

01/00

---

TESE DE  
DOUTORADO

Representação de Wigner da  
Mecânica Clássica,  
Quantização e Limite Clássico

BOLIVAR ALVES OLIVEIRA

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS-CBPF.  
RIO DE JANEIRO, MARÇO DE 2000.

# Dedicatória

À memória de nosso insigne físico teórico

*Mário Schönberg,*

pelos dez anos de sua morte, que nos deixou, entre outras coisas, o seguinte legado:

“Não tenham medo, não só de levar pancada,  
mas também em expor suas idéias,  
porque se tiverem medo, nunca poderão criar algo de original.

É preciso que não tenham medo de dizer  
alguma coisa que possa ser considerada como erro.”

# Dedicatória

Dedico também aos meus descendentes *Poiesis* e *Aletho*, esperando que o espírito que permeia este trabalho induza-os a adentrarem o mundo do Pensamento, repleto de conhecimento fértil.

# Agradecimentos

## *Agradecimentos Gerais:*

(i) Pelas trivialidades etílicas, agradeço a meus irmãos cachaceiros de Ceilândia (D.F.): Chiquinho, Vandinho, Roberto (tio Zé), Andréia, Mary, Gilmar, Delei, Marquinhos, Riba, Ricardo, Galego, Júnior (Madera), Tiano, *et al.*

(ii) à Vanda, Almério, Regina e a nossa secretária maior: Myriam, como também aos funcionários da biblioteca: Rosa, Marina, Baiano, Sérgio e os rapazes da xerox.

(iii) a Paul Krause por facilitar a minha estada quinzenal aqui no Rio no ano de 98.

## *Agradecimentos Acadêmicos:*

( $\alpha$ ) ao CBPF por ser o local menos burocrático para se estudar física e por possuir uma magnífica biblioteca com periódicos e livros.

( $\beta$ ) a todos os estudantes, pelo convívio no CBPF: Pedro Santoro, Raul Vallejos, Fabricio Toscano, Ernesto Borges, Julio Ortiz, Erwin Lenzi, Carmen, Alejandro Rivas, Viviana, Winder, Ronaldo, Renato Klippert, Márcia, Cristine, Juan Dias, Gabriel Flores, Hugo Christiansen, Rodolfo Casana, Lenyj, Moises, Boldo, Guilherme, Guillermo, Marco Flores, Wang, Álvaro, Álvaro Nogueira, Fortunato, Sasaki, Peche Puertas, Gilmar, Andrés Papa, Rafael Bermudez, Alexandre, *et al.*

( $\gamma$ ) ao Dr. Sebastião A. Dias (o Tião) pelo apoio acadêmico e pela leitura criteriosa apontando frutíferas críticas e sugestões que moldaram uma melhor apresentação dessa tese.

( $\delta$ ) ao Prof. José A. Helayël-Neto pelo apoio, confiança e total liberdade (*liberdade, liberté, Freiheit, freedom*) concedida a mim na realização deste trabalho.

( $\epsilon$ ) ao Dr. Bartolomeu D. B. Figueiredo (tio-Dr. Bartô) pela companhia quinzenal e pelas trivialidades étlicas.

( $\zeta$ ) ao Dr. Olavo L. S. F. (UnB) pela fértil influência sem a qual esta tese não lograria êxito.

( $\eta$ ) ao Prof. Aníbal Omar Caride, pelo apoio institucional.

( $\theta$ ) ao CNPq pela bolsa de doutoramento (1997 - 2000).

( $\iota$ ) ao Prof. Peter H. Richter e Claudia Heitzhausen (Universidade de Bremen, Alemanha) por me enviar o artigo do Einstein (Ref.[115]); e, também, à Prof. Carolina Nemes e José Geraldo (UFMG) pelo envio do artigo da Ref.[190].

( $\upsilon$ ) finalmente, quero registrar a importância das críticas e comentários feitos pelos árbitros (*referees*) das revistas PHYSICAL REVIEW A e JOURNAL OF PHYSICS A, sobre os artigos submetidos.

#### *Agradecimentos Especiais:*

(a) à *minha concubina*, Lúcia, *pelos nove anos de providência existencial*.

(b) à nossa insigne MERETRIZ: a Física.

(c) ao meu **Mestre** J. Henrique cuja importância ressalto consagrando-lhe estas palavras do nosso querido físico J. Leite Lopes:

“Mestre é o professor que a gente encontra na vida e que muda nossa vida!... que nos enriquece, e que faz com que nós todos tenhamos uma lamparina dentro de nós, um candeeiro, e de repente você encontra um mestre, um professor, que tem um certo conhecimento, uma certa intuição, e uma certa maneira de transmitir um conhecimento que nos encanta, e de súbito é como se ele aumentasse a luz da lamparina e do candeeiro transformando-a em uma chama incessante. O mestre é aquele que faz isso, mudando a vida das pessoas, transmitindo de uma maneira característica o conhecimento como ninguém mais saberia transmitir”.

(José Leite Lopes, CBPF, 1999)

# Resumo

A partir das equações Newtonianas de movimento, dentro de uma estrutura probabilística, introduzimos, por meio de uma determinada transformada de Fourier, a representação de Wigner na qual deduzimos uma estrutura de operador e relações de incerteza para a mecânica clássica. Além desta característica, a importância desta nova representação reside no fato de ela ser um modo bastante adequado de estabelecer um método geral de quantização diretamente das equações de movimento sem fazer qualquer alusão à existência de Hamiltonianas e Lagrangianas. Seguindo este procedimento, quantizamos somente o movimento de uma partícula browniana com atrito não-linear (o banho térmico mantém-se inteiramente clássico). Assim, obtemos uma equação mestra que se reduz à equação de Caldeira-Leggett para o caso de atrito linear. Somente quando a influência do meio é desconsiderada, mostramos que as forças de atrito podem ser descritas aproximadamente por equações de movimento em termos de uma função de onda, tais como, a equação de Schrödinger-Langevin e equações do tipo Caldirola-Kanai. Finalmente, para tornar o presente estudo auto-consistente, calculamos o limite clássico destas equações dinâmicas utilizando, para isto, um novo método de limite clássico  $\hbar \rightarrow 0$ .

# Abstract

Starting from the Liouvillian formulation of classical physics it is possible by means of a Fourier transform to introduce the Wigner representation and to derive an operator structure to classical mechanics. The importance of this new representation lies on the fact that it turns out to be a suitable route to establish a general method of quantization directly from the equations of motion without alluding to the existence of Hamiltonian and Lagrangian functions. Following this approach we quantize only the motion of a Brownian particle with non-linear friction (the thermal bath being hold entirely classical), and we obtain a master equation which reduces to the Caldeira-Leggett equation for the linear friction case. Only when the environmental influence is neglected we show that frictional forces can be approximately described by equations of motion in terms of a wave function, such as the Schrödinger-Langevin equation and equations of the Caldirola-Kanai type. Finally, to turn the present study self-consistent, we evaluate the classical limit of these dynamical equations employing a new classical limiting method  $\hbar \rightarrow 0$ .

# Conteúdo

Dedicatória . . . . .	i
Agradecimentos . . . . .	iii
Resumo . . . . .	vi
Abstract . . . . .	vii
Conteúdo . . . . .	viii
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Mecânica Clássica</b>	<b>8</b>
1.1 Sistemas Dinâmicos . . . . .	9
1.2 Formulação Newtoniana . . . . .	14
1.3 Formulação Analítica . . . . .	16
1.3.1 Formalismo Hamiltoniano . . . . .	16
1.3.2 Formalismo Lagrangiano . . . . .	20
1.3.3 Formalismo de Hamilton-Jacobi . . . . .	22
1.4 Formulação Liouvilliana . . . . .	23
1.5 Representação de Wigner da Mecânica Clássica . . . . .	26
<b>2 Mecânica Quântica</b>	<b>35</b>
2.1 Quantização de Planck e Bohr . . . . .	36
2.2 Quantização de Heisenberg . . . . .	37
2.3 Quantização de Schrödinger . . . . .	38
2.4 Quantização de Dirac . . . . .	39

2.5	Quantização de Feynman . . . . .	42
2.6	Quantização Dinâmica . . . . .	44
<b>3</b>	<b>Limite Clássico da Dinâmica Quântica</b>	<b>55</b>
3.1	O Problema do Limite Clássico . . . . .	56
3.2	Limite Clássico das Equações de Movimento da Mecânica Quântica . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Conclusão e Perspectivas</b>	<b>66</b>
<b>A</b>	<b>Equações Diferenciais Estocásticas e Equação de Fokker-Planck</b>	<b>70</b>
<b>B</b>	<b>Dedução da Equação de Langevin</b>	<b>74</b>
<b>C</b>	<b>Comparação com os Métodos de Quantização de Dirac e de Feynman</b>	<b>78</b>
<b>D</b>	<b>Quantização e Limite Clássico dos Sistemas: partícula linearmente amortecida, sistema de van der Pol, sistema de Duffing e sistema de Lotka-Volterra</b>	<b>82</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>87</b>

# Introdução:

## Sistemas Conservativos e Sistemas Não-Conservativos

A ciência moderna nasceu anunciando um modo novo de apreender o real, em oposição à concepção aristotélica dominante na Baixa Idade Média [1,2]. Para Galileu, perscrutar a verdadeira natureza do movimento mecânico é desprezar ou abstrair-se de características tidas como secundárias, tais como a resistência do ar em experiências envolvendo a queda livre de corpos ou o atrito inerente a um plano inclinado, por exemplo. Apenas quando o objeto físico é elevado ao *status* de ente matemático, ele se torna verdadeiramente inteligível. É neste mundo matemático que a essência dos fenômenos passa a ser revelada. Experimentalmente, nunca a lei matemática é verificada de modo exato, pois o atrito ou a resistência do ar estão sempre presentes. A imperfeição do real torna-se um mero *desvio* da idealidade perfeita. Newton, por sua vez, consolida o projeto galileano ao estabelecer a equação fundamental da dinâmica clássica ( $\dot{y} \equiv dy/dt$ )

$$\begin{aligned}\dot{p} &= f(q, p, t) \\ \dot{q} &= \frac{1}{m}p,\end{aligned}\tag{1}$$

onde  $q$  é a posição ocupada por um corpo,  $p$  o seu *momentum* físico,  $m$  sua massa e  $f$  uma força de natureza arbitrária. Apesar desta arbitrariedade, Newton propõe a *universalidade* de uma força (conservativa), a força da gravitação comum a *todos* os corpos dotados de

massa e separados por uma distância  $d$

$$f = G \frac{m_1 m_2}{d^2}. \quad (2)$$

Ressaltemos que a universalidade desta força obnubila definitivamente uma possível relevância que as forças não-conservativas poderiam ter dentro do esquema teórico newtoniano.

Com Lagrange, Hamilton, Jacobi e outros, a física dos sistemas conservativos atinge o auge de abstração e generalidade com a introdução do conceito de coordenadas generalizadas em termos das quais as funções lagrangianas e hamiltonianas passam a ser expressas. Nesta formulação analítica, o objeto principal não é mais a força, mas a energia potencial, a partir da qual aquela é derivada. Mais uma vez, os sistemas não-conservativos mantêm um papel secundário, ou melhor, sua própria existência é questionada, pois pode-se imaginar que um sistema dissipativo esteja sempre imerso em um sistema maior de tal modo que o sistema total seja conservativo [3]. A não-conservação, portanto, torna-se uma mera ilusão (teórica).

A teoria quântica surge, então, sob a égide dos sistemas conservativos dentro de uma estrutura analítica. A primeira tentativa de formular uma mecânica quântica, a chamada velha teoria quântica (*old quantum theory*) (1900-1925), visa interpretar os novos fenômenos na escala microscópica baseando-se no formalismo hamiltoniano. No entanto, só com Heisenberg, Schrödinger e Dirac é que nasce de fato a mecânica quântica, enfatizando como nunca tal estrutura matemática hamiltoniana; Schrödinger parte da equação de Hamilton-Jacobi, ao passo que Heisenberg<sup>1</sup> e Dirac partem das equações de Hamilton introduzindo a noção de operador e obtendo a equação de evolução para a função de onda  $\psi$ . Feynman, em 1948, finalmente completa a influência do formalismo analítico ao obter

---

<sup>1</sup>Na verdade, no seu artigo de 1925, Heisenberg [121] chega à mecânica matricial partindo diretamente da equação de Newton, sem aludir à existência de hamiltoniana ou de lagrangiana, não obtendo, por conseguinte, nenhuma função de onda. Contudo, em um artigo de 1926 [122], seduzido pela beleza matemática incrustada na substituição dos parêntesis de Poisson por comutadores, Heisenberg adere ao método de Dirac totalmente hamiltoniano [125].

a equação de Schrödinger a partir do formalismo lagrangiano. No entanto, estes procedimentos de quantização possuem algumas dificuldades internas, tais como, o problema de ordenamento de operadores quando se passa de uma estrutura algébrica comutativa (física clássica) a uma não-comutativa (física quântica) e o problema do ponto médio no cálculo do propagador, de modo que eles têm fundamento apenas *heurístico*, funcionando sem ambigüidade somente em sistemas conservativos simples. Conseqüentemente, a maneira mais sólida de estabelecer uma mecânica quântica é POSTULAR a *universalidade* da função de onda (já que se acredita que pelo teorema de Ehrenfest ou pelo método WKB a mecânica clássica seja deduzida da mecânica quântica) e se concentrar apenas no sucesso empírico deste procedimento. Contudo, esta atitude axiomática não resolve os problemas de interpretação [4] e muito menos evita o aparecimento de paradoxos [5] relacionados com a existência da função de onda.

