

NIVALDO AGOSTINHO LEMOS

QUANTIZAÇÃO DE SISTEMAS DISSIPATIVOS

TESE DE

DOUTORADO

T 530.143
L 557
14.362/82

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO

À MÁRCIA

AGRADECIMENTOS

- A Prem Prakash Srivastava pela orientação e pela confiança em mim depositada durante a realização deste trabalho.

- A Carlos Augusto Pinto Galvão pela leitura do Apêndice, pelo estímulo constante e pela amizade.

- A Raimundo F. Albuquerque ("Deutsch") pela tradução de artigos em alemão.

- A Roberto Lobo por discussões interessantes e pela indicação de referências bibliográficas importantes.

- Aos amigos do CBPF, especialmente a Mário José Delga do Assad, Marcelo José Rebouças e Carlos Augusto Romero Filho, respectivamente Presidente e Massa Revolucionária do já célebre PRI. Mais particularmente a Marcelo Rebouças pela leitura de todo o manuscrito e pelo oferecimento de numerosas sugestões de caráter estilístico-gramatical.

- Ao CBPF por ter proporcionado as condições para a concretização deste trabalho.

- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, pela concessão de bolsa de estudos.

- A Carlos Lopes da Conceição pelo excelente trabalho de datilografia.

RESUMO

Estudamos a quantização canônica de sistemas dissipativos e observamos que existem lagrangianas não-equivalentes que dão lugar a um mesmo conjunto de equações de movimento. No caso de sistemas conservativos, provamos que a exigência de que a hamiltoniana seja igual à energia total é suficiente para definir uma classe de lagrangianas equivalentes que descrevem um único sistema físico na teoria quântica. Para sistemas dissipativos mostramos que o mesmo critério é excessivamente restritivo, e mesmo uma condição mais fraca impede a existência de lagrangianas. Demonstramos, ainda, que uma saída possível, consistindo em incluir na lagrangiana os potenciais das forças conservativas e fazer as forças não-conservativas figurarem exclusivamente nas equações de movimento, é inconsistente com o formalismo matemático da mecânica quântica. Consideramos, em seguida, a quantização estocástica de sistemas dissipativos e provamos que a força de amortecimento proporcional à velocidade é a única força dissipativa compatível com o formalismo estocástico, desde que não se pretenda uma ruptura radical com a estrutura tradicional da mecânica quântica. Construímos o espaço de Hilbert e os operadores dentro do contexto estocástico na presença da força dissipativa proporcional à velocidade. O operador hamiltoniano torna-se não-linear, mas os operadores de posição e momento linear são idênticos aos da teoria quântica habitual. Analisamos, finalmente, a quantização de sistemas dissipativos mediante equações de Schrödinger não-lineares. Comparamos as propriedades de algumas equações de evolução não-lineares com as propriedades da equação de Kostin e concluímos que esta última parece mais bem dotada de atributos fisicamente razoáveis do que as demais.

SUMÁRIO

Folha de Rosto	i
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 1 - QUANTIZAÇÃO CANÔNICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS	12
1.1 - A Lagrangiana de Bateman	12
1.2 - Quantização Canônica	16
CAPÍTULO 2 - CRÍTICA DA QUANTIZAÇÃO DE SISTEMAS DISSIPATIVOS	24
2.1 - A Descrição Lagrangiana de Sistemas Clássicos	24
2.2 - Dissipação Versus Massa Variável ...	29
2.3 - O Caráter Ambíguo da Quantização Canônica de Sistemas Dissipativos	34
2.4 - Uma Alternativa Inconsistente	45
CAPÍTULO 3 - QUANTIZAÇÃO ESTOCÁSTICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS	51
3.1 - A Mecânica Estocástica	51
3.2 - Forças Dissipativas na Mecânica Estocástica	66
3.3 - Generalização da Mecânica Estocástica e Álgebra dos Operadores	73

CAPÍTULO 4 - QUANTIZAÇÃO DE SISTEMAS DISSIPATIVOS MEDIANTE EQUAÇÕES DE SCHRÖDINGER NÃO-LINEARES	91
4.1 - O Teorema de Ehrenfest e a Equação de Kostin	91
4.2 - Algumas Soluções da Equação de Kostin	101
4.3 - Outras Equações Não-Lineares	109
4.4 - O Papel Desempenhado Pelas Forças Estocásticas	115
APÊNDICE A - RUDIMENTOS DA TEORIA DOS PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	120
A.1 - Variáveis Aleatórias e Funções de Distribuição	120
A.2 - Processos Estocásticos	128
A.3 - Equações Diferenciais Estocásticas	134
A.4 - Movimento Browniano	143
REFERÊNCIAS	150

Science! true daughter of Old Time thou art!

Who alterest all things with thy peering eyes.

Why preyest thou thus upon the poet's heart,

Vulture, whose wings are dull realities?

How should he love thee? or how deem thee wise?

Who wouldst not leave him in his wandering

To seek for treasure in the jewelled skies,

Albeit he soared with an undaunted wing?

Hast thou not dragged Diana from her car?

And driven the Hamadryad from the wood

To seek a shelter in some happier star?

Hast thou not torn the Naiad from her flood,

The Elfin from the green grass, and from me

The summer dream beneath the tamarind tree?

Edgar Allan Poe, Sonnet - To Science

dos métodos que têm sido empregados para levá-la a efeito. Na verdade não seria nenhum exagero dizer que ao lidarmos com esta questão vemo-nos às voltas com um autêntico embarras de richesses.

Em primeiro lugar, a teoria quântica de sistemas dissipativos é digna de ser investigada por si mesma, já que ela pode ser capaz de proporcionar uma melhor compreensão da estrutura geral do próprio processo de quantização. Este aspecto do problema tornar-se-á claramente discernível quando, no corpo da tese, analisarmos os efeitos da aplicação do formalismo canônico de quantização a certos sistemas dissipativos simples. Além do mais, um estudo cuidadoso da quantização canônica de tais sistemas permite aprofundar significativamente a nossa inteligência da correspondência existente entre sistemas clássicos e quânticos. Este fato isoladamente já bastaria para justificar uma análise mais apurada da teoria quântica de sistemas dissipativos.

A extensão do formalismo lagrangiano a sistemas dissipativos foi realizada pela primeira vez por Bateman (1), que construiu uma lagrangiana com dependência temporal explícita para o oscilador harmônico amortecido. Bateman, contudo, analisou o problema somente do ponto de vista clássico. Sua lagrangiana foi redescoberta por Caldirola (2), mediante um método completamente diferente daquele originalmente empregado por Bateman, e aplicada à quantização canônica de alguns sistemas dissipativos simples. O oscilador harmônico amortecido foi quantizado pela primeira vez por Kerner (3) e Stevens (4) com base na referida lagrangiana, embora um breve exame deste problema tivesse sido feito anteriormente por Kanai (5). Stevens (4) aplicou o modelo

ao cálculo da taxa de dissipação da energia por uma resistência em consequência de flutuações térmicas, obtendo resultado coincidente com o fornecido pela teoria clássica.

O primeiro a apontar que a quantização canônica baseada na lagrangiana de Bateman viola o princípio da incerteza foi Brittin (6), que demonstrou que a quantização canônica de sistemas dissipativos é impossível quando encarada de um ângulo particular. O enfoque de Brittin consiste em incluir na lagrangiana unicamente as forças conservativas, figurando as forças dissipativas apenas nas equações de movimento. Em seu artigo, todavia, Brittin incorreu em erro sério ao concluir que forças dissipativas dependentes exclusivamente da posição prestam-se a tratamento na representação de Heisenberg, mas não na representação de Schrödinger. Este resultado, se verdadeiro, teria momentosas implicações nos fundamentos da mecânica quântica, visto que as representações de Heisenberg e Schrödinger são equivalentes no domínio da mecânica quântica não-relativística de sistemas conservativos com número finito de graus de liberdade. Recentemente, entretanto, demonstramos (7) que o trabalho de Brittin não está plenamente correto e provamos que, em seu formalismo, a quantização canônica de sistemas dissipativos é impossível qualquer que seja a representação escolhida, restabelecendo, assim, a equivalência das representações de Heisenberg e de Schrödinger. O argumento central desta prova de impossibilidade é que na presença de forças não-conservativas as relações de comutação canônicas são incompatíveis com as equações de movimento de Heisenberg para os operadores (7). Uma outra demonstração da impossibilidade de aplicar-se a quantização canônica a

sistemas dissipativos, que utiliza métodos completamente diferentes mas cujo argumento essencial é idêntico ao que acabamos de mencionar, foi dada por Messer (8).

A lagrangiana de Bateman contém em si mesma a força dissipativa, de modo que os teoremas acima citados não se aplicam. Acontece, entretanto, que existem lagrangianas não-equivalentes, isto é, que não diferem pela derivada total em relação ao tempo de nenhuma função das coordenadas generalizadas e do tempo, mas que fornecem equações de movimento equivalentes entre si. Um método sistemático de construir tais lagrangianas para um dado conjunto de equações de movimento foi desenvolvido por Havas (9). No caso de sistemas conservativos é possível demonstrar (10) que a exigência de que a hamiltoniana* do sistema coincida com a energia é suficiente para selecionar uma classe de lagrangianas equivalentes que descrevem um único sistema quântico. No que se refere a sistemas dissipativos este critério é por demais restritivo, e mesmo condições mais fracas impedem a existência de lagrangianas para uma extensa família de sistemas dissipativos (10,11). A ausência de qualquer critério fisicamente razoável para a escolha da lagrangiana torna a quantização canônica de sistemas dissipativos necessariamente ambígua porque lagrangianas não-equivalentes descrevem sistemas quânticos inteiramente

* Usamos "hamiltoniana", no feminino, quando nos referimos à função clássica, ao passo que "hamiltoniano", no masculino, reservamos para o operador da mecânica quântica. Vide Aurélio Buarque de Holanda Ferreira, Novo Dicionário da Língua Portuguesa, Ed. Nova Fronteira (1975). Do mesmo modo a função de Lagrange é chamada de "lagrangiana", no feminino. Os termos "lagrangeana" e "lagrangeano" não estão registrados no Aurélio.

distintos, embora classicamente representem o mesmo sistema físico. Torna-se claro, então, que a um único sistema clássico corresponde uma família infinita de sistemas quânticos fisicamente diversos, e isto vale tanto para os sistemas dissipativos quanto para os sistemas conservativos. A grande diferença é que para estes últimos existe um critério simples para selecionar a lagrangiana fisicamente correta, coisa que não existe no caso de sistemas dissipativos (10). Esta ambigüidade inerente à quantização canônica de sistemas dissipativos já havia sido sublinhada por outros autores (12, 13) como argumento definitivo para negar a sua exeqüibilidade. A existência de lagrangianas não-equivalentes pode vir a ser relevante na teoria quântica dos campos, pois neste caso, ao contrário do que ocorre com sistemas conservativos com número finito de graus de liberdade, não se dispõe de critérios tão nítidos para a escolha da lagrangiana fisicamente apropriada.

Em face de o formalismo canônico não prestar-se à quantização de sistemas dissipativos, resta investigar se outros métodos de quantização adequam-se a esta finalidade. Numerosos métodos alternativos têm sido sugeridos, mas vamos limitar-nos a considerar dois deles que se nos afiguram os mais simples e interessantes. O primeiro destes métodos toma como ponto de partida a mecânica quântica ortodoxa na representação de Schrödinger. Porém, após recorrer ao princípio da correspondência com o intuito de introduzir forças dissipativas, desemboca numa equação de Schrödinger não-linear para a descrição da evolução temporal de cada sistema quântico dissipativo, o que, naturalmente, transcende as fronteiras da mecânica quântica usual. O pioneiro na

aplicação deste programa foi Kostin (14), que propôs uma equação de Schrödinger com uma não-linearidade logarítmica para descrever uma força de amortecimento linear na velocidade. A equação de Kostin admite soluções exatas no caso de alguns sistemas dissipativos simples, e suas propriedades são muito mais razoáveis do ponto de vista físico do que as da equação de Schrödinger linear gerada a partir da lagrangiana dependente do tempo de Bateman. Em particular o princípio da incerteza é automaticamente obedecido no formalismo de Kostin.

Outra teoria que adapta-se ao tratamento quântico de sistemas dissipativos é a chamada mecânica estocástica. Na forma em que será utilizada nesta tese, a mecânica estocástica foi desenvolvida por Nelson (15,16) numa tentativa de estabelecer uma interpretação clássica da mecânica quântica. Nelson deduziu a equação de Schrödinger partindo da hipótese fundamental de que cada partícula microscópica executa um movimento browniano no vácuo. Verificou-se, alguns anos depois, que a quantização estocástica (como é também chamada a teoria de Nelson) pode ser estendida a sistemas sujeitos a uma força dissipativa proporcional à velocidade da partícula. Nestas circunstâncias a mecânica estocástica conduz a uma equação de Schrödinger não-linear que não é outra senão a equação de Kostin a que aludimos no parágrafo anterior (17,18). Na mecânica estocástica é possível provar (19) que a única força dissipativa consistente com o formalismo é a força proporcional à velocidade, desde que se exija que o produto final do emprego da quantização estocástica seja uma equação de Schrödinger não-linear. A mecânica estocástica de Nelson admite uma generalização (20) que propicia a construção de um espa

ço de Hilbert e de operadores que coincidem com os operadores usuais da mecânica quântica (21). Os operadores de posição e momento linear assumem formar idêntica à ordinária mesmo na presença de uma força dissipativa proporcional à velocidade (22), muito embora o operador hamiltoniano deixe de ser linear.

Como se vê, outra característica notável do assunto desta tese é que ele pode ser considerado como um campo de prova para métodos de quantização distintos do canônico. Ao contrário da mecânica estocástica, que admite a equação de Kostin como a única equação de Schrödinger não-linear consistente com seu formalismo matemático, a formulação de Kostin dá margem à construção de múltiplas equações de Schrödinger não-lineares (23,24). Como seria de se esperar, estas diferentes equações levam a resultados distintos que devem ser devidamente explorados a fim de descobrirmos qual delas é, ao menos aproximadamente, a mais correta. De um ponto de vista estritamente teórico nenhuma das outras equações é superior à de Kostin. Pelo contrário, a equação de Kostin pode ser também deduzida dentro do contexto de uma interpretação hidrodinâmica da mecânica quântica (25), o que lhe confere uma base teórica consideravelmente mais sólida do que a das demais equações até aqui aventadas.

O último argumento, mas não o menos importante, para legitimar o estudo da teoria quântica dos sistemas dissipativos é que tais sistemas, além de interessantes do ponto de vista acadêmico, são fisicamente relevantes. Apenas para insinuar ao leitor que de fato assim é, mencionemos uns poucos trabalhos que consistem na aplicação a sistemas físicos concretos dos diferen

tes processos de quantizar sistemas dissipativos a que já fizemos alusão. Na física do estado sólido há exemplos de aplicações da quantização canônica de sistemas dissipativos ao cálculo da condutividade elétrica (26), ao comportamento da carga num circuito elétrico RLC (4), ao campo eletromagnético numa cavidade ressonante (27) e ao efeito Hall (28). Uma tentativa de construir uma mecânica estatística de sistemas dissipativos foi feita por Caldirola (29). A quantização não-canônica baseada na equação de Kostin foi aplicada à determinação da taxa de difusão intersticial de impurezas em materiais sólidos (30). A segunda quantização da equação de Kostin foi realizada e aplicada ao decaimento térmico da corrente alternada de Josephson nas vizinhanças da temperatura crítica (31). A importância de efeitos dissipativos em sistemas macroscópicos com características quânticas foi evidenciada recentemente (32) em materiais supercondutores nas proximidades do zero absoluto de temperatura. Numerosas outras aplicações de caráter mais teórico serão referidas no seu devido tempo no corpo da tese. Evidentemente, não se espera que a quantização de sistemas dissipativos dê resultados exatos, uma vez que o tratamento correto deveria considerar o sistema dissipativo como parte integrante de um sistema conservativo mais amplo que, por seu turno, seria quantizado pelos métodos comuns. O comportamento do subsistema de interesse seria obtido em seguida por eliminação dos graus de liberdade que não interessam (graus de liberdade do "banho térmico"). Este programa, entretanto, é extremamente ambicioso e difícil de ser levado a bom termo em geral, o que tem sido conseguido apenas quando concebem-se modelos bastante simplistas para simular o "banho térmico" (33,34). A teoria quântica dos sistemas dissipativos revela-se atraente ao

permitir que em vários casos importantes cálculos analíticos ex
plícitos sejam factíveis.

Outro ramo da Física no qual sistemas dissipativos quan
tizados são potencialmente aplicáveis é a física nuclear. Alguns
processos nucleares importantes, tais como colisões fortemente
inelásticas de íons pesados e fissão nuclear, desenrolam-se com
transferência da energia cinética de movimentos coletivos para
os graus de liberdade intrínsecos. Desta forma fenômenos dissi
pativos adquirem considerável proeminência no estudo de vários
tipos de reações nucleares (35). Aplicações futuras à fissão nu
clear ou às colisões profundamente inelásticas de íons pesados
poderão permitir uma avaliação mais fundamentada do real signi
ficado da teoria quântica dos sistemas dissipativos. Mais preci
samente, testes empíricos das previsões dos diferentes métodos
de quantização já citados poderão capacitar-nos a tomar uma de
cisão a favor de um método particular ou, talvez, contra todos
eles. O mais provável é que a experiência delimite a região de
aplicabilidade destes modelos fenomenológicos.

Fazemos questão de deixar bem claro que no presente tra
balho o problema da quantização de sistemas dissipativos é abor
dado de um ângulo estritamente teórico e formal, de modo que não
nos deteremos no exame minucioso das possíveis aplicações dos
formalismos considerados.

Esta tese está organizada da seguinte maneira. No Capí
tulo 1 a quantização canônica da partícula livre e do oscilador
harmônico amortecidos é levada a cabo com base na lagrangiana de

Bateman. Relemos algumas das principais soluções até aqui obtidas para a equação de Schrödinger e analisamos as propriedades físicas destas soluções, sublinhando especialmente certas características fisicamente inaceitáveis manifestadas por tais soluções. A análise crítica da quantização canônica de sistemas dissipativos é objeto do Capítulo 2, onde ressaltamos as ambigüidades que patenteiam-se e discutimos os critérios que devem nortear a escolha da lagrangiana tanto no caso dissipativo como no conservativo. No Capítulo 3 investigamos a quantização estocástica de sistemas dissipativos e retomamos raciocínios de outros autores que mostram como a equação de Kostin pode ser obtida dentro da estrutura da mecânica estocástica. Caracterizamos a força dissipativa mais geral que pode ser incluída no formalismo estocástico e construímos a álgebra dos operadores na presença de uma força de amortecimento proporcional à velocidade. No Capítulo 4 estudamos como construir equações de Schrödinger não-lineares para sistemas dissipativos invocando o princípio da correspondência representado no teorema de Ehrenfest, e comparamos a equação de Kostin com diversas outras equações de Schrödinger não-lineares que têm sido propostas como possíveis candidatas à descrição de sistemas dissipativos quantizados. O Apêndice é dedicado a uma introdução elementar à teoria dos processos estocásticos, e contém todos os instrumentos necessários às aplicações constantes do Capítulo 3.

A quantidade de publicações existentes sobre a teoria quântica de sistemas dissipativos é extraordinariamente vasta, de modo que a bibliografia citada nesta tese, embora já bastante alentada, está longe de ser completa. Convencidos de que a

tarefa de coligir uma bibliografia completa seria muito árdua e demorada, esperamos, ao menos, que nossa lista de referências constitua uma amostra representativa da literatura existente.

Por último, tentaremos combater o colonialismo cultural tratando a língua portuguesa com o respeito que a sua beleza inspira. Assim, o leitor não encontrará neste texto barbarismos abomináveis do calibre de "fitar" (por "ajustar"), "assumir" (por "supor" ou "admitir"), "derivar" (por "deduzir"), "requerimento" (por "exigência") e tantos outros - a lista completa seria quilométrica - que pululam na "linguagem" empregada pela maior parte dos físicos brasileiros.

E assim, somos a cada passo advertidos de que não podemos dominar a Natureza como um conquistador domina um povo estrangeiro, como alguém situado fora da Natureza; mas sim que lhe pertencemos, com a nossa carne, nosso sangue, nosso cérebro; que estamos no meio dela; e que todo o nosso domínio sobre ela consiste na vantagem que levamos sobre os demais seres de poder chegar a conhecer suas leis e aplicá-las corretamente.

Friedrich Engels, Humanização do Macaco Pelo Trabalho.

CAPÍTULO 1

QUANTIZAÇÃO CANÔNICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS

Neste capítulo ilustramos as dificuldades inerentes à quantização canônica de sistemas dissipativos por intermédio de dois exemplos bastante simples: a partícula livre e o oscilador harmônico amortecidos. Revemos alguns resultados conhecidos da quantização canônica destes sistemas a partir de uma lagrangiana que depende explicitamente do tempo. Uma análise pormenorizada das ambigüidades que a quantização canônica de sistemas dissipativos encerra será objeto do Capítulo 2, ao qual este capítulo serve de motivação.

1.1 - A LAGRANGIANA DE BATEMAN

Consideremos um sistema clássico constituído por uma única partícula de massa m executando um movimento unidimensional e sujeita a duas forças: uma força conservativa derivada da função energia potencial $V(x)$ e uma força dissipativa da forma $F = -m\beta\dot{x}$, onde β é uma constante positiva. Vamos cingir-nos ao exame do caso unidimensional única e exclusivamente por razões de simplicidade. A equação de movimento do sistema mecânico em questão é, portanto,

$$m \ddot{x} + m \beta \dot{x} + \frac{dV}{dx} = 0 . \quad (1.1.1)$$

A energia total deste sistema é definida por

$$E = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) . \quad (1.1.2)$$

Observe que a energia total é a soma da energia cinética com a energia potencial, onde a energia potencial não leva em conta a existência da força dissipativa. Esta definição por nós utilizada corresponde ao uso corrente em mecânica analítica [(36), pág. 63; (37), § 8]. Usando a equação de movimento (1.1) é fácil mostrar que

$$\frac{dE}{dt} = F \dot{x} = - m\beta \dot{x}^2 \leq 0 , \quad (1.1.3)$$

de modo que a energia da partícula decresce com o passar do tempo. Uma força F que não provém de nenhuma função energia potencial $V(x)$ é dita não-conservativa. Se, além disso, a força não-conservativa F satisfizer a condição $F \dot{x} \leq 0$, então ela será chamada de força dissipativa, pois neste caso a energia efetivamente se dissipa. Se a desigualdade acima citada não for satisfeita a energia poderá ora crescer, ora decrescer ou mesmo permanecer constante. Definições mais gerais e alguns exemplos significativos podem ser encontrados no livro de Gantmacher [(37), § 8].

Para que possamos realizar a quantização canônica de qualquer sistema clássico é preciso que disponhamos de uma hamiltoniana que o descreva. Para construir uma hamiltoniana é mais fácil buscar primeiro uma lagrangiana que seja capaz de gerar a equação de movimento (1.1). Aqui surge a primeira dificuldade: é fácil provar que não existe nenhuma lagrangiana capaz

de fornecer uma equação de movimento idêntica à Eq. (1.1). Sendo esta a situação, o máximo que se pode almejar é a construção de alguma lagrangiana que conduza a uma equação equivalente à equação de movimento em questão. Uma excelente discussão das condições sob as quais um dado sistema de equações diferenciais ordinárias pode ser posto na forma langrangiana encontra-se em Havas (9). As conseqüências físicas da existência de lagrangianas não-equivalentes que geram equações de movimento equivalentes serão discutidas no Capítulo 2.

Ao que parece, a primeira lagrangiana com a propriedade de de fornecer uma equação de movimento equivalente à Eq. (1.1) foi descoberta por Bateman (1). Ela tem a forma

$$L(x, \dot{x}, t) = e^{\beta t} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] . \quad (1.1.4)$$

Esta lagrangiana foi encontrada por Bateman (no caso particular em que o potencial $V(x)$ é harmônico) ao estudar a possibilidade de dedução das equações de movimento de sistemas dissipativos a partir de princípios variacionais. A lagrangiana de Bateman foi subseqüentemente redescoberta por diversos autores de forma independente (2, 38, 39). A equação de Lagrange proveniente da lagrangiana (1.4) é

$$e^{\beta t} \left(m \ddot{x} + m \beta \dot{x} + \frac{dV}{dx} \right) = 0 . \quad (1.1.5)$$

Note que esta equação não é idêntica à Eq. (1.1) mas é equivalente a ela, isto é, toda solução da Eq. (1.5) é solução da Eq. (1.1) e vice-versa porque o fator $e^{\beta t}$ nunca se anula. No caso particu

lar em que $V(x) = 0$ conhecem-se outras lagrangianas dependentes explicitamente do tempo (40) para a Eq. (1.1), mas não iremos discutí-las aqui.

O momento canônico conjugado a x é

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x} e^{\beta t} , \quad (1.1.6)$$

que não coincide com o momento linear da partícula. Este resultado revestir-se-á de particular relevância na teoria quântica porque violações do princípio da incerteza a ele estarão associadas. A hamiltoniana correspondente à lagrangiana (1.4) é

$$H = \dot{x}p - L = e^{-\beta t} \frac{p^2}{2m} + e^{\beta t} V(x) . \quad (1.1.7)$$

Esta hamiltoniana foi descoberta diretamente (sem partir da lagrangiana de Bateman) por Kanai (5) ao investigar a quantização canônica de sistemas dissipativos, tendo considerado também a força de reação da radiação proporcional a \ddot{x} que ocorre na teoria clássica do elétron. Note que H depende explicitamente do tempo, de modo que não representa uma quantidade conservada. Apesar disso, H não é a energia do sistema. Um cálculo simples mostra que

$$E = e^{-\beta t} H . \quad (1.1.8)$$

Esta discrepância entre H e E será de grande importância física na teoria quântica, como veremos no Capítulo 2.

1.2 - QUANTIZAÇÃO CANÔNICA

Agora que já estamos de posse de uma hamiltoniana que gera uma equação de movimento equivalente à Eq.(1.1), é possível procedermos à quantização canônica dos sistemas descritos por esta hamiltoniana para algumas escolhas particulares do potencial $V(x)$. Discutiremos umas poucas soluções simples e suas propriedades, pois nossa preocupação é eminentemente ilustrativa. Muitas outras soluções conhecidas serão citadas apenas de passagem, sem maiores detalhes. O leitor interessado poderá recorrer às fontes que serão mencionadas nos próximos parágrafos.

De acordo com o processo tradicionalmente adotado para executar a quantização canônica de um sistema clássico, imporemos a seguinte relação de comutação à coordenada e seu momento canônico conjugado:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar . \quad (1.2.1)$$

Note que devido à Eq.(1.6) a relação de comutação entre posição e momento linear torna-se

$$[\hat{x}, m \hat{\dot{x}}] = i\hbar e^{-\beta t} . \quad (1.2.2)$$

Na representação de Schrödinger o operador de posição \hat{x} corresponde a multiplicação por x , e \hat{p} é representado pelo operador diferencial $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Nesta representação o operador hamiltoniano assume a forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\beta t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e^{\beta t} V(x) , \quad (1.2.3)$$

e a equação de Schrödinger associada é

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\beta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + e^{\beta t} V(x) \psi . \quad (1.2.4)$$

Consideremos algumas soluções desta equação em dois casos particulares exatamente solúveis.

A. Partícula Livre Amortecida

Neste caso $V(x) = 0$ e a equação de Schrödinger (2.4)

torna-se

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\beta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} . \quad (1.2.5)$$

Em termos da variável μ definida por (2, 41)

$$\mu = \frac{1}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) \quad (1.2.6)$$

a Eq. (2.5) reduz-se à equação de Schrödinger para uma partícula livre:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \mu} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} . \quad (1.2.7)$$

A função de Green (ou propagador) desta última equação é bem conhecida (42):

$$K(x, \mu) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \mu} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{m x^2}{2i \hbar \mu} \right). \quad (1.2.8)$$

Esta função satisfaz a Eq. (2.7) sujeita à condição inicial

$$K(x, +0) \equiv \lim_{\mu \rightarrow 0^+} K(x, \mu) = \delta(x). \quad (1.2.9)$$

Suponha que em $t = 0$ (que corresponde a $\mu = 0$) tenhamos

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x). \quad (1.2.10)$$

Então a única solução de (2.7) que satisfaz esta condição inicial é

$$\psi(x, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x - x', \mu) \psi_0(x') dx' \quad (1.2.11)$$

Analisemos soluções de (2.5) na forma de pacotes de ondas. Tomemos, à guisa de exemplo, um pacote gaussiano inicial da forma

$$\psi_0(x) = \left[2\pi (\Delta x)_0^2 \right]^{-1/4} \exp \left[- \frac{x^2}{4 (\Delta x)_0^2} \right]. \quad (1.2.12)$$

Inserindo as Eqs. (2.8) e (2.12) na Eq. (2.11) e efetuando a integração vem

$$\psi(x, \mu) = \left[2\pi (\Delta x)_0^2 \right]^{-1/4} \left[1 + \frac{i \hbar \mu}{2m (\Delta x)_0^2} \right]^{-1/2} \exp \left\{ - \frac{x^2}{4 \left[(\Delta x)_0^2 + \frac{i \hbar \mu}{2m} \right]} \right\}. \quad (1.2.13)$$

A largura $(\Delta x)_t$ do pacote no instante t é

$$(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_0^2 \left[1 + \frac{\hbar^2 \mu^2}{4m^2 (\Delta x)_0^4} \right] = (\Delta x)_0^2 + (\Delta v)_0^2 \frac{(1-e^{-\beta t})^2}{\beta^2}, \quad (1.2.14)$$

onde $(\Delta v)_0 = \hbar/(2m(\Delta x)_0)$ é a incerteza inicial na velocidade da partícula. Note que a largura $(\Delta x)_t$ permanece finita no limite $t \rightarrow \infty$, ao contrário do que se dá na ausência de amortecimento, quando temos que $(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_0^2 + (\Delta v)_0^2 t^2$ e o pacote alarga-se indefinidamente com o passar do tempo.

Um cálculo simples mostra que

$$(\Delta p)_t = \frac{\hbar}{2(\Delta x)_0}, \quad (1.2.15)$$

de modo que a incerteza no momento canônico da partícula permanece constante durante o movimento. Vemos, portanto, que o produto de incertezas $(\Delta x)_t (\Delta p)_t$ permanece finito para qualquer valor de t . Mas, por causa da Eq.(1.6), resulta que

$$(\Delta x)_t (\Delta mv)_t = e^{-\beta t} (\Delta x)_t (\Delta p)_t \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 0, \quad (1.2.16)$$

o que representa uma flagrante violação da relação de incerteza de Heisenberg entre a posição e o momento linear. A causa deste fenômeno remonta claramente ao fato de o momento linear e o momento canônico não coincidirem, fato este expresso pela Eq.(1.6). Conseqüentemente esta violação do princípio da incerteza deve-se à relação de comutação anômala (2.2) entre os operadores de posição e momento linear.

Existem muitas outras soluções da Eq.(2.5) como, por

exemplo soluções na forma de ondas planas, que podem ser encontradas em Hasse (23) e em referências lá citadas. Não vamos discutir estas e outras soluções por não as julgarmos suficientemente interessantes para nossos propósitos.

B. Oscilador Harmônico Amortecido

Com um potencial harmônico $V(x) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$ a Eq. (2.4) passa a escrever-se

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\beta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{\beta t} \psi. \quad (1.2.17)$$

A quantização canônica do oscilador harmônico amortecido foi realizada pela primeira vez por Kerner (3) e Stevens (4). Estes autores descobriram uma classe de soluções da Eq. (2.17) que constituem os chamados estados pseudo-estacionários do oscilador harmônico amortecido. Desta família de soluções aquela que tem mais baixa energia é dada por (13)

$$\psi_0(x,t) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp \left[(-i\omega + \frac{\beta}{4} t) - \left(\frac{im\beta}{4\hbar} + \frac{1}{2} \alpha^2\right) x^2 e^{\beta t} \right], \quad (1.2.18)$$

onde

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega \equiv \frac{2m}{\hbar} (\omega_0^2 - \beta^2/4)^{1/2}. \quad (1.2.19)$$

Esta solução é válida apenas para o caso de amortecimento fraco, isto é, $\beta < 2\dot{\omega}_0$. Os estados pseudo-estacionários foram encontrados por Dodonov e Man'ko (43) usando as propriedades de periodicidade do hamiltoniano (2.3) sob translações temporais ima

ginárias.

É fácil verificar que

$$(\Delta x)_t = a e^{-\frac{\beta t}{2}}, \quad (\Delta p)_t = b e^{\frac{\beta t}{2}}, \quad (1.2.20)$$

onde a e b são constantes positivas cujos valores são irrelevantes para o raciocínio que se segue. Da Eq. (1.6) concluímos que

$$(\Delta mv)_t = e^{-\beta t} (\Delta p)_t = b e^{-\frac{\beta t}{2}}. \quad (1.2.21)$$

Vemos, portanto, que não apenas o produto $(\Delta mv)_t (\Delta x)_t$ vai a zero quando $t \rightarrow \infty$, mas cada fator separadamente se anula neste limite assintótico. Isto significa que no limite $t \rightarrow \infty$ a partícula possui posição e momento linear perfeitamente definidos. Com efeito, de (2.18) decorre que

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \psi_0(x, t) \right|^2 &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{\beta t/2} \exp(-\alpha^2 x^2 e^{\beta t}) = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-x^2/\epsilon^2)}{\epsilon} = \delta(x). \end{aligned} \quad (1.2.22)$$

A distribuição de probabilidade do momento canônico, sendo o quadrado do módulo da transformada de Fourier de $\psi_0(x, t)$, é também gaussiana. A Eq. (2.21) atesta que a largura da densidade de probabilidade do momento linear (que, obviamente, é gaussiana) tende a zero quando $t \rightarrow \infty$, o que quer dizer que esta densidade de probabilidade também contrai-se a uma função δ . Vê-se, então, que neste limite a partícula encontra-se, com certeza, em repouso na origem do sistema de coordenadas, de modo que toda a

sua energia foi dissipada. Isto representa uma nítida violação do princípio da incerteza. No próximo capítulo veremos que este fenômeno pode ser explicado de maneira extremamente simples e convincente.

