)] \quad (4.1.13)$$

É conveniente definir as expressões:

$$p(x, t) \doteq -\frac{2}{\sigma} [x - q(t)] \quad r(x, t) \doteq \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{[x - q(t)]^2}{\sigma^2} \dot{\sigma}^2 - \frac{2\dot{q}}{\sigma} [x - q(t)] \quad (4.1.14)$$

Recaímos em uma equação diferencial parcial de primeira ordem em relação à x :

$$\frac{\partial}{\partial x} v_q(x, t) + v_q(x, t) p(x, t) = r(x, t) \quad (4.1.15)$$

Para resolver essa equação, vamos considerar que $v_q = v_1 + v_2$ [23], teremos:

$$\underbrace{\left[\frac{\partial v_1}{\partial x} + p(x, t) v_1 \right]}_0 + \underbrace{\left[\frac{\partial v_2}{\partial x} + p(x, t) v_2 \right]}_{r(x, t)} = r(x, t) \quad (4.1.16)$$

A primeira equação entre colchetes é separável e dela verificamos que $v_1 = c(t)e^{-\int p(x, t) dx}$. Agora, consideramos que v_1 e v_2 são linearmente independentes, logo, podemos escrever v_2 como $v_2(x, t) = u(x, t)v_1(x, t)$, e substituir essa forma no segundo colchetes da equação (4.1.16), para obter

$$c(t)e^{-\int p(x, t) dx} \frac{\partial u}{\partial x} + u(x)c(t) \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x} e^{-\int p(x, t) dx} + p(x, t)e^{-\int p(x, t) dx} \right]}_0 = r(x, t) \quad (4.1.17)$$

É fácil perceber que

$$u(x, t) = \frac{1}{c(t)} \int r(x, t) e^{\int p(x, t) dx} dx \quad (4.1.18)$$

Obtemos para o potencial quântico v_q a expressão

$$v_q(x, t) = v_1(x, t) + v_2(x, t) = e^{-\int p(x, t) dx} \left[c(t) + \int r(x, t) e^{\int p(x, t) dx} dx \right] \quad (4.1.19)$$

Resolvendo as integrais em questão, obtemos a seguinte expressão para a velocidade quântica:

$$v_q(x, t) = \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} [x - q(t)] + \dot{q} + \frac{c(t)}{\sqrt{\rho^2 \pi \sigma}} \quad (4.1.20)$$

Sabendo que,

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \sqrt{\rho^2 \pi \sigma} = 0 \quad (4.1.21)$$

Assumimos que $c(t)$ deve ser nula.

Uma vez com a velocidade quântica bem determinada, de forma análoga ao que foi feito na equação da continuidade, derivamos a expressão (4.1.20) em relação ao tempo e em relação à coordenada espacial, a fim de substituir os resultados em (4.1.1). Sabendo que:

$$\frac{\partial v_q}{\partial x} = \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} \quad \frac{\partial v_q}{\partial t} = [x - q(t)] \left(\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{2\sigma^2} \right) - \frac{\dot{\sigma} \dot{q}}{2\sigma} + \ddot{q} \quad (4.1.22)$$

Realizando a substituição das derivadas acima, usando a equação (4.1.9) e somando $\omega^2 q - \omega^2 q$ na

equação (4.1.1)

$$[x - q(t)] \underbrace{\left(\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{4\sigma^2} - \frac{\hbar^2}{m^2\sigma^2} + \omega^2 \right)}_0 + \ddot{q} + \omega(t)^2 q = 0 \quad (4.1.23)$$

Assumindo que a expressão entre parênteses é nula, teremos:

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad (4.1.24)$$

Se

$$\sigma(t) = \frac{\hbar\alpha(t)^2}{m} \quad (4.1.25)$$

e

$$\dot{\sigma} = \frac{2\hbar\alpha\dot{\alpha}}{m} \quad \ddot{\sigma} = \frac{2\hbar}{m}(\dot{\alpha}^2 + \alpha\ddot{\alpha}) \quad (4.1.26)$$

A substituição direta dessas grandezas na expressão nula entre parênteses em (4.1.23) resulta em

$$\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{4\sigma^2} - \frac{\hbar^2}{m^2\sigma^2} + \omega^2 = 0 \quad (4.1.27)$$

Ou seja,

$$\ddot{\alpha} + \alpha\omega^2(t) = \frac{1}{\alpha^3} \quad (4.1.28)$$

Observe que as equações (4.1.24) e (4.1.28) são justamente as restrições descobertas por *Lewis* na formulação tradicional da mecânica quântica para o problema do OHDt.