Até aqui, traçamos uma linha comum que vai da física de Galileu até a mecânica quântica (em termos de função de onda) no que diz respeito ao papel secundário exercido pelos sistemas não-conservativos. O objetivo epistemológico subjacente ao nosso trabalho é tentar seguir um caminho alternativo àquele usualmente aceito. Para isto, vamos nos basear na teoria matemática de sistemas dinâmicos [6], e nos inspirar na teoria da irreversibilidade de Prigogine [7,8] e nos trabalhos de Born [9,10] que visam modificar os próprios fundamentos conceituais da mecânica clássica. De um ponto de vista operacional, para Born não tem significado a especificação do estado de um sistema com precisão absoluta. No caso de sistemas mecânicos (conservativos ou não) cujas trajetórias são instáveis, ou seja, apresentam sensibilidade às condições iniciais (caos), não se prediz o estado futuro de um modo bem determinado. Assim, para a classe destes sistemas dinâmicos, a mecânica clássica, em vez de ser baseada em termos de trajetórias, deve ser formulada estatisticamente por meio de uma densidade de probabilidade. Prigogine, além de enfatizar os limites de validade da noção de trajetória para sistemas dinâmicos instáveis, o que mostra que a mecânica clássica não é uma teoria estéril a novas renovações e generalizações, explora a riqueza dos processos não-conservativos (reações químicas, convecção em hidro-

dinâmica, sistemas biológicos) onde novos conceitos surgem, como o de auto-organização, atrator e o de estrutura dissipativa (estrutura de ordem que aparece em sistemas que trocam energia com o meio externo). Desta forma, empiricamente estes fenômenos são tão fundamentais quanto aqueles considerados conservativos. Mas, é com base na estrutura matemática subjacente à própria mecânica clássica (teoria dos sistemas dinâmicos) que é possível estabelecer um critério matemático e objetivo (o sinal da divergência associada a um sistema de equações diferenciais ordinárias) que distinga um sistema conservativo de um não-conservativo, tratando-os sempre em pé de igualdade. Assim, há fenômenos, que podem ser modelados usando um oscilador harmônico ou um sistema de dois corpos, que se acomodam muito bem a uma descrição basicamente conservativa como se fossem totalmente isolados do mundo que os circunda. Por outro lado, o estudo de sistemas com amortecimento (dissipação) — exemplo de um sistema fechado (dissipação sem influência do meio) — é igualmente fundamental.

Na verdade, ao lado dos sistemas físicos determinísticos (isolados e fechados), acima citados, existem ainda aqueles que sofrem influência do meio circundante (e.g., uma partícula browniana, exemplo de um sistema aberto) descritos por equações diferenciais estocásticas.

Geralmente, costuma-se classificar um sistema como conservativo ou não-conservativo dependendo de se a energia total de um sistema mecânico newtoniano é conservada ou não, ou equivalentemente, considerando a hamiltoniana  $H = T + V$  (energia cinética mais energia potencial) independente do tempo. Ao contrário, no Capítulo 1 procuramos estabelecer um critério matemático para distinguir o caráter conservativo do não-conservativo associado a um sistema de equações diferenciais ordinárias (Seção 1.1). Notamos que os sistemas newtonianos se apresentam como um caso particular de sistema dinâmico (Seção 1.2). Em seguida, enfatizamos ainda o quão ambíguo é descrever analiticamente sistemas newtonianos não-conservativos, ou seja, usando os formalismos lagrangiano, hamiltoniano e o de Hamilton-Jacobi (Seção 1.3). Tais sistemas podem ser estudados dentro de uma estrutura probabilística, graças ao conceito de *ensemble* (Seção 1.4). Com base nesta for-

mulação liouvilliana, terminamos este capítulo introduzindo uma transformada de Fourier (a função de Wigner clássica) que define uma NOVA representação da mecânica clássica, na qual deduzimos uma estrutura de operador e relações de incerteza; mostramos também a importância operacional deste novo formalismo. Assim, de um modo geral, a temática principal deste capítulo reside em mostrar que sistemas conservativos e não-conservativos podem ser tratados irmanamente dentro do esquema teórico da física clássica quando se dá ênfase à descrição em termos das equações de movimento, e não em termos de objetos abstratos como lagrangiana e hamiltoniana.

No Capítulo 2, depois de apontarmos os pontos fracos dos métodos de quantização, historicamente aceitos, elaborados por Planck, Bohr (Seção 2.1), Heisenberg (Seção 2.2), Schrödinger (Seção 2.3), Dirac (Seção 2.4) e Feynman (Seção 2.5), que funcionam bem para sistemas conservativos e são obtusos para sistemas não-conservativos, exploramos o ponto de vista de que a representação de Wigner da mecânica clássica é a rota mais adequada para quantizar um dado sistema sem apelar para hamiltonianas e lagrangianas. Tal método chamamos de QUANTIZAÇÃO DINÂMICA. Como exemplo específico, consideramos a quantização de uma partícula executando um movimento tipo-browniano com força de atrito não-linear. Conseguimos, assim, deduzir a equação de Caldeira-Leggett como caso particular. Além disso, a quantização dinâmica é capaz de revelar a verdadeira natureza física de certas equações de movimento quânticas tidas na literatura como dissipativas, tais como, a equação de Schrödinger-Langevin e equações do tipo Caldirola-Kanai. Aqui, o ponto importante deste novo método de quantização é o fato de a função de onda ser *derivada* da função de von Neumann, mesmo no caso de sistemas isolados.

O Capítulo 3 trata da transição mecânica quântica  $\rightarrow$  mecânica clássica. Na Seção 3.1, são mencionados métodos usuais de limite clássico, tais como o teorema de Ehrenfest (e a sua versão mais recente: a abordagem da descoerência), a aproximação WKB e o potencial quântico de Bohm. No entanto, a fim de darmos uma consistência lógica mais sólida ao método de quantização dinâmica, definimos e aplicamos um NOVO método de calcular limite clássico de equações da dinâmica quântica, tanto conservativas como não-

conservativas (Seção 3.2) . Na Conclusão, fazemos nossas considerações finais acentuando algumas conseqüências epistemológicas do nosso trabalho.

Acrescentamos, ainda, quatro apêndices. Os dois primeiros versam sobre assunto já conhecido na literatura: o Apêndice A trata da equivalência entre um sistema dinâmico estocástico e a equação de Fokker-Planck, ao passo que o Apêndice B aborda a dedução da equação de Langevin a partir de um modelo específico descrevendo o banho térmico. Os dois últimos são originais: o Apêndice C é dedicado à comparação entre os métodos de quantização de Dirac e de Feynman e a quantização dinâmica, no caso de sistemas isolados; já o Apêndice D procura mostrar a quantização (dinâmica) e o limite clássico de uma partícula linearmente amortecida, de um sistema de van der Pol, de um sistema de Duffing e de um sistema de Lotka-Volterra.

A presente tese pode ser vista como uma fusão de outras duas teses de doutorado, uma elaborada por Olavo L. da Silva Filho e a outra por Nivaldo A. Lemos. Da primeira (Ref.[11]), tomamos emprestado a idéia de utilizar a transformação de Wigner como um meio de definir um processo de quantização, e da segunda (Ref.[12]) a importância conceitual de se estudar sistemas dissipativos.

Finalizando, queremos enfatizar o nosso apreço à memória de nosso saudoso Mário Schönberg, transcrevendo o seguinte poema de Menotti del Picchia:

*É inútil que cubram de terra os corpos.*

*Eles saem do chão  
não como fantasmas  
mas vivos.*

*Sentam-se às nossas mesas  
comem soturnos nossa sopa misturada com  
lágrimas.*

*Sabemos que não são imortais  
e que essa sobrevivência tem prazo.*

*Um dia, porém  
quando?  
(dessa data nem nos damos conta)  
evaporam-se ...*

*Somos nós que matamos nossos mortos  
e os enterramos em nós mesmos.*

(Os Mortos, Menotti del Picchia *in* Entardecer, 1978)

# Capítulo 1

## Mecânica Clássica

Começamos com a teoria dos sistemas dinâmicos introduzindo um critério objetivo para distinguir o caráter conservativo e não-conservativo dos fenômenos naturais descritos por equações diferenciais ordinárias. Na Seção 1.2, passamos a nos concentrar no estudo dos sistemas dinâmicos descritos pelas equações de Newton (sistemas newtonianos). Em seguida, na Seção 1.3, analisamos a possibilidade de inserir os sistemas newtonianos não-conservativos dentro do formalismo analítico da mecânica clássica: equações de Hamilton, equações de Lagrange e equação de Hamilton-Jacobi. Na Seção 1.4, apresentamos a formulação liouvilliana segundo a qual um sistema é descrito deterministicamente por equações diferenciais dentro de uma estrutura probabilística. Por fim, a Seção 1.5 é dedicada à introdução de uma NOVA representação da mecânica clássica por meio de uma transformada de Fourier, a qual chamamos *função de Wigner clássica*. Nesta formulação, deduzimos a dinâmica, uma estrutura de operador e relações de incerteza e, como uma aplicação simples, resolvemos o caso de um oscilador harmônico.

## 1.1 Sistemas Dinâmicos

SISTEMA DINÂMICO é uma denominação matemática para um sistema genérico cujo estado em um dado tempo  $t$  é especificado por  $N$  variáveis  $z_1(t), z_2(t), \dots, z_N(t)$  que evoluem segundo o sistema de  $N$  equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, que podem ser dependentes explicitamente do tempo e geralmente não-lineares [13-16]

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &\equiv \frac{dz_1}{dt} = K_1(z_1, \dots, z_N, t) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ \dot{z}_N &\equiv \frac{dz_N}{dt} = K_N(z_1, \dots, z_N, t), \end{aligned} \tag{1.1}$$

para cada grau de liberdade. As  $N$  variáveis  $z_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) podem representar quantidades físicas como posição, *momentum* linear, ângulo, temperatura, pressão. Sistemas biológicos e químicos (reações químicas) podem também ser modelados como sistemas dinâmicos de modo que o conjunto  $z_i$  pode denotar populações de insetos, pássaros, animais, concentrações de vários reagentes, etc. Quando tais variáveis apresentam um caráter estocástico, e não determinístico, as Eqs.(1.1) definem um sistema dinâmico estocástico (ver Apêndice A).

Uma propriedade importante das equações (1.1) é que, uma vez dadas as condições iniciais  $z_i(t = 0)$ , o estado do sistema pode ser determinado em um certo tempo  $t$  desde que condições (e.g., existência de derivadas contínuas) sejam obedecidas pelas funções  $K_i$ . Este é o conteúdo do teorema de existência e unicidade das soluções das equações diferenciais ordinárias que definem um sistema como determinístico [13,17]. Uma outra propriedade é a existência de um conjunto de transformações permitidas  $(z_i) \mapsto (Z_i)$  que mantêm invariante uma dada característica inerente a (1.1) [6].

Geometricamente, o sistema dinâmico (1.1) pode ser estudado utilizando-se do conceito de *espaço de fase*  $\Gamma$ , um espaço euclidiano<sup>1</sup> com  $N$  dimensões cujos eixos são  $z_1, \dots, z_N$ .

<sup>1</sup>Um espaço euclidiano  $N$ -dimensional é um espaço vetorial real munido de um produto interno ou

O estado do sistema é representado, portanto, por um *ponto matemático* neste espaço vetorial, enquanto que sua evolução temporal define uma trajetória, ou uma órbita ou um fluxo. O caráter *determinístico* de (1.1) é então visualizado assegurando que haja uma única trajetória passando por cada ponto de  $\Gamma$ , de modo que a intersecção de duas trajetórias, ou a auto-intersecção de uma dada trajetória em um certo ponto, seja proibida pelo teorema de existência e unicidade.