Um cálculo direto associado à utilização da Eq. (1.8) estabelece que o valor esperado da energia é dado por (13)

$$\langle \hat{E} \rangle = e^{-\beta t} \langle \hat{H} \rangle = e^{-\beta t} \frac{\hbar \omega_0^2}{2\omega} . \quad (1.2.23)$$

Este resultado vem corroborar nossas asserções anteriores, isto é, a energia se dissipa completamente com o passar do tempo. Este é outro dos aspectos deste tratamento que tem sido alvo de críticas severas (27, 13), pois representa por si só uma violação do princípio da incerteza ao predizer uma energia do ponto zero nula.

Outros cálculos interessantes têm sido realizados fazendo uso da lagrangiana de Bateman. Por exemplo, o propagador da equação de Schrödinger (2.4) foi determinado para alguns potenciais simples por meio das integrais funcionais de Feynman (44) por analogia com o procedimento adotado para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo (45), e, também, por outros métodos (46). O hamiltoniano (2.3) tem também sido útil para certas aplicações na mecânica estatística (47). Do ponto de vista clássico vale a pena sublinhar que a lagrangiana de Bateman é inatacável e perfeitamente legítima no que diz respeito à busca das soluções da equação clássica de movimento (1.1). Como testemunho disto podemos mencionar que a aplicação da teoria de Hamilton-Jacobi partindo da lagrangiana (1.4) conduz aos mesmos

resultados que os obtidos resolvendo-se a equação diferencial ordinária (1.1) diretamente (48, 49). Não poderíamos deixar de salientar que existe uma transformação canônica notavelmente simples que elimina a dependência temporal explícita da hamiltoniana (1.7) quando o potencial $V(x)$ é harmônico. Esta transformação canônica é muito útil tanto para a quantização canônica do oscilador harmônico amortecido (3, 4) quanto para a resolução de sua equação clássica de movimento pelo método de Hamilton-Jacobi (49).

The theoretical possibilities in a given case are relatively few and relatively simple, and among them the choice can often be made by quite general arguments. Considering these tells us what is possible but does not tell us what reality is.

Albert Einstein

CAPÍTULO 2

CRÍTICA DA QUANTIZAÇÃO CANÔNICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS

O objetivo fundamental deste capítulo é mostrar que a quantização canônica de sistemas dissipativos é ambígua. Revemos argumentos que provam que a lagrangiana de Bateman descreve, na verdade, um sistema com massa variável, e não um sistema dissipativo. Uma análise mais apurada do sistema físico descrito pela lagrangiana de Bateman permite compreender os resultados da quantização canônica obtidos no capítulo anterior. Observamos que existem lagrangianas não-equivalentes capazes de gerar equações de movimento equivalentes. Isto vale tanto para sistemas conservativos quanto para sistemas dissipativos. No primeiro caso, a exigência de que a hamiltoniana seja igual à energia total é suficiente para definir uma classe de lagrangianas que representam um único sistema físico na teoria quântica. Para sistemas dissipativos notamos que o mesmo critério é excessivamente restritivo, e mesmo uma condição mais fraca e mais realista impede a existência de lagrangianas. Uma saída possível, consistindo em incluir na lagrangiana apenas os potenciais das forças conservativas e fazer as forças dissipativas figurarem exclusivamente nas equações de movimento, revela-se incompatível com o formalismo matemático da mecânica quântica.

2.1 - A DESCRIÇÃO LAGRANGIANA DE SISTEMAS CLÁSSICOS

Os exemplos apresentados no capítulo precedente demonstraram cabalmente que há sérias dificuldades no que respeita à

quantização de sistemas clássicos dissipativos. Os resultados físicos inaceitáveis já discutidos denunciam que a lagrangiana de Bateman não é apropriada para descrever corretamente, na mecânica quântica, os sistemas físicos a que se propõe. Torna-se imperiosa, então, a necessidade de um estudo mais aprofundado da possibilidade ou não de aplicar-se o formalismo canônico de quantização a sistemas dissipativos.

Uma característica essencial da equação de movimento (1.1.1) é que, como já observamos no Capítulo 1, não existe nenhuma lagrangiana capaz de gerar uma equação de movimento idêntica a ela. A lagrangiana de Bateman fornece uma equação de movimento apenas equivalente à Eq. (1.1.1). É fato muito bem conhecido que existe uma família infinita de lagrangianas que produzem equações de movimento idênticas a uma dada equação. Estas são denominadas lagrangianas equivalentes.

Definição. Considere um sistema mecânica com n graus de liberdade representados pelas coordenadas generalizadas q_1, \dots, q_n . Duas lagrangianas $L(q, \dot{q}, t)$ e $L'(q, \dot{q}, t)$, onde $q = (q_1, \dots, q_n)$, são ditas equivalentes se existe uma função $F(q, t)$ tal que $L'(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{dF}{dt}(q, t)$. Caso contrário L e L' são ditas não-equivalentes.

Esta pluralidade de lagrangianas são causa preocupações porque é possível provar que lagrangianas equivalentes descrevem o mesmo sistema físico na mecânica quântica (50), ao mesmo tempo que na mecânica clássica elas geram equações de movimento idênticas. As condições necessárias e suficientes para que exista

ta uma lagrangiana cujo conjunto de equações de Lagrange seja idêntico a um dado conjunto de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem foram descobertas por Helmholtz há muitos anos (51). As condições de Helmholtz, evidentemente, não são satisfeitas pela Eq. (1.1.1). De crucial importância, embora menos discutida, é a existência de lagrangianas não-equivalentes mas que conduzem a equações equivalentes a uma mesma equação clássica de movimento. Uma investigação geral das condições sob as quais é possível construir lagrangianas capazes de fornecer equações equivalentes a uma dada equação de movimento foi levada a cabo por Havas (9), que mostrou que quase sempre é possível encontrar tais lagrangianas. Há alguns casos patológicos, contudo, que não admitem lagrangianas. Por exemplo, Douglas (52) provou que não existe nenhuma lagrangiana capaz de produzir equações de movimento equivalentes a

$$\ddot{x} = x^2 + y^2, \quad \ddot{y} = x. \quad (2.1.1)$$

Casos como este são raros, e numerosos autores têm discutido a possibilidade de existirem lagrangianas não-equivalentes associadas a uma dada equação de movimento (53). A título de exemplo simples e ilustrativo, considere a equação de movimento unidimensional de uma partícula livre amortecida:

$$\ddot{x} + \beta \dot{x} = 0. \quad (2.1.2)$$

Foi demonstrado por Kobussen (53) que qualquer lagrangiana da forma

$$L(x, \dot{x}) = \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} f(y + \beta x), \quad (2.1.3)$$

onde f é uma função real arbitrária tal que f' nunca se anula, dá lugar a uma equação de movimento equivalente à Eq.(1.2). De fato, é muito fácil comprovar que a equação de Lagrange associada à lagrangiana (1.3) é

$$\frac{f'(\dot{x} + \beta x)}{\dot{x}} (\ddot{x} + \beta \dot{x}) = 0, \quad (2.1.4)$$

de modo que se f' nunca se anular a equação acima será equivalente à Eq.(1.2). É fácil provar que quaisquer duas lagrangianas distintas da classe definida pela Eq.(1.3) não são equivalentes. Com efeito, considere as lagrangianas

$$\begin{aligned} L_f(x, \dot{x}) &= \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} f(y + \beta x), \\ L_g(x, \dot{x}) &= \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} g(y + \beta x) \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

e suponha que elas são equivalentes. Já que L_f e L_g não dependem explicitamente do tempo, deve existir uma função $F(x)$ tal que

$$L_f(x, \dot{x}) - L_g(x, \dot{x}) \equiv \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} h(y + \beta x) = \frac{dF}{dt} = \dot{x} F'(x), \quad (2.1.6)$$

onde $h(\mu) = f(\mu) - g(\mu)$. Devemos ter, portanto,

$$\int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} h(y + \beta x) = F'(x). \quad (2.1.7)$$

Diferenciando esta última equação em relação a \dot{x} vem

$$\frac{1}{\dot{x}^2} h(\dot{x} + \beta x) = 0 \quad (2.1.8)$$

ou $h \equiv 0$, donde $f \equiv g$. Portanto L_f e L_g não são equivalentes se $f \neq g$. A existência de lagrangianas não-equivalentes não é privilégio de sistemas dissipativos. Considere a equação de movimento

$$m \ddot{x} + \frac{dV}{dx} = 0 . \quad (2.1.9)$$

Então todas as lagrangianas da forma

$$L(x, \dot{x}) = \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} f\left(\frac{m}{2} y^2 + V(x)\right), \quad (2.1.10)$$

com f tal que $f' \neq 0$, determinam equações de movimento equivalentes a (1.9), conforme observou Kobussen (53). Repetindo-se o raciocínio anterior prova-se imediatamente que quaisquer duas lagrangianas distintas da forma (1.10) são não-equivalentes. A classe mais geral possível de lagrangianas para a Eq. (1.9) foi construída por Rosen (53). Pode-se tirar partido das propriedades de simetria das equações de movimento para a construção de lagrangianas não-equivalentes (54). Exemplos explícitos de lagrangianas não-equivalentes são conhecidos principalmente no caso de sistemas mecânicos unidimensionais. Conhecem-se outros exemplos concretos para o oscilador harmônico simples em duas ou três dimensões e em coordenadas cartesianas (55). Nestes casos cada grau de liberdade tem sua própria equação de movimento independente das demais. Trata-se, na verdade, de uma situação trivial já que, ao invés de um problema pluridimensional genuíno, o que se tem são vários problemas unidimensionais independentes.

Todos os argumentos desenvolvidos nos parágrafos anteriores foram apresentados com o intuito de tornar claro que existe uma enorme riqueza de alternativas no que tange à busca de uma lagrangiana para descrever um sistema físico cuja equação de movimento seja conhecida. Do ponto de vista clássico todas as lagrangianas que fornecem equações de movimento equivalentes à equação em questão são igualmente legítimas. O quadro muda radicalmente quando se trata da teoria quântica correspondente. Será que todas as lagrangianas levam às mesmas previsões físicas após a quantização canônica? Veremos em seguida que não: lagrangianas não-equivalentes conduzem a propriedades físicas mutuamente contraditórias na mecânica quântica. Em sendo esta a situação, que critérios irão orientar-nos na busca da lagrangiana que descreva corretamente o sistema físico em que estejamos interessados?

Antes de determo-nos nestas questões, todavia, analisemos mais de perto a lagrangiana de Bateman a fim de descobriremos que sistema físico ela efetivamente representa. Isto possibilitará uma compreensão dos diversos resultados aparentemente inesperados discutidos no capítulo anterior.

2.2 - DISSIPACÃO VERSUS MASSA VARIÁVEL

Considere a lagrangiana (1.1.4) no caso especial em que o potencial $V(x)$ é harmônico, isto é,

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m e^{\beta t}}{2} \dot{x}^2 - \frac{m e^{\beta t}}{2} \omega_0^2 x^2 . \quad (2.2.1)$$

Repare que escrita desta forma esta lagrangiana pode ser encarada como sendo a diferença entre a energia cinética e a energia potencial de uma partícula de massa variável

$$M(t) = m e^{\beta t} \quad , \quad (2.2.2)$$

isto é, esta lagrangiana descreve um oscilador harmônico simples de frequência angular constante ω_0 , mas cuja massa cresce com o tempo de acordo com a Eq. (2.2). É fácil idear um sistema deste tipo (56). Imagine um pêndulo executando pequenas oscilações e constituído por um balde que recolhe chuva que cai a uma taxa "cientificamente arranjada" de tal maneira que a massa do sistema cresça exponencialmente com o tempo. A lagrangiana deste sistema será (x denota o deslocamento horizontal do pêndulo)

$$L = \frac{M(t)}{2} \dot{x}^2 - \frac{M(t)}{2} \frac{g}{\ell} x^2 \quad , \quad (2.2.3)$$

onde ℓ é o comprimento do pêndulo e g é a aceleração da gravidade. A interpretação de massa variável é perfeitamente consistente com o desejo de que o momento canônico coincida com o momento linear. Nesta interpretação o momento canônico

$$p = m \dot{x} e^{\beta t} = M(t) \dot{x} \quad (2.2.4)$$

é de fato idêntico ao momento linear.

Para termos a confirmação de que a interpretação de massa variável é correta, consideremos a dedução da equação de movimento deste sistema diretamente a partir da segunda lei de

Newton (41,56). Considere uma partícula cuja massa esteja crescendo sem que a massa acrescida carregue nenhum momento linear (a água recolhida por um balde oscilando numa chuva vertical não contribui para modificar o momento linear horizontal do sistema). A aplicação do teorema de conservação do momento linear num intervalo de tempo Δt fornece

$$(M + \Delta M)(v + \Delta v) - Mv = \int_t^{t+\Delta t} F dt \quad , \quad (2.2.5)$$

onde F é a força externa agindo sobre a partícula. Dividindo esta equação por Δt e tomando o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$ chegamos a

$$\frac{d}{dt}(Mv) = F \quad . \quad (2.2.6)$$

Se a força F provém do potencial $\varphi(x,t)$ esta última equação reduz-se a

$$\frac{d}{dt}(M\dot{x}) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \quad , \quad (2.2.7)$$

que tem por lagrangiana

$$L = \frac{M}{2} \dot{x}^2 - \varphi(x,t) \quad . \quad (2.2.8)$$

Quando o potencial pode ser escrito como

$$\varphi(x,t) = M(t) V(x) \quad , \quad (2.2.9)$$

que tem a forma de um potencial gravitacional proporcional à massa, a Eq.(2.8) assume a forma

$$L = \frac{M(t)}{2} \dot{x}^2 - M(t) V(x). \quad (2.2.10)$$

Escolhas apropriadas de $M(t)$ e $V(x)$ fazem com que as lagrangianas (2.10) e (2.1) tornem-se idênticas. Ao mesmo tempo as equações de movimento (2.7) e (1.1.1) também tornam-se idênticas. Note que na interpretação de massa variável a hamiltoniana coincide com a energia total do sistema:

$$H = p \dot{x} - L = \frac{M}{2} \dot{x}^2 + \varphi(x, t). \quad (2.2.11)$$

Este resultado aliado a alguns argumentos que serão explicitados na próxima seção permitem afirmar inequívoca e definitivamente que a lagrangiana de Bateman não descreve um sistema dissipativo, mas sim um sistema com massa variável, embora os dois sistemas tenham as mesmas equações de movimento!

A interpretação correta da lagrangiana de Bateman permite sanar as dificuldades encontradas na quantização canônica de sistemas supostamente dissipativos. Pelo acima exposto concluímos que os resultados da quantização canônica baseada na lagrangiana de Bateman, obtidos no Capítulo 1, referem-se a um sistema com massa variável, e não a um sistema dissipativo. Antes de mais nada vemos que a violação do princípio da incerteza é ilusória porque agora o momento canônico e o momento linear coincidem, o que não ocorria na interpretação anterior segundo a qual a partícula possuía massa constante. Além disso torna-se fácil justificar a existência de uma função de onda para o oscilador harmônico amortecido que prevê que no limite $t \rightarrow \infty$ a partícula tem posição e velocidade perfeitamente especificados, isto

é, a partícula encontra-se em repouso na origem do sistema de coordenadas. A grosso modo pode-se argumentar que à medida que t cresce a massa da partícula também cresce indefinidamente, de modo que no limite $t \rightarrow \infty$ a sua massa é infinita, ela perdeu todas as suas características quânticas e encontramos-nos no regime clássico. Por isto é possível que a partícula esteja perfeitamente localizada e com velocidade perfeitamente determinada. No caso do oscilador harmônico amortecido este argumento pode ser tornado quantitativo. A solução geral da equação clássica de movimento neste caso é

$$x(t) = A e^{-\frac{\beta t}{2}} \cos(\omega t + \delta), \quad (2.2.12)$$

donde

$$p(t) = m \dot{x} e^{\beta t} = m A e^{\frac{\beta t}{2}} \left[-\frac{\beta}{2} \cos(\omega t + \delta) - \omega \sin(\omega t + \delta) \right], \quad (2.2.13)$$

onde ω é dada pela Eq. (1.2.19) e A e δ são constantes arbitrárias. Vemos, portanto, que p pode assumir valores ilimitados à medida que $t \rightarrow \infty$, de modo que o comprimento de onda de de Broglie da partícula $\lambda = \frac{h}{p} \rightarrow 0$, confirmando que o sistema pode entrar no regime clássico. A situação é distinta para a partícula livre amortecida, cuja equação de movimento admite como solução geral

$$x(t) = A + B e^{-\beta t}, \quad (2.2.14)$$

com A e B constantes arbitrárias. Conseqüentemente

$$p(t) = m \dot{x} e^{\beta t} = -m \beta B, \quad (2.2.15)$$

de modo que, a rigor, o regime clássico nunca é atingido apesar de a massa da partícula tornar-se infinita. Por esta razão não foi possível encontrar nenhuma solução da equação de Schrödinger (1.2.5) com comportamento análogo ao da função de onda (1.2.18) do oscilador harmônico amortecido.

O exemplo da lagrangiana de Bateman mostra com clareza meridiana que é preciso encontrar condições que nos permitam ter certeza de que uma dada lagrangiana descreve realmente o sistema físico para o qual ela foi construída. Esta é a questão que passaremos a examinar agora.

2.3 - O CARÁTER AMBÍGUO DA QUANTIZAÇÃO CANÔNICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS

Desejamos encontrar critérios fisicamente razoáveis que nos permitam selecionar uma única lagrangiana ou, no máximo, uma família de lagrangianas equivalentes que forneçam a descrição correta de um dado sistema físico. Para tornar mais clara a análise desta questão no caso de sistemas dissipativos, é conveniente investigar primeiro como este problema pode ser resolvido quando se trata de sistemas conservativos (10).

Considere uma única partícula cujo movimento é governado pela equação (em coordenadas cartesianas x_1, x_2, x_3)

$$m \ddot{\vec{x}} + \vec{\nabla}V(\vec{x}) = 0 . \quad (2.3.1)$$

A fim de obter-se uma descrição lagrangiana desta equação, a pri

meira exigência que se faz à lagrangiana é a de que ela produza uma equação de movimento equivalente à Eq.(3.1). Ao menos em uma só dimensão, como já vimos, dispõe-se de uma infinidade de lagrangianas não-equivalentes que conduzem a equações de movimento equivalentes à versão unidimensional da Eq.(3.1). Dada esta superabundância de lagrangianas, qual delas deve ser escolhida como ponto de partida para a quantização canônica do sistema mecânico caracterizado pela equação de movimento (3.1)? A chave para resolver este problema foi proporcionada por um instigante trabalho de Kennedy e Kerner (57). Estes autores construíram uma hamiltoniana apta a gerar a equação de movimento de um oscilador harmônico simples unidimensional, mas que é igual à raiz quadrada da energia. O resultado da quantização subsequente foi um espectro contínuo para a energia, em flagrante contradição com o espectro uniformemente espaçado que se obtém usualmente para o oscilador harmônico. Esta descoberta evidencia que lagrangianas não-equivalentes conduzem a conseqüências físicas conflitantes na teoria quântica e, ao mesmo tempo, sugere que a condição de que a hamiltoniana seja igual à energia é de importância fundamental no que concerne à quantização. Em vista destas evidências, imponhamos como condição adicional à lagrangiana que sua hamiltoniana correspondente seja igual à energia total do sistema (10).

Esta condição implica a seguinte equação diferencial para a lagrangiana $L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$:

$$\dot{\vec{x}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} - L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + V(\vec{x}) \quad (2.3.2)$$

Verifica-se facilmente que sua solução geral vem dada por

$$L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) + \dot{\vec{x}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) , \quad (2.3.3)$$

onde $\vec{f}(\vec{x}, t)$ é um campo vetorial arbitrário. Inserindo-se a lagrangiana (3.3) nas equações de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad , \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.3.4)$$

resulta

$$m\ddot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} + \dot{x}_j \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} - \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial f_i}{\partial t} = 0 \quad , \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.3.5)$$

onde a convenção de soma sobre índices repetidos de Einstein está sendo empregada. Estas últimas equações são equivalentes ã Eq.(3.1) se e somente se

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = 0 \quad , \quad \frac{\partial f_i}{\partial x_j} - \frac{\partial f_j}{\partial x_i} = 0 \quad . \quad (2.3.6)$$

Em outras palavras, as lagrangianas da forma (3.3) conduzem ã Eq.(3.1) se e somente se existir uma função escalar $\phi(\vec{x})$ tal que $\vec{f} = \vec{\nabla} \phi(\vec{x})$. Assim, no caso de sistemas conservativos, todas as lagrangianas da forma

$$L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x}) + \dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{x}) \quad , \quad (2.3.7)$$

e apenas estas, satisfazem ambas as exigências. Note que estas lagrangianas diferem da lagrangiana usual pela derivada total em relação ao tempo de $\phi(x)$, de modo que elas constituem uma

família de lagrangianas equivalentes. Conforme já foi mencionado anteriormente, estas lagrangianas descrevem o mesmo sistema físico na teoria quântica (50). Uma demonstração alternativa e particularmente simples deste fato será dada a seguir.

O momento canônico resultante da lagrangiana (3.7) é

$$\vec{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = \vec{p} + \vec{\nabla} \phi(\vec{x}) , \quad (2.3.8)$$

onde $\vec{p} = m \dot{\vec{x}}$ é o momento linear habitual. Observe que a Eq.(3.8) pode ser encarada como parte de uma transformação para as novas variáveis canônicas

$$\vec{X} = \vec{x} , \quad \vec{P} = \vec{p} + \vec{\nabla} \phi(\vec{x}) . \quad (2.3.9)$$

Na mecânica clássica esta é uma transformação canônica (58) com uma função geradora $F_3(\vec{p}, \vec{X}) = -\vec{p} \cdot \vec{X} - \phi(\vec{X})$. Na mecânica quântica é uma transformação unitária executada pelo operador unitário $U = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \phi(\vec{x}) \right]$, como demonstrado por Dirac (59). Portanto, de acordo com a teoria geral da mecânica quântica, todas as lagrangianas da forma (3.7) dão origem às mesmas propriedades físicas na teoria quântica. Incidentalmente, esta é uma ilustração do resultado geral segundo o qual a cada transformação canônica independente do tempo de um sistema clássico (desde que possa ser obtida a partir da transformação identidade por uma sucessão de transformações canônicas infinitésimas) corresponde uma transformação unitária do sistema quântico associado (60). A conclusão final é que para sistemas conservativos a condição adicional $H=E$ define um sistema quântico fisicamente único. É

evidente que este resultado pode ser trivialmente generalizado sem quaisquer alterações para sistemas conservativos contendo um número arbitrário de partículas. Há, também, ampla sustentação empírica para a suposição de que o único sistema quântico assim obtido descreve corretamente a natureza dentro do domínio de validade da mecânica quântica.

O resultado recém-obtido merece uns breves comentários. Antes de mais nada não podemos abster-nos de assinalar que não parece haver qualquer razão física a priori para impor $H=E$ na mecânica clássica. De fato, a dedução das equações de Hamilton em qualquer livro moderno de mecânica analítica revela que a hamiltoniana é construída diretamente a partir da lagrangiana, e só depois sua possível conexão com a energia é discutida. Além disso o valor da energia em cada instante depende unicamente das equações de movimento, de modo que este valor é absolutamente insensível à escolha da hamiltoniana. Na mecânica quântica, todavia, o hamiltoniano desempenha um duplo papel: ele é responsável pela evolução temporal do sistema e, ao mesmo tempo, representa um observável, a energia. Contrariamente ao que ocorre na mecânica clássica, na mecânica quântica os autovalores da energia dependem drasticamente da escolha do hamiltoniano, como o trabalho de Kennedy e Kerner (57) tão bem exemplifica. Por conseguinte, a condição $H=E$ adquire significado físico apenas na mecânica quântica e, o que é digno de registro, ela é suficiente para caracterizar um único sistema físico. Deste arrazoado inferimos que lagrangianas não-equivalentes descrevem sistemas quânticos diferentes, muito embora classicamente possam gerar as equações de movimento de um único sis

tema mecânico. Nesse sentido a utilização de diversas lagrangianas não-equivalentes para a quantização de um único sistema clássico não pode conduzir senão a resultados disparatados (40).

A pergunta que se coloca agora é se, para sistemas dissipativos, existe algum critério análogo ao que acabamos de discutir. Com o propósito de ilustrar a análise tomemos como exemplo a Eq.(1.2), que representa uma partícula de massa unitária sujeita à força de atrito viscoso $F = -\beta\dot{x}$. Estamos em busca de um critério para a seleção da lagrangiana fisicamente correta, se é que esta última de fato existe. Tentemos primeiramente, como foi feito no caso conservativo, impor $H=E$. Algumas palavras de esclarecimento fazem-se necessárias. Aquilo que chamamos de energia é simplesmente a soma da energia cinética com a energia potencial, onde a energia potencial inclui todas as forças conservativas mas exclui todas as forças não-conservativas. Temos, então, como antes (considere a versão unidimensional da Eq.(3.3) com $m = 1$ e $V = 0$),

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{\dot{x}^2}{2} + \dot{x} f(x, t) \quad (2.3.10)$$

sendo f arbitrária. É extremamente fácil verificar que nenhuma lagrangiana desta forma pode dar origem a uma equação de movimento equivalente à Eq.(1.2), não importa qual seja a forma de f . Portanto a condição $H=E$ é excessivamente restritiva para sistemas dissipativos. Não há qualquer surpresa nisso. Observe que nenhum vestígio da força dissipativa foi deixado na lagrangiana (3.10). Devido ao fato de a energia ignorar completamente a presença da força dissipativa, a existência de uma hamiltoniana

na que seja igual à energia e, ao mesmo tempo, capaz de gerar uma equação de movimento na qual a força dissipativa esteja presente torna-se altamente improvável.

Claramente a condição discutida acima tem que ser enfraquecida a fim de permitir a existência de lagrangianas. Em nossa opinião, de todas as condições mais fracas que podem ser imaginadas a mais simples é $\frac{dH}{dt} = \frac{dE}{dt}$. Esta condição permite que H difira de E por uma função arbitrária de quaisquer constantes de movimento, e isto amplia consideravelmente o conjunto de lagrangianas admissíveis. Para a equação de movimento (1.2), por exemplo, as duas constantes de movimento independentes são

$$C_1(x, \dot{x}, t) = \dot{x} + \beta x \quad , \quad C_2(x, \dot{x}, t) = \dot{x} e^{\beta t} \quad . \quad (2.3.11)$$

Assim a consequência mais geral de $\dot{H} = \dot{E}$ é

$$\dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L = \frac{\dot{x}^2}{2} + F(C_1(x, \dot{x}, t), C_2(x, \dot{x}, t)) \quad , \quad (2.3.12)$$

onde $F(\mu, \nu)$ é uma função arbitrária de duas variáveis reais. A solução geral desta última equação é

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{\dot{x}^2}{2} + \dot{x} \int^{\dot{x}} \frac{dy}{y^2} F(C_1(x, y, t), C_2(x, y, t)) + \dot{x} f(x, t) \quad , \quad (2.3.13)$$

com f arbitrária. Observe que esta é uma maneira possível de a lagrangiana levar em conta a força dissipativa pelo menos através das constantes de movimento C_1 e C_2 , pois elas ostentam o selo da força dissipativa, nomeadamente, a constante β . Daí a esperança otimista de que da família de lagrangianas determina-

da pela Eq. (3.13) somente uma delas, ou no máximo um subconjunto de lagrangianas equivalentes, possa produzir uma equação de movimento equivalente à Eq. (1.2). Neste caso estas lagrangianas poderiam ser consideradas privilegiadas em relação às demais e uma análise das conseqüências físicas por elas originadas após a quantização poderia decidir se este critério é, de fato, significativo do ponto de vista físico. Esta esperança é insustentável, entretanto, porque, infelizmente, mesmo dentro desta classe aumentada de lagrangianas não existe nenhuma capaz de engendrar uma equação de movimento equivalente à Eq. (1.2). Ao invés de provarmos isto para o sistema representado pela Eq. (1.2), vamos apresentar uma demonstração que é válida para uma classe um pouco mais geral de sistemas dissipativos unidimensionais(11). Consideremos a equação de movimento

$$m \ddot{x} + \frac{f(\dot{x})}{\dot{x}} + \frac{dV}{dx} = 0, \quad (2.3.14)$$

isto é, estamos considerando forças dissipativas que são funções arbitrárias da velocidade, ou seja, $F = -f(\dot{x})/\dot{x}$. Esta forma de escrever a força dissipativa é conveniente para os desenvolvimentos subseqüentes. Temos, então, o seguinte:

Teorema. Se a força dissipativa for tal que $f''(\dot{x}) \neq 0$ então não existe nenhuma lagrangiana que satisfaça a condição $\dot{H} = \dot{E}$ e forneça uma equação de movimento equivalente à Eq. (3.14).

Demonstração. A taxa de variação temporal da energia é

$$\frac{dE}{dt} = F \dot{x} = -f(\dot{x}) \quad . \quad (2.3.15)$$

Seja H a hamiltoniana. Então, de acordo com nossa condição,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dE}{dt} = - f(\dot{x}) \quad . \quad (2.3.16)$$

Mas é sabido que (61)

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t} \quad . \quad (2.3.17)$$

Portanto a Eq. (3.16) assume a forma

$$\frac{\partial L}{\partial t} = f(\dot{x}) \quad , \quad (2.3.18)$$

donde

$$L(x, \dot{x}, t) = t f(\dot{x}) + G(x, \dot{x}) \quad , \quad (2.3.19)$$

onde G é uma função arbitrária duas vezes diferenciável de seus argumentos. A equação de movimento resultante desta última lagrangiana é

$$\left[t f''(\dot{x}) + G_{\dot{x}\dot{x}} \right] \ddot{x} + \dot{x} G_{x\dot{x}} + f'(\dot{x}) - G_x = 0 \quad , \quad (2.3.20)$$

onde $G_{x\dot{x}} = \frac{\partial^2 G}{\partial x \partial \dot{x}}$, etc.. Se $f''(\dot{x}) \neq 0$ o coeficiente de \ddot{x} não se anula identicamente porque G não depende explicitamente de t.

Assim, nos é permitido escrever

$$\ddot{x} = \left[t f''(\dot{x}) + G_{\dot{x}\dot{x}} \right]^{-1} \left[G_x - \dot{x} G_{x\dot{x}} - f'(\dot{x}) \right] \quad . \quad (2.3.21)$$

Uma vez que G não depende explicitamente do tempo, é evidente

que, se $f''(\dot{x}) \neq 0$, o lado direito da Eq.(3.21) depende explicitamente do tempo para qualquer G. Conseqüentemente a Eq. (3.21) não pode ser equivalente à Eq. (3.14). Isto completa a demonstração.

O caso de força dissipativa proporcional à velocidade está incluído neste teorema, pois corresponde a $f(\dot{x}) = \beta \dot{x}^2$, donde $f''(\dot{x}) = 2\beta \neq 0$. O fato de lidarmos apenas com sistemas unidimensionais não é um ponto fraco deste resultado negativo, pois se a condição $\dot{H} = \dot{E}$ fosse um bom critério para sistemas dissipativos com um número qualquer de graus de liberdade, a fortiori também o seria no caso particular unidimensional. Vale a pena ressaltar que nosso resultado é interessante não apenas classicamente. Nosso resultado também é importante no que concerne à quantização canônica de sistemas dissipativos, pois suponha que se pudesse encontrar uma classe de lagrangianas equivalentes para as quais $H=E + C(q,p,t)$, onde C é uma constante de movimento. Então, associada à variável dinâmica clássica $C(q,p,t)$, é quase sempre possível encontrar um operador hermitiano $\hat{C}(\hat{q},\hat{p},t)$ que também seja constante de movimento e tal que $\hat{H}=\hat{E} + \hat{C}$. É possível demonstrar (62) que podem ser construídas soluções para a equação de Schrödinger que sejam simultaneamente auto-estados do operador \hat{C} . Para tais estados quânticos os valores esperados do operador hamiltoniano difeririam dos valores esperados do operador de energia por uma simples constante. Portanto estes deveriam ser considerados os únicos estados fisicamente permitidos para o sistema dissipativo quantizado. Nosso teorema prova que tais estados não existem.

A argumentação desenvolvida nos parágrafos anteriores prova categoricamente que a quantização canônica de sistemas dissipativos é ambígua, isto é, não há critério para favorecer uma determinada lagrangiana em detrimento das outras. Nossos resultados corroboram objeções semelhantes já feitas por outros autores (12, 13). Diante disto, resultados como os obtidos por quantização canônica de sistemas submetidos a uma força não-conservativa proporcional ao quadrado da velocidade (63) não podem ser levados muito a sério. Neste caso a lagrangiana empregada não descreve um sistema dissipativo, mas uma partícula com massa variável e dependente da posição.