Se substituirmos $\omega^2(t)$ na expressão (4.1.28), obtemos:

$$\ddot{\alpha} - \frac{\ddot{q}\alpha}{q} = \frac{1}{\alpha^3} \quad (4.1.29)$$

$$\ddot{\alpha}q - \ddot{q}\alpha = \frac{q}{\alpha^3} \quad (4.1.30)$$

$$\frac{d}{dt}(\dot{\alpha}q - \dot{q}\alpha) = \frac{q}{\alpha^3} \quad (4.1.31)$$

$$(\dot{\alpha}q - \dot{q}\alpha) \frac{d}{dt} (\dot{\alpha}q - \dot{q}\alpha) = (\dot{\alpha}q - \dot{q}\alpha) \frac{q}{\alpha^3} \quad (4.1.32)$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} (\dot{\alpha}q - \dot{q}\alpha)^2 \right] = -\frac{q}{\alpha} \frac{d}{dt} \left[\frac{q}{\alpha} \right] \quad (4.1.33)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \left[(\dot{q}\alpha - \dot{\alpha}q)^2 + \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \right] = 0 \quad (4.1.34)$$

Ou seja

$$\frac{dI}{dt} = 0 \quad (4.1.35)$$

Definimos I_S como a invariante de *Ermakov-Lewis* na formulação causal da mecânica quântica para a equação de *Schrödinger* linear no caso onde $c = 1$. Assim,

$$I_S \doteq \frac{1}{2} \left[(\dot{q}\alpha - \dot{\alpha}q)^2 + \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \right] \quad (4.1.36)$$

4.2 INVARIANTE RESULTANTE DA EQUAÇÃO DE *Bateman-Caldirola-Kanai*

Para a *ESBCK*, teremos as equações (3.5.10) e (3.5.11) onde Q_{BCK} é o potencial quântico efetivo de *Bateman-Caldirola-Kanai* e v_{BCK} é a velocidade de *Bateman-Caldirola-Kanai*. Para o potencial do *OHDT*, a equação (3.5.11)¹ é

$$\frac{\partial v_{BCK}}{\partial t} + v_{BCK} \frac{\partial}{\partial x} v_{BCK} + \omega^2(t)x + \frac{\lambda}{m} v_{BCK} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} Q_{BCK} = k(t)[x - q(t)] \quad (4.2.1)$$

Nesse caso²,

$$-\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} Q_{BCK} = e^{-2\lambda t/m} \frac{\hbar^2}{4m^2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^3 \right] = k(t)[x - q(t)] \quad (4.2.2)$$

Utilizando $\rho(x,0)$ e suas derivadas, as expressões, (4.1.5), (4.1.6) e (4.1.7) e substituindo em (4.2.2), obteremos

¹Também sujeita a condição **II**

²No caso de dúvidas algébricas, ver o Apêndice B

$$k(t) = \frac{\hbar^2 e^{-2\lambda t/m}}{m^2 \sigma^2(t)} \quad \rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi \sigma(t)}} e^{-\frac{[x-q(t)]^2}{\sigma(t)}} \quad (4.2.3)$$

Logo, teremos derivadas idênticas às (4.1.11) e (4.1.12), que se forem substituídas na equação da continuidade (3.5.10), resulta na velocidade de *Bateman-Caldirola-Kanai*

$$v_{BCK}(x, t) = \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} [x - q(t)] + \dot{q} \quad (4.2.4)$$

Logo,

$$\frac{\partial v_{BCK}}{\partial x} = \frac{\dot{\sigma}}{2\sigma} \quad \frac{\partial v_{BCK}}{\partial t} = [x - q(t)] \left(\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{2\sigma^2} \right) - \frac{\dot{\sigma} \dot{q}}{2\sigma} + \ddot{q} \quad (4.2.5)$$

A substituição dessas derivadas, do fator $k(t)$ dado por (4.2.3) e da expressão de v_{BCK} na expressão (4.2.1), resulta na equação

$$[x - q(t)] \underbrace{\left(\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{4\sigma^2} - \frac{\hbar^2 e^{-2\lambda t/m}}{m^2 \sigma^2} + \omega(t)^2 + \frac{\lambda \dot{\sigma}}{2m\sigma} \right)}_0 + \ddot{q} + \omega(t)^2 q + \frac{\lambda \dot{q}}{m} = 0 \quad (4.2.6)$$