Uma vez definidos o estado ( $z_i$ ), a dinâmica ( $\dot{z}_i = K_i$ ) e a arena geométrica ( $\Gamma$ ), queremos estabelecer um critério que caracterize a natureza conservativa ou não-conservativa de um dado sistema dinâmico. Isto é, dado um sistema de equações diferenciais ordinárias, qual a condição necessária e suficiente para que ele seja considerado como conservativo ou não-conservativo? Como uma certa região  $\mathcal{D}$  do espaço de fase  $\Gamma$  ( $\mathcal{D} \subset \Gamma$ ) ocupa um hiper-volume  $\mathcal{V}$ , veremos que é o comportamento desta região, no tempo, o responsável pela classificação dos sistemas dinâmicos (1.1) em conservativo ou não-conservativo [19-24]. Seja

$$\mathcal{V}(t_0) = \int_{\mathcal{D}(t_0)} dz_1(t_0) \dots dz_N(t_0) \quad (1.2)$$

o hiper-volume no tempo  $t_0$ , e

$$\mathcal{V}(t) = \int_{\mathcal{D}(t)} dz_1(t) \dots dz_N(t) \quad (1.3)$$

o hiper-volume ocupado por  $\mathcal{D}$  no tempo  $t$ . Notando que

$$dz_1(t) \dots dz_N(t) = \mathcal{J} dz_1(t_0) \dots dz_N(t_0), \quad (1.4)$$

onde

$$\mathcal{J} = \left| \frac{\partial(z_1(t), \dots, z_N(t))}{\partial(z_1(t_0), \dots, z_N(t_0))} \right| \quad (1.5)$$

---

escalar, entre dois de seus vetores, definido por  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \mathbf{y}_i$ , tal que [18]

- (a)  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{y}, \mathbf{x})$ ;
- (b)  $(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}, \mathbf{g}) = \alpha(\mathbf{x}, \mathbf{g}) + \beta(\mathbf{y}, \mathbf{g})$ , onde  $\alpha$  e  $\beta$  são escalares;
- (c)  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0$ , qualquer que seja  $\mathbf{x}$ ;  $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$  se e somente se  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ .

é o jacobiano da transformação  $(z_1(t_0), \dots, z_N(t_0)) \mapsto (z_1(t), \dots, z_N(t))$ , e expandindo  $z_i(t)$  em torno de  $t_0$

$$z_i(t) = z_i(t)|_{t=t_0} + \frac{dz_i(t)}{dt}|_{t=t_0}(t - t_0) + O[(t - t_0)^2], \quad (1.6)$$

obtemos

$$\mathcal{J} = 1 + (t - t_0) \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i(t_0)} + O[(t - t_0)^2]. \quad (1.7)$$

Inserindo (1.7) em (1.3) segue que [25]

$$\frac{d\mathcal{V}(t)}{dt}|_{t=t_0} = \int_{\mathcal{D}(t_0)} \left[ \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i(t_0)} \right] dz_1(t_0) \dots dz_N(t_0) \quad (1.8)$$

de modo que um sistema dinâmico é CONSERVATIVO, ou seja, preserva o híper-volume no decorrer do tempo para qualquer região  $\mathcal{D}$ , se e somente se a *divergência* é nula

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \equiv \text{div} \mathbf{K} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i} = 0 \quad (1.9)$$

e NÃO-CONSERVATIVO se e somente se

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \equiv \text{div} \mathbf{K} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i} \neq 0. \quad (1.10)$$

No caso em que  $\text{div} \mathbf{K} < 0$ , em média ao longo de um tempo  $t$  [19,26,27], ou seja,

$$\langle \text{div} \mathbf{K} \rangle_t = \frac{1}{t} \int_0^t \text{div} \mathbf{K} d\tau < 0$$

o sistema é dito *dissipativo*. Vale observar que podem existir, associadas a (1.1), constantes de movimento  $I = I(z_1, \dots, z_N, t)$ :

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= \frac{\partial I}{\partial z_1} \dot{z}_1 + \frac{\partial I}{\partial z_2} \dot{z}_2 + \dots + \frac{\partial I}{\partial z_N} \dot{z}_N + \frac{\partial I}{\partial t} \\ &= \frac{\partial I}{\partial z_1} K_1 + \frac{\partial I}{\partial z_2} K_2 + \dots + \frac{\partial I}{\partial z_N} K_N + \frac{\partial I}{\partial t} = 0, \end{aligned} \quad (1.11)$$

de modo que a mera existência de integrais primeiras unívocas não serve de critério para distinguir o caráter conservativo ou não-conservativo de um sistema dinâmico, ao contrário do que é defendido por Minorsky [28].

Agora, a fim de darmos ao critério (1.9) ou (1.10) um caráter objetivo, exigimos que as transformações *permitidas*  $(z_i) \mapsto (Z_i)$  das variáveis  $z_i$  às variáveis  $Z_i$  sejam aquelas que mantenham o sinal da divergência invariante, ou seja,

$$\text{sinal}(\text{div}\mathbf{K}(z_1, z_2, \dots, z_N, t)) = \text{sinal}(\text{div}\bar{\mathbf{K}}(Z_1, Z_2, \dots, Z_N, t)).$$

• EXEMPLOS DE SISTEMAS DINÂMICOS:

$\alpha)$  *Sistema de Lorentz*: Um modelo simplificado da convecção atmosférica para determinar a previsão do tempo é dado pelas equações diferenciais não-lineares de Lorentz [15,16,20,29]

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= \sigma(z_2 - z_1) \equiv K_1 \\ \dot{z}_2 &= -z_1 z_3 + r z_1 - z_2 \equiv K_2 \\ \dot{z}_3 &= z_1 z_2 + b z_3 \equiv K_3, \end{aligned} \tag{1.12}$$

onde  $\sigma = \nu/\kappa$  é o número de Prandtl, sendo  $\nu$  a viscosidade cinemática e  $\kappa$  a condutividade térmica,  $r$  o número de Rayleigh, normalizado e proporcional à diferença de temperatura, e  $b$  um fator geométrico. Fisicamente, a variável  $z_1$  está relacionada com a intensidade do movimento (velocidade) convectivo e  $z_2$  com a diferença de temperatura entre a parte de baixo e a parte de cima da camada do fluido, enquanto que  $z_3$  é proporcional à distorção do perfil de temperatura a partir da linearidade. Calculando a divergência associada às equações (1.12), obtemos

$$\text{div}\mathbf{K} = \frac{\partial K_1}{\partial z_1} + \frac{\partial K_2}{\partial z_2} + \frac{\partial K_3}{\partial z_3} = -(\sigma + 1 + b), \tag{1.13}$$

o que mostra que o sistema de Lorentz é sempre dissipativo desde que  $b, \sigma > 0$ . Todas as trajetórias acabam confinadas em uma certa região do espaço de fase chamada de atrator estranho [30], onde a evolução temporal das variáveis  $z_1, z_2$  e  $z_3$  apresenta sensibilidade às condições iniciais (comportamento caótico). Isto ocorre para o parâmetro adimensional  $r > 24,74$ . As constantes de movimento associadas a (1.12) são construídas na Ref. [31].

$\beta$ ) *Sistema de Lotka-Volterra*: A dinâmica de Lotka-Volterra para o caso do sistema predador/presa é dada pelas equações não-lineares [32-34]

$$\begin{aligned}\dot{z}_1 &= \lambda_1 z_1 + z_1 A_{11} z_1 + z_1 A_{12} z_2 \\ \dot{z}_2 &= \lambda_2 z_2 + z_2 A_{21} z_1 + z_2 A_{22} z_2.\end{aligned}\tag{1.14}$$

Os coeficientes  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  estão relacionados com o auto-crescimento (ou auto-diminuição) de predador ou presa. Os outros termos, proporcionais a  $A_{ij}$ , denotam a interação de cada população entre si e uma com a outra. O sistema de Lotka-Volterra (1.14) é não-conservativo ( $\text{div}\mathbf{K} \neq 0$ ). Caso  $\lambda_1 = -\lambda_2 = \lambda$ ,  $2A_{11} = -A_{21} = \alpha$  e  $2A_{22} = -A_{12} = \beta$ , o modelo torna-se conservativo:  $\text{div}\mathbf{K} = 0$ .

Consideremos agora o sistema de Lotka-Volterra (1.14) na forma

$$\begin{aligned}\dot{z}_1 &= \lambda_1 z_1 + z_1 A_{12} z_2 \\ \dot{z}_2 &= \lambda_2 z_2 + z_2 A_{21} z_1\end{aligned}\tag{1.15}$$

com divergência igual a

$$\lambda_1 + \lambda_2 + A_{12} z_2 + A_{21} z_1 \neq 0.\tag{1.16}$$

Segundo Minorsky [28], (1.15) é considerado como conservativo por causa da existência do invariante de movimento  $I = -\lambda_1 \ln z_2 + \lambda_2 \ln z_1 + A_{21} z_1 - A_{12} z_2$ . Realizemos a seguinte transformação no espaço de fase  $(z_1, z_2) \mapsto (Z_1, Z_2)$  dada por

$$\begin{aligned}Z_1 &= -\ln z_1 \\ Z_2 &= \ln z_2\end{aligned}\tag{1.17}$$

de modo que (1.15) passa a ser

$$\begin{aligned}\dot{Z}_1 &= -(\lambda_1 + A_{12} e^{Z_2}) \\ \dot{Z}_2 &= \lambda_2 + A_{21} e^{-Z_1}\end{aligned}\tag{1.18}$$

cuja divergência é nula. Aqui, temos um exemplo de transformação proibida, pois ela não conserva o sinal da divergência. No entanto, nas Refs.[32,35,36], (1.17) é usada para converter um sistema de Lotka-Volterra inicialmente não-conservativo em um conservativo a fim de dar-lhe uma estrutura hamiltoniana

$$\dot{Z}_1 = \frac{\partial I}{\partial Z_2}$$

$$\dot{Z}_2 = -\frac{\partial I}{\partial Z_1},$$

sendo  $I = -\lambda_1 Z_2 - \lambda_2 Z_1 + A_{21}e^{-Z_1} - A_{12}e^{Z_2}$ .

Além de servir como modelo de populações em sistemas biológicos, a dinâmica de Lotka-Volterra pode modelar sistemas físicos que, por sua vez, podem ser quantizados (Ver apêndice D). A partir da próxima seção, passamos a nos concentrar no estudo dos sistemas mecânicos newtonianos.

## 1.2 Formulação Newtoniana

Os sistemas newtonianos (com 1 grau de liberdade) constituem uma importante classe de sistemas dinâmicos caracterizados pelas equações de Newton [13,16,25,37]

$$\begin{aligned} \dot{p} &= f(q, p, t) \\ \dot{q} &= \frac{1}{m}p, \end{aligned} \tag{1.19}$$

onde  $q$  denota a posição e  $p$  o *momentum* linear de um sistema de massa  $m$ . As equações de Newton definem um sistema como conservativo ou não-conservativo dependendo da natureza da força  $f = f(q, p, t)$ , i.e.,

$$\text{div} \mathbf{K} = \frac{\partial f}{\partial p}. \tag{1.20}$$

Quando  $f$  é derivada de um potencial  $V(q)$ , o sistema é dito ser conservativo.

Um estudo completo dos sistemas newtonianos também exige a introdução dos vínculos que restringem a dinâmica [37]. Geometricamente, estas funções de vínculo reduzem a dimensão do espaço de fase associado a (1.19). Doravante, concentrar-nos-emos no estudo de sistemas newtonianos sem vínculo apenas.

Tomemos, como exemplo, um sistema unidimensional com força derivada de um potencial escalar externo  $V = V(q, t)$ , com força dissipativa linearmente proporcional ao *momentum* físico e com uma força  $\mathcal{F}(t)$  aplicada externamente

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \beta p + \mathcal{F}(t) \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}\end{aligned}\tag{1.21}$$

sujeito às condições iniciais  $q(t = 0) = q_0$  e  $p(t = 0) = p_0$ . A solução é dada por

$$p(t) = p_0 e^{-\beta t} + e^{-\beta t} \int_0^t d\tau e^{\beta \tau} \left[ -\frac{\partial V(q, \tau)}{\partial q} + \mathcal{F}(\tau) \right],\tag{1.22}$$

e a divergência associada a (1.21) é  $-\beta$ , sendo  $\beta$  o coeficiente de atrito.

Um exemplo curioso que nos será útil posteriormente (ver Seção 2.5) é o caso de um sistema newtoniano submetido a uma força proporcional à força normal  $\partial Z(q, t)/\partial q$  entre superfícies de contato e independente da velocidade  $dq/dt$ :

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \frac{\beta}{m} \frac{\partial Z(q, t)}{\partial q} \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}\end{aligned}\tag{1.23}$$

com divergência de  $\mathbf{K}$  nula. Logo, é um sistema conservativo, embora seja usual e equivocadamente classificado como um sistema dissipativo [37].

Consideremos agora o seguinte sistema newtoniano conservativo

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}\end{aligned}\tag{1.24}$$

e realizemos a transformação  $(q, p) \mapsto (Q, P)$  no espaço de fase

$$\begin{aligned}P &= e^{\beta t} p \\ Q &= e^{\beta t} q.\end{aligned}\tag{1.25}$$

Conseqüentemente, o sistema original (1.24) é convertido no seguinte

$$\begin{aligned}\dot{P} &= -\frac{\partial V}{\partial Q} + \beta P \\ \dot{Q} &= \frac{P}{m} e^{-2\beta t} + \beta Q\end{aligned}\tag{1.26}$$

cuja divergência é  $2\beta$ . Portanto, (1.25) constitui uma transformação não permitida, pois altera a natureza física do sistema newtoniano conservativo (1.24). Na próxima seção, investigamos a possibilidade de estudar sistemas newtonianos não-conservativos fazendo-se uso do formalismo analítico da mecânica clássica.