Existem outros enfoques objetivando tornar viável a quantização canônica de sistemas dissipativos. Uma maneira alternativa de obter lagrangianas para sistemas dissipativos consiste na introdução de graus de liberdade fictícios que observariam a energia dissipada pelo subsistema cujo movimento estamos interessados em analisar, de tal modo que o sistema como um todo seja conservativo (64). Este método tem sido pouco explorado, e só conhecemos exemplos de sua aplicação à teoria quântica da partícula livre amortecida (65) e à quantização do oscilador harmônico amortecido usual (66) ou amortecido pela reação da radiação (67). A lagrangiana construída por este método é uma função bilinear das velocidades generalizadas, de modo que a hamiltoniana associada não é igual à energia. Conseqüentemente este formalismo padece das mesmas ambigüidades que o método tradicional (66). Recentemente Dekker (68) propôs uma variante do formalismo canônico habitual para sistemas dissipativos introduzindo uma hamiltoniana complexa. Este método,

contudo, também não resolve as dificuldades porque as ambigüidades permanecem (69).

2.4 - UMA ALTERNATIVA INCONSISTENTE

Na seção anterior colocamos em relevo a necessidade de que a hamiltoniana escolhida para gerar a evolução temporal de um dado sistema clássico seja igual à energia. As ambigüidades envolvidas na quantização canônica de sistemas dissipativos podem ser resumidas na impossibilidade de se construir uma lagrangiana que contenha em si mesma a força dissipativa e, ao mesmo tempo, dê origem a uma hamiltoniana com a referida propriedade. Este obstáculo pode ser contornado desde que renunciemos à inclusão das forças dissipativas na lagrangiana e as incluamos exclusivamente nas equações de movimento. Este foi o caminho considerado por Brittin (6) muitos anos atrás. Seu formalismo consiste em escrever as equações de movimento de um sistema não-conservativo com n graus de liberdade na forma

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = F_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.4.1)$$

Nestas equações $L(q, \dot{q}) = T - V$ é a lagrangiana usual e $F_i = F_i(q, \dot{q})$ são forças não-conservativas, isto é, forças que não podem ser obtidas a partir de nenhum potencial generalizado $U(q, \dot{q})$. Para a equação de movimento (1.1.1), por exemplo, teríamos $L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x)$ e $F = -m\beta \dot{x}$. Observe que a lagrangiana contém somente os potenciais das forças conservativas, ficando todas as forças não-conservativas agrupadas em F_1, \dots, F_n . A passagem ao formalismo hamiltoniano faz-se da maneira tradicional. Os momentos canônicos

conjugados às coordenadas generalizadas são definidos por

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad . \quad (2.4.2)$$

Suporemos que

$$\det \left\| \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \right\| \neq 0 \quad , \quad (2.4.3)$$

de modo que a Eq. (4.2) pode ser resolvida para as velocidades em função das coordenadas e momentos generalizados, isto é , $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q,p)$. A hamiltoniana é definida por

$$H(q,p) = \sum_i \dot{q}_i p_i - L \quad . \quad (2.4.4)$$

Sendo $L = T - V$, conclui-se que se T for uma forma quadrática nas velocidades teremos $H = T + V = E$, como pretendíamos. Em termos da hamiltoniana é fácil provar que as equações de movimento (4.1) assumem a forma (6)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} + Q_i \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad , \quad (2.4.5)$$

onde $Q_i = Q_i(q,p) = F_i(q, \dot{q}(q,p))$. A equação de movimento de qualquer variável dinâmica $A(q,p)$ é dada por

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \sum_k \frac{\partial A}{\partial p_k} Q_k \quad , \quad (2.4.6)$$

onde $\{, \}$ denota os parênteses de Poisson definidos por

$$\{A, H\} = \sum_k \left(\frac{\partial A}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \quad . \quad (2.4.7)$$

Considere agora o sistema quântico correspondente a este sistema clássico, na representação de Heisenberg. De acordo com as regras da quantização canônica os operadores de Heisenberg $q(t)$, $p(t)$ obedecem às relações de comutação

$$[q_k(t), p_\ell(t)] = i\hbar \delta_{k\ell}, \quad (2.4.8)$$

$$[q_k(t), q_\ell(t)] = [p_k(t), p_\ell(t)] = 0. \quad (2.4.9)$$

A equação de movimento de qualquer operador de Heisenberg $A(t)$ é

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A(t), H(t)] + i\hbar \sum_k \frac{\partial A(t)}{\partial p_k(t)} Q_k(t). \quad (2.4.10)$$

A rigor, se $A(t)$ for um observável os termos sob o sinal de somatório devem ser apropriadamente simetrizados de modo a tornarem-se operadores hermitianos. Já que isto não afetará nossas futuras conclusões, manteremos a Eq. (4.10) como está a bem da simplicidade. Como Brittin observou, as regras de comutação (4.8) têm que ser consistentes com as equações de movimento. Portanto devemos ter

$$\left[\frac{dq_k(t)}{dt}, p_\ell(t) \right] + \left[q_k(t), \frac{dp_\ell(t)}{dt} \right] = 0, \quad (2.4.11)$$

donde

$$\left[[q_k(t), H(t)], p_\ell(t) \right] + \left[q_k(t), [p_\ell(t), H(t)] \right] + [q_k(t), i\hbar Q_\ell(t)] = 0. \quad (2.4.12)$$

A soma dos dois primeiros termos é nula porque, segundo a identidade de Jacobi, ela é igual a

$$\left[[q_k(t), p_\ell(t)], H(t) \right] = [i\hbar \delta_{k\ell}, H(t)] = 0. \quad (2.4.13)$$

Resulta, portanto,

$$[q_k(t), Q_\ell(t)] = 0 \quad , \quad k, \ell = 1, \dots, n \quad . \quad (2.4.14)$$

Por hipótese os q 's constituem um conjunto completo de observáveis comutativos. Por conseguinte decorre [(59), pág. 78] que os Q 's são funções dos q 's, isto é,

$$Q_i(t) = Q_i(q(t)) \quad . \quad (2.4.15)$$

Brittin (6) avança somente até este ponto na representação de Heisenberg, e afirma que os únicos sistemas dissipativos que podem ser tratados pelo presente formalismo são aqueles para os quais as forças generalizadas dependem apenas das coordenadas generalizadas. Em seguida ele passa a discutir a representação de Schrödinger e descobre que só é possível formular equações consistentes caso as forças $Q_i(t)$ sejam dedutíveis de um potencial escalar $U(q)$, isto é, se as forças forem conservativas.

Brittin parece ter suposto que se os Q 's dependerem somente das coordenadas então as equações de movimento (4.10) serão automaticamente consistentes com as relações de comutação canônicas restantes (4.9), que ele nem sequer deu-se ao trabalho de escrever. Examinemos esta questão com um pouco mais de cuidado (7). As condições de consistência

$$\left[\frac{dq_k(t)}{dt} , q_\ell(t) \right] + \left[q_k(t) , \frac{dq_\ell(t)}{dt} \right] = 0 \quad (2.4.16)$$

conduzem a

$$\left[[q_k(t), H(t)], q_\ell(t) \right] + \left[q_k(t), [q_\ell(t), H(t)] \right] = 0, \quad (2.4.17)$$

que são identicamente satisfeitas em virtude da identidade de Jacobi. As últimas condições de consistência são

$$\left[\frac{dp_k(t)}{dt}, p_\ell \right] + \left[p_k(t), \frac{dp_\ell(t)}{dt} \right] = 0, \quad (2.4.18)$$

donde

$$\begin{aligned} & \left[[p_k(t), H(t)], p_\ell(t) \right] + \left[p_k(t), [p_\ell(t), H(t)] \right] + \\ & + [i\hbar Q_k(t), p_\ell(t)] + [p_k(t), i\hbar Q_\ell(t)] = 0. \end{aligned} \quad (2.4.19)$$

Novamente a soma dos dois primeiro termos é nula como consequência da identidade de Jacobi, e ficamos com

$$[Q_k(t), p_\ell(t)] = [Q_\ell(t), p_k(t)]. \quad (2.4.20)$$

Mas é fácil ver que, se os $Q_i(q(t))$ forem funções que podem ser desenvolvidas em séries de potências dos $q(t)$'s, então é uma implicação das regras de comutação (4.8) que

$$[Q_k(q(t)), p_\ell(t)] = i\hbar \frac{\partial Q_k(q(t))}{\partial q_\ell(t)}. \quad (2.4.21)$$

Por conseguinte a Eq. (4.20) transforma-se em

$$\frac{\partial Q_k(q(t))}{\partial q_\ell(t)} = \frac{\partial Q_\ell(q(t))}{\partial q_k(t)}. \quad (2.4.22)$$

Isto significa que existe uma função energia potencial $U(q)$ tal que

$$Q_i(q(t)) = - \frac{\partial U(q(t))}{\partial q_i(t)} ; \quad (2.4.23)$$

em resumo, as forças F_i são conservativas. Isto contradiz nossa premissa original.

Demonstramos, em síntese, que no enfoque de Brittin nenhum sistema dissipativo pode ser submetido à quantização canônica. No caso de sistemas conservativos é possível compatibilizar as relações de comutação canônicas com as equações de movimento, embora saiba-se que as equações de movimento não determinam univocamente as relações de comutação (70). O argumento central de nossa demonstração de impossibilidade é que na presença de forças não-conservativas as equações de movimento são incompatíveis com as relações de comutação canônicas. O mesmo resultado foi demonstrado recentemente por Messer (8), e sua prova, apesar de levada a efeito com métodos diferentes, baseia-se essencialmente neste mesmo argumento.

Dada a inviabilidade de estender-se o processo de quantização canônica de modo a abarcar os sistemas dissipativos, métodos alternativos devem ser investigados a fim de que se descubra se a teoria quântica de tais sistemas faz sentido do ponto de vista físico. É exatamente à análise desta questão que serão dedicados os próximos capítulos.

Mas, agora, feita a folga que me vem, e sem pequenos dessorsegos, estou de range rede. E me inventei neste gosto, de especular idéia.

João Guimarães Rosa, Grande Sertão: Veredas

CAPÍTULO 3

QUANTIZAÇÃO ESTOCÁSTICA DE SISTEMAS DISSIPATIVOS

Mostramos neste capítulo que a formulação estocástica da mecânica quântica é aplicável a sistemas dissipativos. Fazemos uma revisão desta teoria destacando que a equação de Schrödinger pode ser deduzida a partir da hipótese de que cada partícula microscópica executa um movimento browniano no vácuo. A introdução de uma força de amortecimento proporcional à velocidade da partícula conduz a uma equação de Schrödinger não-linear. Provamos que esta é a única força dissipativa consistente com o formalismo estocástico, desde que não se pretenda romper radicalmente com a estrutura tradicional da mecânica quântica. Construímos o espaço de Hilbert e os operadores da mecânica quântica dentro do contexto estocástico. Na presença da força dissipativa proporcional à velocidade, o operador hamiltoniano torna-se não-linear, mas os operadores de posição e momento linear são idênticos aos da teoria quântica habitual.

3.1 - A MECÂNICA ESTOCÁSTICA

A interpretação estocástica da mecânica quântica representa uma tentativa de descrever os fenômenos quânticos em termos puramente clássicos. Do ponto de vista matemático o resultado fundamental da mecânica estocástica, na forma desenvolvida por Nelson (15,16,71,72), reside na demonstração da equivalência formal da equação de Schrödinger a um processo de Markov. Do ponto de vista físico a hipótese subjacente ao formalismo é que

cada partícula microscópica executa um movimento browniano no vácuo. Tal suposição tem profundas implicações tanto no que se refere a aspectos puramente epistemológicos da Física quanto no que tange à interpretação física da teoria quântica. Estas questões, apesar de sumamente relevantes e atraentes, não constituem o objeto principal deste trabalho, de modo que faremos apenas breves menções aos diversos argumentos que sobre elas têm sido aventados. Nesta tese a mecânica estocástica será encarada de um ângulo estritamente pragmático e empregada para a quantização de sistemas dissipativos, sem que com isso estejamos sugerindo qualquer simpatia de nossa parte pela interpretação inortodoxa da mecânica quântica que ela representa. No que se segue usaremos freqüentemente a notação e os resultados expostos no Apêndice, que, portanto, deve ser consultado antes da leitura deste capítulo.

Passemos à demonstração da existência de um processo de Markov associado a cada sistema quântico descrito pela equação de Schrödinger. Consideremos um sistema formado por uma única partícula de massa m e submetida a uma força externa conservativa $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{x})$. A hipótese básica, conforme antecipamos no parágrafo anterior, é que cada partícula descreve um movimento browniano no vácuo com coeficiente de difusão (ver seção A.4 do Apêndice, particularmente Eq. (A.4.15))

$$v = \frac{\sigma^2}{2} = \frac{\hbar}{2m} , \quad (3.1.1)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π . A presença da massa da partícula no denominador justifica-se intuitivamente

pelo fato de corpos macroscópicos não manifestarem tal comportamento. A origem de tal valor para o coeficiente de difusão não é explicada na mecânica estocástica, mas este é um defeito também da mecânica quântica, que não tem outra justificativa senão a empírica para o valor da constante de Planck. Seguindo Nelson (15, 16), usaremos a cinemática de Einstein-Smoluchowski para a descrição do movimento browniano tridimensional. Conseqüentemente a equação diferencial estocástica que governa o movimento browniano da partícula é

$$d\vec{X}(t) = \vec{\mu}(\vec{X}(t), t)dt + \sigma d\vec{B}(t) . \quad (3.1.2)$$

Nesta equação $\vec{B}(t)$ é um processo de Wiener tridimensional com parâmetro de variância 1, isto é,

$$\begin{aligned} E [d\vec{B}(t)] &= 0 , \\ E [dB_i(t) dB_j(t)] &= \delta_{ij} dt , \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

$d\vec{B}(t)$ é independente de $\vec{X}(s)$ para todo $t \geq s$, e σ é dada pela Eq. (1.1). Associada à Eq. (1.2) temos a equação diferencial estocástica para trás

$$d_* \vec{X}(t) = \vec{\mu}_*(\vec{X}(t), t)dt + \sigma d\vec{B}_*(t) , \quad (3.1.4)$$

onde usamos a Eq. (A.3.23).

As equações de Fokker - Planck para a frente e para trás são, respectivamente,

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot [\rho(\vec{x}, t) \vec{\mu}(\vec{x}, t)] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \rho(\vec{x}, t) \quad , \quad (3.1.5)$$

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot [\rho(\vec{x}, t) \vec{\mu}_*(\vec{x}, t)] - \frac{\sigma^2}{2} \Delta \rho(\vec{x}, t) \quad , \quad (3.1.6)$$

onde $\rho(\vec{x}, t)$ é a densidade de probabilidade da posição da partícula e Δ é o operador laplaciano. Estas duas últimas equações são generalizações tridimensionais óbvias de suas congêneres unidimensionais (A.3.8) e (A.3.15), e onde já usamos o fato de σ^2 ser constante. Somando as Eqs. (1.5) e (1.6) resulta a equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\rho(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}, t)] = 0 \quad , \quad (3.1.7)$$

onde a velocidade de corrente (também chamada de velocidade média) vem dada por

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \left[\vec{\mu}(\vec{x}, t) + \vec{\mu}_*(\vec{x}, t) \right] \quad . \quad (3.1.8)$$

A versão tridimensional da Eq. (A.3.22) com σ^2 constante é

$$\vec{\mu}_*(\vec{x}, t) = \vec{\mu}(\vec{x}, t) - \frac{\sigma^2}{\rho(\vec{x}, t)} \vec{\nabla} \rho(\vec{x}, t) \quad , \quad (3.1.9)$$

que pode ser escrita na forma

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{\sigma^2}{2} \vec{\nabla} \ln \rho(\vec{x}, t) \quad (3.1.10)$$

introduzindo-se a velocidade osmótica $\vec{u}(\vec{x}, t)$ definida por

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \left[\vec{\mu}(\vec{x}, t) - \vec{\mu}_*(\vec{x}, t) \right] \quad . \quad (3.1.11)$$

Segundo a teoria do movimento browniano desenvolvida por Einstein (73), \vec{u} é a velocidade adquirida por uma partícula suspensa num líquido e em equilíbrio sob a ação de uma força externa e da força de pressão osmótica, daí o nome escolhido por Nelson (15,16). Freqüentemente \vec{u} é também chamada de velocidade estocástica (74).

Neste ponto é preciso introduzir alguma hipótese dinâmica que seja capaz de caracterizar o processo estocástico $\vec{X}(t)$ uma vez conhecidas as forças externas que atuam sobre a partícula. Como já vimos na seção A.4 do Apêndice, no tratamento do movimento browniano baseado na aproximação de Einstein-Smoluchowski impõe-se (estamos usando a Eq. (A.3.20) na forma tridimensional)

$$\vec{\mu}(\vec{X}(t), t) = D\vec{X}(t) = \frac{\vec{F}(\vec{X}(t))}{m\beta}, \quad (3.1.12)$$

onde $m\beta$ é o coeficiente de atrito e \vec{F} é a força externa experimentada pela partícula. Em nosso caso isto não pode ser repetido por pelo menos dois motivos. Por hipótese a partícula executa um movimento browniano no vácuo. Não podemos atribuir nenhum coeficiente de atrito ao vácuo (éter) porque isto permitiria distinguir o estado de repouso absoluto do estado de movimento retilíneo uniforme em relação ao éter, o que quebraria a invariância* galileana da teoria. Além disso estamos interessados em estabelecer uma correspondência entre a equação de Schrödinger e um processo de Markov. Sabemos que a equação de Schrödinger é simétrica sob inversão temporal (75), de modo que devemos pro

* Diversos físicos brasileiros escrevem "invariância", palavra que parece não existir na língua portuguesa (vide Aurélio).

curar definir o processo de Markov por meio de equações que não introduzam assimetrias no tempo, pois caso contrário seríamos conduzidos a processo irreversíveis. A Eq. (1.12) envolve apenas a derivada temporal para a frente D , de forma que ela claramente introduz uma assimetria temporal, o que a torna indesejável.

Em três dimensões as derivadas para a frente e para trás assumem a forma

$$Df(\vec{X}(t), t) = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\mu}(\vec{X}(t), t) \cdot \vec{\nabla} + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \right] f(\vec{X}(t), t) , \quad (3.1.13)$$

$$D_* f(\vec{X}(t), t) = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mu_*(\vec{X}(t), t) \cdot \vec{\nabla} - \frac{\sigma^2}{2} \Delta \right] f(\vec{X}(t), t) , \quad (3.1.14)$$

como inferimos das Eqs. (A.3.17) e (A.3.19). Seguindo Nelson (15, 16), vamos supor que a segunda lei de Newton é válida na forma

$$\frac{m}{2} (DD_* + D_*D) \vec{X}(t) = - \vec{\nabla} V(\vec{X}(t)) , \quad (3.1.15)$$

onde a aceleração média definida por

$$\vec{a}(\vec{X}(t), t) = \frac{1}{2} (DD_* + D_*D) \vec{X}(t) \quad (3.1.16)$$

é claramente simétrica sob inversão do tempo (troca de D por $-D_*$ e vice-versa). No limite clássico ($\hbar = 0$) o coeficiente de difusão anula-se e as equações diferenciais (1.2) e (1.4) perdem seu caráter estocástico. Neste limite $D = D_* = \frac{d}{dt}$, a aceleração média reduz-se à aceleração usual e a Eq. (1.15) transforma-se

na equação newtoniana de movimento da partícula, como não poderia deixar de ocorrer. A Eq. (1.16), entretanto, não é a única definição possível para a aceleração média. Na próxima seção veremos que uma hipótese dinâmica diferente de (1.15) conduz a alguns resultados interessantes.

Fazendo uso das Eqs. (1.13) e (1.14) encontramos

$$DD_{*}^{\vec{x}}(t) = D_{\mu_{*}}^{\vec{x}}(\vec{X}(t), t) = \frac{\partial \mu_{*}}{\partial t} + (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \mu_{*} + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \mu_{*} \quad , \quad (3.1.17)$$

$$D_{*}^{\vec{x}}DX(t) = D_{*}^{\vec{x}}\mu(\vec{X}(t), t) = \frac{\partial \mu}{\partial t} + (\vec{\mu}_{*} \cdot \vec{\nabla}) \mu - \frac{\sigma^2}{2} \Delta \mu \quad , \quad (3.1.18)$$

de modo que a Eq. (1.15) torna-se

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{1}{m} \vec{\nabla} V + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \vec{u} \quad , \quad (3.1.19)$$

onde usamos

$$\vec{\mu} = \vec{v} + \vec{u} \quad , \quad \vec{\mu}_{*} = \vec{v} - \vec{u} \quad , \quad (3.1.20)$$

como se deduz das Eqs. (1.8) e (1.11). A Eq. (1.19) juntamente com a equação da continuidade (1.7) constituem o conjunto básico de equações diferenciais parciais que caracterizam completamente o processo de Markov $\vec{X}(t)$. Para provar que as Eqs. (1.7) e (1.19) são equivalentes à equação de Schrödinger é preciso introduzir a hipótese cinemática adicional de que a velocidade de corrente é um gradiente (15, 16):

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = \sigma^2 \vec{\nabla} S(\vec{x}, t) \quad . \quad (3.1.21)$$

Observe que esta equação define S salvo por uma função aditiva do tempo arbitrária. Vale a pena sublinhar que a introdução desta hipótese adicional não demanda maiores justificativas porquanto não estamos pretendendo deduzir a equação de Schrödinger a partir de um conjunto bem definido de postulados fundamentais, mas queremos apenas evidenciar que é possível encontrar um processo de Markov associado à evolução temporal de cada sistema quântico não-relativístico.

Defina

$$R(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \ln \rho(\vec{x}, t) , \quad (3.1.22)$$

donde, conforme a Eq. (1.10) ,

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \sigma^2 \vec{\nabla} R(\vec{x}, t) . \quad (3.1.23)$$

Com estas definições a Eq. (1.19) torna-se

$$\sigma^2 \vec{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{1}{m} \vec{\nabla} V + \sigma^4 \left\{ [(\vec{\nabla} R) \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla} R - [\vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla} S \right\} + \frac{\sigma^4}{2} \vec{\nabla} (\Delta R) . \quad (3.1.24)$$

Fazendo uso da identidade vetorial (76)

$$\vec{\nabla} (\vec{A} \cdot \vec{B}) = (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} + (\vec{B} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} + \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) + \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \quad (3.1.25)$$

vêm

$$\left[(\vec{\nabla} R) \cdot \vec{\nabla} \right] \vec{\nabla} R = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \left[(\vec{\nabla} R)^2 \right] \quad (3.1.26)$$

e uma equação idêntica para S . Com estes resultados a Eq. (1.24) transforma-se em

$$\vec{\nabla} \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{t}} \right) = \vec{\nabla} \left\{ - \frac{V}{m\sigma^2} + \frac{\sigma^2}{2} \left[(\vec{\nabla}R)^2 - (\vec{\nabla}S)^2 \right] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta R \right\} , \quad (3.1.27)$$

cuja solução é

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{t}} = - \frac{1}{m\sigma^2} V - \frac{\sigma^2}{2} \left[(\vec{\nabla}S)^2 - (\vec{\nabla}R)^2 \right] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta R + \alpha(t) , \quad (3.1.28)$$

onde $\alpha(t)$ é uma função arbitrária. Esta constante de integração revelar-se-á importante quando, mais adiante, incorporarmos forças dissipativas ao formalismo. No caso conservativo a função $\alpha(t)$ é irrelevante, e redefiniremos S - o que bem podemos fazer, como notado imediatamente após a Eq. (1.21) - de modo a eliminá-la. Neste caso a Eq. (1.28) torna-se

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{t}} = - \frac{1}{m\sigma^2} V - \frac{\sigma^2}{2} \left[(\vec{\nabla}S)^2 - (\vec{\nabla}R)^2 \right] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta R , \quad (3.1.29)$$

ao passo que a Eq. (1.7) assume a forma

$$\frac{\partial R}{\partial \vec{t}} = - \frac{\sigma^2}{2} \Delta S - \sigma^2 (\vec{\nabla}R) \cdot (\vec{\nabla}S) , \quad (3.1.30)$$

onde usamos as Eqs. (1.21) e (1.22). Multiplicando a Eq. (1.29) por $i = \sqrt{-1}$, somando com a Eq. (1.30) e multiplicando a equação resultante por $\exp(R + iS)$, encontramos

$$\frac{\partial}{\partial \vec{t}} \exp(R+iS) = \frac{i\sigma^2}{2} \Delta \exp(R+iS) - \frac{i}{m\sigma^2} V \exp(R+iS) . \quad (3.1.31)$$

Usando o valor de σ^2 dado pela Eq. (1.1) e definindo $\psi = \exp(R+iS)$ chegamos à equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi \quad . \quad (3.1.32)$$

Isto completa a demonstração formal de que a evolução temporal de um sistema quântico descrito pela equação de Schrödinger é equivalente a um processo de Markov. Com efeito, dado um estado quântico do sistema no instante t_0 caracterizado pela função de onda $\psi(\vec{x}, t_0)$, as funções $R(\vec{x}, t_0)$ e $S(\vec{x}, t_0)$ ficam determinadas. Em conseqüência $\rho(\vec{x}, t_0)$, $\vec{v}(\vec{x}, t_0)$ e $\vec{u}(\vec{x}, t_0)$ determinam-se por meio das Eqs. (1.22), (1.21) e (1.23). Estes dados iniciais são suficientes para que, mediante as Eqs. (1.7) e (1.19), se determinem a densidade de probabilidade da posição $\rho(\vec{x}, t)$ e a velocidade de corrente $\vec{v}(\vec{x}, t)$, que caracterizam completamente o processo de Markov $\vec{X}(t)$. Devido à Eq. (1.22) a densidade de probabilidade $\rho(\vec{x}, t)$ do processo de Markov coincide em qualquer instante com a densidade de probabilidade $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ gerada pela equação de Schrödinger. Assim, a interpretação de Born é uma conseqüência natural do formalismo estocástico. É importante notar que, ao contrário do que ocorre na teoria de Einstein-Smoluchowski do movimento browniano, na mecânica estocástica $\vec{\mu}(\vec{x}, t)$ não é um campo vetorial dependente apenas da força externa atuante sobre a partícula, mas depende também do estado inicial do sistema. Isto pode ser visto a partir da Eq. (1.20) e do fato de $\vec{v}(\vec{x}, t)$ e $\vec{u}(\vec{x}, t)$ dependerem das condições iniciais do problema de Cauchy para as Eqs. (1.7) e (1.19). Como cada componente de $\vec{\mu}(\vec{x}, t)$ é dada por uma equação análoga à Eq. (A.3.4), concluímos que a densidade de probabilidade de passagem $p(\vec{y}, t | \vec{x}, t_0)$ depende da densidade de probabilidade inicial $\rho(\vec{x}, t_0)$. Neste aspecto o processo de Markov $\vec{X}(t)$ difere qualitativamente dos processos de difusão para os quais $\vec{\mu}(\vec{x}, t)$ é um campo vetorial per

feitamente definido pelo próprio sistema físico, e para os quais $p(\vec{y}, t | \vec{x}, t_0)$ não depende de $\rho(x, s)$ para nenhum valor de s . Esta propriedade tem consequências interpretativas importantes (74) que não discutiremos aqui.

Os resultados aqui expostos podem ser deduzidos de outra maneira (77). O formalismo aqui considerado pode ser generalizado de modo a incluir forças eletromagnéticas (15, 16) e sistemas com qualquer número de partículas (74). Numerosíssimos outros desenvolvimentos podem ser encontrados na abundante literatura existente. A incorporação de efeitos relativísticos é possível e permite a dedução da equação de Klein-Gordon no formalismo estocástico, mas à custa de hipóteses adicionais que transformam o tempo numa variável discreta (78) ou que atribuem propriedades estocásticas ao próprio espaço-tempo (79). A equação de Dirac pode ser deduzida dentro do contexto estocástico desde que admita-se que o espaço-tempo seja quantizado (80). Partículas não-relativísticas com spin podem ser tratadas na mecânica estocástica sem hipóteses adicionais, como mostrou Dankel (81) ao deduzir a equação de Pauli.

Conforme observamos no Apêndice, a teoria de Ornstein-Uhlenbeck do movimento browniano reduz-se à de Einstein-Smoluchowski para tempos longos em comparação com o tempo de relaxação β^{-1} . Portanto, adotando-se a cinemática de Ornstein-Uhlenbeck, é possível deduzir-se uma equação de onda que difere da equação de Schrödinger para tempos curtos, mas que a ela reduz-se para tempos longos. A teoria assim construída contém um parâmetro adicional β que representa o tempo de relaxação do sis

tema e que, juntamente com um coeficiente de difusão idêntico ao da teoria de Nelson, caracteriza o éter (82).

A Eq. (1.15) pode ser deduzida a partir de um princípio variacional estocástico (83,84). Uma formulação lagrangiana alternativa foi desenvolvida por Santos (85), mas seu modelo estocástico da mecânica quântica difere do aqui discutido. É possível representar a função de onda que é solução da equação de Schrödinger em termos da ação estocástica (86). A forma assumida pela função de onda guarda um remoto parentesco com a que se obtém pelo método das integrais de trajetória de Feynman. O princípio variacional adotado originalmente por Schrödinger (87) para obter os níveis de energia do átomo de hidrogênio admite uma justificação até certo ponto natural na mecânica estocástica (84, 88). É possível provar uma versão mais forte da relação de incerteza entre posição e momento linear dentro do contexto da mecânica estocástica (89). A quantização estocástica pode ser estendida a teorias de campos, isto é, sistemas com uma infinidade não-enumerável de graus de liberdade (90-94). Neste caso, num tratamento matematicamente rigoroso, passa-se a lidar com os chamados processos estocásticos generalizados (95). Aplicações de caráter teórico do formalismo estocástico têm sido feitas à teoria dos lasers (91) e à mecânica estatística fora do equilíbrio (96). Com o emprego da mecânica estocástica é possível a descrição dependente do tempo de fenômenos de penetração em barreiras de potencial, tanto na mecânica quântica (97) quanto na teoria quântica dos campos, particularmente para o estudo do papel desempenhado pelos "instantons" nas teorias de Yang-Mills (98).

O postulado básico da mecânica estocástica é que cada partícula microscópica executa um movimento browniano no vácuo, de modo que surge o problema de explicar a origem de tal movimento. A principal teoria que tem sido utilizada para este fim é a chamada eletrodinâmica estocástica (99 - 101), que baseia-se na hipótese de que existe uma radiação eletromagnética aleatória de fundo que permeia todo o espaço. Os propugnadores mais ferrenhos da eletrodinâmica estocástica asseveram que esta não é uma hipótese adicional à eletrodinâmica clássica, ao contrário, segundo eles um postulado injustificado é admitir a inexistência da radiação de fundo (100). Deste ponto de vista os próprios fenômenos quânticos são uma evidência em favor da hipótese da radiação aleatória de fundo. É claro que uma determinada assertiva pode ser considerada uma hipótese adicional ou não, dependendo da teoria que se tome como fundamental. Para a mecânica quântica ortodoxa as características quânticas são imanentes à própria matéria, e não precisam ser explicadas por nenhum mecanismo subjacente. Deste ponto de vista a suposição de que existe uma radiação de fundo é uma hipótese adicional porque viola o princípio da parcimônia (102) ou princípio de Occam ("Ockham's razor"). Em outras palavras, não havendo nenhum motivo que nos obrigue a admitir a existência da radiação estocástica, tal hipótese é supérflua.

Seja como for, um aspecto curioso da eletrodinâmica estocástica é que ela prevê a ocorrência de efeitos quânticos apenas em partículas carregadas. Assim, se a teoria for levada a sério e desejarmos que partículas neutras também apresentem comportamento quântico, somos forçados a admitir que todas as par

tículas elementares são compostas por partículas carregadas (100). Por outro lado, a teoria manifesta as mesmas deficiências que a eletrodinâmica quântica, com suas subtrações de quantidades infinitas e renormalizações, de modo que dificilmente a eletrodinâmica estocástica poderia ser considerada superior à eletrodinâmica quântica. A física estocástica é um terreno fértil para especulações as mais das vezes artificiais e arbitrarias. Por exemplo, é possível deduzir a equação de Schrödinger supondo que partículas carregadas no vácuo estão submetidas a uma força estocástica de reação da radiação, desde que se atribua uma temperatura ao vácuo que, no final, é tomada igual a zero (103).

Na interpretação estocástica da mecânica quântica as partículas descrevem trajetórias contínuas no espaço, de modo que a função de onda não fornece uma descrição completa dos estados do sistema. A interpretação estocástica da mecânica quântica pode ser considerada uma teoria de variáveis ocultas na qual tais variáveis permanecem ocultas para sempre, pois embora seja possível pensar nas partículas como percorrendo trajetórias contínuas, estas trajetórias não são observáveis (15, 74). O problema das medições na mecânica quântica também pode ser examinado mediante modelos baseados na mecânica estocástica (104). A mecânica estocástica foi acerbamente criticada por Gilson (105), segundo quem a teoria estocástica é consistente com a equação de Schrödinger apenas se o coeficiente de difusão for zero, o que destrói o caráter estocástico da teoria. Os argumentos de Gilson baseiam-se em aproximações e no uso de integrais funcionais de Feynman. Devido à falta de rigor matemático, contudo, suas conclusões não são plenamente confiáveis. Problemas sérios

ocorrem quando a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ possui superfícies nodais (15, 106), isto é, quando $\psi(\vec{x}, t)$ se anula sobre alguma superfície - exemplos simples são os estados estacionários excitados. Numa superfície nodal a função $R(\vec{x}, t)$ não está definida, $\rho(\vec{x}, t)$ anula-se e a Eq. (1.22) não vale. Neste caso as trajetórias amostrais do processo estocástico $\vec{X}(t)$ não podem atravessar nenhuma superfície nodal da função de onda (15, 74, 106), de modo que a partícula permanece confinada no interior de duas superfícies nodais consecutivas de $\psi(\vec{x}, t)$. Segundo Mielnik e Tengstrand (107), esta propriedade invalida a mecânica estocástica como uma interpretação clássica consistente da mecânica quântica. De qualquer modo, a interpretação estocástica da mecânica quântica é extremamente insatisfatória porque reincorpora à Física uma entidade hipotética - o éter - com o qual as partículas microscópicas interagem de tal modo a executarem um movimento browniano no vácuo. Portanto, mesmo se matematicamente defensável, a ausência de fatos empíricos que corroborem a existência de tal entidade hipotética torna a teoria estocástica dificilmente aceitável de ponto de vista filosófico (108).