Teremos

$$\ddot{q} + \omega^2(t) q + \frac{\lambda \dot{q}}{m} = 0 \quad (4.2.7)$$

Substituindo (4.1.25) e suas derivadas na parte nula da equação (4.2.6), obtemos a expressão

$$\ddot{\alpha} + \frac{\lambda \dot{\alpha}}{m} + \alpha \omega^2(t) = \frac{e^{-2\lambda t/m}}{\alpha^3} \quad (4.2.8)$$

A partir da expressão (4.2.7), podemos substituir $\omega^2(t)$ na expressão (4.2.8), para obter:

$$m(q\ddot{\alpha} - \ddot{q}\alpha) + \lambda(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q}) = \frac{mq}{\alpha^3} e^{-2\lambda t/m} \quad (4.2.9)$$

Assim,

$$m \frac{d}{dt} (\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q}) + \lambda(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q}) = \frac{mq}{\alpha^3} e^{-2\lambda t/m}, \quad (4.2.10)$$

$$m(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})\frac{d}{dt}(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q}) + \lambda(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})^2 = \frac{mq}{\alpha^3}e^{-2\lambda t/m}(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q}), \quad (4.2.11)$$

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})^2 + \lambda(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})^2 = -e^{-2\lambda t/m}\frac{q}{\alpha}\frac{d}{dt}\frac{q}{\alpha} \quad (4.2.12)$$

Logo

$$\frac{d}{dt}\left\{e^{2\lambda t/m}\left[\frac{m}{2}(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})^2\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{\alpha}\right)^2\right\} = 0 \quad (4.2.13)$$

Teremos,

$$I_{BCK} = e^{2\lambda t/m}\left[\frac{m}{2}(\dot{\alpha}q - \alpha\dot{q})^2\right] + \frac{1}{2}\left(\frac{q}{\alpha}\right)^2 \quad (4.2.14)$$

Onde I_{BCK} é uma invariante exata na equação diferencial não linear de *Bateman-Caldirola-Kanai*.

4.3 INVARIANTE RESULTANTE DA EQUAÇÃO DE *Bialynicki-Birula-Mycielski*

Na equação não linear de *Bialynicki-Birula-Mycielski*, teremos as equações (3.4.1) e (3.5.14), que levando em consideração as condições [I] e [III], para o OHDT é escrita na forma

$$\frac{\partial v_q}{\partial t} + v_q\frac{\partial}{\partial x}v_q + \omega^2(t)x - \frac{\lambda\hbar}{2m\rho}\frac{\partial\rho}{\partial x} = \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}[x - k(t)] \quad (4.3.1)$$

A substituição de v_q e suas derivadas espaço-temporal dadas por (4.1.20) e (4.1.22), $\rho(x, t)$ e sua derivada espacial dadas por (4.1.9) e (4.1.11), na equação (4.3.1) resulta na expressão

$$[x - q(t)]\underbrace{\left(\frac{\ddot{\sigma}}{2\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^2}{4\sigma^2} - \frac{\hbar^2}{m^2\sigma^2} + \omega^2 + \frac{\lambda\hbar}{m\sigma}\right)}_0 + \ddot{q} + \omega(t)^2q = 0 \quad (4.3.2)$$

Daí

$$\ddot{q} + \omega^2q = 0 \quad (4.3.3)$$

Como era de se esperar, entretanto, o procedimento padrão da substituição de α resulta na expressão

$$\ddot{\alpha} + \alpha\omega^2(t) = \frac{1}{\alpha^3} - \frac{\lambda}{\alpha} \quad (4.3.4)$$

Podemos analisar a possibilidade de se resgatar a expressão (2.3.4) manipulando as variáveis, c e λ

$$\frac{1}{\alpha^3} - \frac{\lambda}{\alpha} = \frac{c}{\alpha^3} \quad (4.3.5)$$

Logo,

$$c = 1 - \lambda\alpha^2 \quad (4.3.6)$$

Entretanto, a única maneira de se obter uma constante arbitrária c é com a solução trivial $\lambda = 0$, recaindo na invariante da equação de *Schrödinger* linear. Logo, não foram encontrados invariantes de *Ermakov-Lewis* na formulação causal de *Bialynicki-Birula-Mycielski*.