## 1.3 Formulação Analítica

### 1.3.1 Formalismo Hamiltoniano

No formalismo de Hamilton [13,14,16,20,25,38-41], o estado de um sistema físico com 1 grau de liberdade é caracterizado por  $(x, \pi)$ , sendo  $\pi$  o *momentum* generalizado canonicamente conjugado à coordenada generalizada  $x$ . A dinâmica é dada por

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \\ \dot{\pi} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}, \end{aligned} \tag{1.27}$$

onde  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(x, \pi, t)$  é a função hamiltoniana do sistema. Uma vez obtidas as soluções do sistema hamiltoniano (1.27), as quantidades físicas  $A(x, \pi)$ , que em princípio podem ser medidas, tais como, energia, *momentum* linear, podem ser calculadas em qualquer tempo  $t$ .

A divergência é

$$\nabla \cdot \mathbf{K} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \right) + \frac{\partial}{\partial \pi} \left( -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \right) = 0, \tag{1.28}$$

ou seja, o fluxo *hamiltoniano* é conservativo, preserva a área (ou o volume) de uma certa região do espaço de fase no decorrer do tempo. Aqui, as transformações (permitidas) que mantêm esta característica (1.28) são as chamadas *transformações canônicas*. Fisicamente, então, sistemas hamiltonianos formam uma classe particular dos sistemas newtonianos. Como exemplo, citemos o sistema físico dado pelas equações newtonianas (1.23) que também é um sistema hamiltoniano por ser descrito pela hamiltoniana  $\mathcal{H} = H = p^2/2m + V(q, t) + (\beta/m)Z(q, t)$ .

Vale enfatizar que não é necessário que a hamiltoniana  $\mathcal{H}$  tenha a forma usual  $H = p^2/2m + V(q, t)$  e que seja uma quantidade conservada  $d\mathcal{H}/dt = 0$ . A forma de  $\mathcal{H}$  é arbitrária. O importante é que as equações de Hamilton sejam idênticas às equações de Newton (1.19) para *sistemas conservativos*. A fim de ilustrar esta não-unicidade no formalismo hamiltoniano, consideremos o movimento de uma partícula com massa  $m$  e carga  $e$  em um plano perpendicular à ação de um campo magnético  $(0, 0, B_0)$  constante e uniforme descrito por meio das equações de Newton [42]

$$\begin{aligned} \dot{p}_1 &= \frac{\kappa}{m} p_2 \quad ; \quad \dot{p}_2 = -\frac{\kappa}{m} p_1 \\ \dot{q}_1 &= \frac{p_1}{m} \quad ; \quad \dot{q}_2 = \frac{p_2}{m}, \end{aligned} \tag{1.29}$$

onde  $\kappa = eB_0/c$ , sendo  $c$  a velocidade da luz. No formalismo de Hamilton, a hamiltoniana

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m} \left( \pi_x + \frac{\kappa}{2} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left( \pi_y - \frac{\kappa}{2} x \right)^2, \tag{1.30}$$

com os *momenta* canônicos

$$\begin{aligned} \pi_x &= p_1 - \frac{\kappa}{2} x \\ \pi_y &= p_2 + \frac{\kappa}{2} y. \end{aligned} \tag{1.31}$$

e a hamiltoniana

$$\mathcal{H}_2 = \pi_x \pi_y \cos\left(\frac{\kappa t}{m}\right) + \frac{1}{2m} \left( \pi_x^2 - \pi_y^2 \right) \text{sen}\left(\frac{\kappa t}{m}\right), \tag{1.32}$$

com

$$\begin{aligned} \pi_x &= p_2 \cos\left(\frac{\kappa t}{m}\right) + p_1 \text{sen}\left(\frac{\kappa t}{m}\right) \\ \pi_y &= p_1 \cos\left(\frac{\kappa t}{m}\right) - p_2 \text{sen}\left(\frac{\kappa t}{m}\right), \end{aligned} \tag{1.33}$$

são *equivalentes* no sentido de que levam às mesmas equações de Newton (1.29). Outros exemplos de hamiltonianas classicamente equivalentes podem ser encontrados nas Refs.[43-48]. Um ponto importante desta não-unicidade inerente ao formalismo hamiltoniano é se a quantização a partir destas hamiltonianas leva ou não a um *único* sistema quântico (ver Seção 2.4).

Até agora, abordamos apenas os sistemas conservativos. Uma questão que se coloca é a seguinte: como é possível descrever sistemas newtonianos não-conservativos dentro do

formalismo hamiltoniano da mecânica clássica? Segundo Santilli[37], uma resposta completa a esta questão tem de levar em conta: (i) as condições necessárias e suficientes para a existência de funções hamiltonianas; (ii) uma vez verificadas estas condições de integrabilidade, deve-se formular métodos de construção de hamiltonianas; e finalmente, (iii) a especificação das forças newtonianas mais gerais que são suscetíveis a uma formulação hamiltoniana. Como exemplo desta abordagem, citemos a hamiltoniana de Bateman [49]:

$$\mathcal{H}(x, \pi, t) = \frac{\pi^2}{2m}e^{-\beta t} + V(x)e^{\beta t}, \quad (1.34)$$

onde  $\pi = pe^{\beta t}$  é o *momentum* generalizado canonicamente conjugado a  $x = q$ . Esta hamiltoniana leva às equações de movimento

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\pi}{m}e^{-\beta t} \\ \dot{\pi} &= -\frac{dV}{dx}e^{\beta t}, \end{aligned} \quad (1.35)$$

ou

$$\begin{aligned} e^{\beta t}\dot{p} &= -\beta pe^{\beta t} - \frac{dV}{dx}e^{\beta t} \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

que são matematicamente *equivalentes* (mas não idênticas, pois estão multiplicadas pelo fator  $e^{\beta t}$ ) às equações de Newton (dissipativas) (1.19) com  $f = -\beta p - dV/dq$ . Contudo, com base no critério (1.9) a divergência relacionada com as equações (1.35) é nula, isto é, a hamiltoniana de Bateman não descreve um sistema dissipativo, embora forneça as mesmas soluções. Tal resultado é contrário ao critério de conservatividade ou não de alguns autores [37,49-66] que enfatizam a natureza dissipativa de (1.34). Em suma, a equivalência *matemática* entre as equações de Newton e as equações de Hamilton não basta para caracterizar a consistência da extensão do formalismo hamiltoniano a sistemas não-conservativos. Ray [67] e Greenberger [68] chegaram à mesma conclusão seguindo argumentos diferentes. A hamiltoniana (1.34) descreve um sistema conservativo ou com frequência variável [69], ou com massa variável [67,68], ou um sistema em um referencial não-inercial [62]. Esta ambigüidade (divergência nula) intrínseca à hamiltoniana de Bateman não é um caso particular, ocorre também para a sua equivalente [60,70]  $\mathcal{H} = -(\beta q\pi)/2 + (1/2)\ln[(q^2/4)(4k^2 - \beta^2)]$

com  $\pi = (2/q)(4k^2 - \lambda^2)^{-1/2} \text{tg}^{-1}[(2\dot{q}/q + \lambda)(4k^2 - \lambda^2)^{-1/2}]$ , no caso de um oscilador harmônico amortecido ( $m = 1$ )  $V = k^2 q^2/2$ ,  $k^2 = \text{cte}$ . De fato, ocorre para todas as hamiltonianas construídas segundo o método de fatores integrantes [71] inventado por Havas [52,72-74]. Além deste procedimento incorreto de estender o formalismo hamiltoniano para tratar de sistemas não-conservativos, encontramos, na literatura, também o de Caldirola [75-77] e o de Tarasov [78]. O primeiro converte um sistema dissipativo em um conservativo usando uma transformação não-permitida, enquanto que Tarasov [78] propõe  $\dot{x} = \partial\mathcal{H}/\partial\pi - \partial\omega/\partial\pi$  e  $\dot{\pi} = -\partial\mathcal{H}/\partial x + \partial\omega/\partial x$ , onde  $\mathcal{H} = H = T + V$  e  $\omega = \omega(x, \pi)$  é um termo relacionado com um princípio de mínima ação generalizado. Aqui, a divergência é também nula no espaço generalizado  $(x, \pi)$ .

Um modo correto de estudar dissipação analiticamente é partir das equações de Hamilton modificadas por um termo dissipativo [37,79]

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} - \mathcal{F}(q, p, t)\end{aligned}\tag{1.37}$$

que podem ser derivadas de um princípio de Hamilton modificado ou das equações de Newton juntamente com o princípio de d'Alembert. Aqui,  $H = T + V$  (energia cinética mais energia potencial) e o *momentum* canônico coincide com o momentum linear. É fácil verificar que a divergência associada a (1.37) é dada por

$$\nabla \cdot \mathbf{K} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial p},\tag{1.38}$$

o que mostra que realmente estamos tratando de um sistema dissipativo em um formalismo do tipo hamiltoniano. No entanto, a característica principal deste formalismo é perdida:  $p$  e  $q$  não guardam necessariamente um vínculo de canonicidade.

Um ponto de suma importância, quando se tem em mente a quantização de sistemas físicos, é que a *formulação do tipo hamiltoniana de sistemas dissipativos não é única*: Dekker [80-82], por exemplo, generaliza a teoria hamiltoniana em termos de variáveis complexas  $\dot{x} = \partial\mathcal{H}/\partial\pi$  e  $\dot{\pi} = -\partial\mathcal{H}^*/\partial x$ . Além de  $\mathcal{H}$  não ser identificada com a energia

total do sistema, ela é não-hermitiana, o que faz com que o fluxo hamiltoniano seja sempre não-conservativo (divergência diferente de zero). Enz [83], por sua vez, generaliza a estrutura simplética  $\dot{x} = D_{11}\partial\mathcal{H}/\partial x + D_{12}\partial\mathcal{H}/\partial\pi$  e  $\dot{\pi} = D_{21}\partial\mathcal{H}/\partial x + D_{22}\partial\mathcal{H}/\partial\pi$ , de modo que a divergência também não é nula.

### 1.3.2 Formalismo Lagrangiano

Na formulação lagrangiana da mecânica clássica [13,16,25,38-41], o estado de um sistema *conservativo* é especificado pela coordenada generalizada  $x$  e pela velocidade generalizada  $\dot{x}$ , ao passo que sua dinâmica é determinada pela equação de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}, \quad (1.39)$$

onde  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(x, \dot{x}, t)$  é a função de Lagrange ou lagrangiana.

Geometricamente, o “*espaço de fase*” de Lagrange  $(x, \dot{x})$  é distinto do *espaço de fase de Hamilton*  $(x, \pi)$ . O primeiro caracteriza-se como um fibrado tangente (*tangent bundle*), enquanto que o último é um fibrado co-tangente (*cotangent bundle*) [16,25]. No espaço  $(x, \dot{x})$ , em geral, o volume de uma certa região não se mantém constante no tempo, mesmo para sistemas conservativos [13,28].

A lagrangiana usual  $\mathcal{L} \equiv L = T - V$  se apresenta como um caso muito particular de funções que geram as equações de movimento a partir de Eq.(1.39). Na verdade, existe um número infinito de  $\mathcal{L}$  equivalentes ou não umas às outras, ou seja, diferindo ou não por uma derivada total, que fornecem as mesmas equações de Newton conservativas [44,46,84]. Além disso, uma das vantagens do formalismo lagrangiano consiste no fato de fornecer um método mais geral de obter os *momenta* generalizados

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \quad (1.40)$$

fundamentais à formulação hamiltoniana.

Quanto a sistemas não-conservativos, há duas maneiras de descrevê-los usando o formalismo de Lagrange. Na descrição fenomenológica introduz-se *ad hoc* a função dissipativa

de Rayleigh  $\mathcal{R}(q, \dot{q}, t)$  na equação de Lagrange (1.39) [38,41]

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \dot{q}} \quad (1.41)$$

com  $L = T - V$ . Ou seja, não existe nenhuma lagrangiana, por si só, descrevendo um sistema dissipativo. Já seguindo uma linha não-fenomenológica, dado um sistema newtoniano não-conservativo, procuram-se as condições necessárias e suficientes para a existência de lagrangianas  $\mathcal{L} (\neq T - V)$  [37,52,70,72,74,85-88]. Uma vez asseguradas estas condições de integrabilidade, é importante investigar os métodos de construção de lagrangianas [37,49,52,56,89-93] (independentemente daqueles que envolvem hamiltonianas). Por fim, deve-se especificar quais são as forças newtonianas não-conservativas mais gerais que podem ser descritas pelo formalismo lagrangiano [37,87,94].