Apesar disso, a mecânica estocástica é mais do que uma simples curiosidade teórica. Seu formalismo é um instrumento útil para a realização de cálculos aproximados, particularmente no caso da aproximação semiclássica, como exemplos recentes o demonstram (109). Nosso interesse pela mecânica estocástica deve-se ao fato de sua estrutura ser suficientemente flexível para abranger alguns sistemas dissipativos. Passaremos, portanto, ao estudo da possibilidade de realizar a quantização de sistemas dissipativos pelo método estocástico e à análise dos resultados físicos conse

qüentes a este procedimento.

3.2 - FORÇAS DISSIPATIVAS NA MECÂNICA ESTOCÁSTICA

A teoria estocástica esboçada nos parágrafos anteriores reproduz a equação de Schrödinger desde que a força externa \vec{F} experimentada pela partícula admita uma energia potencial $V(\vec{x})$. Esta hipótese, no entanto, não é necessária para que a aplicação do formalismo estocástico possa ser levada a bom termo. Torna-se possível, portanto, discutir a extensão do modelo estocástico a sistemas dissipativos. Começemos pelo caso mais simples e, felizmente, mais importante. Suponhamos que a força total agindo sobre a partícula seja da forma

$$\vec{F} = - m\beta\vec{v} - \vec{\nabla}V(\vec{x}) , \quad (3.2.1)$$

isto é, uma força conservativa $-\vec{\nabla}V(\vec{x})$ superposta a uma força de amortecimento proporcional à velocidade.

Note que no limite clássico ($\hbar = 0$) o sistema descrito pela equação diferencial estocástica (1.2) torna-se perfeitamente causal e perde todo o caráter aleatório. A velocidade de corrente $\vec{v}(\vec{x}, t)$ reduz-se à velocidade usual, a Eq. (1.15) reduz-se à segunda lei de Newton e a velocidade estocástica $\vec{u}(\vec{x}, t)$ anula-se porque $D = D_* = \frac{d}{dt}$. Em face disto é natural considerar-se a velocidade de corrente $\vec{v}(\vec{x}, t)$ como a correspondente estocástica à velocidade clássica. Por isso iremos supor (17, 18, 31) que, na mecânica estocástica, a expressão (2.1) para a força retém sua validade, sendo que a velocidade que entra na expressão da

força dissipativa é a velocidade de corrente. Neste caso a hipótese dinâmica de Nelson assume a forma

$$\frac{m}{2}(DD_{*} + D_{*}D) \vec{X}(t) = - m\beta \vec{V}(\vec{X}(t), t) - \vec{V}V(\vec{X}(t)) . \quad (3.2.2)$$

Usando as hipóteses e resultados da seção anterior esta equação pode ser escrita como

$$\vec{V} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right) = \vec{V} \left\{ - \frac{V}{m\sigma^2} - \beta S + \frac{\sigma^2}{2} \left[(\vec{V}R)^2 - (\vec{V}S)^2 \right] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta R \right\} . \quad (3.2.3)$$

Para passarmos da Eq. (1.27) a esta última equação basta que substituamos V por $V + m\beta\sigma^2 S$ por causa das Eqs. (2.1) e (1.21). Integrando esta última equação resulta

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{V}{m\sigma^2} - \beta S + \frac{\sigma^2}{2} \left[(\vec{V}R)^2 - (\vec{V}S)^2 \right] + \frac{\sigma^2}{2} \Delta R - \frac{\alpha(t)}{m\sigma^2} , \quad (3.2.4)$$

onde $\alpha(t)$ é uma função real a ser determinada mais adiante. A equação da continuidade (1.7) permanece inalterada. Repetindo o procedimento anterior, ou seja, multiplicando a Eq. (2.4) por i , somando com a Eq. (1.30) e multiplicando a equação resultante por $\exp(R+iS)$ vem

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS) &= i \frac{\sigma^2}{2} \Delta \exp(R+iS) - \\ &- \frac{i}{m\sigma^2} (V + m\beta\sigma^2 S) \exp(R+iS) - \frac{i\alpha(t)}{m\sigma^2} \exp(R+iS) . \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

Definindo $\psi = \exp(R+iS)$ e levando em conta a Eq. (1.1) obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \ln \left(\frac{\psi}{\psi^*} \right) \psi + \alpha(t) \psi , \quad (3.2.6)$$

onde usamos

$$S(\vec{x}, t) = \frac{1}{2i} \ln \frac{\psi(\vec{x}, t)}{\psi^*(\vec{x}, t)} . \quad (3.2.7)$$

A função real do tempo $\alpha(t)$ será escolhida de modo que o valor esperado da energia total em cada instante coincida com o valor esperado do operador hamiltoniano (18, 25). A Eq. (2.6) pode ser escrita na forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi , \quad (3.2.8)$$

onde \hat{H} é o operador não-linear definido por

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V\psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \psi \ln \frac{\psi}{\psi^*} + \alpha(t)\psi . \quad (3.2.8)$$

O operador que representa a energia total do sistema é a soma da energia cinética com a energia potencial, isto é ,

$$\hat{E}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V\psi . \quad (3.2.9)$$

Portanto exigimos que

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \int \psi^* \hat{H} \psi \, d^3x = \int \psi^* \hat{E} \psi \, d^3x \equiv \langle \hat{E} \rangle , \quad (3.2.10)$$

donde determina-se

$$\alpha(t) = -\frac{\beta\hbar}{2i} \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 \ln \frac{\psi(\vec{x}, t)}{\psi^*(\vec{x}, t)} . \quad (3.2.11)$$

Com este resultado para $\alpha(t)$ a Eq. (2.6) torna-se, finalmente ,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \psi \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \int d^3x |\psi|^2 \ln \frac{\psi}{\psi^*} \right]. \quad (3.2.12)$$

É possível eliminar o termo integrado desta última equação redefinindo apropriadamente a fase S . Isto é conveniente e útil em certas situações, desde que não percamos de vista que o termo logarítmico remanescente não contribui para o valor esperado da energia total.

A equação de Schrödinger não-linear (2.12) foi descoberta originalmente por Kostin (14), que a denominou equação de Schrödinger-Langevin. Daqui por diante chamaremos esta equação de equação de Kostin. Pouco tempo após seu descobrimento, a equação de Kostin foi deduzida (25) a partir de uma interpretação hidrodinâmica da mecânica quântica (110). Subseqüentemente ela foi rededuzida dentro do contexto da interpretação estocástica da mecânica quântica (17, 18, 31), dedução esta que acabamos de reproduzir. A maneira original de construí-la, e as principais propriedades da equação de Kostin serão discutidas no próximo capítulo. Antes disso, examinemos com um pouco mais de atenção a natureza das forças dissipativas que são compatíveis com o formalismo estocástico.

Conforme acabamos de verificar, uma força dissipativa proporcional à velocidade pode ser incorporada facilmente à teoria estocástica, sendo responsável pelo aparecimento de um termo não-linear na equação de Schrödinger. Devido à não-linearidade, a equação de Kostin ultrapassa os limites habituais da mecânica quântica (o princípio da superposição, por exemplo, é vio-

lado). Apesar disso veremos no próximo capítulo que ela ainda preserva muitas das propriedades importantes exibidas pela equação de Schrödinger usual. Por este motivo desejamos descobrir se forças dissipativas mais gerais do que a recém-considerada admitem tratamento pelo método estocástico conduzindo a uma equação de Schrödinger não-linear com boas propriedades, de modo a não nos vermos obrigados a uma ruptura radical com estrutura tradicional da mecânica quântica, que nos é tão cara. Hashimoto (111) considerou forças da forma

$$\vec{F} = - f(v)\vec{v} - \vec{\nabla}V(\vec{x}) , \quad (3.2.13)$$

onde $v = |\vec{v}|$ e f é uma função diferenciável arbitrária. Para que a Eq. (1.19) admita a forma integrada (1.28) é necessário supor que a força \vec{F} seja o gradiente de alguma função. Só então, combinando-se as Eqs. (1.28) e (1.30), chega-se a uma equação para a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$. No caso em que a força dissipativa é proporcional à velocidade, o procedimento é executável porque, segundo a Eq. (1.21), a velocidade de corrente é um gradiente, o que faz com que a força total definida pela Eq. (2.1) seja o gradiente de $V + m\beta\sigma^2 S$.

Com o intuito de repetir este raciocínio para a força dada pela Eq. (2.13), Hashimoto (111) supôs que $f(v)\vec{v}$ é também um gradiente. A partir desta hipótese ele chegou a uma equação de Schrödinger não-linear. Uma solução desta equação foi obtida por ele para um oscilador harmônico unidimensional no caso de força dissipativa quadrática na velocidade, isto é, $f(v) = \gamma v$. A solução encontrada é bastante semelhante àquelas que iremos

discutir no próximo capítulo para o caso de dissipação proporcional à velocidade. O que desejamos demonstrar aqui é que a equação construída por Hashimoto só é válida no caso unidimensional, sendo impossível a sua extensão para duas ou três dimensões (19).

O cerne da questão consiste na hipótese de que $\vec{v}(\vec{x}, t)$ e $f(v(\vec{x}, t))\vec{v}(\vec{x}, t)$ são ambos campos vetoriais gradientes. No caso unidimensional isto é trivialmente verdadeiro. Basta definir

$$\begin{aligned} W(x, t) &= \int_a^x v(\mu, t) \, d\mu, \\ K(x, t) &= \int_b^x v(\mu, t) f(v(\mu, t)) \, d\mu, \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

onde a e b são funções arbitrárias do tempo, e automaticamente resulta

$$v(x, t) = \frac{\partial W}{\partial x}, \quad f(v(x, t))v(x, t) = \frac{\partial K}{\partial x}. \quad (3.2.15)$$

No caso tridimensional isto é impossível com f arbitrária em virtude da:

Proposição (19). Seja $\vec{v}(\vec{x}, t)$ um campo vetorial continuamente diferenciável definido numa região aberta $B \subset \mathbb{R}^3$ onde $v(\vec{x}, t) = |\vec{v}(\vec{x}, t)|$ não se anula. Se $\vec{v}(\vec{x}, t)$ é um campo vetorial arbitrário, então $\vec{v}(\vec{x}, t)$ e $f(v(\vec{x}, t))\vec{v}(\vec{x}, t)$ podem ser ambos gradientes em B se e somente se $f(v) = \text{constante}$.

Demonstração. Necessidade: suponha que \vec{v} e $f(v)\vec{v}$ são

ambos gradientes. Então, dadas as hipóteses da proposição, a seguinte equação é satisfeita (112) em B:

$$\vec{\nabla}X(f(v)\vec{v}) = 0 \quad . \quad (3.2.16)$$

Esta equação pode ser desdobrada em

$$\vec{\nabla}f(v)X\vec{v} + f(v)\vec{\nabla}X\vec{v} = 0 \quad . \quad (3.2.17)$$

Observando que $\vec{\nabla}X\vec{v} = 0$ porque, por hipótese, \vec{v} é um campo gradiente, e que

$$\vec{\nabla}f(v) = f'(v)\vec{\nabla}v = \frac{f'(v)}{2v} \vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{v}) = \frac{f'(v)}{2v} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \quad , \quad (3.2.18)$$

onde usamos novamente $\vec{\nabla}X\vec{v} = 0$, podemos escrever a Eq. (2.17) na forma

$$\frac{f'(v)}{v} \vec{\nabla}X[(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}] = 0 \quad . \quad (3.2.19)$$

É fácil comprovar que, sendo \vec{v} um campo vetorial gradiente arbitrário, em geral o produto vetorial nesta última equação não é nulo. Com efeito, sua componente x, por exemplo, é

$$v_y v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y^2 \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_y v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \left(v_z v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_z v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z^2 \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \quad ,$$

que em geral não se anula. Conseqüentemente a Eq. (2.19) implica $f'(v) = 0$, donde $f(v) = \text{constante}$. A suficiência é óbvia.

O mesmo resultado vale em duas dimensões. De fato, seja

$\vec{v} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ um campo vetorial bidimensional. Sob as mesmas hipóteses de regularidade, a condição necessária para que \vec{v} e $f(\vec{v})\vec{v}$ sejam ambos gradientes é (112)

$$\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}(f(\vec{v})v_y) - \frac{\partial}{\partial y}(f(\vec{v})v_x) = 0 \quad . \quad (3.2.20)$$

A partir desta condição obtém-se uma equação idêntica à Eq.(2.19), exceto que todos os vetores envolvidos são bidimensionais (incluindo o operador nabla), e com o produto vetorial de vetores bidimensionais \vec{a} e \vec{b} (nesta ordem) definido como sendo o escalar $a_x b_y - a_y b_x$. O resultado segue-se, então, por repetição do argumento utilizado no caso tridimensional.

Em resumo, acabamos de provar que a força dissipativa mais geral que pode ser incorporada ao formalismo estocástico é a força proporcional à velocidade, desde que se exija que o resultado da aplicação das equações da mecânica estocástica seja uma equação análoga à equação de Schrödinger usual. Assim sendo, a força de amortecimento proporcional à velocidade é privilegiada em relação às demais. Vamos, portanto, examinar alguns desdobramentos da mecânica estocástica de sistemas submetidos a esta força dissipativa.

3.3 - GENERALIZAÇÃO DA MECÂNICA ESTOCÁSTICA E ÁLGEBRA DOS OPERADORES

A mecânica estocástica não se revela isenta de dificuldades quando se tenta estabelecer uma relação mais íntima entre as grandezas estocásticas e os observáveis da mecânica quântica.

Sérios problemas surgem quando se busca representar os operadores da mecânica quântica em termos das quantidades estocásticas correspondentes. Alguns exemplos elementares ajudarão a esclarecer o tipo de deficiência com que nos deparamos. Observe, em primeiro lugar, que

$$E\left[\vec{X}(t)\right] = \int \vec{x} \rho(\vec{x}, t) d^3x = \int \psi^*(\vec{x}, t) \vec{x} \psi(\vec{x}, t) d^3x = \langle \hat{\vec{x}} \rangle, \quad (3.3.1)$$

onde $\langle \hat{A} \rangle$ denota o valor esperado do operador \hat{A} no estado quântico caracterizado pela função de onda $\psi(\vec{x}, t)$. Portanto o operador de posição $\hat{\vec{x}}$ corresponde ao processo estocástico $\vec{X}(t)$, e a média estocástica coincide com o valor esperado quântico. Por outro lado, sendo $\vec{v}(\vec{X}(t), t)$ interpretada como a velocidade da partícula em movimento browniano, é natural definir o momento linear mediante $\vec{p}(\vec{X}(t), t) = m\vec{v}(\vec{X}(t), t)$. Neste caso

$$E\left[\vec{p}(\vec{X}(t), t)\right] = m \int \vec{v}(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t) d^3x = \hbar \int \vec{\nabla} S |\psi|^2 d^3x, \quad (3.3.2)$$

onde usamos as Eqs. (1.1) e (1.21). Fazendo uso da Eq. (2.7) podemos escrever

$$\begin{aligned} E\left[\vec{p}(\vec{X}(t), t)\right] &= \frac{\hbar}{2i} \int \left[\frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} - \frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} \right] |\psi|^2 d^3x = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) d^3x = \int \psi^*(\vec{x}, t) (-i\hbar \vec{\nabla}) \psi(\vec{x}, t) d^3x = \langle \hat{\vec{p}} \rangle, \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

onde fizemos uma integração por partes e supusemos que ψ anula-se no infinito. O resultado representado pela Eq. (3.3) parece ser plenamente satisfatório, e tem levado alguns autores [(82), pág. 39; (20), pág. 276] a afirmar que a interpretação estocás-

tica conduz a expressões corretas para os observáveis da mecânica quântica. Esta é uma afirmação precipitada, entretanto, porque, por exemplo, $E[\vec{p}(\vec{X}(t), t)^2] = \int \hbar^2 (\vec{\nabla} S)^2 |\psi|^2 d^3x$ em geral é diferente de $\langle \vec{p}^2 \rangle = \int \psi^* (-\hbar^2 \Delta \psi) d^3x$. Torna-se evidente, portanto, que o valor médio das grandezas estocásticas nem sempre coincide com o valor esperado quântico dos operadores correspondentes quando se consideram expressões algébricas não-lineares envolvendo os operadores, muito embora as Eqs. (3.1) e (3.3) sejam sempre válidas. Este exemplo singelo torna claro que não é possível obter-se uma representação dos operadores da mecânica quântica na teoria estocástica em sua forma até aqui considerada. É possível, entretanto, gerar a álgebra dos operadores num modelo estocástico generalizado em que o coeficiente de difusão é arbitrário (20). Isto foi feito originalmente para o caso em que não há forças dissipativas presentes (21), mas já que o resultado vale mesmo em presença de uma força de amortecimento proporcional à velocidade (22), vamos discutir logo este último caso devido à sua maior generalidade.

Já assinalamos que a hipótese dinâmica de Nelson, Eq. (1.15), não é a única compatível com a exigência de reversibilidade no tempo. Davidson (20) introduziu a hipótese dinâmica

$$m \left[\frac{1}{2} (DD_* + D_*D) + \frac{b}{8} (D - D_*)^2 \right] \vec{X}(t) = \vec{F} \quad , \quad (3.3.4)$$

onde b é um número real arbitrário. Note que D e D_* entram simetricamente nesta última equação, de modo que ela não envolve nenhuma direção preferencial para o tempo. Além disso, no limite clássico $D = D_* = \frac{d}{dt}$ e a Eq. (3.4) reduz-se à segunda lei de New-

ton. Esta hipótese dinâmica traz algumas conseqüências interessantes, como passaremos a expor. Utilizando as Eqs. (1.13) e (1.14) para $f(\vec{X}(t), t) = \vec{X}(t)$ chegamos a

$$(D-D_*)\vec{X}(t) = [(\vec{\mu} - \vec{\mu}_*) \cdot \vec{V}] \vec{X} \Big|_{\vec{X}=\vec{X}(t)} = \vec{\mu}(\vec{X}(t), t) - \vec{\mu}_*(\vec{X}(t), t) = 2\sigma_D^2 \vec{V}R(\vec{X}(t), t), \quad (3.3.5)$$

onde usamos as Eqs. (1.11) e (1.23). Repetindo o procedimento, um cálculo simples fornece

$$(D-D_*)^2 \vec{X}(t) = [(\vec{\mu} - \vec{\mu}_*) \cdot \vec{V} + \sigma_D^2 \Delta] 2\sigma_D^2 \vec{V}R = 2\sigma_D^4 \vec{V} [(\vec{V}R)^2 + \Delta R]. \quad (3.3.6)$$

Portanto temos que

$$\frac{mb}{8} (D-D_*)^2 \vec{X}(t) = \vec{V} \left\{ mbv_D^2 \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right\}, \quad (3.3.7)$$

onde $\sqrt{\rho} = e^R$ e $v_D = \frac{\sigma_D^2}{2}$. Suponhamos que a força experimental da partícula seja dada pela Eq. (2.1). Neste caso a Eq. (3.4) assume a forma

$$\frac{m}{2} (DD_* + D_*D) \vec{X}(t) = -\vec{V}W, \quad (3.3.8)$$

com

$$W = V + m\beta_D \sigma_D^2 S + mbv_D^2 \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}. \quad (3.3.9)$$

Observe que a terceira parcela de W tem exatamente a forma do "potencial quântico" da interpretação hidrodinâmica da mecânica quântica (110). Já que a Eq. (3.3) tem forma idêntica à da Eq. (1.15) com W substituindo V , todos os resultados anteriormente

obtidos continuam válidos desde que troquemos V por W . Assim, repetindo os raciocínios anteriores, chegamos a

$$\left[-\frac{(2mv_D)^2}{2m} \Delta + V + \beta_D \hbar S_D + \frac{b}{2} \frac{(2mv_D)^2}{2m} \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right] \exp(R+iS_D) =$$

$$= i(2mv_D) \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS_D) \quad , \quad (3.3.10)$$

onde a fase S_D foi definida de modo a anular a constante de integração $\alpha(t)$. O subscrito "D" indica que a equação provém da hipótese dinâmica de Davidson. A equação que se obtém aplicando a hipótese dinâmica de Nelson é

$$\left[-\frac{(2mv)^2}{2m} \Delta + V + \beta_N \hbar S_N \right] \exp(R+iS_N) = i(2mv) \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS_N) \quad , \quad (3.3.11)$$

donde, tomando v conforme a Eq. (1.1) e supondo que S_N foi escolhida de modo a anular a constante de integração $\alpha(t)$, chegamos à Eq. (2.6).

Aparentemente as Eqs. (3.10) e (3.11) são inteiramente distintas, mas isto é apenas na aparência. A conexão entre elas é estabelecida por um teorema de Davidson (20), que enunciaremos numa forma ligeiramente generalizada (22).

Teorema. Dado um número real não nulo Z , as equações

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V + \beta_O \hbar S_O \right] \exp(R+iS_O) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS_O) \quad (3.3.12)$$

e

$$\left[-\frac{(Z\hbar)^2}{2m} \Delta + V + \beta \hbar S + \frac{\hbar^2}{2m} (Z^2-1) \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right] \exp(R+iS) = i(Z\hbar) \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iS) \quad (3.3.13)$$

são equivalentes se

$$\beta = z\beta_0 \quad \text{e} \quad S = S_0/z . \quad (3.3.14)$$

A demonstração é simples (20). A Eq. (3.12) implica

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \Delta R + i\Delta S_0 + (\vec{\nabla}R)^2 - (\vec{\nabla}S_0)^2 + 2i\vec{\nabla}R \cdot \vec{\nabla}S_0 \right\} + V + \beta_0 \hbar S_0 = \\ = i\hbar \dot{R} - \hbar \dot{S}_0 , \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

enquanto que de (3.13) se deduz

$$\begin{aligned} -\frac{(z\hbar)^2}{2m} \left\{ \Delta R + \frac{1}{z} \Delta S_0 + (\vec{\nabla}R)^2 - \frac{1}{z^2} (\vec{\nabla}S_0)^2 + \frac{2i}{z} \vec{\nabla}R \cdot \vec{\nabla}S_0 \right\} + V + \\ + z\beta_0 \hbar \frac{S_0}{z} + (z^2-1) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = i z\hbar \dot{R} - z\hbar \frac{\dot{S}_0}{z} , \end{aligned} \quad (3.3.16)$$

onde já empregamos a Eq. (3.14). A parte real desta última equação é

$$\begin{aligned} -\frac{(z\hbar)^2}{2m} \left\{ \Delta R + (\vec{\nabla}R)^2 - \frac{1}{z^2} (\vec{\nabla}S_0)^2 \right\} + V + \beta_0 \hbar S_0 + \\ + (z^2-1) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = -\hbar \dot{S}_0 . \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

Utilizando a identidade

$$\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = \frac{\Delta e^R}{e^R} = \Delta R + (\vec{\nabla}R)^2 , \quad (3.3.18)$$

a Eq. (3.17) reduz-se a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \Delta R + (\vec{\nabla}R)^2 - (\vec{\nabla}S_0)^2 \right\} + V + \beta_0 \hbar S_0 = -\hbar \dot{S}_0 , \quad (3.3.19)$$

que é exatamente a parte real da Eq. (3.15). Por outro lado, a parte imaginária de (3.16) é

$$-\frac{(Z\hbar)^2}{2m} \left\{ \frac{\Delta S_O}{Z} + \frac{2}{Z} \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{S_O} \right\} = Z\hbar\dot{R} \quad (3.3.20)$$

ou, dividindo por Z,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \Delta S_O + 2 \vec{v}_R \cdot \vec{v}_{S_O} \right\} = \hbar\dot{R} , \quad (3.3.21)$$

que é a parte imaginária da Eq. (3.15). Isto completa a demonstração do teorema.

De posse deste resultado, podemos voltar a considerar a Eq. (3.10) resultante da hipótese dinâmica (3.4). Com as definições

$$2mv_D = Z\hbar \quad (3.3.22)$$

e

$$\frac{b}{2} \frac{(2mv_D)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (Z^2 - 1) , \quad (3.3.23)$$

ou, o que é equivalente,

$$b = 2(Z^2 - 1)/Z^2 , \quad (3.3.24)$$

a Eq. (3.10) assume a forma da Eq. (3.13). Pelo teorema recém-demonstrado, a Eq. (3.10) é equivalente a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \beta \frac{\hbar Z S_D}{N} + V \right] \exp(R+iZS_D) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp(R+iZS_D) , \quad (3.3.25)$$

com

$$\beta_D = Z\beta_N \quad . \quad (3.3.26)$$

Definindo $\psi = \exp(R+iZS_D)$ resulta a equação de Schrödinger não-linear

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V + \frac{\beta_N \hbar}{2i} \ln \frac{\psi}{\psi^*} \right] \psi \quad . \quad (3.3.27)$$

Vemos, assim, que a hipótese dinâmica de Davidson também conduz à equação de Kostin, embora o valor do coeficiente de atrito e a definição da fase de ψ sejam diferentes das quantidades análogas no modelo de Nelson. O aspecto mais notável do presente formalismo é que a Eq. (3.27) emerge para qualquer valor de Z ou, o que é a mesma coisa, para qualquer valor não nulo do coeficiente de difusão $v_D = \frac{Z\hbar}{2m}$. Na teoria de Davidson qualquer valor do coeficiente de difusão é admissível, e o caso $Z = 1$ corresponde ao modelo de Nelson. Esta generalização da mecânica estocástica pode ser estendida a variedades riemannianas (113) ou a sistemas com uma infinidade contínua de graus de liberdade (114), mas não discutiremos estas questões aqui.

Seguindo Davidson (21), passemos a definir operadores neste modelo estocástico da mecânica quântica. Seja \mathcal{H}_t o espaço de Hilbert das funções complexas $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ com o produto escalar definido por

$$(f, g) = E \left[f^*(\vec{X}(t)) g(\vec{X}(t)) \right] = \int f^*(\vec{x}) g(\vec{x}) \rho(\vec{x}, t) d^3x \quad . \quad (3.3.28)$$

O operador de posição é definido por

$$(\vec{x}_{op} f)(\vec{x}) = \vec{x} f(\vec{x}) . \quad (3.3.29)$$

O operador de velocidade será definido por (21)

$$(\dot{\vec{x}}_{op} f)(\vec{x}) = \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \frac{\partial}{\partial \mu} E \left[\vec{X}(\mu) f(\vec{X}(t)) \mid \vec{X}(S) = \vec{x} \right] , \quad S < \mu < t . \quad (3.3.30)$$

Esta definição assemelha-se à empregada em (115), mas não é completamente idêntica a ela. Para obter uma expressão explícita para $\dot{\vec{x}}_{op}$ observe que

$$E \left[\vec{X}(\mu) f(\vec{X}(t)) \mid \vec{X}(S) = \vec{x} \right] = \int \vec{y} f(\vec{z}) p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu; \vec{z}, t) d^3 y d^3 z , \quad (3.3.31)$$

onde $p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu; \vec{z}, t)$ é a densidade de probabilidade de que $\vec{X}(\mu) = \vec{y}$ e $\vec{X}(t) = \vec{z}$ dado que $\vec{X}(S) = \vec{x}$ (vide Sec. 2 do Apêndice). Por analogia com a Eq. (A.2.2), podemos escrever

$$p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu; \vec{z}, t) = \frac{\rho(\vec{x}, S; \vec{y}, \mu; \vec{z}, t)}{\rho(\vec{x}, S)} . \quad (3.3.32)$$

Porém, segundo a Eq. (A.2.8) ,

$$\rho(\vec{x}, S; \vec{y}, \mu; \vec{z}, t) = \rho(\vec{x}, S; \vec{y}, \mu) p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) , \quad (3.3.33)$$

de modo que, levando este último resultado em (3.32), resulta

$$p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu; \vec{z}, t) = p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) , \quad (3.3.34)$$

onde usamos a Eq. (A.2.2). Podemos, então, escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu} \mathbb{E} \left[\vec{X}(\mu) f(\vec{X}(t)) \mid \vec{X}(S) = \vec{x} \right] &= \int d^3 y d^3 z \vec{y} f(\vec{Z}) \frac{\partial}{\partial \mu} \left[p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \right] = \\ &= \int d^3 y d^3 z f(\vec{Z}) \vec{y} \left[p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \frac{\partial}{\partial \mu} p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) + p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) \frac{\partial}{\partial \mu} p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \right], \end{aligned} \quad (3.3.35)$$

onde supusemos que é admissível a troca da ordem das operações de integração e diferenciação. Usando as equações de Kolmogorov para a frente e para trás, Eqs. (A.3.9) e (A.3.11) em suas versões tridimensionais, obtemos

$$\begin{aligned} \dot{(\vec{x}_{op} f)}(\vec{x}) &= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \int d^3 y d^3 z f(\vec{Z}) \vec{y} \{ p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \left[-\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu}(\vec{y}, t) - \vec{\mu}(\vec{y}, t) \cdot \vec{\nabla}_y + \right. \\ &\left. + v_{D_Y} \Delta_y \right] p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) + p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) \left[-\vec{\mu}(\vec{y}, t) \cdot \vec{\nabla}_y - v_{D_Y} \Delta_y \right] p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \}. \end{aligned} \quad (3.3.36)$$

Uma integração por partes fornece

$$\begin{aligned} \dot{(\vec{x}_{op} f)}(\vec{x}) &= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \int d^3 y d^3 z f(\vec{Z}) \left\{ \vec{y} p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \left[-\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu} - \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}_y + v_{D_Y} \Delta_y \right] \times \right. \\ &\times p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) + p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \left(\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}_y - v_{D_Y} \Delta_y \right) \left[\vec{y} p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu) \right] \left. \right\} = \\ &= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \int d^3 y d^3 z f(\vec{Z}) p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) \left[\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}_y - v_{D_Y} \Delta_y, \vec{y} \right] p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu), \end{aligned} \quad (3.3.37)$$

sendo $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ o comutador dos operadores \hat{A} e \hat{B} , e onde supusemos que $p(\vec{x}, S \mid \vec{y}, \mu)$ anula-se rapidamente no infinito. Devido à Eq. (A.2.6) temos que

$$\lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ \mu < t}} p(\vec{y}, \mu \mid \vec{z}, t) = \delta(\vec{y} - \vec{z}) \quad (3.3.38)$$

Supondo que o limite pode ser tomado sob o sinal de integral na

Eq. (3.37), resulta

$$(\dot{\vec{x}}_{\text{op}} f)(\vec{x}) = \lim_{\substack{S \rightarrow t \\ S < t}} \int d^3y f(\vec{y}) \left[\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}_y - v_D \Delta_y \right] p(\vec{x}, S | \vec{y}, t). \quad (3.3.39)$$

Nova integração por partes redundante em

$$(\dot{\vec{x}}_{\text{op}} f)(\vec{x}) = \lim_{\substack{S \rightarrow t \\ S < t}} \int d^3y p(\vec{x}, S | \vec{y}, t) \left[\vec{\nabla}_y \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}_y + v_D \Delta_y \right] f(\vec{y}), \quad (3.3.40)$$

donde, usando novamente a Eq. (3.38),

$$(\dot{\vec{x}}_{\text{op}} f)(\vec{x}) = \left[\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} + v_D \Delta, \vec{x} \right] f(\vec{x}) = \left[\vec{\mu}(\vec{x}, t) + 2v_D \vec{\nabla} \right] f(\vec{x}), \quad (3.3.41)$$

de modo que

$$\dot{\vec{x}}_{\text{op}} = \vec{\mu}(\vec{x}, t) + 2v_D \vec{\nabla}. \quad (3.3.42)$$

O operador correspondente à enésima derivada temporal do operador de posição é definido por

$$(\vec{x}_{\text{op}}^{(n)} f)(\vec{x}) = \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \frac{\partial^n}{\partial \mu^n} E \left[\vec{X}(\mu) f(\vec{X}(t)) \middle| \vec{X}(S) = \vec{x} \right], \quad S < \mu < t. \quad (3.3.43)$$

Consideremos em detalhe o caso $n = 2$. Introduza o operador

$$\hat{O}_y(t) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\mu}(\vec{y}, t) + \vec{\mu}(\vec{y}, t) \cdot \vec{\nabla}_y - v_D \Delta_y. \quad (3.3.44)$$

Então, de acordo com a Eq. (3.37),

$$\begin{aligned}
\ddot{\vec{x}}_{\text{op}} f(\vec{x}) &= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \frac{\partial}{\partial \mu} \int d^3 y d^3 z f(\vec{z}) p(\vec{y}, \mu | \vec{z}, t) [\hat{O}_Y(\mu), \vec{y}] p(\vec{x}, S | \vec{y}, \mu) = \\
&= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \int d^3 y d^3 z f(\vec{z}) \left\{ \frac{\partial p}{\partial \mu}(\vec{y}, \mu | \vec{z}, t) [\hat{O}_Y(\mu), \vec{y}] p(\vec{x}, S | \vec{y}, \mu) + \right. \\
&\quad \left. + p(\vec{y}, \mu | \vec{z}, t) [\hat{O}_Y(\mu), \vec{y}] \frac{\partial}{\partial \mu} p(\vec{x}, S | \vec{y}, \mu) + p(\vec{y}, \mu | \vec{z}, t) \left[\frac{\partial \hat{O}_Y(\mu)}{\partial \mu}, \vec{y} \right] p(\vec{x}, S | \vec{y}, \mu) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.3.45}$$