Capítulo 5

Conclusão

O episódio histórico que configura a publicação do paradoxo EPR, evoluindo para teoria quântica causal de *Madelung-De Broglie-Bohm* e por fim as desigualdades de *Bell* é talvez o maior embate epistemológico do século XX, onde o posicionamento ortodoxo-realista referente aos fenômenos quânticos se tornou algo não apenas filosófico e pode ser posto em prova por um juiz de alta confiabilidade, a natureza.

Embora na atualidade a maioria dos físicos se atenha a interpretação de *Copenhagem*, a formulação proposta por *Bohm* continua ativa e até então sem refutação, sendo válido o seu estudo e aprofundamento no pensamento de novas teorias e conceitos. Uma evidência disso, são os resultados obtidos no corpo do trabalho, principalmente nas invariantes exatas da equação de *Schrödinger* linear que são idênticas em ambos os formalismos, caracterizando nas definições propostas no trabalho, um invariante de *Ermakov-Lewis*.

Analisando formas não lineares da equação de *Schrödinger*, e seus respectivos sistemas físicos, verificou-se que para o caso da equação de *Bateman-Caldirola-Kanai*, existem famílias de invariantes exatos, tendo em vista a liberdade da escolha de λ , entretanto, o invariante I_{BCK} seria mais bem classificado como invariante de *Ermakov*, uma vez que as gradezas α e q possuem restrições diferentes das encontradas por *Lewis*. No caso da equação de *Bialynicki-Birula-Mycielski*, não fora encontrado invariante exato algum pelos meios usuais da teoria.

Neste trabalho, foram abordados desde os rudimentos clássicos da física até os postulados da mecânica quântica causal com o intuito de comparar os resultados tão bem estabelecidos pela formulação tradicional da mecânica quântica com as previsões previstas pelo modelo de *Bohm*. Para um maior refinamento, é necessário outros trabalhos que visem comparar os resultados de ambas as teorias verificando suas compatibilidades e divergências a fim de por em prova qual tem maior aplicabilidade.

Apêndice A

O Oscilador Harmônico Simples

Considerando um corpo pontual de massa m , preso em uma mola com constante k , movendo-se apenas em uma dimensão, verificamos que a energia potencial sofrida pela partícula é dada por:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (\text{A.0.1})$$

Em torno de um mínimo local, x_0 por exemplo, podemos expandir $V_w(x)$, um potencial qualquer, em uma série de *Taylor*, obtendo:

$$V_w(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \quad (\text{A.0.2})$$

Subtraindo $V(x_0)$, definindo $V'(x_0) \doteq 0$ e truncando a série no termo de segunda ordem, obteremos

$$V_w(x) \approx \frac{1}{2} V''_w(x_0)(x - x_0)^2 \quad (\text{A.0.3})$$

Ou seja, virtualmente, qualquer movimento de oscilação pode ser tratado como harmônico simples com uma constante de mola $k = V''_w(x_0)$, o que explicita a importância desse potencial na modelagem de problemas físicos.

O problema resume-se em resolver a equação de *Schrödinger* independente do tempo, dada pela expressão

$$\hat{\mathcal{H}} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (\text{A.0.4})$$

onde $|n\rangle$ é o estado físico do n -ésimo nível excitado do oscilador e E_n é a energia associada a este estado.

Um dos métodos para resolver essa equação é puramente algébrico e consiste na fatoração do hamiltoniano do oscilador, que pode ser escrito na forma

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] \quad (\text{A.0.5})$$

Definimos o operador aniquilação \hat{a} e o seu complexo conjugado, o operador criação \hat{a}^\dagger , que no caso do oscilador harmônico podem ser escritos na forma:

$$\hat{a} \doteq \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad \hat{a}^\dagger \doteq \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (\text{A.0.6})$$

Podemos escrever os operadores canônicos na forma:

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (\text{A.0.7})$$

Substituindo essa versão da posição e do *momentum*, obtemos o operador hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \quad (\text{A.0.8})$$

A equação (A.0.4) toma a forma:

$$E_n |n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) |n\rangle \quad (\text{A.0.9})$$

Os operadores aniquilação/criação afetam $|n\rangle$ na seguinte forma:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (\text{A.0.10})$$

Após alguns passos algébricos, verificamos que para o n -ésimo estado excitado do oscilador harmônico unidimensional, temos um valor de energia E_n associado, dado pela expressão:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (\text{A.0.11})$$

O problema do oscilador harmônico é tradicional na física tanto na mecânica clássica, quanto na mecânica quântica, entretanto, problemas surgem quando abordamos esse sistema em um forma mais real, em que a frequência angular se torna uma função do tempo $\omega = \omega(t)$. Um método para resolver esse novo sistema é dado pelas invariantes de *Ermakov-Lewis*.