Deve-se enfatizar que a construção de lagrangiana a partir das equações de Newton não-conservativas dá origem a equações de movimento *matematicamente* equivalentes. No entanto, *fisicamente* podem apresentar interpretações diferentes (e.g., a lagrangiana associada à hamiltoniana de Bateman (1.34)). Ou seja, a lagrangiana simplesmente pode não descrever um sistema não-conservativo. Com base nisto, a abordagem de Tarasov [78], onde o *momentum* canônico é definido por  $\pi = \partial L / \partial \dot{q} + \partial \omega / \partial \dot{q}$ , é incorreta, como também a de Caldirola [75-77]. Este parte de (1.42) (ver a equação abaixo), supondo que  $\mathcal{Q} = -\beta m \dot{q}$ , e constrói a lagrangiana  $\mathcal{L} = L \phi^2(t)$  por meio de uma transformação não-linear  $\tau = \chi(t)$ . Desta lagrangiana, equações de Hamilton são deduzidas com divergência nula no espaço de fase  $(x, \pi)$ .

Uma abordagem coerente para estudar sistemas dissipativos consiste em partir das próprias equações de Newton e do princípio de d'Alembert, e obter [37,40]

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = \mathcal{Q}(q, \dot{q}, t), \quad (1.42)$$

onde  $\mathcal{Q}$  é uma força não-conservativa. A lagrangiana do sistema é  $L = T - V$ , de modo que o *momentum* generalizado  $\pi$  coincide com o *momentum* linear  $p$ . A Eq.(1.42) pode ser obtida de uma modificação do princípio de Hamilton [79] para uma força dissipativa linear nas velocidades.

No entanto, a não-unicidade também aparece na formulação lagrangiana de sistemas dissipativos. Por exemplo, existe a teoria hamiltoniana de Dekker [80-82] que é construída a partir da lagrangiana complexa  $\mathcal{L}$ , usando  $\pi = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{x}$ .

### 1.3.3 Formalismo de Hamilton-Jacobi

O formalismo de Hamilton-Jacobi é introduzido em mecânica clássica a partir do formalismo hamiltoniano de duas maneiras:

(i) Dada uma função hamiltoniana  $\mathcal{H}(x, \pi, t)$ , constrói-se a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \mathcal{H}\left(\frac{\partial S}{\partial x}, x, t\right) = 0, (S = S(x, t)) \quad (1.43)$$

cuja integração é reduzida à integração das equações de Hamilton. Este é o problema de Cauchy: quais as condições necessárias e suficientes para que uma equação diferencial parcial de primeira ordem e não-linear seja equivalente a um par de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem [25].

(ii) Substitui-se a integração do sistema de equações de Hamilton pela integração da equação de Hamilton-Jacobi. Este é o teorema de Jacobi: quais são as condições necessárias e suficientes para que um sistema de duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem seja equivalente a uma equação diferencial parcial de primeira ordem e não-linear [16,20,25,39].

A íntima relação entre os formalismos de Hamilton (sem modificação) e o de Hamilton-Jacobi faz com que este último seja restrito apenas a sistemas conservativos. Denman e Buch [57] e Lemos [61] investigaram a equação de Hamilton-Jacobi associada com a hamiltoniana de Bateman (1.34). Para estes autores está-se estudando um sistema dissipativo. Contudo, com base no critério (1.9) e (1.10), a hamiltoniana de Bateman e, por conseguinte, a equação de Hamilton-Jacobi, não descrevem um sistema não-conservativo.

O procedimento correto de descrever dissipação no formalismo de Hamilton-Jacobi

é investigar a integração das equações de Hamilton modificadas por um termo externo linear

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} - \beta p,\end{aligned}\tag{1.44}$$

sendo  $H = T + V$ , e chegar à equação de Hamilton-Jacobi dissipativa [79]

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + H\left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial q}, q, t\right) + \beta \bar{S} = 0, (\bar{S} = e^{-\beta t} S)\tag{1.45}$$

primeiro postulada por Razavy [95,96].

Em resumo, a formulação analítica de sistemas conservativos é única no sentido de que todas as possíveis hamiltonianas (ou lagrangianas) geram um fluxo sem divergência no espaço de fase. Quanto a sistemas não-conservativos, há várias formulações do tipo hamiltoniano implicando em total ambigüidade com respeito a que tipo de sistema físico está-se investigando analiticamente. Isto já nos faz suspeitar da fraqueza dos métodos de quantização baseados em hamiltonianas, lagrangianas e equação de Hamilton-Jacobi. Por isso, passamos a estudar a mecânica clássica dentro de uma estrutura liouvilliana a ser detalhada na próxima seção.

## 1.4 Formulação Liouvilliana

Vimos na Seção 1.1 que o estado de um sistema dinâmico é determinado por um *ponto*  $z = (z_1, \dots, z_N)$  no espaço de fase. Na formulação liouvilliana, ao contrário, o estado passa a ser especificado por um *conjunto* de pontos fictícios (*ensemble* de Gibbs) em torno do ponto  $z = (z_1, \dots, z_N)$ , cada um com uma certa *probabilidade* de representar o sistema e evoluindo, de modo independente, segundo as equações diferenciais (1.1) [21,23,97,98].

Um número muito grande de pontos  $\Delta N$  (possíveis estados) que se distribuem em uma certa região  $\Delta V$  (infinitesimal) dá origem à noção de distribuição ou densidade de estados (pontos) [23,97]

$$\lim_{N_{tot} \rightarrow \infty} \frac{1}{N_{tot}} \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta V} \equiv F(z, t) \geq 0,\tag{1.46}$$

onde  $N_{tot}$  designa o número total de estados no espaço de fase  $\Gamma$ . Segue, então, que

$$\text{Prob}(\mathcal{M}) = \int_{\mathcal{M}} F(z, t) dz \equiv \int_{\mathcal{M}} F(z_1, \dots, z_N) dz_1 \dots dz_N \quad (1.47)$$

dá a probabilidade de o estado do sistema ser especificado dentro da região  $\mathcal{M}$  de  $\Gamma$ . Como consequência natural, temos

$$\text{Prob}(\Gamma) = \int_{\Gamma} F(z, t) dz = 1. \quad (1.48)$$

Em suma, na formulação liouvilliana, especifica-se o estado de um sistema por meio da função de densidade ou distribuição de probabilidade  $F(z, t)$ .

Como os pontos que constituem o *ensemble*  $F(z, t)$  evoluem segundo as equações diferenciais determinísticas (1.1), a evolução de  $F$  seguirá então como consequência do movimento de cada um de seus constituintes:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial z_1} \dot{z}_1 + \frac{\partial F}{\partial z_2} \dot{z}_2 + \dots + \frac{\partial F}{\partial z_N} \dot{z}_N + \frac{\partial F}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial F}{\partial z_i} K_i + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (1.49)$$

Geometricamente, a derivada total  $dF/dt$  significa a taxa de variação de  $F$  com relação ao tempo na vizinhança de um ponto em movimento no espaço de fase, ao passo que a derivada parcial  $\partial F/\partial t$  indica a taxa de variação de  $F$  no decorrer do tempo na vizinhança de um dado ponto fixo. Consideremos, então, uma dada região  $\mathcal{D}$  de  $\Gamma$  com híper-volume  $\mathcal{V} = \int_{\mathcal{D}} dz_1 \dots dz_N$  em torno do ponto  $(z_1, \dots, z_N)$ . O número total de pontos dentro de  $\mathcal{V}$  em qualquer instante é dado por

$$\mathcal{N} = \int_{\mathcal{D}} F dz_1 \dots dz_N. \quad (1.50)$$

Sejam duas híper-superfícies, em particular, do híper-volume perpendiculares ao eixo- $z_i$  localizadas no ponto  $z_i$  e  $z_i + dz_i$ . O número de pontos entrando pela híper-superfície no ponto  $z_i$  é

$$\mathcal{N}_1 = \int_{\mathcal{D}} F(z_1, \dots, z_i, \dots, z_N, t) dz_1 \dots K_i(z_1, \dots, z_i, \dots, z_N, t) dt \dots dz_N. \quad (1.51)$$

Já o número de pontos saindo pela híper-superfície no ponto  $z_i + dz_i$  é

$$\mathcal{N}_2 = \int_{\mathcal{D}} F(z_1, \dots, z_i + dz_i, \dots, z_N, t) dz_1 \dots K_i(z_1, \dots, z_i + dz_i, \dots, z_N, t) dt \dots dz_N. \quad (1.52)$$

Fazendo as seguintes expansões

$$F(z_1, \dots, z_i + dz_i, \dots, z_N, t) = F(z_1, \dots, z_i, \dots, z_N, t) + \frac{\partial F}{\partial z_i} dz_i + O[(dz_i)^2] \quad (1.53)$$

$$K_i(z_1, \dots, z_i + dz_i, \dots, z_N, t) = K_i(z_1, \dots, z_i, \dots, z_N, t) + \frac{\partial K_i}{\partial z_i} dz_i + O[(dz_i)^2],$$

até segunda ordem, obtemos de (1.52) a expressão

$$\mathcal{N}_2 = \int_{\mathcal{D}} dz_1 \dots \left[ FK_i + F \frac{\partial K_i}{\partial z_i} dz_i + K_i \frac{\partial F}{\partial z_i} dz_i \right] dt \dots dz_N. \quad (1.54)$$

Logo,

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}_1 - \mathcal{N}_2 = - \int_{\mathcal{D}} dz_1 \dots \left[ F \frac{\partial K_i}{\partial z_i} dz_i + K_i \frac{\partial F}{\partial z_i} dz_i \right] dt \dots dz_N \quad (1.55)$$

$$= \int_{\mathcal{D}} F dz_1 \dots dz_i \dots dz_N.$$

Calculando  $d\mathcal{N}/dt$ , somando todas as hiper-superfícies e notando que cada uma delas está fixa, chegamos a

$$\frac{\partial F}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \left[ F \frac{\partial K_i}{\partial z_i} + K_i \frac{\partial F}{\partial z_i} \right]. \quad (1.56)$$

Substituindo este resultado na Eq.(1.49), segue que

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^N K_i \frac{\partial F}{\partial z_i} = -F \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i} \quad (1.57)$$

ou escrita de outra forma

$$\frac{1}{F} \frac{dF}{dt} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial K_i}{\partial z_i}. \quad (1.58)$$

Uma vez obtida a solução da equação de Liouville não-conservativa (1.57), podemos determinar o valor esperado (ou média) de qualquer observável  $A = A(z, t)$

$$\langle A \rangle = \int AF dz. \quad (1.59)$$

sobre o *ensemble* dado por  $F$ .

Para a dedução da equação de Liouville generalizada (1.57), seguimos a abordagem pictórica de Nicolis e Prigogine [21] e também de Tolman [98]. Uma dedução baseada

em teoria de transformação é dada por Gerlich [99], e uma mais rigorosa com base na definição de derivada de Lie se encontra na Ref. [100].

Uma característica importante a ser ressaltada é que a formulação liouvilliana da mecânica clássica engloba de modo complementar a descrição determinística subjacente à teoria dos sistemas dinâmicos (1.1) e a descrição probabilística baseada na noção de *ensemble* (1.46) cuja evolução temporal *independe* de hamiltonianas e lagrangianas. Veja a Eq.(1.58), onde o lado direito depende do caráter probabilístico enquanto que o lado esquerdo representa o aspecto determinístico.

## 1.5 Representação de Wigner da Mecânica Clássica

Nosso objetivo nesta seção é introduzir uma nova representação onde os sistemas clássicos possam ser estudados estatisticamente. A fim de explicitar nossa formulação da mecânica clássica, restringir-nos-emos aos sistemas newtonianos (1.19) descritos probabilisticamente pela equação de Liouville não-conservativa (em uma dimensão)

$$\frac{\partial F}{\partial t} + f \frac{\partial F}{\partial p} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} = -F \frac{\partial f}{\partial p}, \quad (1.60)$$

onde  $f = f(p, q, t)$  é uma força genérica e  $F = F(p, q, t) \geq 0$  a função de distribuição de probabilidade com as seguintes propriedades estatísticas

$$\tilde{F}(q, t) = \int F dp; \quad \tilde{\tilde{F}}(p, t) = \int F dq, \quad (1.61)$$

$$\int F dpdq = 1, \quad (1.62)$$

tal que o valor esperado de uma quantidade física  $A = A(p, q, t)$  seja dado por

$$\langle A \rangle = \int AF dpdq. \quad (1.63)$$

Comos tivemos oportunidade de ver na seção anterior, especifica-se o estado pela distribuição de probabilidade  $F$  que dá a probabilidade de o sistema ser determinado por algum ponto dentro de uma região  $\mathcal{M}$  do espaço de fase  $\Gamma$  em torno do ponto  $(p, q)$ . Vale lembrar que a área de  $\mathcal{M}$  tem dimensão de ação.