Os dois primeiros termos desta última equação tornam-se idênticos aos termos correspondentes da Eq. (3.35) se substituirmos $[\hat{O}_Y(\mu), \vec{y}]$ por \vec{y} . Portanto, procedendo como antes, obtemos

$$\begin{aligned}
\ddot{\vec{x}}_{\text{op}} f(\vec{x}) &= \lim_{\substack{\mu \rightarrow t \\ S \rightarrow \mu}} \int d^3 y d^3 z f(\vec{z}) p(\vec{y}, \mu | \vec{z}, t) [\hat{O}_Y(\mu), [\hat{O}_Y(\mu), \vec{y}]] p(\vec{x}, S | \vec{y}, \mu) + \\
&\quad + \lim_{S \rightarrow t} \int d^3 y f(\vec{y}) \left[\frac{\partial \hat{O}_Y(t)}{\partial t}, \vec{y} \right] p(\vec{x}, S | \vec{y}, t),
\end{aligned} \tag{3.3.46}$$

ou, finalmente, por analogia com a Eq. (3.41),

$$\ddot{\vec{x}}_{\text{op}} = \left[\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} + v_D \Delta, \dot{\vec{x}}_{\text{op}} \right] + \frac{\partial \dot{\vec{x}}_{\text{op}}}{\partial t}. \tag{3.3.47}$$

Não é difícil de provar por indução que

$$\vec{x}_{\text{op}}^{(n+1)} = \left[(\vec{\mu} + v_D \nabla) \cdot \vec{\nabla}, \vec{x}_{\text{op}}^{(n)} \right] + \frac{\partial \vec{x}_{\text{op}}^{(n)}}{\partial t}. \tag{3.3.48}$$

O operador de aceleração pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\ddot{\vec{x}}_{\text{op}} &= \left[(\vec{\mu} + v_D \vec{\nabla}) \cdot \vec{\nabla}, \vec{\mu} + 2v_D \vec{\nabla} \right] + \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} = \\
&= \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + v_D \Delta \vec{\mu} + \frac{1}{2} \vec{\nabla} \mu^2 + (\vec{\nabla} \times \vec{\mu}) \times (\vec{\mu} + 2v_D \vec{\nabla}) = \\
&= \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial t} + v_D \Delta \vec{\mu} + \frac{1}{2} \vec{\nabla} \mu^2
\end{aligned} \tag{3.3.49}$$

porque $\vec{\mu}$ é um gradiente. Usando a equação

$$\vec{\mu} = 2 v_D \vec{\nabla} (R+S_D) \quad , \quad (3.3.50)$$

a Eq. (3.49) torna-se

$$\ddot{\vec{x}}_{op} = \vec{\nabla} \left\{ \exp(-R-S_D) (2v_D \frac{\partial}{\partial t} + 2v_D^2 \Delta) \exp(R+S_D) \right\} \quad , \quad (3.3.51)$$

como é possível verificar através de cálculo direto. Fazendo uso da Eq. (3.25) podemos reescrever esta última equação na forma

$$m \ddot{\vec{x}}_{op} = - \vec{\nabla} \left\{ V + \beta_N \hbar S_D - \left(\frac{\hbar^2}{2m} + 2mv^2 \right) \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \right\}. \quad (3.3.52)$$

A álgebra dos operadores \vec{x}_{op} , $\dot{\vec{x}}_{op}$ é

$$\left[x_{op}^k , \dot{x}_{op}^l \right] = \left[x_k , \mu_l + 2v_D \frac{\partial}{\partial x_l} \right] = - 2v_D \delta_{kl} \quad , \quad (3.3.53)$$

$$\left[x_{op}^k , x_{op}^l \right] = 0 \quad , \quad \left[\dot{x}_{op}^k , \dot{x}_{op}^l \right] = 2v_D (\partial_k \mu_l - \partial_l \mu_k) = 0 \quad , \quad (3.3.54)$$

porque $\vec{\mu}$ é um gradiente. Seja $F(\vec{x}_{op} , \dot{\vec{x}}_{op})$ um polinômio bem ordenado. Neste caso

$$(g, F(\vec{x}_{op}, \dot{\vec{x}}_{op}) h) = \int d^3x \rho(\vec{x}, t) g^*(\vec{x}) F(\vec{x}, \vec{\mu} + 2v_D \vec{\nabla}) h(\vec{x}) \quad , \quad (3.3.55)$$

conforme a Eq. (3.42). Esta última igualdade pode ser escrita na forma

$$(g, F(\vec{x}_{op}, \dot{\vec{x}}_{op}) h) = \int d^3x \exp(R-S_D) g^*(\vec{x}) F(\vec{x}, 2v_D \vec{\nabla}) h(\vec{x}) \exp(R+S_D) \quad (3.3.56)$$

porque

$$\begin{aligned} 2 v_D \vec{\nabla} (h \exp(R+S_D)) &= 2v_D \left[\vec{\nabla} h + 2v_D \vec{\nabla} (R+S_D) h \right] \exp(R+S_D) = \\ &= \exp(R+S_D) (\vec{\mu} + 2v_D \vec{\nabla}) h . \end{aligned} \quad (3.3.57)$$

A Eq. (3.56) mostra que $\dot{\vec{x}}_{op}$ adquire a forma particularmente simples $2v_D \vec{\nabla}$ se fizermos um mapeamento do espaço de Hilbert \mathcal{H}_t no novo espaço de Hilbert I_t por meio do operador $T: \mathcal{H}_t \rightarrow I_t$ tal que $Tf = \exp(R+S_D)f$, onde o produto escalar em I_t preserva a norma:

$$(f, g) = (Tf, Tg) . \quad (3.3.58)$$

Desta última equação decorre imediatamente que o produto escalar em I_t é dado por

$$((f, g)) = \int [\exp(-S_D) f(\vec{x})]^* \exp(-S_D) g(\vec{x}) d^3x . \quad (3.3.59)$$

Os operadores transformados são

$$\vec{X}_{op}^{(n)} = T \vec{x}_{op}^{(n)} T^{-1} , \quad (3.3.60)$$

e, em particular,

$$\dot{\vec{X}}_{op} = 2v_D \vec{\nabla} . \quad (3.3.61)$$

Repare agora que

$$\vec{X}_{op}^{(n+1)} = T \vec{x}_{op}^{(n+1)} T^{-1} = T \left[\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} + v_D \Delta, \vec{x}_{op}^{(n)} \right] T^{-1} + T \frac{\partial \vec{x}_{op}^{(n)}}{\partial t} T^{-1} , \quad (3.3.62)$$

segundo a Eq. (3.48). Mas $\vec{X}_{op}^{(n)} = T^{-1} \vec{X}_{op}^{(n)} T$, de modo que

$$T \frac{\partial \vec{X}_{op}^{(n)}}{\partial t} T^{-1} = \frac{\partial \vec{X}_{op}^{(n)}}{\partial t} + T \frac{\partial T^{-1}}{\partial t} \vec{X}_{op}^{(n)} + \vec{X}_{op}^{(n)} \frac{\partial T}{\partial t} T^{-1} . \quad (3.3.63)$$

A partir da identidade $TT^{-1} = 1$ prova-se que

$$\frac{\partial T}{\partial t} T^{-1} = - T \frac{\partial T^{-1}}{\partial t} . \quad (3.3.64)$$

Substituindo este último resultado em (3.63) e levando a equação resultante em (3.62) vem

$$\vec{X}_{op}^{(n+1)} = \left[T(\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla} + v_D \Delta) T^{-1} + T \frac{\partial T^{-1}}{\partial t} , \vec{X}_{op}^{(n)} \right] + \frac{\partial \vec{X}_{op}^{(n)}}{\partial t} . \quad (3.3.65)$$

Depois de cálculos longos e tediosos, com o uso da Eq. (3.25), obtém-se

$$\vec{X}_{op}^{(n+1)} = \frac{1}{2m v_D} \left[H_{op} , \vec{X}_{op}^{(n)} \right] + \frac{\partial \vec{X}_{op}^{(n)}}{\partial t} , \quad (3.3.66)$$

com H_{op} dado por

$$H_{op} = \frac{1}{2} \frac{(2m v_D)^2}{m} \Delta + v \beta_N \hbar z S_D - \left[\frac{\hbar^2}{2m} + 2m v_D^2 \right] \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} . \quad (3.3.67)$$

Os operadores transformados \vec{X}_{op}^{\dagger} e \vec{X}_{op} satisfazem a mesma álgebra que os operadores originais:

$$\left[X_{op}^k , X_{op}^l \right] = -2v_D \delta_{kl} , \quad (3.3.68)$$

$$\left[X_{op}^k , X_{op}^l \right] = \left[\dot{X}_{op}^k , \dot{X}_{op}^l \right] = 0 .$$

Se escolhermos

$$v_D = - \frac{i\hbar}{2m} \quad (3.3.69)$$

e definirmos

$$\vec{P}_{op} = m \dot{\vec{X}}_{op} \quad , \quad (3.3.70)$$

as Eqs. (3.68) transformam-se em

$$\begin{aligned} [X_{op}^k, P_{op}^\ell] &= i\hbar\delta_{k\ell} \quad , \\ [X_{op}^k, X_{op}^\ell] &= [P_{op}^k, P_{op}^\ell] = 0 \quad , \end{aligned} \quad (3.3.71)$$

que é a álgebra dos operadores da mecânica quântica. Além disso o operador H_{op} dado pela Eq. (3.67) assume a forma

$$H_{op} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V + \beta_N \hbar Z S_D \quad . \quad (3.3.72)$$

A escolha ditada pela Eq. (3.69) corresponde a tomar $Z = -i$ na Eq. (3.22). Nestas circunstâncias $Z S_D$ deve ser real, de modo que S_D torna-se imaginária. Devido à Eq. (3.26) vemos que β_D também torna-se imaginário. Portanto, defina, com S e β reais,

$$S_D = iS \quad , \quad \beta_D = -i\beta \Rightarrow \beta_N = \beta \quad . \quad (3.3.73)$$

Assim o operador hamiltoniano torna-se

$$H_{op} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V + \beta \hbar S \quad , \quad (3.3.74)$$

e a Eq. (3.25) identifica-se com a equação de Kostin

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_{op} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V\psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \ln \frac{\psi}{\psi^*} \right] \psi. \quad (3.3.75)$$

O fato de S_D ser imaginária faz com que o produto escalar no espaço de Hilbert I_t passe a ser dado por (ver a Eq. (3.59))

$$((f, g)) = \int f^*(\vec{x}) g(\vec{x}) d^3x, \quad (3.3.76)$$

de modo que $I_t = L^2(\mathbb{R}^3)$, isto é, recuperamos o espaço de Hilbert usual da mecânica quântica. No caso em que $\beta = 0$, ou seja, na ausência de forças dissipativas, o operador H_{op} torna-se linear e idêntico ao operador hamiltoniano da mecânica quântica, ao passo que os operadores de posição e momento linear operam sobre o espaço de Hilbert das funções de quadrado integrável e obedecem à álgebra canônica (3.71). Assim o formalismo de Davidson permite construir toda a álgebra dos operadores da mecânica quântica dentro da formulação estocástica. Significativamente, entretanto, isto só é conseguido à custa de postular um coeficiente de difusão imaginário para o éter, o que destrói completamente o conteúdo físico da mecânica estocástica bem como qualquer pretensão de interpretá-la como uma explicação clássica da mecânica quântica.

Contentando-nos com os aspectos puramente formais do modelo de Davidson, observemos que se $\beta \neq 0$ o operador hamiltoniano deixa de ser linear, e o resultado de sua ação sobre qualquer elemento ψ de seu domínio está dado na Eq. (3.75). O fato de β não ser nulo não afeta os operadores de posição e momento linear, que permanecem lineares e com forma idêntica à dos ope

radores correspondentes da mecânica quântica ordinária. O operador de aceleração, contudo, não é linear porque $\dot{\hat{X}}_{op}$ não comuta com o termo logarítmico presente na Eq. (3.75), enquanto que \hat{X}_{op} comuta com aquele termo. O que nos parece mais notável é o fato de que, mesmo na presença de uma força dissipativa, o caráter linear dos operadores de posição e momento linear é preservado e, além disso, sua forma coincide com aquela que eles assumem na mecânica quântica habitual. Esta propriedade da mecânica estocástica empresta uma importante justificativa teórica para o emprego destes operadores lineares na teoria quântica de sistemas dissipativos, que é intrinsecamente não-linear devido ao caráter não-linear da equação fundamental que governa a evolução temporal do sistema (22).

We are to admit no more causes of natural things than such as are both true and sufficient to explain their appearances.

To this purpose the philosophers say that Nature does nothing in vain, and more is in vain when less will serve; for Nature is pleased with simplicity, and affects not the pomp of superfluous causes.

Isaac Newton, Mathematical Principles of Natural Philosophy

CAPÍTULO 4QUANTIZAÇÃO DE SISTEMAS DISSIPATIVOS MEDIANTE EQUAÇÕES
DE SCHRÖDINGER NÃO-LINEARES

Este capítulo é devotado à quantização de sistemas dissipativos com o emprego de equações de Schrödinger não-lineares. Mostramos como a equação de Kostin pode ser deduzida por meio de um apelo ao princípio da correspondência caracterizado pelo teorema de Ehrenfest. Analisamos as propriedades fundamentais da equação de Kostin e algumas de suas soluções para a partícula livre e o oscilador harmônico amortecidos. Outras equações não-lineares que têm sido propostas para a descrição quântica de sistemas dissipativos são investigadas sucintamente e comparamos suas propriedades com as da equação de Kostin, que parece ser uma equação mais bem dotada de atributos fisicamente razoáveis do que as demais. Revemos, finalmente, o papel desempenhado pelas forças estocásticas na teoria quântica de sistemas dissipativos.

4.1 - O TEOREMA DE EHRENFEST E A EQUAÇÃO DE KOSTIN

Estamos interessados em examinar a possibilidade de construirmos equações de evolução capazes de descrever sistemas dissipativos sem abandonarmos completamente a estrutura conceitual da mecânica quântica. Mais precisamente, desejamos descrever o movimento de uma partícula mediante uma equação análoga à de Schrödinger de tal modo que, no limite clássico, recuperemos a equação newtoniana de movimento de uma partícula num poten-

cial $V(\vec{x})$ e sujeita a uma força de amortecimento proporcional à sua velocidade. Entendemos aqui por "limite clássico" o teorema de Ehrenfest da mecânica quântica (116). Tentaremos construir uma equação de Schrödinger da forma (14, 23, 24)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{x})\psi + V_L \psi \quad (4.1.1)$$

adicionando o operador de dissipação real V_L ao potencial $V(\vec{x})$ de modo a transformar o teorema de Ehrenfest usual em

$$\frac{d\langle \hat{\vec{x}} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{\vec{p}} \rangle}{m} \quad , \quad (4.1.2)$$

$$\frac{d\langle \hat{\vec{p}} \rangle}{dt} = -\beta \langle \hat{\vec{p}} \rangle - \langle \vec{\nabla} V \rangle \quad . \quad (4.1.3)$$

Deste modo a equação de movimento para o valor esperado da posição assume a forma

$$m \frac{d^2 \langle \hat{\vec{x}} \rangle}{dt^2} + m\beta \frac{d\langle \hat{\vec{x}} \rangle}{dt} + \langle \vec{\nabla} V \rangle = 0 \quad , \quad (4.1.4)$$

que consideraremos o análogo quântico da equação newtoniana de movimento

$$m \ddot{\vec{x}} + m\beta \dot{\vec{x}} + \vec{\nabla} V(\vec{x}) = 0 \quad . \quad (4.1.5)$$

Embora a equação de Schrödinger que iremos obter não seja linear, suporemos que o momento linear da partícula ainda pode ser representado pelo operador linear

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad . \quad (4.1.6)$$

Esta hipótese é sustentada pela construção da álgebra dos operadores no modelo estocástico com coeficiente de difusão imaginário analisado no capítulo precedente.

Um cálculo simples e direto, com o uso da Eq. (1.1), mostra que

$$\frac{d\langle \hat{\vec{x}} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{\vec{p}} \rangle}{m} + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\vec{x}}, V_L] \rangle \quad (4.1.7)$$

e

$$\frac{d\langle \hat{\vec{p}} \rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla} V_L \rangle - \langle \vec{\nabla} V \rangle \quad (4.1.8)$$

Condições suficientes sobre V_L para que estas equações reduzam-se às Eqs. (1.2) e (1.3) são (24)

$$\langle [\hat{\vec{x}}, V_L] \rangle = 0, \quad (4.1.9)$$

$$\langle \vec{\nabla} V_L \rangle = \beta \langle \hat{\vec{p}} \rangle. \quad (4.1.10)$$

Além disso iremos impor a condição adicional

$$\langle V_L \rangle = 0 \quad (4.1.11)$$

a fim de que o valor esperado do operador hamiltoniano seja igual ao valor esperado da soma da energia cinética com a energia potencial, isto é, $\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{H}_0 \rangle \equiv \langle -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \rangle$. As Eqs. (1.9) a (1.11) são pouco restritivas, de modo que elas admitem numerosas soluções. Considere a Eq. (1.10):

$$\int \psi^*(\vec{x}, t) (\vec{\nabla} V_L) \psi(\vec{x}, t) d^3x = \beta \int \psi^*(\vec{x}, t) (-i\hbar) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) d^3x =$$

$$= -\frac{i\beta\hbar}{2} \int (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) d^3x . \quad (4.1.12)$$

Portanto, se

$$\vec{\nabla} V_L = -\frac{i\beta\hbar}{2} \left[\frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} - \frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} \right] = \frac{\beta\hbar}{2i} \vec{\nabla} \ln \frac{\psi}{\psi^*} , \quad (4.1.13)$$

a Eq. (1.10) é satisfeita. Temos, então, que V_L é dado por

$$V_L(\psi) = \frac{\beta\hbar}{2i} \ln \frac{\psi}{\psi^*} + \alpha(t) . \quad (4.1.14)$$

A condição (1.11) traz V_L à forma

$$V_L(\psi) = \frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \rangle \right] , \quad (4.1.15)$$

e a Eq. (1.9) é automaticamente satisfeita. O operador de dissipação (1.15) foi descoberto pela primeira vez por Kostin (14) . Outras formas possíveis para o operador de dissipação serão discutidas mais adiante neste capítulo. Antes disso, porém, examinemos algumas propriedades importantes da equação de Kostin

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \rangle \right] \psi . \quad (4.1.16)$$

(i) Conservação da probabilidade. A partir da Eq.(1.16) e da equação obtida por conjugação complexa, levando em conta que V_L é real, deduz-se facilmente a equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 , \quad (4.1.17)$$

onde

$$\rho = |\psi|^2 \quad \text{e} \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (4.1.18)$$

são a densidade de probabilidade e a densidade de corrente de probabilidade usuais. Embora a equação de Kostin seja não-linear e, conseqüentemente, esteja fora dos limites da mecânica quântica ordinária, as Eqs. (1.17) e (1.18) nos compelem a reter a interpretação habitual de $|\psi|^2$ como a densidade de probabilidade da posição da partícula. A equação da continuidade (1.17) mostra que, uma vez normalizada, a função de onda ψ assim o permanecerá para sempre, ou seja, a probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar do espaço é constante no tempo. Já vimos no capítulo anterior que a interpretação de Born para a equação de Kostin é uma conseqüência automática do modelo estocástico da mecânica quântica. Portanto, com este duplo respaldo, admitiremos que a interpretação de Born permanece válida mesmo para equações de Schrödinger não-lineares como as que analisaremos neste capítulo.

Observe, entretanto, que a equação de Kostin, além de não-linear, é também não-homogênea, isto é, se ψ for uma solução e c for uma constante complexa com $|c| \neq 1$, então $c\psi$ não é uma solução. Isto suscita uma indagação quanto ao significado da normalização da função de onda. Há argumentos indicativos (embora não completamente rigorosos) de que, pelo menos para uma certa classe de equações de Schrödinger não-lineares, funções de onda com formas idênticas mas normas diferentes representam estados puros distintos (117). Diante deste indício, admitiremos

apenas funções de onda normalizadas. Repare que, neste caso, todas as soluções admissíveis são elementos do espaço de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$. Esta restrição é plausível porque, classicamente, uma partícula submetida a uma força de atrito proporcional à velocidade pode percorrer somente uma distância finita em todas as regiões do espaço onde a força conservativa é nula. Por isso é razoável supor que ψ anule-se no infinito para todos os potenciais $V(\vec{x})$ fisicamente significativos (24).

(ii) Lei de dissipação da energia. Com pequeno esforço chega-se a (23, 24)

$$\frac{d\langle\hat{E}\rangle}{dt} \equiv \frac{d\langle\hat{H}_0\rangle}{dt} = -\frac{1}{m\beta} \langle(\vec{\nabla}V_L)^2\rangle, \quad (4.1.19)$$

que, segundo a Eq. (1.10), é o análogo quântico da lei de dissipação clássica $\dot{E} = -\frac{\beta}{m} \vec{p}^2$. A Eq. (1.19) mostra que o valor esperado da energia é uma função decrescente do tempo, uma vez que V_L é real. Observe, no entanto, que duas equações mais intimamente relacionadas à lei de dissipação clássica seriam

$$\frac{d\langle\hat{E}\rangle}{dt} = -\frac{\beta}{m} \langle\hat{p}^2\rangle \quad (4.1.20)$$

ou

$$\frac{d\langle\hat{E}\rangle}{dt} = -\frac{\beta}{m} \langle\vec{p}\rangle^2. \quad (4.1.21)$$

(iii) Limite clássico e teoria de Hamilton-Jacobi. Com o intuito de estudar o limite clássico da equação de Kostin adotemos o procedimento tradicional e escrevamos

$$\psi(\vec{x}, t) = A(\vec{x}, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x}, t)\right], \quad (4.1.22)$$

onde A e S_0 são funções reais. Substituindo esta função de onda na Eq. (1.16) e tomando o limite em que \hbar tende a zero, obtemos a equação

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S_0)^2 + V(\vec{x}) + \beta[S_0 - \int A^2 S_0 d^3x] = 0. \quad (4.1.23)$$

Embora a equação para S_0 não seja independente da equação para A , o acoplamento entre A e S_0 é trivial, pois o termo integrado é uma função apenas do tempo. Defina

$$S_0(\vec{x}, t) = S(\vec{x}, t) + a(t), \quad (4.1.24)$$

onde $a(t)$ satisfaz

$$\dot{a} + \beta a = \int A^2(\vec{x}, t) S_0(\vec{x}, t) d^3x. \quad (4.1.25)$$

Resulta, portanto,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{x}) + \beta S = 0, \quad (4.1.26)$$

que pode ser considerada a equação de Hamilton-Jacobi para a "ação" S (31, 69). Esta terminologia é justificada porque é possível provar (31) que as curvas características (118) da equação diferencial parcial de primeira ordem (1.26) satisfazem as equações

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V - \beta\vec{p}, \quad (4.1.27)$$

que são equivalentes à equação clássica de movimento (1.5). É interessante observar que a equação de Hamilton-Jacobi foi obtida sem que se fizesse qualquer menção a uma hamiltoniana, e de fato é óbvio que não existe nenhuma função hamiltoniana cuja equação de Hamilton-Jacobi associada seja idêntica à Eq. (1.26). Apesar disso a "ação" S existe neste formalismo. Outra curiosidade é que a equação de Kostin pode ser também deduzida com base no princípio variacional de Schrödinger (87) partindo-se da Eq. (1.26) em lugar da equação de Hamilton-Jacobi usual (31, 39). No temos de passagem que fazendo-se a separação da variável temporal na Eq. (1.26) obtém-se uma equação que se assemelha bastante à equação de Hamilton-Jacobi gerada pela hamiltoniana (1.1.7) depois de efetuada a mesma separação de variáveis (48). Esta semelhança não é fortuita, e uma contribuição recente para a sua elucidação foi dada por Battezzati (119).

(iv) Separação de variáveis. Apesar de não-linear, a equação de Kostin goza da notável propriedade de admitir separação de variáveis se o potencial $V(\vec{x})$ for separável. Ilustremos a situação em coordenadas cartesianas. Seja $V(\vec{x}) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)$ e $\psi(\vec{x}, t) = \psi_1(x_1, t)\psi_2(x_2, t)\psi_3(x_3, t)$, onde $\psi_k \in L^2(\mathbb{R})$ e cada ψ_k está normalizada à unidade em relação à sua coordenada espacial correspondente. Então é muito fácil comprovar que $\psi(\vec{x}, t)$ é solução da equação de Kostin tridimensional se cada ψ_k satisfizer a equação de Kostin unidimensional

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x_k^2} + V_k(x_k) \psi_k + \frac{\beta \hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi_k}{\psi_k^*} - \langle \ln \frac{\psi_k}{\psi_k^*} \rangle \right] \psi_k, \quad (4.1.28)$$

onde o valor esperado é tomado apenas em relação à variável x_k .

Esta propriedade é bastante significativa uma vez que equações diferenciais parciais não-lineares dificilmente são separáveis, e deve-se pelo menos parcialmente ao fato de a não-linearidade ser logarítmica, já que esta propriedade é também exibida por uma outra equação de Schrödinger com não-linearidade logarítmica proposta por Białyński-Birula e Mycielski em outro contexto (120). O valor esperado da energia para a solução com as variáveis separadas é dado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{E} \rangle &= \int \psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \psi(\vec{x}, t) d^3x = \int \psi^* i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3x = \sum_{k=1}^3 \int \psi_k^* i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} dx_k = \\ &= \langle \hat{E}_1 \rangle + \langle \hat{E}_2 \rangle + \langle \hat{E}_3 \rangle, \end{aligned} \quad (4.1.29)$$

isto é, coincide com a soma dos valores esperados da energia para cada grau de liberdade, como seria de se presumir.

(v) Inversão do tempo. Fazendo a conjugação complexa da Eq. (1.16) resulta

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi^*(\vec{x}, t) - \\ -\frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi^*(\vec{x}, t)}{\psi(\vec{x}, t)} - \int d^3x \psi(\vec{x}, t) \psi^*(\vec{x}, t) \ln \frac{\psi^*(\vec{x}, t)}{\psi(\vec{x}, t)} \right] &\psi^*(\vec{x}, t). \end{aligned} \quad (4.1.30)$$

Substituindo t por $-t$ nesta equação vem

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{x}, -t)}{\partial (-t)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\vec{x}, -t) + V(\vec{x}) \psi^*(\vec{x}, -t) - \\ -\frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi^*(\vec{x}, -t)}{\psi(\vec{x}, -t)} - \int d^3x \psi(\vec{x}, -t) \psi^*(\vec{x}, -t) \ln \frac{\psi^*(\vec{x}, -t)}{\psi(\vec{x}, -t)} \right] &\psi^*(\vec{x}, -t). \end{aligned} \quad (4.1.31)$$

Supondo que o operador de inversão do tempo é o mesmo da mecânica quântica não-relativística usual, escrevemos (1.16)

$$\chi(\vec{x}, t) = (\hat{T}\psi)(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, -t) \quad , \quad (4.1.32)$$

onde \hat{T} é o operador antilinear de inversão temporal e $\chi(\vec{x}, t)$ é a função de onda transformada. De acordo com (1.31) a equação de evolução com o sentido do tempo invertido é

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \chi + V\chi - \frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\chi}{\chi^*} - \langle \ln \frac{\chi}{\chi^*} \rangle \right] \chi \quad . \quad (4.1.33)$$

Vemos, em primeiro lugar, que a equação de Kostin não é invariante sob inversão do tempo, o que não poderia deixar de acontecer uma vez que a dissipação da energia introduz uma direção preferencial para o tempo, ou seja, aquela ao longo da qual a energia decresce. Além disso, a equação de evolução com o sentido do tempo invertido obtém-se a partir da Eq. (1.16) por uma mera troca do sinal do coeficiente de atrito β , o que está plenamente de acordo com o que se esperaria a partir de uma análise da equação clássica de movimento (1.5).

As cinco propriedades da equação de Kostin que acabamos de discutir permitem um certo otimismo quanto à sua capacidade de oferecer uma descrição quântica de sistemas dissipativos com algum grau de razoabilidade física. Para melhor investigar esta questão iremos examinar algumas soluções exatas da equação de Kostin para sistemas dissipativos simples.

4.2 - ALGUMAS SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE KOSTIN

A. Partícula Livre Amortecida

Um sistema dissipativo exatamente solúvel e que suscita algum interesse é a partícula livre amortecida, para cujo movimento unidimensional escrevemos a equação

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\beta \hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \rangle \right] \psi \quad (4.2.1)$$

Não há perda de generalidade em considerar-se apenas o caso unidimensional porque, conforme já assinalamos, soluções do problema tridimensional podem ser escritas como produtos das soluções unidimensionais que iremos analisar. Kostin (14) encontrou "soluções" para a Eq. (2.1) na forma de ondas planas, mas a rigor tais "soluções" não são admissíveis por que têm norma infinita. É possível obter uma solução da Eq. (2.1) simplesmente fazendo uma analogia com o caso da partícula livre ordinária (23). Uma inspeção da forma do pacote gaussiano para a partícula livre (42) sugere que tentemos como solução normalizada

$$\psi(x,t) = \left(\frac{b(t)}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ - \frac{a(t)}{2} (x-\eta(t))^2 + \frac{i}{\hbar} m \dot{\eta}(t) (x-\eta(t)) + \frac{i}{\hbar} \xi(t) \right\}, \quad (4.2.2)$$

onde $a(t)$ pode ser uma função complexa, mas satisfaz

$$b(t) \equiv \text{Re } a(t) > 0, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad (4.2.3)$$

para que a função de onda seja de quadrado integrável. Inserindo esta solução tentativa na Eq. (2.1), concluímos que ela é de fato solução se η , a e ξ satisfizerem

$$m\ddot{\eta} + m\beta\dot{\eta} = 0, \quad (4.2.4)$$

$$\dot{a} + \frac{i\hbar}{m} a^2 + \frac{\beta}{2m} (a-a^*) = 0, \quad (4.2.5)$$

$$\dot{\xi} = \frac{m}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{i\hbar}{4} \frac{\dot{b}}{b} - \frac{\hbar^2 a}{2m} + \frac{\beta\hbar}{8im} \frac{a-a^*}{b}. \quad (4.2.6)$$

A despeito da aparência da Eq. (2.6), é fácil mostrar que $\xi(t)$, assim como $\eta(t)$, é uma função real. Com efeito, fazendo uso das Eqs. (2.3) e (2.5), podemos reescrever a equação para ξ na forma

$$\dot{\xi} = \frac{m}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{i\hbar}{4} (\dot{a}^* - \dot{a})(a + a^*), \quad (4.2.7)$$

uma expressão manifestamente real para ξ .

Vemos que $\eta(t)$ obedece à equação clássica de movimento, de modo que a função de onda (2.2) representa um pacote gaussiano centrado na solução clássica e com valor esperado da velocidade idêntico à velocidade clássica da partícula. Isto é facilmente verificável pois

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \psi(x,t) (-i\hbar) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} dx = m\dot{\eta}. \quad (4.2.8)$$

A densidade de probabilidade da posição da partícula é

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{b(t)}{\pi} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{b(t)}{2} (x - \eta(t))^2 \right], \quad (4.2.9)$$

cujas largura é dada por

$$(\Delta x)_t^2 = \frac{1}{2b(t)} = (a + a^*)^{-1}. \quad (4.2.10)$$

A dispersão do pacote é governada pela Eq. (2.5) que, embora de aparência simples, é muito difícil de ser resolvida exatamente. Entretanto, não se pode deixar de notar que ela não admite nenhuma solução que tenha uma parte real constante e positiva, como se comprova facilmente. Isto demonstra que o pacote dispersa-se inevitavelmente. A partir de (2.10) e (2.5) é possível construir uma equação diferencial para a largura $(\Delta x)_t$. Soluções assintóticas desta equação podem ser obtidas (23,121) e o resultado é que $|a(t)|^{-1}$ e a largura do pacote crescem indefinidamente com o tempo. Para grandes valores de t a largura $(\Delta x)_t$ cresce proporcionalmente à raiz quarta de t , o que representa um crescimento muito mais lento do que o da partícula livre usual, que é linear em t (42). Confronte-se este resultado com o obtido no Capítulo 1 a partir da hamiltoniana dependente do tempo, segundo o qual a largura do pacote de ondas torna-se constante e finita para grandes valores de t . No presente caso, ao mesmo tempo que o pacote se desfaz, a largura da densidade de probabilidade do momento linear estreita-se indefinidamente. De fato, um cálculo simples e direto mostra que

$$(\Delta p)_t^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \hbar^2 \frac{|a(t)|^2}{a(t)+a(t)^*} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0 \quad (4.2.11)$$

porque $\lim_{t \rightarrow \infty} |a(t)| = 0$. Por outro lado, usando a Eq. (2.10), obtemos

$$(\Delta x)_t^2 (\Delta p)_t^2 = \frac{\hbar^2}{4} \frac{4aa^*}{(a+a^*)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (4.2.12)$$

de modo que a relação de incerteza de Heisenberg é respeitada. Isto não poderia deixar de acontecer visto que estamos usando o

operador $-i\hbar\partial/\partial x$ para representar o momento linear, de modo que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, donde resulta a desigualdade (2.12). Para tempos longos, portanto, a partícula encontra-se em repouso com certeza porque, segundo a Eq. (2.4), a velocidade se anula, o que faz com que o valor esperado do momento linear também se anule conforme a Eq. (2.8). A posição da partícula, contudo, torna-se completamente indeterminada, e todas as posições são equiprováveis. Vemos que o uso da equação não-linear de Kostin para a descrição de sistemas dissipativos elimina as dificuldades com o princípio da incerteza que assolam a formulação canônica.