Apêndice B

A substituição $R^2 = \rho(x, t)$

Considerando a equação (4.1.3), temos:

$$-\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} Q(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{\rho}} \right] = \frac{\hbar^2}{4m^2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} - \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^3 \right] \quad (\text{B.0.1})$$

Para a derivada destacada teremos:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{\rho} = \frac{1}{2\rho^{1/2}} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{4\rho^{3/2}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 \quad (\text{B.0.2})$$

A substituição dessa derivada na equação (B.0.1) retorna a expressão

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sqrt{\rho} \right] = \frac{\hbar^2}{2m^2} \left\{ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right]}_1 - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{4\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 \right]}_2 \right\} \quad (\text{B.0.3})$$

Para 1:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2\rho} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) = \frac{1}{2\rho} \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3} - \frac{1}{2\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (\text{B.0.4})$$

Para 2:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{4\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 \right] = \frac{1}{2\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{1}{2\rho^3} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^3 \quad (\text{B.0.5})$$

Finalmente, a substituição de (B.0.4) e (B.0.5) em (B.0.3) devolve a forma dada em (B.0.1), *QED*.

Referências Bibliográficas

- [1] P. R. Holland, "*The quantum theory of motion: an account of the de Broglie-Bohm causal interpretation of quantum mechanics*", Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [2] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, "*Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?*", Phys. Rev. **47** (1935) 777.
- [3] D. Griffiths, "*Introduction to quantum mechanics*", Prentice Hall, New Jersey, 1995.
- [4] D. Bohm, Phys. Rev. **85** (1952) 166.
- [5] J. S. Bell, "*Einstein–Podolsky–Rosen Experiments*", Quantum Mechanics, High Energy Physics And Accelerators: Selected papers of John S. Bell (with Commentary), page 768 (1995).
- [6] H. R. Lewis, "*Classical and quantum systems with time-dependent harmonic oscillator-type Hamiltonians*", Phys. Rev. Lett. **18** (1967) 510.
- [7] H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, "*An exact quantum theory of the time dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field*", J. Math. Phys. **10** (1969) 1458.
- [8] V. P. Ermakov, "*Second order differential equations. Conditions of complete integrability*", Universita Izvestia Kiev, Series III **9** (1880) 1.
- [9] F. Haas, "*Sistemas de Ermakov generalizados, simetrias e invariantes exatos*", Ph. D. thesis, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1998.
- [10] J. M. F. Bassalo, P. T. S. Alencar, M.S. D. Cattani, and A.B. Nassar, "*Tópicos de mecânica quântica de Broglie– Bohm*", Editora Universitária - EDUFPA, Belém, 2003.
- [11] H. Goldstein, "*Classical mechanics*", Addison Wesley, Reading, 1980.
- [12] M. Born, "*Statistical interpretation of quantum mechanics*", Science **122** (1955) 675.
- [13] P. A. M. Dirac, "*A new notation for quantum mechanics*", Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **35** (1939) 416.

Referências Bibliográficas

- [14] C. J. Eliezer and A. Gray, "A note on the time-dependent harmonic oscillator", SIAM J. Appl. Math. **30** (1976) 463.
- [15] E. Madelung, "Eine anschauliche Deutung der Gleichung von Schrödinger", Naturwissenschaften **14** (1926) 1004.
- [16] D. J. Griffiths, "Introduction to electrodynamics", Prentice Hall, New Jersey, 1999.
- [17] H. Bateman, "On dissipative systems and related variational principles", Phys. Rev. **38** (1931) 815.
- [18] P. Caldirola, "Forze non conservative nella meccanica quantistica", Il Nuovo Cimento **18** (1941) 393.
- [19] E. Kanai, "On the quantization of the dissipative systems", Progress of Theoretical Physics **3** (1948) 440.
- [20] J. M. F. Bassalo and M. S. D. Cattani, "Osciladores Harmônicos Clássicos e Quânticos", Editora Livraria da Física, São Paulo, 2009.
- [21] I. Bialynicki-Birula and J. Mycielski, "Nonlinear wave mechanics", Annals of Physics **100** (1976) 62.
- [22] A. B. Nassar, "Quantum-fluid-dynamics description of the brownian motion", Physics Letters A **106** (1984) 43.
- [23] D. G. Zill, "Equações diferenciais com aplicações em modelagem", Cengage Learning Editores, São Paulo, 2003.