Em 1932, Wigner [266] introduziu uma representação da mecânica quântica no espaço de fase por meio da transformação

$$W(p, q, t) = \frac{1}{2\pi} \int \rho\left(q + \frac{\eta\hbar}{2}, q - \frac{\eta\hbar}{2}, t\right) e^{-ip\eta} d\eta,$$

onde  $\rho$  é a matriz densidade, solução da equação de von Neumann,  $\hbar$  a constante de Planck e  $W$  uma função no espaço de fase quântico, nem sempre definida positiva. Um ponto importante é que esta formulação de Wigner possibilita um estudo mais coerente do limite clássico  $\hbar \rightarrow 0$ , já que as duas mecânicas são expressas em termos de números-c (ver Capítulo 3).

Matematicamente, a equação acima é um tipo de transformada de Fourier de tal forma que podemos escrevê-la de um modo geral como

$$\chi\left(y + \frac{u}{2}, y - \frac{u}{2}, t\right) = \int \mathcal{G}(x, y, t) e^{ixu/\ell} dx$$

sendo agora  $\ell$  um parâmetro arbitrário com dimensão tal que  $e^{ixu/\ell}$  seja adimensional. Esta transformada de Fourier é central no nosso trabalho. Especificamente, queremos examinar as conseqüências de sua introdução no seio do formalismo da mecânica clássica. Para isto interpretamos fisicamente esta equação ao considerarmos  $\mathcal{G}(x, y, t) = F(p, q, t)$  uma densidade de probabilidade definida positiva, solução de (1.60), por exemplo. Assim, tal transformada permite, por um lado, instaurar uma nova representação da mecânica clássica na qual é possível deduzir uma estrutura de operadores e relações de incerteza, e também a resolução (aproximada) da equação de Liouville, a equação de evolução para  $F$ ; por outro lado, permite também a definição de um processo de quantização, isto é, a passagem da mecânica clássica à mecânica quântica, as duas expressas em termos da mesma linguagem: números-q.

Começemos, então, introduzindo a representação de Wigner da mecânica clássica por meio da transformada

$$\chi\left(q + \frac{\ell\eta}{2}, q - \frac{\ell\eta}{2}, t\right) = \int F e^{ip\eta} dp \quad (1.64)$$

no espaço- $(q, \eta)$ , e

$$\theta\left(p + \frac{\ell\xi}{2}, p - \frac{\ell\xi}{2}, t\right) = \int F e^{i q \xi} dq \quad (1.65)$$

no espaço- $(p, \xi)$  [101]. Do fato de os fatores de Wigner  $e^{i p \eta}$  e  $e^{i q \xi}$  serem adimensionais e de os produtos  $\ell\eta$  e  $\ell\xi$  terem dimensão de posição e *momentum* linear, respectivamente, resulta que  $\ell$  deve ter a dimensão de ação ou *momentum* angular. Escolhemos este parâmetro  $\ell$  com um valor tal que  $\ell^3 \ll 1$ , o que implica que (1.64) e (1.65) têm um caráter de infinitesimalidade advogado na Ref.[188]. (Doravante, vamos considerar apenas a Eq.(1.64)). Inserindo, então, (1.64) na Eq.(1.60), obtemos a equação de evolução na representação de Wigner

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} - \frac{i}{m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \eta \partial q} + \Omega_1 \chi = -\Omega_2 \chi, \quad (1.66)$$

onde

$$\Omega_1 \chi = \int f \frac{\partial F}{\partial p} e^{i p \eta} dp \quad (1.67)$$

e

$$\Omega_2 \chi = \int F \frac{\partial f}{\partial p} e^{i p \eta} dp. \quad (1.68)$$

A Eq.(1.66) é matematicamente equivalente à equação de Liouville não-conservativa (1.60) devido à existência da inversa de (1.64). No entanto, apenas aquelas  $\chi$  que geram  $F > 0$  têm significado físico. Da Eq.(1.66), notamos que a função de Wigner  $\chi$  é uma função complexa por causa da presença de  $i = (-1)^{1/2}$ . Usando a inversa de (1.64), o valor esperado de  $A$ , Eq.(1.63), passa a ser

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2\pi} \int \chi\left(q + \frac{\ell\eta}{2}, q - \frac{\ell\eta}{2}, t\right) A(p, q, t) e^{-i p \eta} d\eta dp dq. \quad (1.69)$$

O estado físico de um sistema é especificado pela função de Wigner clássica com as seguintes propriedades

- a) *hermiticidade*:  $\langle \chi \rangle = \langle \chi^\dagger \rangle \Rightarrow \chi = \chi^\dagger$ .
- b) *normalização*:  $\int F(p, q, t) dq dp = 1 \Rightarrow \int \chi(q, q, t) dq = 1$ . No entanto,  $\chi(q_1, q_2, t)$  não é normalizável.
- c) *não-positividade*: embora  $F$  seja definida positiva, o mesmo não acontece com a função  $\chi(q_1, q_2, t)$ .

Nesta nova formulação, também é possível deduzir uma estrutura operatorial para a mecânica clássica. Da Eq.(1.69), escrevemos

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int (p\chi) e^{-ip\eta} d\eta dp dq = \frac{1}{2\pi} \int \left(-i \frac{\partial \chi}{\partial \eta}\right) e^{-ip\eta} d\eta dp dq, \quad (1.70)$$

$$\langle q \rangle = \frac{1}{2\pi} \int (q\chi) e^{-ip\eta} d\eta dp dq = \frac{1}{2\pi} \int (\tilde{q}\chi) e^{-ip\eta} d\eta dp dq. \quad (1.71)$$

Na Eq.(1.70) fizemos uso do fato de que

$$\int \frac{\partial}{\partial \eta} \chi e^{-ip\eta} dp dq d\eta = 0. \quad (1.72)$$

Estes resultados permitem que possamos associar ao momento  $p$  o operador hermitiano

$$\tilde{p} = -i \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (1.73)$$

e à posição  $q$  o operador multiplicativo

$$\tilde{q} = q. \quad (1.74)$$

Segue que a uma função geral  $G(q, p)$  associamos o operador  $\tilde{G} \equiv G(\tilde{p}, \tilde{q})$ . Os operadores (1.73) e (1.74) atuam sobre a função de Wigner clássica  $\chi(q + \eta\ell/2, q - \eta\ell/2, t)$  definida em dois pontos no espaço- $(q, \eta)$ . Conseqüentemente, este fato nos induz a definir um ponto no *espaço de Wigner clássico* como  $Q = q + \eta\ell$  ou  $Q = q - \eta\ell$ , que chamamos de *ponto físico* a fim de o distinguirmos da noção de *ponto matemático*  $q$ . Como o operador  $\tilde{Q}$  associado a  $Q$  é idêntico a  $\tilde{q}$ , ao calcularmos

$$\left[ \tilde{Q}, \tilde{p} \right] \chi = (\tilde{Q}\tilde{p} - \tilde{p}\tilde{Q})\chi \quad (1.75)$$

achamos

$$\left[ \tilde{Q}, \tilde{p} \right] = 0 \quad (1.76)$$

que, por seu turno, leva a

$$\Delta Q \Delta p \geq 0, \quad (1.77)$$

onde  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ . Notando ainda que  $\Delta Q = \Delta q$ , temos

$$\Delta q \Delta p \geq 0 \quad (1.78)$$

na representação de Wigner. Portanto, todos os sistemas clássicos descritos pela equação de movimento (1.66) obedecem às relações de dispersão (ou incerteza) (1.77) ou (1.78). Se estivéssemos considerando o ponto matemático  $q$ , teríamos obtido  $[\hat{q}, \hat{p}] = 0$  e  $\Delta q \Delta p \geq 0$ . Resta-nos investigar para quais situações vale a expressão  $\Delta q \Delta p > 0$  e a igualdade  $\Delta q \Delta p = 0$ .

Quando  $\chi$  é fatorizável, i.e.,

$$\chi(q + \eta\ell/2, q - \eta\ell/2, t) = \phi^\dagger(q - \eta\ell/2, t)\phi(q + \eta\ell/2, t), \quad (1.79)$$

da Eq.(1.70) obtemos

$$\langle p \rangle = \int \phi^\dagger \left( \frac{\ell}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \phi dq \quad (1.80)$$

depois de expandirmos  $\phi^\dagger$  e  $\phi$  de acordo com

$$u(q \pm \frac{\eta\ell}{2}) = u(q) \pm \frac{\eta\ell}{2} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{1}{2!} \left( \frac{\eta\ell}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} \pm \frac{1}{3!} \left( \frac{\eta\ell}{2} \right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} + O(\eta^4) \quad (1.81)$$

e depois de usarmos a propriedade da função delta de Dirac  $\int g(x)\delta(x - y)dx = g(y)$ .

Assim, podemos associar a  $p$  o operador

$$\hat{p} = \frac{\ell}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (1.82)$$

e a  $q$  o operador

$$\hat{q} = q \quad (1.83)$$

que atuam sobre a função  $\phi$ . Segue imediatamente que

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\ell \quad (1.84)$$

e

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\ell}{2}. \quad (1.85)$$

Fazendo  $\ell = 0$  nesta Eq.(1.85), recuperamos a Eq.(1.78), além de fazer com que o ponto físico  $q \pm \eta\ell$  se reduza ao ponto matemático  $q$ . Portanto, com base na estrutura de operador apenas, deduzida acima, mostramos a existência de relações de incerteza para *todos* os sistemas clássicos (conservativos e não-conservativos) descritos pela Eq.(1.66),

na representação de Wigner, com  $\ell > 0$  exercendo o papel de um parâmetro geométrico variando continuamente.

Tomemos, como exemplo, os sistemas newtonianos conservativos para os quais  $f = -\partial V/\partial q$ , onde  $V = V(q, t)$  é o potencial escalar externo. A equação de Liouville é dada por

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial F}{\partial p} = 0. \quad (1.86)$$

e a equação de movimento para a função de Wigner é

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} \right] - [V(q_1, t) - V(q_2, t)] \chi = 0 \quad (1.87)$$

com

$$\ell^3 \ll 1. \quad (1.88)$$

A obtenção de (1.87) é feita usando

$$q_1 = q + \frac{\ell\eta}{2}; q_2 = q - \frac{\ell\eta}{2} \quad (1.89)$$

$$\frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2}; \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\ell}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q_1} - \frac{\partial}{\partial q_2} \right)$$

na Eq.(1.66);  $\chi$ , então, pode ser fatorada. Logo, a Eq.(1.87) pode ser obtida da equação

$$i\ell \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial q_1^2} - V(q_1, t)\phi = 0 \quad (1.90)$$

no ponto  $q_1$  e da sua complexo-conjugada no ponto  $q_2$ . Vale observar que a equivalência entre as Eqs.(1.87) e (1.86) somente existe para um conjunto restrito de soluções da Eq.(1.90), justamente aquelas que não são obtidas da superposição,  $\phi = \phi_1 + \phi_2$ , e aquelas que mantêm a positividade de  $F(p, q, t)$ . Ilustremos isto com um exemplo específico: consideremos um oscilador harmônico  $V(q) = m\omega^2 q^2/2$  com frequência  $\omega$ , as soluções da Eq.(1.90) (em um ponto genérico  $q$ ) são dadas por

$$\phi_n(q, t) = \frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} \left( \frac{m\omega}{\pi\ell} \right)^{1/4} e^{-m\omega q^2/2\ell} H_n(\sqrt{m\omega/\ell}q) e^{-i\epsilon_n t/\ell} \quad (1.91)$$

com

$$\epsilon_n = \ell\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (1.92)$$

e  $H_n$  os polinômios de Hermite. Para  $n = 0$ , a densidade de probabilidade (inversa da Eq.(1.64)) é

$$F(p, q, t) = \frac{1}{\pi\ell} e^{-m\omega q^2/\ell - p^2/\ell m\omega}, \quad (1.93)$$

ao passo que para  $n = 1$  temos

$$F(p, q, t) = -\frac{1}{\pi\ell} \left( 1 - \frac{2m\omega q^2}{\ell} - \frac{2p^2}{\ell m\omega} \right) e^{m\omega q^2/\ell - p^2/\ell m\omega} \quad (1.94)$$

que não possui significado físico porque não é definida positiva. Portanto, somente (1.93) é adequada como solução da Eq.(1.86).

Calculando o produto das incertezas  $\Delta q \Delta p$  usando (1.93), chegamos a

$$\Delta q \Delta p = \frac{\ell}{2}. \quad (1.95)$$

Embora  $\ell$  seja um parâmetro variável, esta Eq.(1.95) nos mostra que o estado do oscilador clássico é restrito por relações de incerteza entre *momentum* linear e posição, justificando, portanto, o sinal de igualdade na Eq.(1.85). Além disso, também é caracterizado por uma certa energia residual  $\epsilon_0 = \ell\omega/2$ . Este resultado está relacionado com a estrutura geométrica do espaço de Wigner, e é corroborado fisicamente pelo movimento browniano inerente a toda especificação real de um estado clássico por qualquer aparelho de medida [102]. Quando  $\ell \rightarrow 0$  na função  $F$  (1.93), obtemos o caso particular e pouco realístico onde o estado é determinado sem qualquer erro:  $\delta(q)\delta(p)$ . Em suma, para que haja compatibilidade entre as Eqs. (1.95), (1.85) e (1.78), re-escrevemos (1.77) ou (1.78) na forma mais geral (1.85).