B. Oscilador Harmônico Amortecido

Um sistema físico mais interessante e potencialmente relevante para aplicações concretas é o oscilador harmônico amortecido. No caso unidimensional a equação de Kostin para este sistema tem a forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi + \frac{\beta \hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \rangle \right] \psi, \quad (4.2.13)$$

onde ω é a frequência angular clássica do oscilador na ausência de amortecimento. A primeira solução exata desta equação foi descoberta (25) na forma de um pacote gaussiano:

$$\psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} (x - \eta(t))^2 + \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar\omega}{2} t + m\dot{\eta} (x - \eta) + \xi(t) \right] \right\}, \quad (4.1.14)$$

onde $\eta(t)$ e $\xi(t)$ são funções reais. A substituição desta função de onda na Eq. (2.13) revela que ela é de fato uma solução des

de que

$$m \ddot{\eta} + m\beta \dot{\eta} + m\omega^2 \eta = 0 \quad (4.2.15)$$

e

$$\dot{\xi} = \frac{m}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{m\omega^2}{2} \eta^2 \equiv L_C(\eta, \dot{\eta}) \quad , \quad (4.2.16)$$

onde L_C é a lagrangiana clássica do oscilador harmônico simples. Note que a função de onda (2.14) é solução para os três tipos de amortecimento (fraco, forte ou crítico), ao contrário do que alguns autores (23, 24) parecem sugerir. Em qualquer dos três casos de amortecimento $\eta(t)$ e $\dot{\eta}(t)$ anulam-se com o passar do tempo, de modo que a função de onda (2.14) reduz-se ao estado estacionário fundamental do oscilador harmônico simples. Esta tendência ao estado de equilíbrio é bastante satisfatória e manifesta-se claramente na expressão para o valor esperado da energia

$$\langle \hat{E} \rangle = \int \psi^* i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} dx = \frac{\hbar\omega}{2} + \left(\frac{m}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \eta^2 \right) \equiv \frac{\hbar\omega}{2} + E_C \quad , \quad (4.2.17)$$

onde E_C representa a energia clássica do oscilador. Conforme a Eq. (2.15), a energia clássica da partícula dissipa-se completamente com o passar do tempo e o valor esperado da energia reduz-se à energia do estado fundamental do oscilador sem amortecimento.

As soluções mais gerais até aqui descobertas (18, 41) são da forma

$$\psi(x, t) = \psi_n(x - \eta(t)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[-E_n t + m\dot{\eta}(x - \eta) + \xi(t) \right] \right\} \quad , \quad (4.2.18)$$

onde ψ_n é a enésima autofunção do oscilador harmônico simples e

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (4.2.19)$$

é seu autovalor correspondente. As funções η e ξ obedecem às mesmas equações anteriores. A função de onda (2.18) é um pacote de ondas cujo centro oscila exatamente como a solução da equação clássica de movimento (2.15). Além disso o pacote mantém sua estabilidade, isto é, não muda de forma. Estas soluções da equação de Kostin são análogas ao pacote de ondas oscilante construído por Schrödinger (122) para o oscilador harmônico simples. É curioso que a equação de Schrödinger (1.2.17) também admite soluções deste tipo (23, 39), mas o pacote dispersa-se com o passar do tempo. Estudemos, agora, algumas das propriedades da solução (2.18). O valor esperado da energia é dado por

$$\langle \hat{E} \rangle = \int \psi^* i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega + (\frac{m}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{m \omega^2}{2} \eta^2) \equiv (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega + E_c, \quad (4.2.20)$$

que consiste na energia clássica acrescida de uma flutuação quântica. Para tempos longos vemos que o valor esperado da energia aproxima-se da energia do enésimo estado estacionário do oscilador harmônico unidimensional, ao mesmo tempo que a função de onda confunde-se com a autofunção correspondente. A conclusão é que não apenas o estado fundamental, mas todos os estados estacionários do oscilador não-amortecido constituem estados de equilíbrio do oscilador amortecido. Um aspecto importante da equação de Kostin é que estes estados de equilíbrio parecem ser estáveis. De fato, todos os estados estacionários

$$\psi(x,t) = \psi_n(x) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t) \quad (4.2.21)$$

são soluções da Eq. (2.13) porque o terceiro termo no lado direito daquela equação anula-se para estas funções de onda, que correspondem a tomar $\eta = \xi \equiv 0$ como soluções das Eqs. (2.15) e (2.16). Esta solução é única para as condições iniciais $\eta(0) = \dot{\eta}(0) = 0$. Desta forma evidencia-se que, uma vez ocupando um dos estados estacionários, a partícula nele permanecerá sempre. Na verdade, no que diz respeito à estabilidade destes estados de equilíbrio, este argumento não tem caráter conclusivo, e é mais de cunho sugestivo, mesmo porque não se conhece nenhum teorema de unicidade* para as soluções da equação de Kostin. A questão da unicidade não é trivial devido à não-linearidade da equação, e no caso de equações diferenciais ordinárias, por exemplo, há equações não-lineares que admitem soluções distintas satisfazendo as mesmas condições iniciais, como é sobejamente conhecido (123). A questão da existência e da unicidade das soluções da equação de Kostin merece uma investigação aprofundada em face de sua importância não apenas do ponto de vista físico, mas também como um problema puramente matemático.

Cálculos um pouco laboriosos, porém diretos, fornecem

* São conhecidas algumas condições suficientes que garantem a unicidade (124), mas estas condições não são satisfeitas nas situações mais gerais.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \eta(t) \quad , \quad \langle \hat{p} \rangle = m\dot{\eta} \quad , \\
\langle \hat{x}^2 \rangle &= \eta(t)^2 + \frac{\hbar}{m\omega} (n + 1/2) \quad , \\
\langle \hat{p}^2 \rangle &= (m\dot{\eta})^2 + m\hbar\omega (n + 1/2) \quad , \\
(\Delta x)_t (\Delta p)_t &= (n + 1/2)\hbar \quad ,
\end{aligned}
\tag{4.2.22}$$

demonstrando que (2.14) é a função de onda com produto de incertezas mínimo. Incidentalmente, a Eq. (2.22) mostra que, para $V(x) = m\omega^2 x^2/2$,

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = m\omega^2 \eta = \frac{\partial}{\partial \eta} \langle V \rangle = \frac{\partial}{\partial \langle \hat{x} \rangle} V(\langle \hat{x} \rangle) \quad . \tag{4.2.23}$$

Nestas circunstâncias o teorema de Ehrenfest (1.4) torna-se esstritamente idêntico à equação clássica de movimento (2.15) desde que as variáveis clássicas sejam entendidas como os valores esperados dos operadores quânticos correspondentes. Para completar a analogia com a mecânica clássica, observe que valendo-nos da Eq. (2.20) deduzimos

$$\frac{d\langle \hat{E} \rangle}{dt} = \frac{dE_c}{dt} = -m\beta\dot{\eta}^2 = -\frac{\beta}{m} \langle \hat{p} \rangle^2 \quad . \tag{4.2.24}$$

Para as soluções aqui consideradas a equação geral (1.19) reduz-se à Eq. (1.21) que, como já havíamos mencionado, assemelha-se mais à lei clássica de dissipação da energia.

As soluções aqui analisadas no caso unidimensional podem ser facilmente generalizadas para três dimensões. As funções de onda tridimensionais são construídas tomando-se o produ

to das soluções unidimensionais que acabamos de discutir. No que tange às propriedades das soluções, os casos unidimensional e tridimensional não apresentam diferenças qualitativas. São conhecidas também soluções exatas para um potencial dependente linearmente da posição (campo gravitacional constante). Para uma discussão destas e de outras soluções remetemos o leitor aos trabalhos originais (23, 124). Colisões de pacotes de ondas gaussianos e penetração em barreiras de potencial também têm sido objeto de estudo por meio de integração numérica da equação de Kostin (121).

4.3 - OUTRAS EQUAÇÕES NÃO-LINEARES

Como já sublinhamos anteriormente, as condições (1.9) a (1.11), que o operador de dissipação deve satisfazer, admitem uma grande variedade de soluções. Vamos discutir alguns operadores de dissipação que têm sido propostos (23, 24) bem como suas propriedades. Estudaremos inicialmente problemas unidimensionais para, em seguida, comentarmos em breves palavras a situação tridimensional.

Um operador de dissipação proposto por Albrecht (24) é

$$V_A = \beta (x - \langle \hat{x} \rangle) \langle \hat{p} \rangle , \quad (4.3.1)$$

de modo que a equação de evolução correspondente é

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi + \beta (x - \langle \hat{x} \rangle) \langle \hat{p} \rangle \psi . \quad (4.3.2)$$

Para o caso da partícula livre amortecida, isto é, $V(x) = 0$, esta equação admite como solução um pacote de ondas da forma (2.2), sendo que a equação diferencial satisfeita por $a(t)$ passa a ser

$$\dot{a} + \frac{i\hbar}{m} a^2 = 0 \quad , \quad (4.3.3)$$

cuja solução tem a forma

$$a(t) = (\delta^2 + i\hbar t/m)^{-1} \quad , \quad (4.3.4)$$

onde δ é uma constante real positiva com dimensão de comprimento. Mas a Eq. (3.4) descreve um alargamento do pacote de ondas que é idêntico ao de uma partícula livre sem amortecimento (42). É surpreendente que neste caso a força de amortecimento não afeta a dispersão do pacote de ondas, que segue o seu caminho como se se movesse absolutamente livre de forças. Note que este comportamento dificilmente poderia ser aceitável visto que não pode ser comparado com o dos estados estacionários do oscilador harmônico simples, que, como vimos no caso da equação de Kostin, não são afetados pela força dissipativa. Os comportamentos são díspares porque os estados estacionários são estados de equilíbrio, ao passo que não se pode dizer o mesmo do pacote gaussiano da partícula livre.

Quanto ao oscilador harmônico amortecido, não é difícil constatar que a função de onda (2.18) é solução da Eq. (3.2) com $V(x) = m\omega^2 x^2/2$. Isto infere-se da igualdade

$$V_L(\psi) = V_A(\psi) = m\beta(x-\eta)\dot{\eta} \quad , \quad (4.3.5)$$

que pode ser facilmente comprovada com o emprego da Eq. (2.22). Da mesma forma, verifica-se que os estados estacionários (2.21) são soluções da Eq. (3.2) com um potencial harmônico. A lei de dissipação da energia determina-se trivialmente a partir da Eq. (1.19) substituindo-se V_L por V_A , e o resultado é

$$\frac{d\langle \hat{E} \rangle}{dt} = - \frac{\beta}{m} \langle \hat{p} \rangle^2. \quad (4.3.6)$$

Esta expressão vale qualquer que seja o potencial $V(x)$, e coincide com o resultado obtido para a equação de Kostin no caso particular do oscilador harmônico amortecido. As propriedades (i), (iv) e (v) da equação de Kostin são compartilhadas pela equação de Albrecht.

Hasse (23) sugeriu o operador de dissipação

$$V_H = \frac{\beta}{4} \left[(x - \langle \hat{x} \rangle) (\hat{p} + \langle \hat{p} \rangle) + (\hat{p} + \langle \hat{p} \rangle) (x - \langle \hat{x} \rangle) \right], \quad (4.3.7)$$

que é consideravelmente mais complicado que V_A . Para a partícula livre amortecida obtém-se um pacote de ondas cuja largura cresce indefinidamente com o passar do tempo, mas com muito maior rapidez do que a da solução correspondente da equação de Kostin (23). O resultado mais interessante associado a V_H é que o pacote gaussiano (2.14) e os estados estacionários (2.21) são soluções para o oscilador harmônico amortecido desde que substituamos naquelas funções de onda a frequência angular ω por

$$\Omega = (\omega^2 - \beta^2/4)^{1/2},$$

que é exatamente a frequência angular reduzida que ocorre na solução da equação clássica de movimento (2.15). Um inconveniente do operador de dissipação de Hasse é que as soluções estão res- tritas ao caso de amortecimento fraco, isto é, $\beta < 2 \omega$. Recorde- mos, neste momento, que as soluções obtidas para a equação de Kostin são válidas independentemente do regime de amortecimento. Outra dificuldade com V_H é que a Eq. (1.11) não é satisfeita e xatamente em todos os estados quânticos. As propriedades (iv) e (v) da equação de Kostin também são exibidas pela equação cons- truída com V_H .

Os operadores de dissipação V_L , V_A e V_H têm a caracte- rística comum de admitirem, para a partícula livre amortecida, pacotes gaussianos cujas larguras crescem indefinidamente com o tempo. Para cada um dos três casos as larguras dos pacotes são funções do tempo distintas, e não parece haver ainda nenhum tes- te empírico capaz de decidir em favor de um ou outro (ou nenhum) operador de dissipação. As equações não-lineares aqui discuti- das são potencialmente aplicáveis ao espalhamento profundamente inelástico de íons pesados, de modo que num futuro não muito re moto a distinção experimental dos diferentes operadores de dis- sipação poderá vir a ser possível (125). Equações não-lineares como as propostas por Albrecht e Hasse podem ser deduzidas a partir de modelos microscópicos simplificados de reações nuclea- res (126), enquanto que a equação de Kostin é dedutível por quan- tização de um sistema composto por uma infinidade de oscilado- res acoplados (127). O operador V_A sofre do inconveniente de permitir como solução um pacote gaussiano que se move exatamen- te como uma partícula livre, sem que a força de atrito sobre

ela exerça qualquer influência. A existência de estados estacionários como soluções de equações não-lineares que pretendem descrever sistemas dissipativos tem sido reiteradamente (23, 41) tachada de aspecto negativo do formalismo aqui focalizado. É até possível, no entanto, que esta venha a revelar-se uma característica positiva da teoria quântica de sistemas dissipativos baseada em equações de Schrödinger não-lineares. Com efeito, como já vimos, há fortes indícios de que os estados estacionários sejam estados de equilíbrio estável. É possível provar que o estado estacionário fundamental do oscilador harmônico amortecido descrito pela equação de Kostin é estável no seguinte sentido: qualquer pacote gaussiano que difira ligeiramente do estado estacionário fundamental passa por um processo de decaimento e termina por retornar ao estado de equilíbrio fundamental (128). E evidencia-se, então, que quando a partícula está ocupando um estado estacionário não ocorre dissipação da energia, o que está em flagrante contradição com a mecânica clássica. Salta aos olhos o paralelo com a teoria de Bohr do átomo de hidrogênio (129), segundo a qual o elétron ocupante de um estado estacionário não irradia ondas eletromagnéticas, o que viola as leis da eletrodinâmica clássica. Devido à nossa atual ignorância sobre a teoria quântica de sistemas dissipativos, o significado físico de tal paralelo, se existe, permanece na obscuridade.

Recentemente, Gisin (130) construiu uma equação de Schrödinger não-linear cujos estados estacionários são semi-estáveis e apenas o estado fundamental é estável. A equação de Gisin foi obtida a partir de exigências de caráter puramente quântico, sem lançar mão de qualquer analogia com sistemas dissipa-

tivos clássicos. Se, por um lado, isto pode representar uma vantagem teórica, por outro lado pode dificultar a interpretação do modelo. Por exemplo, o teorema de Ehrenfest, na forma considerada no início deste capítulo, não é satisfeito. Caldirola e Montaldi (131) propuseram uma equação de diferenças finitas no tempo para substituir a equação de Schrödinger usual no caso de sistemas dissipativos. Novamente, esta equação não tem um análogo clássico evidente, o que dificulta a sua interpretação física. Equações de Schrödinger lineares com potenciais complexos ou dependentes explicitamente do tempo têm sido propostas para a descrição de colisões inelásticas de íons pesados (132).

Diante deste quadro, não parece existir nenhuma justificativa convincente para, em detrimento da equação de Kostin, se preferir qualquer uma das outras equações que têm sido sugeridas. Além disso a equação de Kostin desfruta de uma base teórica muito mais sólida que as demais, já que ela pode ser deduzida tanto no contexto da interpretação estocástica - como demonstramos no capítulo anterior - quanto a partir de uma interpretação hidrodinâmica da mecânica quântica (25). Os operadores de dissipação que têm sido propostos são muito mais artificiais de que aquele que surge naturalmente quando se deduz a equação de Kostin a partir de qualquer uma das duas interpretações da mecânica quântica a que acabamos de aludir. A equação de Kostin é a única, dentre as equações não-lineares aqui apreciadas, que dá lugar a uma equação de Hamilton-Jacobi fisicamente razoável quando se adota o procedimento tradicional para o estudo do limite clássico (analogia com a transição da óptica ondulatória à óptica geométrica). As equações propostas por Albrecht e Hasse

só atendem a este requisito se, para sistemas dissipativos, a equação de Hamilton-Jacobi for modificada de uma maneira que nos parece um tanto artificial e ad hoc (133).

4.4 - O PAPEL DESEMPENHADO PELAS FORÇAS ESTOCÁSTICAS

Até aqui temos considerado sistemas dissipativos caracterizados por um único parâmetro, ou seja, o coeficiente de atrito β . No caso do movimento browniano, além deste parâmetro, entra em jogo uma força flutuante ou estocástica caracterizada por um parâmetro associado à correlação entre suas componentes em instante distintos (vide Sec. A.4 do Apêndice). Este parâmetro, por seu turno, está relacionada à temperatura do meio no qual a partícula browniana encontra-se imersa, e ao próprio coeficiente de atrito, conforme a Eq. (A.4.7). Este é o chamado teorema da flutuação - dissipação [vide Eq. (A.4.8)], segundo o qual o coeficiente de atrito viscoso depende diretamente da força estocástica, e ou ambos são diferentes de zero, ou ambos anulam-se simultaneamente. Além disso a presença da força flutuante é essencial para que a distribuição de velocidades torne-se maxwelliana no limite $t \rightarrow \infty$; em outras palavras, para que o equilíbrio térmico seja atingido. A força estocástica surge naturalmente em modelos que simulam o banho térmico com o qual a partícula encontra-se em contato como sendo um sistema de osciladores harmônico acoplados (33, 34). Senitzky (27) construiu um modelo em que um oscilador harmônico interage com um sistema não especificado com um espectro energético quase contínuo, isto é, os níveis de energia do sistema responsável pelos efeitos dissipativos são muito numerosos e densamente distribuídos. Admi-

tiu ele, ainda, que o referido sistema é caracterizado por uma temperatura e que os níveis energéticos distribuem-se de acordo com a lei de distribuição de Boltzmann àquela temperatura. Atribuindo uma forma simples ao acoplamento entre a partícula e o mecanismo de dissipação, e fazendo aproximações perturbativas, ele mostrou que a equação (no caso unidimensional)

$$m\ddot{\hat{x}} + m\beta\dot{\hat{x}} + m\omega^2\hat{x} = \hat{F}(t) \quad (4.4.1)$$

é satisfeita pelos operadores na representação de Heisenberg, onde $\hat{F}(t)$ é um operador cujas propriedades foram deduzidas em seu formalismo. Senitzky mostrou, ainda, que o comutador entre os operadores de posição e de momento linear é igual a $i\hbar$, enquanto que o comutador dado pela Eq. (1.2.2) prevalece somente se a força $\hat{F}(t)$ for ignorada. Desta forma ele mostrou que a violação do princípio da incerteza na quantização canônica do oscilador harmônico amortecido baseada na hamiltoniana (1.17) deve-se ao fato de a força $\hat{F}(t)$ ter sido desconsiderada. Em outro contexto (força dissipativa de reação da radiação) demonstrou-se que as flutuações de vácuo do campo eletromagnético restauram a relação de comutação usual entre posição e momento linear (134).

Na teoria quântica de sistemas dissipativos, como estudada nesta tese, não se propõe nenhum modelo para a interação da partícula com o sistema responsável pela dissipação. Entretanto é possível incorporar os efeitos da força flutuante, e cálculos explícitos têm sido realizados (135, 136) com base no seguinte procedimento. Para levar-se em conta a presença da força estocástica $\vec{F}(t)$ acrescenta-se seu potencial $V_R = -\vec{x} \cdot \vec{F}(t)$ ao po

tencial usual $V(\vec{x})$ na equação de Schrödinger. Por exemplo, a equação de Kostin unidimensional incluindo a força estocástica escreve-se

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi - xF(t)\psi + \frac{\beta\hbar}{2i} \left[\ln \frac{\psi}{\psi^*} - \langle \ln \frac{\psi}{\psi^*} \rangle \right] \psi, \quad (4.4.2)$$

e foi nesta forma que ele foi originalmente proposta (14). Por sua vez a equação de Schrödinger (1.2.4) escreve-se, agora,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-\beta t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + e^{\beta t} V(x)\psi + e^{\beta t} xF(t)\psi. \quad (4.4.3)$$

No caso do oscilador harmônico amortecido, a Eq. (4.2) admite uma solução da forma (2.14) desde que $\eta(t)$ satisfaça agora

$$m\ddot{\eta} + m\beta\dot{\eta} + m\omega^2\eta = F(t). \quad (4.4.4)$$

A força $F(t)$ é um processo estocástico, de modo que a solução $\eta(t)$ desta equação fica sujeita a uma distribuição de probabilidades que se deduz das propriedades estatísticas de $F(t)$. A hipótese usual (135) é que $F(t)$ tem propriedades idênticas às admitidas na teoria de Ornstein - Uhlenbeck do movimento browniano. Pelo fato de $\eta(t)$ ser agora um processo estocástico, a função de onda (2.14) também torna-se estocástica. Tomando-se a média em relação à distribuição de probabilidades de $\eta(t)$, obtém-se a função de onda média que descreve o sistema. Aplicando este método à Eq. (4.3), Svin'in (135) demonstrou que, ao menos para certas condições iniciais, a relação de incerteza entre posição e momento linear é restaurada pela presença da força estocástica, assim como a energia de ponto zero deixa de ser nula, corro

borando o resultado de Senitzky. Este resultado foi confirmado recentemente com o emprego de outros métodos (137). Messer (136), por sua vez, mostrou que, pelo menos para certas condições iniciais, os modelos baseados nas Eqs. (4.2) e (4.3) produzem os mesmos resultados no caso do oscilador harmônico amortecido. No caso da partícula livre amortecida, contudo, os resultados são distintos, mas a diferença é pequena demais para ser acessível a um teste experimental (136).

Como se vê, a presença da força estocástica é necessária para eliminar as inconsistências físicas da quantização canônica apoiada na lagrangiana de Bateman, quando a Eq. (1.5) é considerada válida para os operadores de Heisenberg. Neste caso o operador de posição deve ser encarado como representando uma variável de posição média, de modo que para excitações inicialmente muito maiores que as flutuações, e para tempos suficientemente curtos para que as excitações permaneçam sensivelmente maiores que as flutuações, a coordenada de posição média pode ser considerada apropriada para descrever o movimento da partícula (138).

Na teoria quântica de sistemas dissipativos baseada em equações de Schrödinger não-lineares não há quaisquer dificuldades nem com o princípio da incerteza, que é automaticamente satisfeito, nem com a energia de ponto zero, que não é nula. O método aqui esboçado para incorporar os efeitos da força estocástica é particularmente apropriado para a teoria quântica do movimento browniano (135, 136). Entretanto, modelos estatísticos de colisões de íons pesados indicam que, em certas condições, a

força estocástica parece produzir efeitos desprezíveis (139) . . Neste tipo de processo físico há uma outra razão para se por em dúvida a eficácia da inclusão da força estocástica: espera-se que flutuações quânticas manifestem-se mesmo à temperatura zero, flutuações estas que na presença de dissipação não são necessariamente as mesmas que na sua ausência (140). Cálculos perturbativos de flutuações quânticas de variáveis coletivas em modelos simplificados da interação entre os graus de liberdade coletivos e intrínsecos em reações nucleares conduzem a resultados consistentes com a equação de Kostin, mas não com outras equações de Schrödinger não-lineares (126). Nestas circunstâncias, concluímos que somente após a comparação das previsões dos modelos discutidos nesta tese com os resultados empíricos é que tornar-se-á possível decidir se a teoria quântica de sistemas dissipativos é coerente e merecedora de algum crédito.

Não há nada que dê tanto peso e dignidade a um livro como um Apêndice.

Heródoto, apud V. Grigoryev e G. Myakishev, The Forces of Nature

APÊNDICE A

RUDIMENTOS DA TEORIA DOS PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

Neste apêndice fazemos um bosquejo elementar da teoria dos processos estocásticos na forma que julgamos mais adequada às aplicações físicas. Não será possível, por motivos óbvios, discutir em detalhes as motivações intuitivas subjacentes às definições formais que apresentaremos. Procuraremos remediar esta deficiência remetendo o leitor à bibliografia relevante onde tais discussões podem ser encontradas*. Não temos absolutamente nenhuma pretensão ao rigor matemático porque, em primeiro lugar, isto transcende o escopo do presente trabalho e, ademais, está além da nossa competência. Tentaremos, não obstante, exibir demonstrações heurísticas dos resultados mais importantes. Em benefício do leitor interessado nas sutilezas matemáticas, faremos menção freqüente às fontes onde as definições e demonstrações rigorosas estão disponíveis.

A.1 - VARIÁVEIS ALEATÓRIAS E FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO

Uma variável aleatória é uma função cujos valores estão sujeitos a uma distribuição de probabilidades. O resultado do lançamento de um dado ou a velocidade de uma molécula de um gás a uma dada temperatura são exemplos de variáveis aleatórias [(141), cap.4].

* Uma introdução sucinta e intuitiva à teoria da probabilidade encontra-se no segundo capítulo do interessante livro de Haken (34).

Do ponto de vista matemático, uma função real X definida sobre um conjunto Ω será dita uma variável aleatória se, para todo número real x , a desigualdade $X(\omega) \leq x$ delimitar um subconjunto de Ω cuja probabilidade está definida [(142), pág. 5]. O conjunto Ω é chamado de espaço amostral e os subconjuntos de Ω para os quais a probabilidade está definida (conjuntos mensuráveis) são chamados de eventos [(141), cap. 1; (142), págs. 1-5]. Portanto, se X é uma variável aleatória, a função

$$F(x) = P \{X(\omega) \leq x\} \quad (\text{A.1.1})$$

está definida para todo x real, onde $P \{X(\omega) \leq x\}$ designa a probabilidade de X assumir valores menores que ou iguais a x [(142), pág. 5]. A função F é chamada de função de distribuição da variável aleatória X . Ela é monótona não-decrescente, contínua à direita, e

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0 \quad , \quad \lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1 \quad . \quad (\text{A.1.2})$$

Estas equações decorrem de (A.1.1) e da exigência de que P satisfaça $P\{\emptyset\} = 0$ e $P\{\Omega\} = 1$, onde \emptyset denota o conjunto vazio. Vamos considerar apenas variáveis aleatórias contínuas [(143), pág. 2] e para as quais existe uma densidade de probabilidade $\rho(x) \geq 0$ tal que

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \rho(\lambda) d\lambda \quad . \quad (\text{A.1.3})$$

Naturalmente

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1 \quad . \quad (\text{A.1.4})$$

A média (ou esperança, ou valor esperado) de X define-se por

$$E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x) dx \quad , \quad (\text{A.1.5})$$

e a variância de X é definida por

$$\text{Var}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x-E[X])^2 \rho(x) dx \quad , \quad (\text{A.1.6})$$

desde que as integrais existam [(141), cap. 5] . Se X for uma variável aleatória e g for uma função real, então $Y = g(X)$ é também uma variável aleatória. Neste caso a esperança de $g(X)$ é dada por [(143), pág. 2]

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \rho(x) dx \quad . \quad (\text{A.1.7})$$

Sejam X_1, \dots, X_n variáveis aleatórias definidas no mesmo espaço amostral Ω . Então sua função de distribuição conjunta é definida mediante

$$F(x_1, \dots, x_n) = P \{X_1(\omega) \leq x_1, \dots, X_n(\omega) \leq x_n\}, \quad (\text{A.1.8})$$

que suporemos dotada de uma densidade de probabilidade conjunta $\rho(x_1, \dots, x_n) \geq 0$ tal que

$$F(x_1, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} \rho(\lambda_1, \dots, \lambda_n) d\lambda_1 \dots d\lambda_n \quad . \quad (\text{A.1.9})$$

É evidente que

$$\lim_{x_j \rightarrow -\infty} F(x_1, \dots, x_n) = 0 \quad , \quad j = 1, \dots, n \quad , \quad (\text{A.1.10})$$

$$\lim_{x_1, \dots, x_n \rightarrow \infty} F(x_1, \dots, x_n) = 1 \quad .$$

As variáveis aleatórias X_1, \dots, X_n são ditas independentes se

$$F(x_1, \dots, x_n) = F_{X_1}(x_1) \dots F_{X_n}(x_n) \quad ,$$

ou, em termos das densidades de probabilidade de cada uma das variáveis aleatórias,

$$\rho(x_1, \dots, x_n) = \rho_{X_1}(x_1) \dots \rho_{X_n}(x_n) \quad . \quad (\text{A.1.11})$$

Se $g(x_1, \dots, x_n)$ for uma função real, o valor esperado da variável aleatória $g(X_1, \dots, X_n)$ é dado por

$$E[g(X_1, \dots, X_n)] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} g(x_1, \dots, x_n) \rho(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \quad . \quad (\text{A.1.12})$$

Se X_1, \dots, X_n forem variáveis aleatórias independentes é evidente que

$$E[X_1 \dots X_n] = E[X_1] \dots E[X_n] \quad . \quad (\text{A.1.13})$$

A matriz cujos elementos são

$$\Gamma_{ij} = E[(X_i - E[X_i])(X_j - E[X_j])] \quad (\text{A.1.14})$$

é chamada de matriz de covariância de X_1, \dots, X_n . Observe que,

se Z_1, \dots, Z_n forem números complexos,

$$\sum_{i,j=1}^n \Gamma_{ij} Z_i^* Z_j = E \left[\left| \sum_{i=1}^n Z_i (X_i - E[X_i]) \right|^2 \right] \geq 0 ,$$

de modo que a matriz de covariância é simétrica e positiva definida.

Variáveis aleatórias gaussianas [(95), pág. 6]. Uma variável aleatória X é dita gaussiana se sua densidade de probabilidade for dada por

$$\rho(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[- \frac{(x-m)^2}{2\sigma^2} \right] , \quad (\text{A.1.15})$$

com $\sigma > 0$ e $m \in \mathbb{R}$. É trivial verificar que m e σ são, respectivamente, a média e a variância de X . Uma coleção finita de variáveis aleatórias X_1, \dots, X_n é dita gaussiana se existem números reais m_1, \dots, m_n e uma matriz $n \times n$, simétrica, não-singular e positiva definida Q tal que a função de distribuição conjunta de X_1, \dots, X_n tenha densidade

$$\rho(x_1, \dots, x_n) = \frac{(\det Q)^{1/2}}{(2\pi)^{n/2}} \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (x_i - m_i) Q_{ij} (x_j - m_j) \right\} . \quad (\text{A.1.16})$$

A densidade de probabilidade conjunta de qualquer subconjunto ou combinação linear de X_1, \dots, X_n é novamente gaussiana e, em particular, cada X_i é uma variável aleatória gaussiana. Um cálculo simples e direto prova que $E[X_i] = m_i$ e $\Gamma_{ij} = (Q^{-1})_{ij}$. Assim, se X_1, \dots, X_n for uma família de variáveis aleatórias gaussianas, sua distribuição conjunta é completamente determinada por suas médias e matriz de covariância. Em particular, se a matriz

de covariância for diagonal as variáveis aleatórias gaussianas X_1, \dots, X_n são independentes.

Distribuições condicionais e esperanças condicionais [(143), págs. 5-9]. Sejam X, Y variáveis aleatórias com densidades de probabilidade $\rho_X(x)$, $\rho_Y(y)$ e seja $\rho_{XY}(x, y)$ sua densidade de probabilidade conjunta. A distribuição condicional de X dado que $Y(\omega) = y$ ($\forall \omega \in \Omega$) é definida por

$$F_{X|Y}(x|y) = \frac{\int_{-\infty}^x \rho_{XY}(\lambda, y) d\lambda}{\rho_Y(y)} \quad (\text{A.1.17})$$

sempre que $\rho_Y(y) > 0$, e tem valores atribuídos arbitrariamente quando $\rho_Y(y) = 0$. Note que

$$\begin{aligned} \rho_X(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{XY}(x, y) dy, \\ \rho_Y(y) &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{XY}(x, y) dx. \end{aligned} \quad (\text{A.1.18})$$

Temos que $F_{X|Y}(x|y)$ é uma função de distribuição em x para cada y , é uma função de y para cada x fixo, e

$$P\{X(\omega) \leq x, Y(\omega) \leq y\} = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y \rho_{XY}(\lambda, \eta) d\lambda d\eta = \int_{-\infty}^y F_{X|Y}(x|\eta) \rho_Y(\eta) d\eta. \quad (\text{A.1.19})$$

Aplicando este último resultado ao caso $y = \infty$ chegamos à lei da probabilidade total:

$$P\{X(\omega) \leq x\} = P\{X(\omega) \leq x, Y(\omega) \leq \infty\} = \int_{-\infty}^{\infty} F_{X|Y}(x|y) \rho_Y(y) dy. \quad (\text{A.1.20})$$

A densidade de probabilidade condicional $p_{X|Y}(x|y)$ de X dado que $Y = y$ é definida mediante

$$F_{X|Y}(x|y) = \int_{-\infty}^x p_{X|Y}(\lambda|y) d\lambda$$

donde, pela Eq. (A.1.17),

$$p_{X|Y}(x|y) = \frac{\rho_{XY}(x,y)}{\rho_Y(y)} \quad , \quad (\text{A.1.21})$$

desde que $\rho_Y(y) > 0$.

Seja g uma função real para a qual a esperança de $g(X)$ é finita. A esperança condicional de $g(X)$ dado que $Y(\omega) = y$ ($\forall \omega \in \Omega$) é definida por

$$E[g(X) | Y(\omega) = y] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) p_{X|Y}(x|y) dx \quad . \quad (\text{A.1.22})$$

Repare que $E[g(X) | Y(\omega) = y]$ é uma função de y para cada função g fixada. Se h for uma função real temos que

$$E[g(X)h(Y)] = \int_{-\infty}^{\infty} E[g(X) | Y(\omega) = y] h(y) \rho_Y(y) dy \quad . \quad (\text{A.1.23})$$

De fato, pelas Eqs. (A.1.22) e (A.1.21),

$$\begin{aligned} \int E[g(X) | Y(\omega) = y] h(y) \rho_Y(y) dy &= \int \left[\int g(x) p_{X|Y}(x|y) dx \right] h(y) \rho_Y(y) dy = \\ &= \iint g(x) h(y) \rho_{XY}(x,y) dx dy = E[g(X)h(Y)] \quad , \end{aligned}$$

onde a última igualdade decorre da Eq. (A.1.12). No caso especial em que $h \equiv 1$ somos conduzidos à lei da probabilidade total para esperanças:

$$E[g(X)] = \int E[g(X) | Y(\omega) = y] \rho_Y(y) dy \quad . \quad (\text{A.1.24})$$

Conforme já mencionamos, $E[g(X) | Y(\omega) = y]$ é uma função da variável real y . Se calcularmos o valor desta função em $y = Y$ obtemos uma variável aleatória que denotaremos por $E[g(X) | Y]$. Com esta notação a Eq. (A.1.23) pode ser agora escrita como

$$E[g(X)h(Y)] = E[E[g(X) | Y]h(Y)] \quad . \quad (\text{A.1.25})$$

A lei da probabilidade total (A.1.24) assume a forma

$$E[g(X)] = E[E[g(X) | Y]] \quad . \quad (\text{A.1.26})$$

Um resultado muito importante, mas cuja demonstração omitiremos por ser trivial, é que se X, Y forem variáveis aleatórias independentes então

$$E[g(X) | Y] = E[g(X)] \quad . \quad (\text{A.1.27})$$

Outras propriedades importantes cuja verificação é imediata são:

$$E[f(X, Y) | Y(\omega) = y] = E[f(X, y) | Y(\omega) = y] \quad , \quad (\text{A.1.28})$$

$$E[g(X)h(Y) | Y] = h(Y) E[g(X) | Y] \quad , \quad (\text{A.1.29})$$

$$E[f(Y) | Y] = f(Y) \quad . \quad (\text{A.1.30})$$

A.2 - PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

Um processo estocástico é qualquer processo que se desenvolve no tempo e é controlado por leis estatísticas. Do ponto de vista matemático, um processo estocástico é uma família de variáveis aleatórias $\{X_t, t \in T\}$ onde o conjunto de índices T é arbitrário [(142), pág. 46]. Nas aplicações físicas t será o tempo e T o conjunto dos números reais. Um exemplo típico de processo estocástico é o movimento browniano [(73); (16), §§2-4]. Neste caso X_t representa a posição, no instante t , da partícula que executa o movimento browniano (no caso unidimensional, evidentemente). A posição da partícula no instante t , X_t , não é determinada, mas está sujeita a uma distribuição de probabilidades, isto é, X_t é uma variável aleatória (desde que a distribuição de X_0 seja conhecida). Em outras palavras, um processo estocástico é uma função de duas variáveis $X(t, \omega)$. Para cada t fixo $X(t, \omega)$ é uma função definida no espaço amostral Ω , ou seja, é uma variável aleatória. Para cada ω fixo $X(t, \omega)$ torna-se uma função de t . A função $X(t, \omega)$ com ω fixo é chamada de realização particular do processo estocástico. Usam-se também as expressões "trajetória amostral" ou "função amostral" do processo.

Vamos supor daqui por diante que X_t representa a posição de uma partícula no instante t . Exceto quando houver risco de ambigüidade, passaremos a empregar a notação $X(t)$ em lugar de X_t . Seja $\rho(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ a densidade de probabilidade de que a partícula esteja nas posições x_1, \dots, x_n respectivamente nos instantes t_1, \dots, t_n , isto é,

$$P\{X(t_1, \omega) \leq x_1, \dots, X(t_n, \omega) \leq x_n\} = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} \rho(\lambda_1, t_1; \dots; \lambda_n, t_n) d\lambda_1 \dots d\lambda_n.$$

É claro que

$$\rho(x_1, t_1; \dots; x_{k-1}, t_{k-1}; x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) = \int dx_k \rho(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n), \quad (\text{A.2.1})$$

onde $k = 1, \dots, n$. Esta equação é uma generalização imediata de (A.1.18). Por analogia com a Eq. (A.1.21), a densidade de probabilidade condicional de que a partícula esteja em x_{n+1} no instante t_{n+1} , dados x_1, \dots, x_n nos instantes t_1, \dots, t_n é definida por (74)

$$p(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}) = \frac{\rho(x_1, t_1; \dots; x_{n+1}, t_{n+1})}{\rho(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)}. \quad (\text{A.2.2})$$

As funções p satisfazem a equação

$$\begin{aligned} & p(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n+1}, t_{n+1}) = \\ & = \int dx_n p(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) p(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}). \quad (\text{A.2.3}) \end{aligned}$$

Para comprovar este resultado basta substituir nesta última equação a definição (A.2.2) e observar que recai-se na Eq. (A.2.1).

Do ponto de vista das aplicações físicas a classe mais importante de processos estocásticos é a dos chamados processos de Markov [(142), cap. II, § 6]. O processo estocástico $X(t)$ é dito um processo de Markov se

$$p(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}) = p(x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}) \quad (\text{A.2.4})$$

sempre que $t_1 < \dots < t_n < t_{n+1}$. Isto significa que a probabilidade de passagem de x_n no instante t_n para qualquer posição futura não depende da história prévia do sistema, ou seja, a evolução futura do processo só depende do presente. O conhecimento do presente torna o passado e o futuro estocasticamente independentes, e pode-se dizer que o passado age sobre o futuro apenas a través do presente [(144), pág. 37]. Para um processo de Markov a Eq. (A.2.3) torna-se

$$p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n+1}, t_{n+1}) = \int dx_n p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) p(x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}), \quad (\text{A.2.5})$$

onde $t_{n-1} < t_n < t_{n+1}$. Esta é a equação de Chapman-Kolmogorov [(142), pág. 89; (144), § 15]. A função $p(y, S | x, t)$ é chamada de densidade de probabilidade de passagem ou densidade de probabilidade de transição. Ao multiplicarmos a Eq. (A.2.5) por $\rho(x_{n-1}, t_{n-1})$ e usarmos a definição (A.2.2) obtemos ($t_n < t_{n-1}$)

$$\rho(x_{n+1}, t_{n-1}) = \int dx_n \rho(x_n, t_n) p(x_n, t_n | x_{n+1}, t_{n+1}), \quad (\text{A.2.6})$$

cuja interpretação intuitiva é cristalina.

A definição de processo de Markov introduz uma direção preferencial para o tempo. Como nas aplicações físicas nós estamos interessados em descrever processos reversíveis, isto é, processos simétricos no tempo, vamos introduzir a descrição para trás de um processo de Markov por meio da densidade de probabilidade condicional para trás $p_*(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2 | x_1, t_1)$, ou seja, a densidade de probabilidade de que a partícula esteja em x_1 no instante t_1 dado que ela estará em x_2, \dots, x_n nos instan-

tes futuros t_1, \dots, t_n . Por definição (74)

$$p_*(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{\rho(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)}{\rho(x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)} . \quad (\text{A.2.7})$$

Queremos provar que um processo de Markov com o sentido do tempo invertido é ainda um processo de Markov [(142), pág. 83]. A partir das Eqs. (A.2.2) e (A.2.4) com $t_1 < t_2 < t_3$ obtemos sucessivamente

$$\begin{aligned} \rho(x_1, t_1; x_2, t_2) &= \rho(x_1, t_1) p(x_1, t_1 | x_2, t_2) , \\ \rho(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) &= \rho(x_1, t_1; x_2, t_2) p(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) = \\ &= \rho(x_1, t_1; x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_3, t_3) = \\ &= \rho(x_1, t_1; x_2, t_2) \frac{\rho(x_2, t_2; x_3, t_3)}{\rho(x_2, t_2)} . \end{aligned} \quad (\text{A.2.8})$$

Por indução resulta ($n > 3$)

$$\rho(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = \frac{\rho(x_1, t_1; x_2, t_2) \rho(x_2, t_2; x_3, t_3) \dots \rho(x_{n-1}, t_{n-1}; x_n, t_n)}{\rho(x_2, t_2) \rho(x_3, t_3) \dots \rho(x_{n-1}, t_{n-1})} , \quad (\text{A.2.9})$$

onde $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Introduzindo esta última equação no numerador e denominador da Eq. (A.2.7) chegamos a (74)

$$p_*(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{\rho(x_1, t_1; x_2, t_2)}{\rho(x_2, t_2)} = p_*(x_2, t_2 | x_1, t_1) \quad (\text{A.2.10})$$

com $t_1 < t_2$, que é a propriedade característica de um processo de Markov. Da definição (A.2.7) segue-se que as densidades de probabilidade de passagem para a frente e para trás estão relacionadas pela equação

$$p_*(x_2, t_2 | x_1, t_1) = p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \frac{\rho(x_1, t_1)}{\rho(x_2, t_2)} . \quad (\text{A.2.11})$$

Processo de Wiener. O processo de Wiener é um modelo matemático idealizado do movimento browniano físico no qual as hipóteses introduzidas por Einstein são supostas válidas mesmo para intervalos de tempo indefinidamente curtos (ver a discussão no § 5 do segundo artigo de Einstein em (73) e, também, em (142), cap. VIII, § 3). Denotemos por $W(t)$ o processo de Wiener, que pretende representar a posição no instante t de uma partícula que executa um movimento browniano unidimensional. Neste processo as variáveis aleatórias não são $W(t)$, mas $W(t)-W(s)$, que representa o deslocamento sofrido pela partícula no intervalo de tempo de duração $|t-s|$. Supondo que estes deslocamentos são independentes, Einstein (73) mostrou que o deslocamento quadrático médio da partícula num intervalo de tempo não excessivamente curto é proporcional à duração do intervalo e que, ademais, tais deslocamentos são variáveis aleatórias gaussianas. Portanto o processo de Wiener $W(t)$ é definido pelas seguintes propriedades [(142), pág. 97; (143), págs. 21 e 343]:

(a) Para quaisquer $t, s \in \mathbb{R}$ a diferença $W(t)-W(s)$ é uma variável aleatória gaussiana com média zero e variância proporcional a $|t-s|$, isto é,

$$E[W(t)-W(s)] = 0 , \quad (\text{A.2.12})$$

$$E[(W(t)-W(s))^2] = \sigma^2 |t-s| , \quad (\text{A.2.13})$$

com $\sigma > 0$. A constante σ é denominada parâmetro de variância do processo de Wiener.

(b) Para quaisquer n intervalos de tempo disjuntos $(t_1, t_2), (t_3, t_4), \dots, (t_{2n-1}, t_{2n})$ com $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < \dots < t_{2n-1} < t_{2n}$ as diferenças $W(t_{2n}) - W(t_{2n-1}), \dots, W(t_4) - W(t_3), W(t_2) - W(t_1)$ são variáveis aleatórias gaussianas independentes.

Usando as propriedades (a) e (b) e a Eq. (A.1.13) concluimos que

$$E\left[(W(t) - W(s))(W(t') - W(s'))\right] = E\left[W(t) - W(s)\right] E\left[W(t') - W(s')\right] = 0, \quad (\text{A.2.14})$$

desde que $t \geq s \geq t' \geq s'$. A partir deste fato e de (A.2.13) é fácil provar que, se $s, t > 0$,

$$E\left[(W(t) - W(0))(W(s) - W(0))\right] = \sigma^2 \min(s, t). \quad (\text{A.2.15})$$

Com efeito, seja $t > s > 0$. Então

$$\begin{aligned} E\left[(W(t) - W(0))(W(s) - W(0))\right] &= E\left[(W(t) - W(s) + W(s) - W(0)) \times \right. \\ &\left. \times (W(s) - W(0))\right] = E\left[(W(t) - W(s))(W(s) - W(0))\right] + E\left[(W(s) - W(0))^2\right] = \sigma^2 s. \end{aligned}$$

Devido à simetria do lado esquerdo da Eq. (A.2.15) em s e t concluimos ser verdadeiro o resultado que desejávamos demonstrar.

A propriedade (b) implica que o deslocamento $W(t+s) - W(s)$ com $t, s > 0$ é independente do passado ou, de outra forma, se conhecermos $W(s) = x_0$ o conhecimento dos valores de $W(\tau)$ com $\tau < s$ não exerce nenhuma influência sobre a distribuição de probabilidade de $W(t+s) - W(s)$. Portanto, para t_0 fixo, as diferenças

$\{W(t)-W(t_0), t \geq t_0\}$ constituem um processo de Markov.

O processo de Wiener tridimensional $\vec{W}(t)$ é definido de forma análoga à adotada no caso unidimensional. Dados $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$, as diferenças $\vec{W}(t_4) - \vec{W}(t_3)$ e $\vec{W}(t_2) - \vec{W}(t_1)$ são variáveis aleatórias gaussianas independentes com média zero e matriz de covariância proporcional à matriz identidade, ou seja,

$$E[\vec{W}(t) - \vec{W}(s)] = 0 \quad , \quad (\text{A.2.16})$$

$$E[(W_i(t) - W_i(s))(W_j(t) - W_j(s))] = \sigma^2 \delta_{ij} |t-s| \quad , \quad (\text{A.2.17})$$

com $\sigma > 0$. Observe que a Eq. (A.2.17) mostra que as componentes da diferença $\vec{W}(t) - \vec{W}(s)$ são independentes entre si. Em três dimensões a Eq. (A.2.15) assume a forma ($s, t > 0$)

$$E[(W_i(t) - W_i(0))(W_j(s) - W_j(0))] = \sigma^2 \delta_{ij} \min(s, t) \quad . \quad (\text{A.2.18})$$

A.3 - EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ESTOCÁSTICAS

Considere um processo de Markov do seguinte tipo:

$X(t_2) - X(t_1)$, o incremento da posição entre os instantes t_1 e t_2 , é uma soma de pequenos incrementos $dX(t)$ cada um dos quais é gaussiano com média μdt e variância $\sigma^2 dt$. Estas duas quantidades são da ordem de dt , e μ e σ são funções de t e $X(t)$. Isto sugere que escrevamos [(142), cap. IV, § 3]

$$dX(t) = \mu(X(t), t) dt + \sigma(X(t), t) dB(t) \quad , \quad (\text{A.3.1})$$

onde $B(t)$ é o processo de Wiener com parâmetro de variância 1.

Na Eq. (A.3.1) temos, por definição, $dX(t) = X(t+dt) - X(t)$ e $dB(t) = B(t+dt) - B(t)$, de modo que

$$\begin{aligned} E[dB(t)] &= 0, \\ E[dB(t)^2] &= dt. \end{aligned} \tag{A.3.2}$$

Naturalmente $dB(t)$ é independente de $X(s)$ para todo $t > s$. Devido à segunda das Eqs. (A.3.2), a contribuição de $dB(t)$ à Eq. (A.3.1) é da ordem de $(dt)^{1/2}$, de modo que $B(t)$ não é diferenciável e, conseqüentemente, não é possível escrever (A.3.1) em termos de derivadas porque $\frac{dB}{dt}$ não existe [(142), cap. VIII, § 2]. Na verdade a equação diferencial estocástica (A.3.1) é apenas uma forma simbólica de representar a equação matematicamente bem definida

$$X(b) - X(a) = \int_a^b \mu(X(t), t) dt + \int_a^b \sigma(X(t), t) dB(t), \tag{A.3.3}$$

onde a segunda integral é chamada de integral estocástica de Itô [(142), cap. IX, § 2; (145), cap. VIII, § 1]. O conhecimento das propriedades desta integral não será necessário para a compreensão do que se segue.

Desde que $\mu(x, t)$ e $\sigma(x, t)$ sejam funções suficientemente regulares, é possível provar que a Eq. (A.3.1) admite uma única solução, solução esta que é um processo de Markov com trajetórias amostrais contínuas [(142), cap. VI, § 3]. Uma vez satisfeitas tais condições de regularidade, prova-se também que

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{X(t+h) - X(t)}{h} \mid X(t, \omega) = x \right] \equiv \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} \int (y-x) p(x, t \mid y, t+h) dy = \mu(x, t)$$

(A.3.4)

e

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{(X(t+h) - X(t))^2}{h} \mid X(t, \omega) = x \right] \equiv \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} \int (y-x)^2 p(x, t \mid y, t+h) dy = \sigma^2(x, t).$$

(A.3.5)

Uma demonstração heurística destes resultados é a seguinte:

$$\begin{aligned} \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} E \left[X(t+dt) - X(t) \mid X(t, \omega) = x \right] &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} E \left[\mu(X(t), t) dt + \right. \\ &\left. + \sigma(X(t), t) dB(t) \mid X(t, \omega) = x \right] = \mu(x, t) + \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} \sigma(x, t) E \left[dB(t) \right] = \mu(x, t) ; \\ \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} E \left[(X(t+dt) - X(t))^2 \mid X(t, \omega) = x \right] &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} E \left[\mu^2(X(t), t) dt^2 + \right. \\ &\left. + 2\mu(X(t), t) \sigma(X(t), t) dB(t) dt + \sigma^2(X(t), t) dB(t)^2 \mid X(t, \omega) = x \right] = \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} \left\{ \mu^2(x, t) dt^2 + 2\mu(x, t) \sigma(x, t) dt E \left[dB(t) \right] + \sigma^2(x, t) E \left[dB(t)^2 \right] \right\} = \sigma^2(x, t). \end{aligned}$$

Nestas manipulações levamos em conta que $dB(t)$ é independente de $X(t)$ e usamos diversas propriedades das esperanças condicionais, sobretudo as Eqs. (A.1.27) a (A.1.30), além das Eqs.(A.3.2), é claro.

Equação de Fokker-Planck [(144), § 16] . Seja $\rho(x, t)$ a densidade de probabilidade de $X(t)$ e seja $\phi(x)$ uma função com derivadas contínuas e de suporte compacto, isto é, ϕ anula-se fora de um intervalo finito $[a, b]$. Defina

$$M(t) = E \left[\phi(X(t)) \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \rho(x, t) dx .$$

Então, por um lado,

$$\frac{dM}{dt} = \int \phi(x) \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} dx . \quad (\text{A.3.6})$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} d\phi(X(t)) &= \phi'(X(t)) dX(t) + \frac{1}{2} \phi''(X(t)) dX(t)^2 + \dots = \\ &= \phi'(X(t)) \left[\mu(X(t), t) dt + \sigma(X(t), t) dB(t) \right] + \frac{1}{2} \phi''(X(t)) \sigma^2(X(t), t) dB(t)^2 + o(dt^{3/2}) \end{aligned}$$

porque $dB(t) = o(dt^{1/2})$. Em conseqüência,

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} E \left[d\phi(X(t)) \right] = \lim_{dt \rightarrow 0^+} \frac{1}{dt} \left\{ dt \int \phi'(x) \mu(x,t) \rho(x,t) dx + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} dt \int \phi''(x) \sigma^2(x,t) \rho(x,t) dx + o(dt^{3/2}) \right\} = \\ &= \int \left[\mu(x,t) \phi'(x) + \frac{1}{2} \sigma^2(x,t) \phi''(x) \right] \rho(x,t) dx . \end{aligned}$$

Integrando por partes e lembrando que ϕ tem suporte compacto, chegamos a

$$\frac{dM}{dt} = \int \phi(x) \left\{ - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu(x,t) \rho(x,t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sigma^2(x,t) \rho(x,t) \right] \right\} . \quad (\text{A.3.7})$$

Comparando (A.3.7) com (A.3.6) e tomando em consideração que ϕ é arbitrária somos conduzidos à equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu(x,t) \rho(x,t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sigma^2(x,t) \rho(x,t) \right] , \quad (\text{A.3.8})$$

que governa a difusão da probabilidade. Devido à sua própria de

finição, vemos imediatamente que $p(y, s|x, t)$ com $s < t$ é uma densidade de probabilidade nas variáveis x, t e, conseqüentemente, satisfaz a equação de Kolmogorov para a frente

$$\frac{\partial p(y, s|x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu(x, t) p(y, s|x, t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sigma^2(x, t) p(y, s|x, t) \right], \quad (\text{A.3.9})$$

onde $s < t$. Usando a equação de Chapman-Kolmogorov (A.2.5) é possível encontrar uma equação diferencial para $p(y, s|x, t)$ relativa às variáveis y, s . Com efeito, seja $h > 0$. Então, se $s < s+h < t$,

$$\begin{aligned} p(y, s|x, t) &= \int dz p(y, s|z, s+h) p(z, s+h|x, t) = \int dz p(y, s|z, s+h) \left[p(y, s+h|x, t) + \right. \\ &+ (z-y) \frac{\partial p(y, s+h|x, t)}{\partial y} + \frac{1}{2} (z-y)^2 \frac{\partial^2 p(y, s+h|x, t)}{\partial y^2} + \dots \left. \right] = p(y, s+h|x, t) + \\ &+ \frac{\partial p(y, s+h|x, t)}{\partial y} \int (z-y) p(y, s|z, s+h) dz + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(y, s+h|x, t)}{\partial y^2} \int (z-y)^2 p(y, s|z, s+h) dz + \dots \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} p(y, s+h|x, t) - p(y, s|x, t) &= - \frac{\partial p}{\partial y} E \left[X(s+h) - X(s) | X(s, \omega) = y \right] - \\ &- \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} E \left[(X(s+h) - X(s))^2 | X(s, \omega) = y \right] + \dots \quad (\text{A.3.10}) \end{aligned}$$

Dividindo esta última equação por h , tomando o limite $h \rightarrow 0$ e levando em conta as Eqs. (A.3.4) e (A.3.5) e que os termos não escritos se anulam no limite, encontramos a equação de Kolmogorov para trás:

$$\frac{\partial p(y, s|x, t)}{\partial s} = -\mu(y, s) \frac{\partial p(y, s|x, t)}{\partial y} - \frac{1}{2} \sigma^2(y, s) \frac{\partial^2 p(y, s|x, t)}{\partial y^2} \quad (\text{A.3.11})$$

Seguindo Nelson [(15); (16), § 13] vamos introduzir a descrição para trás do processo de Markov $X(t)$ por intermédio da equação diferencial estocástica

$$d_*X(t) = \mu_*(X(t), t)dt + \sigma_*(X(t), t)dB_*(t) . \quad (\text{A.3.12})$$

Nesta equação $d_*X(t) = X(t) - X(t-dt)$, e $dB_*(t)$ tem as mesmas propriedades que $dB(t)$, exceto que $dB_*(t)$ é independente de $X(s)$ para todo $t \leq s$. Procedendo como antes prova-se que

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{X(t) - X(t-h)}{h} \mid X(t, \omega) = x \right] \equiv \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} \int (x-y) p_*(x, t \mid y, t-h) dy = \mu_*(x, t) \quad (\text{A.3.13})$$

e

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{(X(t) - X(t-h))^2}{h} \mid X(t, \omega) = x \right] \equiv \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h} \int (x-y)^2 p_*(x, t \mid y, t-h) dy = \sigma_*^2(x, t). \quad (\text{A.3.14})$$

Repare que, agora,

$$\begin{aligned} d_*\phi(X(t)) &= \phi(X(t)) - \phi(X(t-dt)) = - \left[\phi(X(t-dt)) - \phi(X(t)) \right] = \\ &= - \left[\phi'(X(t)) (X(t-dt) - X(t)) + \frac{1}{2} \phi''(X(t)) (X(t-dt) - X(t))^2 + \dots \right] = \\ &= \phi'(X(t)) d_*X(t) - \frac{1}{2} \phi''(X(t)) (d_*X(t))^2 + \dots , \end{aligned}$$

de modo que, recorrendo a argumentos já utilizados, deduzimos a equação de Fokker-Planck para trás:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_*(x, t) \rho(x, t) \right] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sigma_*^2(x, t) \rho(x, t) \right] . \quad (\text{A.3.15})$$

Derivadas médias [(15); (16), § 11]. Seja $f(x,t)$ uma função suficientemente diferenciável. A derivada média para a frente do processo estocástico $f(X(t),t)$, define-se por

$$Df(X(t),t) = \lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{f(X(t+h),t+h) - f(X(t),t)}{h} \mid X(t) \right], \quad (\text{A.3.16})$$

de forma que $Df(X(t),t)$ é um processo estocástico. Supondo que $f(x,t)$ admite uma expansão em série de Taylor escrevemos

$$df(X(t),t) = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{x=X(t)} dt + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=X(t)} dX(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x=X(t)} dX(t)^2 + \dots$$

Fazendo uso da equação diferencial estocástica (A.3.1), e repetindo argumentos já fartamente empregados, obtemos

$$Df(X(t),t) = \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \Big|_{x=X(t)} + \mu(X(t),t) \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=X(t)} + \frac{1}{2} \sigma^2(X(t),t) \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \Big|_{x=X(t)}$$

que, para simplificar a notação, escrevemos como

$$Df(X(t),t) = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mu(X(t),t) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(X(t),t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] f(X(t),t). \quad (\text{A.3.17})$$

A derivada média para trás é definida de modo análogo:

$$D_* f(X(t),t) = \lim_{h \rightarrow 0^+} E \left[\frac{f(X(t),t) - f(X(t-h),t-h)}{h} \mid X(t) \right]. \quad (\text{A.3.18})$$

Para encontramos uma forma explícita para a derivada média para trás consideremos ($t' = t-dt$)

$$\begin{aligned}
d_* f(X(t), t) &= f(X(t), t) - f(X(t-dt), t-dt) = - \left[f(X(t'), t') - f(X(t), t) \right] = \\
&= - \left[\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \Big|_{x=X(t)} (t'-t) + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=X(t)} (X(t')-X(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{x=X(t)} (X(t')-X(t))^2 + \dots \right] = \\
&= \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{x=X(t)} dt + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=X(t)} dX_*(t) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x=X(t)} (d_* X(t))^2 + \dots .
\end{aligned}$$

Combinando esta última expressão com a Eq. (A.3.12) e repetindo o raciocínio anterior resulta

$$D_* f(X(t), t) = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mu_*(X(t), t) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} \sigma_*^2(X(t), t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] f(X(t), t) . \quad (\text{A.3.19})$$

A aplicação das Eqs. (A.3.17) e (A.3.19) a $f(X(t), t) = X(t)$ resulta em

$$DX(t) = \mu(X(t), t) \quad , \quad D_* X(t) = \mu_*(X(t), t) . \quad (\text{A.3.20})$$

A razão pela qual foram introduzidas estas derivadas médias é que, na maioria das situações, o processo estocástico $X(t)$ não é diferenciável. Se $X(t)$ for diferenciável então $DX(t) = D_* X(t) = dX(t)/dt$. Como este usualmente não é o caso, em geral $DX(t)$ é diferente de $D_* X(t)$.

Para encerrar este estudo da cinemática dos processos de Markov, vamos estabelecer a relação entre μ_* , σ_* e μ, σ (74). Conforme a Eq. (A.3.13),

$$\begin{aligned}
\mu_*(x_2, t_2) &= \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dx_1 (x_2 - x_1) p_*(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \\
&= \frac{1}{\rho(x_2, t_2)} \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dx_1 (x_2 - x_1) p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \rho(x_1, t_1) \equiv \\
&\equiv \frac{1}{\rho(x_2, t_2)} \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dx_1 (x_2 - x_1) \tilde{p}(x_2 - x_1, x_1, t_1, t_2) \rho(x_1, t_1) ,
\end{aligned}$$

onde usamos a Eq. (A.2.11) e definimos $\tilde{p}(x_2 - x_1, x_1, t_1, t_2) \equiv p(x_1, t_1 | x_2, t_2)$. Introduzindo a nova variável $Z = x_2 - x_1$ a integral torna-se

$$\mu_*(x_2, t_2) = \frac{1}{\rho(x_2, t_2)} \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dZ Z \tilde{p}(Z, x_2 - Z, t_1, t_2) \rho(x_2 - Z, t_1) .$$

Expandindo o integrando (considerado como função de $x_2 - Z$) em potências de Z obtemos

$$\begin{aligned}
\mu_*(x_2, t_2) &= \frac{1}{\rho(x_2, t_2)} \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dZ Z \left\{ \tilde{p}(Z, x_2, t_1, t_2) \rho(x_2, t_1) + \right. \\
&+ (-Z) \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\rho(x_2, t_1) p(Z, x_2, t_1, t_2) \right] + \dots \left. \right\} = \\
&= \frac{1}{\rho(x_2, t_2)} \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \left\{ \rho(x_2, t_1) \int dZ Z p(x_2, t_1 | Z + x_2, t_2) - \right. \\
&- \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\rho(x_2, t_1) \int dZ Z^2 p(x_2, t_1 | Z + x_2, t_2) \right] + \dots \left. \right\} , \quad (\text{A.3.21})
\end{aligned}$$

onde utilizamos $\tilde{p}(Z, x_2, t_1, t_2) = p(x_2, t_1 | Z + x_2, t_2)$. Observe que, por exemplo,

$$\lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dZ Z p(x_2, t_1 | Z + x_2, t_2) = \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \frac{1}{t_2 - t_1} \int dx (x - x_2) p(x_2, t_1 | x, t_2) =$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{t_1 \rightarrow t_2} E \left[\frac{X(t_2) - X(t_1)}{t_2 - t_1} \middle| X(t_1, \omega) = x_2 \right] = \\
&= \lim_{t_1 \rightarrow t_2} E \left[\frac{\mu(X(t_1), t_1) dt + \sigma(X(t_1), t_1) dB(t_1)}{dt} \middle| X(t_1, \omega) = x_2 \right] = \\
&= \lim_{t_1 \rightarrow t_2} \mu(x_2, t_1) = \mu(x_2, t_2) \quad ,
\end{aligned}$$

onde fizemos $dt = t_2 - t_1$ e, como é evidente, supusemos que $\mu(x, t)$ é contínua em t para cada x . Dando um tratamento análogo ao termo seguinte, e notando que os termos omitidos na Eq. (A.3.21) são da ordem de $(dt)^{3/2}$ e, portanto, dão contribuição nula no limite, encontramos finalmente

$$\mu_*(x, t) = \mu(x, t) - \frac{1}{\rho(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma^2(x, t) \rho(x, t) \right]. \quad (\text{A.3.22})$$

Procedimento idêntico permite verificar que

$$\sigma_*^2(x, t) = \sigma^2(x, t) \quad (\text{A.3.23})$$

A.4 - MOVIMENTO BROWNIANO

Os processos estocásticos têm encontrado utilidade no estudo de diversos sistemas dissipativos, inclusive na análise de colisões fortemente inelásticas de íons pesados (139, 146). Historicamente, porém, o processo físico denominado movimento browniano deu o primeiro impulso para o desenvolvimento da teoria matemática dos processos estocásticos. Este problema físico serve de paradigma para a aplicação das equações diferenciais

estocásticas. Por isso iremos discuti-lo aqui, embora de uma forma excessivamente sucinta e com fito precipuamente ilustrativo.

A teoria de Ornstein-Uhlenbeck [(147); (16), § 9]. As equações básicas da teoria de Ornstein-Uhlenbeck para o caso unidimensional são

$$\begin{aligned} dX(t) &= V(t)dt \quad , \\ dV(t) &= -\beta V(t)dt + dW(t) \quad , \end{aligned} \tag{A.4.1}$$

onde $\beta > 0$ é uma constante e $W(t)$ é um processo de Wiener com parâmetro de variância σ_0 a ser determinado mais adiante. Nestas equações $dW(t)$ é independente de $X(s)$ e $V(s)$ para todos $t \geq s$. Se admitirmos que $V(t)$ é diferenciável podemos escrever

$$m \frac{dV(t)}{dt} = -m \beta V(t) + m \frac{dW(t)}{dt} \equiv -m \beta V(t) + F(t) \quad , \tag{A.4.2}$$

que é a equação de Langevin (148). De acordo com esta equação a força sentida pela partícula pode ser dividida em duas partes: uma parte sistemática $-m\beta V(t)$ representando o atrito viscoso experimentado pela partícula, e uma parte flutuante $F(t)$. A equação de Langevin é apenas formal, todavia, porque $W(t)$ não é diferenciável. Formalmente podemos escrever

$$E[F(t)] = m \frac{d}{dt} E[W(t) - W(0)] = 0 \quad ,$$

$$E[F(t)F(s)] = m^2 \frac{d}{dt} \frac{d}{ds} E[(W(t) - W(0))(W(s) - W(0))] =$$

$$\begin{aligned}
&= m^2 \sigma_0^2 \frac{d}{dt} \frac{d}{ds} \min(s, t) = m^2 \sigma_0^2 \frac{d}{dt} \frac{d}{ds} \left[t \theta(s - t) + s \theta(t - s) \right] = \\
&= m^2 \sigma_0^2 \frac{d}{dt} \left[t \delta(s - t) + \theta(t - s) - s \delta(t - s) \right] = m^2 \sigma_0^2 \frac{d}{dt} \theta(t - s) = (m \sigma_0)^2 \delta(t - s),
\end{aligned}
\tag{A.4.3}$$

que correspondem às hipóteses usuais sobre $F(t)$ [(149), pág.21]. Para a obtenção destes resultados fizemos uso da função descontínua

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & ; x < 0 \\ 1/2 & ; x = 0 \\ 1 & ; x > 0 \end{cases}$$

que satisfaz $\frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x)$ desde que as quantidades envolvidas sejam interpretadas como distribuições. A equação de Langevin foi introduzida originalmente de forma fenomenológica, mas sua dedução a partir de modelos microscópicos é possível, como tem sido estabelecido por vários autores. Esta questão está fora dos limites deste trabalho, por isso remetemos o leitor interessado à literatura pertinente (33, 34).