Na representação de Wigner da mecânica clássica outros sistemas podem ser analisados. Por exemplo, o movimento de uma partícula neutra, com spin e dipolo magnético, em um campo magnético externo. Neste caso, é possível analisar classicamente os resultados de experimentos do tipo Stern-Gerlach e também experimentos envolvendo feixe molecular do tipo Rabi. Aqui, as partículas são tratadas como possuindo trajetória contínua e definida, bem como orientação contínua do vetor de spin [103]. Em suma, experimentos outrora tidos como essencialmente “quânticos” podem ser interpretados classicamente

fazendo-se uso da representação de Wigner. Dechoum e França [104] também estudam o movimento de um oscilador harmônico carregado submetido a campos eletromagnéticos estocásticos e a uma força de reação devido à radiação (*radiation reaction force*).

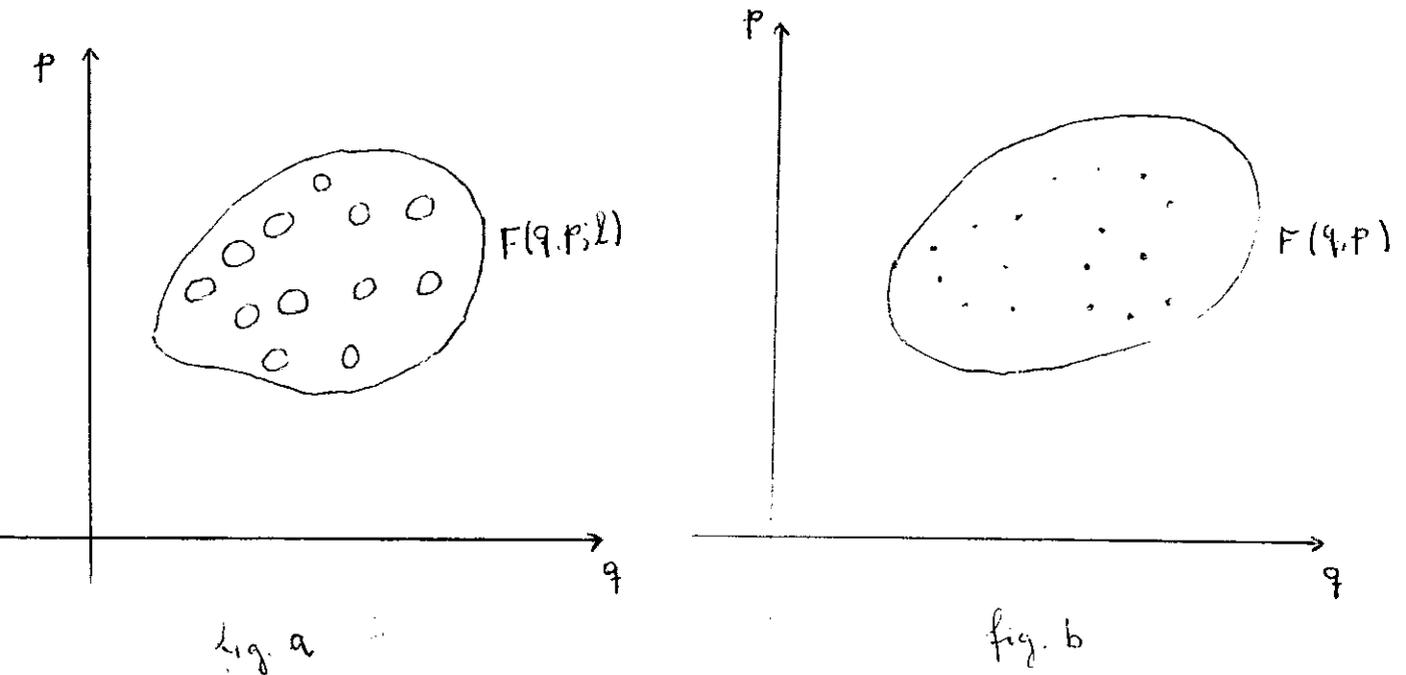
Uma característica importante da transformada de Fourier (1.64) é que sua inversa

$$F(p, q, t) = \frac{1}{2\pi} \int \chi e^{-ip\eta} d\eta \quad (1.96)$$

herda de  $\chi$  o parâmetro geométrico  $\ell$  (ver Eq.(1.93)) de tal modo que valha a expressão  $\Delta q \Delta p \geq \ell/2$ . Isto implica que  $F$  continua a ter um significado de *ensemble*, mas, de um modo generalizado. Notemos, também, que a inversa de (1.87), com  $\ell^3 \ll 1$ , leva a

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial F}{\partial p} - \frac{\ell^2}{24} \frac{\partial^3 V}{\partial q^3} \frac{\partial^3 F}{\partial p^3} = 0. \quad (1.97)$$

A equação de Liouville passa a possuir, na representação de Wigner, um termo de “correção” proporcional a  $\ell^2$ . Estes termos se anulam para  $\ell = 0$ . Portanto, o estado de um sistema clássico é agora determinado por  $F(p, q, t; \ell)$  que dá a probabilidade de o estado do sistema ser especificado por certas “células” que compõem o *ensemble* (fig.a), a área de cada “célula” sendo controlada por  $\ell$ :  $\int dpdq = \ell$ ; e não por pontos matemáticos (dimensão nula) (fig.b).



Além do aspecto operacional relacionado com a possibilidade de resolver aproximadamente a equação de Liouville, queremos defender o ponto de vista de que a representação de Wigner da mecânica clássica constitui o *locus* adequado para quantizar sistemas clássicos, porque, de um lado, parte diretamente das equações de movimento newtonianas, e por outro lado, dota a mecânica clássica de uma estrutura algébrica não-comutativa similar àquela da mecânica quântica, evitando assim todas as ambigüidades, inconsistências e falta de generalidade inerentes aos esquemas de quantização fundamentados em lagrangianas e hamiltonianas.

## Capítulo 2

# Mecânica Quântica

Neste capítulo, nosso objetivo é começar a visualizar uma resposta geral à seguinte questão: dado um sistema físico não-relativístico inicialmente descrito pelas equações de movimento da mecânica clássica, como descrevê-lo em termos da dinâmica quântica? Na Seção 2.1, apresentamos as primeiras tentativas feitas por Planck, Bohr, Sommerfeld, Einstein e outros, ao proporem regras *ad hoc* a fim de investigar a natureza não-clássica de certos sistemas físicos. No entanto, apenas com Heisenberg e Schrödinger é que surgem formulações mais bem fundamentadas visando superar e substituir tais regras de quantização. Para Heisenberg, quantiza-se um sistema escrevendo-se as equações de Newton usuais (números- $c$ ) em termos de operadores (números- $q$ ) (Seção 2.2), ao passo que o método de quantização de Schrödinger parte da equação de Hamilton-Jacobi (Seção 2.3). Na Seção 2.4, é discutida a quantização canônica ou quantização de Dirac que se baseia no formalismo hamiltoniano. O método de Feynman, fundamentado na existência de lagrangianas, é mostrado na Seção 2.5. Finalmente, na Seção 2.6 estudamos um processo de quantização, que chamamos de QUANTIZAÇÃO DINÂMICA, sem fazer qualquer alusão a hamiltonianas e lagrangianas e evitando a questão de ordenamento de operadores.

## 2.1 Quantização de Planck e Bohr

Os primeiros vislumbres de um mundo quântico foram tidos por Planck, em 1900, ao *postular* que, na emissão e/ou absorção de radiação em um corpo-negro, a energia devia ser concebida como uma quantidade discreta [105]. Com base nesta hipótese, Bohr em 1913 também *postulou* que o *momentum* angular associado com o movimento do elétron em torno do núcleo devia ser quantizado, ou seja, ser um múltiplo inteiro de  $\hbar$  (constante de Planck dividida por  $2\pi$ ) [106]. Wilson [107], Planck [108], Sommerfeld [109], Schwarzschild [110], Epstein [111] sintetizaram aqueles postulados de Bohr e Planck na seguinte regra *ad hoc* de quantização [112-114]: dada uma hamiltoniana  $H(q_i, p_i)$ , descrevendo um sistema físico movendo-se em um domínio limitado com  $N$  graus de liberdade ( $i = 1, \dots, N$ ), *postula-se* que as constantes de movimento  $I_i$ , e.g., o *momentum* angular, obedeçam à condição

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i dq_i = \nu_i \hbar, \quad (2.1)$$

onde cada integral é tomada ao longo da trajetória que o sistema *realmente* percorre durante um ciclo do movimento em termos da coordenada  $q_i$ . Estas trajetórias clássicas restritas pelas condições quânticas (2.1) são chamadas de *trajetórias quantizadas*. Os valores discretos da energia são obtidos quando  $E = H(I_i)$ .

Einstein [115] observou que a quantização baseada na regra (2.1) não é adequada para conectar as teorias clássica e quântica, porque ela está restrita a sistemas separáveis<sup>1</sup>. Além disso, matematicamente (2.1) não é bem-definida por não ser invariante sob transformações canônicas, i.e., as formas das trajetórias quantizadas dependiam das coordenadas usadas, embora fornecesse corretamente os níveis de energia. A fim de restaurar a consistência interna das condições de quantização, Einstein introduziu o invariante de Poincaré  $\sum_i p_i dq_i$ , de modo que (2.1) passou a ser

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} \sum_i p_i dq_i = \sum_i \nu_i \hbar, \quad (2.2)$$

---

<sup>1</sup>Sistemas para os quais a equação de Hamilton-Jacobi é separável.

tanto para sistemas separáveis quanto para não-separáveis. Agora as integrais são calculadas ao longo de curvas fechadas  $C_i$  no espaço das coordenadas, não necessariamente as trajetórias clássicas. Fisicamente, contudo, a Eq.(2.2) não é a expressão mais correta porque para concordar com os dados experimentais, a regra de quantização tem de ser modificada para incluir números quânticos semi-inteiros, i.e.,

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} \sum_i p_i dq^i = \sum_i \left(\nu_i + \frac{1}{2}\right) \hbar. \quad (2.3)$$

Vale lembrar que, de acordo com a análise de Einstein, somente os sistemas integráveis (não-caóticos) são quantizados seguindo as condições (2.2) e (2.3) [16,116].

Resumindo, a característica básica subjacente ao procedimento de quantização desenvolvido por Planck, Bohr, Sommerfeld e outros é partir, por analogia formal, do conceito de *trajetória* clássica, e calcular os *níveis de energia*. Atualmente, tal idéia permeia aqueles que investigam caos em mecânica quântica [117-118], posto que as condições de quantização (2.1-2.3) são deduzidas da equação de Schrödinger [16,119,120] por meio de um limite semi-clássico.

## 2.2 Quantização de Heisenberg

Não satisfeito com as regras (2.1-2.3) — aplicáveis a poucos sistemas físicos, introduzidas sem uma sólida justificativa teórica e fazendo uso de um conceito de trajetória puramente matemático — Heisenberg [121-123] propôs um método de quantização partindo das próprias equações de Newton

$$\frac{dp_i}{dt} = f(q_i, p_i, t) \Rightarrow \frac{d\hat{p}_i}{dt} = f(\hat{q}_i, \hat{p}_i, t), \quad (2.4)$$

postulando que no domínio quântico a posição  $q_i$  e o *momentum* físico  $p_i = mdq_i/dt$  devam ser representados, respectivamente, por operadores  $\hat{q}_i, \hat{p}_i$  obedecendo às relações de comutação Born-Jordan-Dirac [122-125]

$$\begin{aligned} [\hat{q}_i, \hat{q}_j] &= 0 = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \\ [\hat{q}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{i,j}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde  $[A, B] = AB - BA$  e  $\delta$  sendo o delta de Kronecker. Assim, a Eq.(2.5) substitui (2.1-2.3) e, juntamente com a equação  $d\hat{p}_i/dt = f(\hat{q}_i, \hat{p}_i, t)$ , permitem calcular os níveis de energia e outras grandezas físicas. Este método tem a vantagem de ser baseado nas equações de Newton, de modo que ele pode ser aplicado a processos estocásticos descritos pelas equações de Langevin [126,127]. Contudo, sua principal dificuldade (teórica) está relacionada com as ambigüidades que surgem do ordenamento dos operadores no cálculo de quantidades físicas  $A(\hat{q}_i, \hat{q}_j)$  [126]. Conceitualmente, o esquema de quantização de Heisenberg abandona conceitos clássicos e intuitivos, como o de trajetória, para se limitar a oferecer regras de cálculo de observáveis físicas.