A solução da segunda das Eqs. (A.4.1) é

$$V(t) = e^{-\beta t} V(0) + e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta s} dW(s), \tag{A.4.4}$$

onde $V(0)$ é a velocidade inicial da partícula que executa o movimento browniano. Portanto $V(t)$ é um processo estocástico gaussiano com média $e^{-\beta t} E[V(0)]$. A covariância de $V(t)$ pode ser calculada formalmente da seguinte maneira ($t \geq s$):

$$\begin{aligned}
& E \left[(V(t) - e^{-\beta t} V(0)) (V(s) - e^{-\beta s} V(0)) \right] = \\
& = E \left[e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta u} dW(u) e^{-\beta s} \int_0^s e^{\beta v} dW(v) \right] = \\
& = e^{-\beta(t+s)} \int_0^t e^{\beta u} du \int_0^s e^{\beta v} dv E \left[\frac{dW(u)}{du} \frac{dW(v)}{dv} \right] = \\
& = e^{-\beta(t+s)} \sigma_0^2 \int_0^t e^{\beta u} du \int_0^s e^{\beta v} \delta(u-v) dv = \sigma^2 e^{-\beta(t+s)} \frac{e^{2\beta s} - 1}{2\beta} ,
\end{aligned} \tag{A.4.5}$$

onde usamos a Eq. (A.4.3). Fazendo $t = s$ e tomando o limite $t \rightarrow \infty$ obtém-se

$$E[V(\infty)^2] = \frac{\sigma_0^2}{2\beta} . \tag{A.4.6}$$

Pelo teorema da equipartição da energia, na situação de equilíbrio térmico devemos ter o valor médio da energia cinética igual a $KT/2$, isto é, $\frac{1}{2} m E[V(\infty)^2] = \frac{1}{2} KT$. Por conseguinte o parâmetro de variância de $W(t)$ é dado por

$$\sigma_0^2 = \frac{2 \beta KT}{m} . \tag{A.4.7}$$

Este é o chamado teorema da flutuação-dissipação que, fazendo uso da Eq. (A.4.3), pode ser escrito na forma

$$\beta = \frac{1}{2mKT} \int_{-\infty}^{\infty} E[F(t)F(0)] dt , \tag{A.4.8}$$

e que relaciona o coeficiente de atrito viscoso à autocorrelação da força flutuante.

A partir da equação

$$X(t) - X(0) = \int_0^t V(s) ds \quad (\text{A.4.9})$$

podemos encontrar a variância condicional de $X(t)$. Citamos apenas o resultado [(149), pág. 26] :

$$E\left[(X(t) - X(0))^2 \mid V(0)\right] = \frac{V(0)^2}{\beta^2} (1 - e^{-\beta t})^2 + \frac{KT}{m\beta^2} (2\beta t - 3 + 4e^{-\beta t} - e^{-2\beta t}). \quad (\text{A.4.10})$$

Se tomarmos a média desta equação sobre todos os valores de $V(0)$ e nos lembrarmos de que, na situação de equilíbrio térmico, o valor médio de $V(0)^2$ é igual a KT/m , chegamos a

$$E\left[(X(t) - X(0))^2\right] = \frac{2KT}{m\beta^2} (\beta t - 1 + e^{-\beta t}) \quad (\text{A.4.11})$$

No limite $t \rightarrow 0$ esta equação fornece

$$E\left[(X(t) - X(0))^2\right] = \frac{KT}{m} t^2 = E\left[V(0)^2\right] t^2, \quad (\text{A.4.12})$$

o que indica que a partícula descreve um movimento retilíneo uniforme com velocidade igual àquela do equilíbrio térmico, como seria de se esperar intuitivamente. Observe que na teoria de Ornstein-Uhlenbeck o processo $X(t)$ é diferenciável, isto é, a velocidade $V(t)$ existe, mas a aceleração não existe.

Até agora consideramos somente o movimento browniano livre, isto é, na ausência de forças externas. Em três dimensões, e na presença de uma força externa $\vec{F}(\vec{x}, t) = m\vec{k}(\vec{x}, t)$, as equações básicas da teoria de Ornstein-Uhlenbeck passam a ser

$$\begin{aligned} d\vec{X}(t) &= \vec{V}(t) dt \quad , \\ d\vec{V}(t) &= \vec{K}(\vec{X}(t), t) dt - \beta \vec{V}(t) dt + d\vec{W}(t) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.4.13})$$

Note que a segunda das Eq's. (A.4.13) acopla os processos $\vec{X}(t)$ e $\vec{V}(t)$, o que não ocorria no caso do movimento browniano livre.

A aproximação de Einstein-Smoluchowski. A aproximação de Einstein para o movimento browniano livre consiste em escrever a equação diferencial estocástica (unidimensional)

$$dX(t) = dW(t) \quad , \quad (\text{A.4.14})$$

onde o processo de Wiener $W(t)$ tem parâmetro de variância $\sigma = \beta^{-1} \sigma_0$, com σ_0 dado pela Eq. (A.4.7). Portanto a variância de $X(t)$ é dada por

$$E[(X(t)-X(0))^2] = E[(W(t)-W(0))^2] = \sigma^2 t = \frac{2KT}{m\beta} t \equiv 2\nu t \quad , \quad (\text{A.4.15})$$

onde ν é o coeficiente de difusão das partículas suspensas [(73), pág. 12]. Se $t \gg \beta^{-1}$ vemos que a Eq. (A.4.11) da teoria de Ornstein-Uhlenbeck reduz-se à Eq. (A.4.15) da teoria de Einstein. Um caso típico (150) é $\beta^{-1} = 10^{-8}$ s. Se considerarmos $t = 1$ s, o que representa um intervalo de tempo bastante curto do ponto de vista experimental, o erro relativo cometido ao empregar-se a aproximação de Einstein é da ordem de 10^{-8} . Vê-se, portanto, que a aproximação de Einstein é excelente para intervalos de tempo muito maiores do que o tempo de relaxação β^{-1} . Para tempos curtos em relação ao tempo de relaxação a discrepância entre as Eq's. (A.4.11) e (A.4.15) é considerável, e a aproximação de

Einstein deixa de ser válida.

Imaginemos, agora, que uma força externa \vec{F} esteja atuando sobre a partícula que executa o movimento browniano. Admitamos, inicialmente, que \vec{F} seja constante. Neste caso, quando a força de atrito viscoso $-m\beta\vec{v}$ e a força externa se equilibrarem, a partícula adquirirá a velocidade limite $\vec{v} = \vec{F}/m\beta$. Em outras palavras, para tempos longos em comparação com o tempo de relaxação β^{-1} a velocidade deve ser aproximadamente $\vec{F}/m\beta$. Se incluímos as flutuações aleatórias devidas aos impactos moleculares somos levados a escrever

$$d\vec{X}(t) = \frac{\vec{F}}{m\beta} dt + d\vec{W}(t) \quad .$$

Se \vec{F} depende de $\vec{X}(t)$ e t , mas varia tão lentamente a ponto de ser aproximadamente constante ao longo das trajetórias para intervalos de tempo da ordem de β^{-1} , podemos escrever

$$d\vec{X}(t) = \frac{\vec{F}(\vec{X}(t), t)}{m\beta} dt + d\vec{W}(t) \quad . \quad (\text{A.4.16})$$

Esta é a equação fundamental da teoria de Einstein-Smoluchowski. Vemos, então, que esta aproximação deve ser boa se β for muito grande. De fato, pode-se provar rigorosamente que a teoria de Einstein-Smoluchowski é o caso limite da teoria de Ornstein-Uhlenbeck quando $\beta \rightarrow \infty$ [(16), § 10, teorema 10.1] .

REFERÊNCIAS

- (1) - H. Bateman, On Dissipative Systems and Related Variational Principles, Phys. Rev. 38, (1931), 815.
- (2) - P. Caldirola, Forze Non Conservative Nella Meccanica Quantistica, Nuovo Cimento 18, (1941), 393.
- (3) - E.H. Kerner, Note on the Forced and Damped Oscillator in Quantum Mechanics, Can. J. Phys. 36, (1958), 371.
- (4) - K.W.H. Stevens, The Wave Mechanical Damped Harmonic Oscillator, Proc. Phys. Soc. Lond. 72, (1958), 1027.
- (5) - E. Kanai, On the Quantization of the Dissipative Systems, Prog. Theor. Phys. 3, (1948), 440.
- (6) - W.E. Brittin, A Note on the Quantization of Dissipative Systems, Phys. Rev. 77, (1950), 396.
- (7) - N.A. Lemos, The Heisenberg Picture is not Privileged for the Canonical Quantization of Dissipative Systems, Phys. Rev. D24, (1981), 2338.
- (8) - J. Messer, Quantum Langevin Systems, Lett. Math. Phys. 2, (1978), 281.
- (9) - P. Havas, The Range of Application of the Lagrange Formalism - I, Nuovo Cimento Suppl. 5, (1957), 363.
- (10) - N.A. Lemos, Physical Consequences of the Choice of the Lagrangian, Phys. Rev. D24, (1981), 1036.

- (11) - N.A. Lemos, Note on the Lagrangian Description of Dissipative Systems, Am. J. Phys. (dezembro de 1981).
- (12) - P. Havas, Generalized Lagrangian Formalism and Quantization Rules, Bull. Am. Phys. Soc. 1, (1956), 337.
- (13) - I.K. Edwards, Quantization of Inequivalent Classical Hamiltonians, Am. J. Phys. 47, (1979), 153.
- (14) - M.D. Kostin, On the Schrödinger - Langevin Equation, J. Chem. Phys. 57, (1972), 3589.
- (15) - E. Nelson, Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics, Phys. Rev. 150, (1966), 1079. Este artigo faz referência a importantes trabalhos anteriores, particularmente ao de Imre Fényes.
- (16) - E. Nelson, Dynamical Theories of Brownian Motion, Princeton University Press (1967).
- (17) - K. Yasue, Quantization of Dissipative Dynamical Systems, Phys. Lett. 64B, (1976), 239.
- (18) - B.K. Skagerstam, Stochastic Mechanics and Dissipative Forces, J. Math. Phys. 18, (1977), 308.
- (19) - N.A. Lemos, A Comment on the Stochastic Quantization of Friction, Phys. Lett. 78A, (1980), 237.
- (20) - M. Davidson, A Generalization of the Fényes-Nelson Stochastic Model of Quantum Mechanics, Lett. Math. Phys. 3, (1979), 271.

- (21) - M. Davidson, The Origin of the Algebra of Quantum Operators in the Stochastic Formulation of Quantum Mechanics, Lett. Math. Phys. 3, (1979), 367.
- (22) - N.A. Lemos, Dissipative Forces and the Algebra of Operators in Stochastic Quantum Mechanics, Phys. Lett. 78A, (1980), 239.
- (23) - R.W. Hasse, On the Quantum Mechanical Treatment of Dissipative Systems, J. Math. Phys. 16, (1975), 2005.
- (24) - K. Albrecht, A New Class of Schrödinger Operators for Quantized Friction, Phys. Lett. 56B, (1975), 127.
- (25) - K. - K. Kan e J.J. Griffin, Quantized Friction and the Correspondence Principle: Single Particle with Friction, Phys. Lett. 50B, (1974), 241.
- (26) - L. Buch e H.H. Denman, Solution of the Schrödinger Equation for Some Electric Field Problems, Am. J. Phys. 42, (1974), 304.
- (27) - I.R. Senitzky, Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator, Phys. Rev. 119, (1960), 670.
- (28) - V.V. Dodonov, I.A. Malkin e V.I. Man'ko, Invariants and Nonequilibrium Density Matrices, J. Stat. Phys. 16, (1977), 357.
- (29) - P. Caldirola, Statistical Mechanics of Nonconservative Systems, Nuovo Cimento B46, (1966), 172.
- (30) - J.H. Weiner e R.E. Forman, Rate Theory for Solids. V.

Quantum Brownian-Motion Model, Phys. Rev. B10, (1974) ,
325.

- (31) - K. Yasue, Quantum Mechanics of Nonconservative Systems ,
Ann. Phys. 114, (1978), 479.
- (32) - A.O. Caldeira e A.J. Legget, Influence of Dissipation on
Quantum Tunnelling in Macroscopic Systems, Phys. Rev.
Lett. 46, (1981), 211.
- (33) - G.W. Ford, M. Kac e P. Mazur, Statistical Mechanics of
Assemblies of Coupled Oscillators, J. Math. Phys. 6,
(1965), 504; J.T. Lewis e L.C. Thomas, How to Make a Heat
Bath in Functional Integration and its Applications, A.M.
Arthurs (ed.), Clarendon Press (1975).
- (34) - H. Haken, Synergetics - An Introduction, Springer-Verlag
(1977), sec. 6.2.
- (35) - R.W. Hasse, Approaches to Nuclear Friction, Rep. Progr.
Phys. 41, (1978), 1027.
- (36) - H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley, 2^a
edição (1980).
- (37) - F. Gantmacher, Lectures in Analytical Mechanics, Mir
Publishers (1970).
- (38) - H.H. Denman, On Linear Friction in Lagrange's Equation,
Am. J. Phys. 34, (1966), 1147.
- (39) - I.R. Svin'in, Quantum-Mechanical Description of Friction,
Theor. Math. Phys. 22, (1975), 67.

- (40) - A. Tartaglia, General Lagrangians for the Motion of a Point Particle in a Viscous Medium and the Problem of Quantization, *Nuovo Cimento* 57B, (1980), 131. As langrangianas construídas neste trabalho são muito menos gerais do que seu autor pretende.
- (41) - D.M. Greenberger, A Critique of the Major Approaches to Damping in Quantum Theory, *J. Math. Phys.* 20, (1979), 762.
- (42) - Ver, por exemplo, E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley and Sons, 2^a edição (1970), cap. 8, § 7.
- (43) - V.V. Dodonov e V.I. Man'ko, Loss Energy States of Nonstationary Quantum Systems, *Nuovo Cimento* 44B, (1978), 265.
- (44) - I.C. Moreira, Propagators For the Caldirola - Kanai - Schrödinger Equation, *Lett. Nuovo Cimento* 23, (1978), 294.
- (45) - D.C. Khandekar e S.V. Lawande, Exact Propagator For a Time-Dependent Oscillator with and Without a Singular Perturbation, *J. Math. Phys.* 16, (1975), 384.
- (46) - A.D. Janussis, G.N. Brodimas e A. Streclas, Propagator with Friction in Quantum Mechanics, *Phys. Lett.* 74A, (1979), 6.
- (47) - A. Janussis, V. Papatheou e K. Vlachos, Statistical Mechanics and the Quantum Friction, *Phys. Lett.* 77A, (1980), 112.
- (48) - H.H. Denman e L. H. Buch, Solution of the Hamilton-Jacobi Equation for Certain Dissipative Classical Mechanical

Systems, J. Math. Phys. 14, (1973), 326.

- (49) - N.A. Lemos, Canonical Approach to the Damped Harmonic Oscillator, Am. J. Phys. 47, (1979), 857.
- (50) - K.S. Cheng, Equivalent Lagrangians and Path Integration for Generalized Mechanics, J. Math. Phys. 15, (1974), 808.
- (51) - Ver, por exemplo, E. Engels, On the Helmholtz Conditions for the Existence of a Lagrangian Formalism, Nuovo Cimento 26B, (1975), 481, e referências lá citadas.
- (52) - J. Douglas, Solution of the Inverse Problem of the Calculus of Variations, Trans. Am. Math. Soc. 50, (1941), 71, especialmente pág. 128.
- (53) - D.G. Currie e E.J. Saletan, q-Equivalent Particle Hamiltonians. I. The Classical One-Dimensional Case, J. Math. Phys. 7, (1966), 967; G. Rosen, Formulations of Classical and Quantum Dynamical Theory, Academic Press (1969), págs. 4 - 7; A.P. Balachandran, T.R. Govindarajan e B. Vijayalakshmi, Particles of Half-Integral or Integral Helicity by Quantization of a Nonrelativistic Free Particle, and Related Topics, Phys. Rev. D 18, (1978), 1950; J.A. Kobussen, Some Comments on the Lagrangian Formalism for Systems with General Velocity-Dependent Forces, Acta Phys. Austriaca 51, (1979), 293; S. Okubo, Does the Equation of Motion Determine Commutation Relations?, Phys. Rev. D22, (1980), 919; S. Okubo, Canonical Quantization of Some Dissipative Systems and Nonuniqueness of Lagrangians, Phys. Rev. A23, (1981), 2776.

- (54) - F. González - Gascón, Symmetries of the Lagrange Equations and Equivalent Lagrangians, J. Phys. A: Math. Gen. 13, (1980), 1965.
- (55) - Y. Gelman e E.J. Saletan, q-Equivalent Particle Hamiltonians. II. The Two-Dimensional Classical Oscillator, Nuovo Cimento 18B, (1973), 53; G. Marmo e E. Saletan, Ambiguities in the Lagrangian and Hamiltonian Formalism: Transformation Properties, Nuovo Cimento 40B, (1977), 67; S. Hojman e H. Harleston, Equivalent Lagrangians: Multidimensional Case, J. Math. Phys. 22, (1981), 1414.
- (56) - J.R. Ray, Lagrangians and Systems They Describe - How not to Treat Dissipation in Quantum Mechanics, Am. J. Phys. 47, (1979), 626.
- (57) - F.J. Kennedy, Jr. e E.H. Kerner, Note on the Inequivalence of Classical and Quantum Hamiltonians, Am. J. Phys. 33, (1965), 463.
- (58) - Ver, por exemplo, Ref. 36, capítulo 9, cuja notação adotamos.
- (59) - P.A.M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, Oxford University Press, 4^a edição revista (1967), § 22.
- (60) - Ref. 42, págs. 342-345.
- (61) - Ver, por exemplo, Ref. 36, pág. 342.
- (62) - H.R. Lewis, Jr. e 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.

- (63) - F. Negro e A. Tartaglia, The Quantization of Quadratic Friction, Phys. Lett. 77A, (1980), 1; F. Negro e A. Tartaglia, Quantization of Motion in a Velocity-Dependent Field: The v^2 Case, Phys. Rev. A23, (1981), 1591.
- (64) - P.M. Morse e H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill (1953), sec. 3.2.
- (65) - M.C. Nemes e A.F.R. de Toledo Piza, A Quantum Phenomenology of Viscosity, Rev. Bras. Fís. 7, (1977), 261.
- (66) - G. Ghosh e R.W. Hasse, Coherent State and the Damped Harmonic Oscillator, Phys. Rev. A24, (1981), 1621, e referências lá citadas.
- (67) - B.G. Englert, Quantization of the Radiation-Damped Harmonic Oscillator, Ann. Phys. 129, (1980), 1.
- (68) - H. Dekker, On the Quantization of Dissipative Systems in the Lagrange-Hamilton Formalism, Z. Physik B21, (1975), 295; H. Dekker, Dissipation of Energy Quanta, Phys. Lett. 76A, (1980), 362; G. Dedene, Oscillators and Complex Hamiltonian Calculus, Physica 103A, (1980), 371.
- (69) - M. Razavy, On the Quantization of Dissipative Systems, Z. Physik B26, (1977), 201.
- (70) - E.P. Wigner, Do the Equations of Motion Determine the Quantum Mechanical Commutation Relations?, Phys. Rev. 77, (1950), 711; L.M. Yang, A Note on the Quantum Rule of the Harmonic Oscillator, Phys. Rev. 84, (1951), 788.

- (71) - E. Nelson, Connection Between Brownian Motion and Quantum Mechanics in Einstein Symposium Berlin, H. Nelkowski et al. (eds.), Lecture Notes in Physics, Vol. 100, Springer-Verlag (1979).
- (72) - E. Nelson, Bull. Am. Math. Soc. 84, (1978), 121.
- (73) - A. Einstein, Investigations on the Theory of the Brownian Movement, editado por R. Fürth, Dover (1956).
- (74) - G.C. Ghirardi, C. Omero, A. Rimini e T. Weber, The Stochastic Interpretation of Quantum Mechanics: A Critical Review, Rivista del Nuovo Cimento 1, (1978), 1.
- (75) - Ver, por exemplo, L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill (1968), 3^a edição, sec. 29.
- (76) - Ver, por exemplo, J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley and Sons (1975), 2^a- edição.
- (77) - L. de la Peña - Auerbach, New Formulation of Stochastic Theory and Quantum Mechanics, J. Math. Phys. 10, (1969), 1620.
- (78) - W.J. Lehr e J.L. Park, A Stochastic Derivation of the Klein-Gordon Equation, J. Math. Phys. 18, (1977), 1235.
- (79) - K. Namsrai, Relativistic Dynamics of Stochastic Particles, Found. Phys. 10, (1980), 353.
- (80) - S. Roy, Relativistic Brownian Motion and the Space-Time Approach to Quantum Mechanics, J. Math. Phys. 21, (1980), 71.

- (81) - T.G. Dankel, Jr., Mechanics on Manifolds and the Incorporation of Spin into Nelson's Stochastic Mechanics, Arch. Rational Mech. Anal. 37, (1970), 192.
- (82) - P. D. Raskin, Short-Time Stochastic Electron, Found. Phys. 18, (1978), 31.
- (83) - K. Yasue, Stochastic Calculus of Variations, Lett. Math. Phys. 4, (1980), 357; J.-C. Zambrini, Stochastic Variational Problems with Constraints, Lett. Math. Phys. 4, (1980), 457.
- (84) - K. Yasue, Quantum Mechanics and Stochastic Control Theory, J. Math. Phys. 22, (1981), 1010.
- (85) - E. Santos, A Lagrangian Formulation of the Theory of Random Motion, Nuovo Cimento LIX B, (1969), 65.
- (86) - K. Yasue, A Path-Probability Representation for Wavefunctions, Lett. Math. Phys. 5, (1981), 93.
- (87) - E. Schrödinger, Mémoires sur la Mécanique Ondulatoire, Félix Alcan (1933).
- (88) - K. Yasue, Schrödinger's Variational Method of Quantization Revisited, Lett. Math. Phys. 4, (1980), 143.
- (89) - L. de la Peña - Auerbach e A.M. Cetto, Stronger Form for the Position-Momentum Uncertainty Relation, Phys. Lett. 39A, (1972), 65.
- (90) - F. Guerra e P. Ruggiero, New Interpretation of the Euclidean-Markov Field in the Framework of Physical

- Minkowski Space-Time, *Phys. Rev. Lett.* 31, (1973), 1022.
- (91) - K. Yasue, Stochastic Quantization of Wave Fields and its Application to Dissipatively Interacting Fields, *J. Math. Phys.* 19, (1978), 1892.
- (92) - S.M. Moore, Can Stochastic Physics be a Complete Theory of Nature?, *Found. Phys.* 9, (1979), 237.
- (93) - S.M. Moore, Stochastic Fields from Stochastic Mechanics, *J. Math. Phys.* 21, (1980), 2102.
- (94) - F. Guerra e M.I. Loffredo, Stochastic Equations for the Maxwell Field, *Lett. Nuovo Cimento* 27, (1980), 41.
- (95) - M.C. Reed, Functional Analysis and Probability Theory in Constructive Quantum Field Theory, G. Velo e A. Wightman (eds.), *Lecture Notes in Physics*, Vol. 25, Springer-Verlag (1973).
- (96) - J.-C. Zambrini e K. Yasue, Thermal Mechanics: A Quantum Mechanical Analogue of Nonequilibrium Statistical Thermodynamics, *Ann. Phys.* 125, (1980), 176.
- (97) - K. Yasue, Detailed Time-Dependent Description of Tunneling Phenomena Arising from Stochastic Quantization, *Phys. Rev. Lett.* 40, (1978), 665.
- (98) - K. Yasue, Quantum Decay Process of Metastable Vacuum States in SU(2) Yang-Mills Theory: A Probability Theoretical Point of View, *Phys. Rev.* D18, (1978), 532.
- (99) - T.W. Marshall, Random Electrodynamics, *Proc. Roy. Soc.* 276A, (1963), 475.

- (100) - E. Santos, The Harmonic Oscillator in Stochastic Electrodynamics, Nuovo Cimento 19B, (1974), 57; E. Santos, Foundations of Stochastic Electrodynamics. I. General Formalism and the Free Radiation Field, Nuovo Cimento 22B, (1974), 201.
- (101) - L. de la Peña - Auerbach e A.M. Cetto, Derivation of Quantum Mechanics from Stochastic Electrodynamics, J. Math. Phys. 18, (1977), 1612, e referências lá citadas.
- (102) - Ver, por exemplo, a primeira regra do raciocínio em filosofia em I. Newton, Mathematical Principles of Natural Philosophy, Great Books of the Western World, Vol. 34, Encyclopaedia Britannica (1952), pág. 270.
- (103) - M. Davidson, A Model for the Stochastic Origins of Schrödinger's Equation, J. Math. Phys. 20, (1979), 1865.
- (104) - D.S. Shucker, Measurement in Stochastic Mechanics, J. Math. Phys. 22, (1981), 491.
- (105) - J.G. Gilson, On Stochastic Theories of Quantum Mechanics, Proc. Camb. Phil. Soc. 64, (1968), 1061.
- (106) - S. Albeverio e R. Høegh-Krohn, A Remark on the Connection Between Stochastic Mechanics and the Heat Equation, J. Math. Phys. 15, (1974), 1745.
- (107) - B. Mielnik e G. Tengstrand, Nelson - Brown Motion: Some Question Marks, Int. J. Theor. Phys. 19, (1980), 239.
- (108) - M. Jammer, The Philosophy of Quantum Mechanics, John Wiley and Sons (1974), cap. 9.

- (109) - G. Jona - Lasinio, Stochastic Dynamics and The Semiclassical Limit of Quantum Mechanics in Quantum Fields - Algebras, Processes, L. Streit (ed.), Springer-Verlag (1980); G. Jona-Lasinio, F. Martinelli e E. Scoppola, New Approach to the Semiclassical Limit of Quantum Mechanics. I. Multiple Tunnellings in One Dimension, Commun. Math. Phys. 80, (1981), 223; S.M. Moore, Semiclassical Approximations at Positive Temperatures in Stochastic Physics, J. Math. Phys. 22, (1981), 765.
- (110) - Uma excelente revisão da interpretação hidrodinâmica da mecânica quântica pode ser encontrada no segundo capítulo do esplêndido livro de Jammer, Ref. 108.
- (111) - N. Hashimoto, Comments on the Stochastic Quantization of the Friction, Lett. Nuovo Cimento 26, (1979), 515.
- (112) - Ver, por exemplo, R.E. Williamson, R.H. Crowell e H.F. Trotter, Cálculo de Funções Vetoriais, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. (1975), Vol. 2, cap. 7.
- (113) - M. Davidson, Generalized Stochastic Mechanics on Riemannian Manifolds, Lett. Math. Phys. 4, (1980), 475.
- (114) - M. Davidson, The Generalized Fényes-Nelson Model for Free Scalar Field Theory, Lett. Math. Phys. 4, (1980), 101.
- (115) - M. Davidson, A Dynamical Theory of Markovian Diffusion, Physica 96A, (1979), 465.
- (116) - Ref. 42, págs. 40-41; Ref. 75, págs. 28-30.

- (117) - R. Haag e U. Bannier, Comments on Mielnik's Generalized (Non Linear) Quantum Mechanics, Commun. Math. Phys. 60, (1978), 1.
- (118) - Para a definição de curvas características de uma equação diferencial parcial de primeira ordem ver, por exemplo, R. Courant e D.Hilbert, Methods of Mathematical Physics, Interscience Publishers (1962), Vol. II, cap. II, §§ 3, 7 e 8.
- (119) - M. Battezzati, A New Derivation of a Schrödinger - Type Equation for Dissipative Systems, Nuovo Cimento 50B, (1979), 7.
- (120) - I. Białyński-Birula e J. Mycielski, Wave Equations with Logarithmic Nonlinearities, Bull. Acad. Polon. Sci. 23, (1975), 461; I. Białyński-Birula e J. Mycielski, Nonlinear Wave Mechanics, Ann. Phys. 100, (1976), 62.
- (121) - J. D. Immele, K.-K. Kan e J.J. Griffin, Special Examples of Quantized Friction, Nucl. Phys. A241, (1975), 47.
- (122) - E. Schrödinger, Der Stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik, Naturwiss. 14, (1926), 664; ver, também, Ref. 75, pág. 74.
- (123) - Ver, por exemplo, D.L. Kreider, R.G. Kuller e D.R. Ostberg, Equações Diferenciais, Ed. Edgard Blücher (1972), págs. 328 e 329.
- (124) - B.K. Skagerstam, On the Theory of Quantized Friction, Phys. Lett. 58B, (1975), 21.

- (125) - Ref. 35, especialmente pág. 1060.
- (126) - R.W. Hasse, *Microscopic Derivation of Quantum Fluctuations in Nuclear Reactions*, Nucl. Phys. A318, (1979), 480; R. W. Hasse, *Microscopic Derivation of a Frictional Schrödinger Equation*, Phys. Lett. 85B, (1979), 197.
- (127) - M. Razavy, *Wave Equation for Dissipative Systems Derived from a Quantized Many-Body Problem*, Can. J. Phys. 58, (1980), 1019.
- (128) - B. Remaud e E.S. Hernandez, *Damping of the Wave Packet Motion in a General Time-Dependent Quadratic Field*, J. Phys. A: Math. Gen. 13, (1980), 2013.
- (129) - N. Bohr, *Sobre a Constituição de Átomos e Moléculas*, Fundação Calouste Gulbenkian (1969).
- (130) - N. Gisin, *A Simple Nonlinear Dissipative Quantum Evolution Equation*, Pré-publicação UGVA - DPT 1979/11 - 224, Département de Physique Théorique, Université de Genève (1979).
- (131) - P. Caldirola e E. Montaldi, *A New Equation for Quantum Dissipative Systems*, Nuovo Cimento 53B, (1979), 291.
- (132) - R. Lipperheide, *Quantal Description of Inelastic Heavy-Ion Scattering*, Nucl. Phys. A260, (1976), 292.
- (133) - W. Stocker e K. Albrecht, *A Formalism for the Construction of Quantum Friction Equations*, Ann. Phys. 117, (1979), 436.
- (134) - P.W. Milloni, *Radiation Reaction and the Nonrelativistic Theory of the Electron*, Phys. Lett. 82A, (1981), 225.

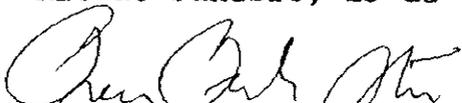
- (135) - I.R. Svin'in, Quantum Description of Brownian Motion in an External Field, *Theor. Math. Phys.* 27, (1976), 478.
- (136) - J. Messer, Friction in Quantum Mechanics, *Acta Phys. Austriaca* 50, (1979), 75.
- (137) - J.R. Brinati e S.S. Mizrahi, Quantum Friction in the C-Number Picture: The Damped Harmonic Oscillator, *J. Math. Phys.* 21, (1980), 2154.
- (138) - K.W.H. Stevens, A Comment on Quantum-Mechanical Damping, *Phys. Lett.* 75A, (1980), 463.
- (139) - C.M. Ko, H.J. Pirner e H. A. Weidenmüller, A One-Dimensional Statistical Model of Friction in Deeply Inelastic Heavy Ion Collisions, *Phys. Lett.* 62B, (1976), 248.
- (140) - Ver o segundo artigo de Hasse na Ref. 126.
- (141) - B.V. Gnedenko, *The Theory of Probability*, Mir Publishers (1969).
- (142) - J.L. Doob, *Stochastic Processes*, John Wiley and Sons (1953).
- (143) - S. Karlin e H. M. Taylor, *A First Course in Stochastic Processes*, Academic Press (1975), 2^a edição.
- (144) - P. Lévy, *Processus Stochastiques et Mouvement Brownien*, Gauthier-Villars (1948).
- (145) - I. Guikhman e A. Skorokhod, *Introduction à la Théorie des Processus Aléatoires*, Éditions Mir (1980).

- (146) - H. Matsuzaki, C. Ishii, T. Honda e T. Tsukamoto, Energy Dissipation and the Stochastic Process in Heavy-Ion Collisions, Prog. Theor. Phys. 63, (1980), 2119.
- (147) - G.E. Uhlenbeck e L.S. Ornstein, On the Theory of Brownian Motion, Phys. Rev. 36, (1930), 823.
- (148) - P. Langevin, Sur la Théorie du Mouvement Brownien, Comptes Rendus 146, (1908), 530.
- (149) - S. Chandrasekhar, Stochastic Problems in Physics and Astronomy, Rev. Mod. Phys. 15, (1943), 1 .
- (150) - J. Perrin, Les Atomes, Félix Alcan (1914), sec. 75.

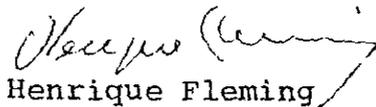
Ilmo. Sr. Coordenador de Ensino

A Banca Examinadora constituída pelos Professores Prem Prakash Srivastava (CBPF), Henrique Fleming (USP), Carlos Marcio do Amaral (UFRJ), Jayme Tiomno (CBPF) e Roberto Lobo (CBPF), no dia 15 de dezembro de 1981, em reunião que precedeu a exposição da Tese de Doutorado "QUANTIZAÇÃO DE SISTEMAS DISSIPATIVOS", por Nivaldo Agostinho Lemos, considerou a Tese apta para defesa imediata.

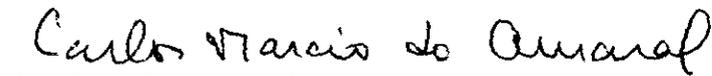
Rio de Janeiro, 15 de dezembro de 1981.



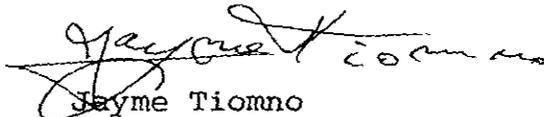
Prem Prakash Srivastava



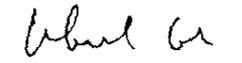
Henrique Fleming



Carlos Marcio do Amaral



Jayme Tiomno



Roberto Lobo