## 2.3 Quantização de Schrödinger

A fim de desvendar a verdadeira natureza das condições quânticas (2.1-2.3), Schrödinger [114,128] propôs um método diferente de quantizar um sistema físico: parte-se da equação de Hamilton-Jacobi (Eq.(1.43)) e introduz-se a relação

$$S(q, t) = -i\ell \ln \psi(q, t), \quad (2.6)$$

$\ell$  tendo dimensão de ação e  $\psi$  sendo uma função complexa. Inserindo (2.6) na Eq.(1.43), constrói-se um funcional  $\mathcal{F}(\psi, \psi^\dagger)$  e supõe-se que a integral  $\mathcal{I}(\psi, \psi^\dagger) = \int \psi \psi^\dagger \mathcal{F} dq$  seja um extremo:  $\delta \mathcal{I} = 0$ . Deste problema variacional, que substitui as regras *ad hoc* de Bohr-Sommerfeld, e fazendo  $\ell \rightarrow \hbar$  chega-se à equação de Schrödinger. Usando este método, Schönberg [129] obteve equações de Schrödinger e de Dirac não-lineares a partir da generalização da equação de Hamilton-Jacobi para uma partícula carregada e submetida a potenciais arbitrários; enquanto que Razavy [95,96], Herrera *et al.* [79] e Pal [130] introduziram dissipação em mecânica quântica a partir de equações de Hamilton-Jacobi dissipativas<sup>2</sup>. Contudo, este procedimento de quantização é severamente criticado pelo próprio Schrödinger [128,131]:

---

<sup>2</sup>Como a equação de Hamilton-Jacobi pode ser construída a partir da hamiltoniana, tem de haver algum critério para selecionar funções hamiltonianas para efeito de uma quantização única. Tal critério existe para sistemas conservativos descritos por  $H = T + V = E$ , para o caso unidimensional apenas.

i) A relação entre  $S$  e  $\psi$  (2.6) é incompreensível (*unverständlich*). Na verdade, originalmente Schrödinger considerara  $S = \ell \ln \psi$ ,  $\psi$  sendo uma função *real*;

ii) A formulação da integral  $\mathcal{I}(\psi, \psi^\dagger) = \int \psi \psi^\dagger \mathcal{F} dq$  não é inteiramente desprovida de ambigüidades (*nicht ganz eindeutig*);

iii) Finalmente, é incompreensível (*unverständlich*) a própria existência do princípio variacional  $\delta\mathcal{I} = 0$ .

Com o intuito de superar estas dificuldades, Schrödinger resolveu abandonar seu método de quantização e tentou estabelecer uma fundamentação mais segura para sua equação fazendo uso da *analogia* hamiltoniana entre mecânica e óptica [114,131]. No entanto, vale notar que estes dois procedimentos não constituem uma dedução lógica da equação de Schrödinger a partir de princípios físicos mais profundos: esta equação deve ser tomada como um *postulado fundamental* da mecânica quântica. O que importa é o acordo de suas conseqüências com a experiência [112]. Por conseguinte, qualquer procura por um processo adequado de quantização, isto é, um procedimento para se obter equações de movimento quânticas partindo da dinâmica clássica, passa a ser considerado como um mero pseudo-problema. Infelizmente, este é o ponto de vista presente em todos os livros-textos.

## 2.4 Quantização de Dirac

De acordo com Dirac [132-134], para quantizar um sistema clássico é preciso um formalismo hamiltoniano e, de todas as possíveis hamiltonianas  $\mathcal{H}(q, \pi, t)$  que corretamente geram as equações de movimento, devemos selecionar uma função hamiltoniana a ser identificada com a energia total do sistema (*critério de Dirac*) [43,60,74,84,132, 135,136]:

$$H(\pi, x, t) = E(t). \quad (2.7)$$

---

Esta exigência torna a quantização de Schrödinger totalmente ambígua para sistemas dissipativos, visto que não existe um formalismo hamiltoniano único de sistemas não-conservativos (Seção 1.3).

Uma vez estabelecido este critério, usa-se o esquema de quantização canônica de Dirac <sup>3</sup> [120,133,134,137]

$$\pi \implies \hat{\pi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.8)$$

$$x \implies \hat{x} = x \quad (2.9)$$

$$E \implies \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.10)$$

e obtém-se, então, a equação de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \quad (2.11)$$

com  $\hat{H} = H(\hat{\pi}, \hat{x}, t)$  e  $\psi = \psi(x, t)$  uma função complexa. Notemos, ainda que esta prescrição (2.8-2.10) só funciona em coordenadas cartesianas [138]. Ou seja, a condição (2.7) não é suficiente para a quantização canônica de sistemas conservativos.

Algebricamente, a quantização de Dirac pode ser formulada substituindo-se o parêntesis de Poisson pelo comutador [122,125,132,133,139]

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial q} \frac{\partial A}{\partial p} \implies \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i\hbar} = \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{i\hbar}. \quad (2.12)$$

ou, em termos das equações de movimento,

$$\frac{dx}{dt} = \{x, H\} \implies \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{[\hat{x}, \hat{H}]}{i\hbar}, \quad (2.13)$$

$$\frac{d\pi}{dt} = \{\pi, H\} \implies \frac{d\hat{\pi}}{dt} = \frac{[\hat{\pi}, \hat{H}]}{i\hbar}. \quad (2.14)$$

Quando o critério de Dirac (2.7) não é obedecido, a aplicação das regras de quantização (2.8-2.10) ou (2.12-2.14) torna-se *inconsistente* para sistemas conservativos descritos por hamiltonianas não-equivalentes, i.e., hamiltonianas geradoras das mesmas equações de movimento que a função (2.7), mas não conectadas com esta por transformação canônica

---

<sup>3</sup>No Apêndice C, mostramos que este critério não é necessário nem suficiente, logo, o procedimento de quantização de Dirac (2.8-2.10) é inteiramente arbitrário.

[42,43,70,87,93,94,140-144]. Por exemplo, a quantização de sistemas físicos, tais como, uma partícula livre não-relativística [47,48,87,94,140,142], um oscilador harmônico isotrópico bidimensional [70,141], uma partícula em um campo magnético [42,143,144] e o átomo de hidrogênio [94] leva, em cada caso, a sistemas quânticos *fisicamente diferentes*.

Ademais, a quantização canônica de sistemas dissipativos, estudada por vários autores [42,47,48,50,51,53-55,58,60,65,66,70,73,75-78,80-83,95,135,136,143-155], não se apresenta como fisicamente confiável [62,67-69]: além das inconsistências e ambigüidades relacionadas com a Hamiltoniana de Bateman (1.34), diferentes estruturas hamiltonianas são construídas para tratar da dissipação classicamente [75-78,80-83]. Inclusive, no caso em que  $H$  é idêntica à energia do sistema [78,83], o critério de Dirac é insuficiente para a correta quantização de sistemas não-conservativos (ver Subseções 1.3.1 e 1.3.2). Como consequência desta não-unicidade, a função de onda  $\psi$  obtida, por exemplo, para um oscilador harmônico amortecido, é um mero artefato do processo de quantização adotado (ver Apêndice D)

Um modo de tentar salvar o procedimento de quantização de Dirac é acoplar um reservatório térmico (sistema A) ao sistema dissipativo (sistema B), de modo que A+B como um todo seja considerado como conservativo [145,156-158]. No entanto, a hamiltoniana não pode ser identificada com a energia total do sistema [158] e, portanto, esta abordagem não está livre de inconsistências físicas [159] quando são considerados modelos físicos mais gerais para descrever a interação entre o sistema dissipativo e o banho térmico [160].

Para concluir, ressaltamos que, como observado pelo próprio Dirac [133], o procedimento (2.8-2.10) ou (2.12-2.14) não é *matematicamente* bem definido devido ao problema de ordenamento de operadores na transição de função clássica  $A(p, q)$  a uma função quântica  $\hat{A} = A(\hat{p}, \hat{q})$  [133,161-166] e também devido ao fato de privilegiar as coordenadas cartesianas [138]. Além disso, conceitualmente, a quantização de Dirac não esclarece o significado físico da função  $\psi$ :  $\psi$  aparece *ex nihilo*, simplesmente é postulada.

## 2.5 Quantização de Feynman

Em vez de procurar hamiltonianas, Feynman [167] partiu do formalismo lagrangiano da mecânica clássica para quantizar um dado sistema físico. Para isto, seguindo as idéias de Dirac [167], ele introduziu o propagador  $K$  na equação

$$\Omega(x, t) = \int K(x, t; x', t') \Omega(x', t') d[x'] \quad (2.15)$$

com sendo proporcional a  $e^{iS/\hbar}$ , onde  $S = \int_{t'}^t \mathcal{L} dt$  é a ação clássica e  $\mathcal{L}$  uma lagrangiana (quadrática nas velocidades) do sistema. Na Eq.(2.15)  $d[x']$  é o elemento de volume em  $x'$ . Seguindo um determinado processo de limite no cálculo de  $K$ , Feynman foi capaz de obter a equação de Schrödinger para a função de onda  $\Omega = \psi$ .

Foi mencionado na Subseção 1.3.2 que as lagrangianas podem ser de dois tipos: aquelas diferindo por uma derivada total no tempo de uma função  $\phi(x, t)$ , chamadas de lagrangianas equivalentes, e aquelas que não satisfazem tal condição, chamadas lagrangianas não-equivalentes. O efeito das lagrangianas equivalentes conservativas <sup>4</sup> na quantização é apenas alterar a função de onda por um fator de fase [84,168], ao passo que a partir das não-equivalentes a quantização dá origem a sistemas quânticos inteiramente diferentes. Aqui urge, portanto, a necessidade de um critério para selecionar estas lagrangianas, a serem usadas no método de quantização de Feynman.

Apesar de funcionar como uma boa ferramenta computacional, o formalismo de Feynman sofre de algumas ambigüidades internas que o tornam inadequado para conectar a teoria clássica à teoria quântica:

- ( $\alpha$ ) Dificuldades matemáticas surgem na definição geral da integral de Feynman [167,169];
- ( $\beta$ ) Existe arbitrariedade na escolha do propagador  $K$ : o método de Feynman não fornece a quantização correta de um pêndulo duplo [170];
- ( $\gamma$ ) Outra fonte de ambigüidade jaz na escolha do ponto onde o propagador deve ser calculado para diferenças infinitesimais no tempo [167,171]. Esta questão do ponto médio

---

<sup>4</sup>Ou seja, aquelas que geram um fluxo hamiltoniano conservativo.

(*midpoint*) corresponde ao problema de ordenamento de operadores na quantização de Dirac (e de Heisenberg) [172-177];

( $\delta$ ) O fato de a lagrangiana ser quadrática nas velocidades é uma restrição muito severa [134];

( $\epsilon$ ) O critério de Dirac (Eq.(2.7)) pode ser transladado ao formalismo de Feynman, de tal modo que

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x, t) + \dot{x} \frac{d\phi(x)}{dx} \quad (2.16)$$

passa a ser a lagrangiana correspondente à hamiltoniana (2.7) [135,169], o que implica que lagrangianas não-equivalentes conservativas são inadequadas para quantização. Como exemplo disto, temos a lagrangiana de Bateman, que além de ser erroneamente interpretada como a lagrangiana de um sistema dissipativo, é usada amplamente na literatura [64,66,178-183] para a construção de propagadores quânticos.

( $\zeta$ ) Inconsistências e ambigüidades são mais evidentes no método de Feynman quando sistemas não-conservativos são considerados. Foi enfatizado na Seção 1.3.2 que não existe uma formulação lagrangiana única de sistemas dissipativos, e.g., dentro da abordagem de Herrera *et al.* [79], onde a lagrangiana sempre gera uma hamiltoniana igual à energia total, a quantização de Feynman de um oscilador harmônico amortecido fornece resultados não-físicos [185], de modo que o critério (2.7) torna-se insuficiente para sistemas dissipativos. Tal sistema também é quantizado a partir das lagrangianas de Dekker [80-82], de Tarasov [78] e de Caldirola [75-77]. Além disso, Razavy [96] nota que a importante propriedade da aditividade da ação é violada pela dissipação, enquanto que Yeon *et al.*[184] usam a quantização de Feynman a partir de uma lagrangiana, que gera uma hamiltoniana diferente da energia, por meio de uma transformação canônica dependente do tempo sobre  $H = T + V = E$  (ver Apêndice C).

## 2.6 Quantização Dinâmica

Os métodos de quantização elaborados por Dirac, Schrödinger e Feynman funcionam sem ambigüidade para um conjunto reduzido de sistemas físicos: os sistemas conservativos descritos pela hamiltoniana  $\mathcal{H}(\pi, x, t) = E(t)$  ou correspondentemente, pela equação de Hamilton-Jacobi  $\mathcal{H}(\partial S/\partial x, x, t) = -\partial S/\partial t$  ou pela lagrangiana  $\mathcal{L}'(\pi, x, t) = \mathcal{L}(\pi, x, t) + \dot{x}d\phi/dx$ . No entanto, devido aos problemas relacionados com a consistência interna destes métodos (ordenamento de operadores, limitação a coordenadas cartesianas, ambigüidades na escolha do propagador e do ponto onde este deve ser calculado), não existe nenhuma justificativa teórica que fundamente a adequabilidade destes procedimentos usuais de passar da mecânica clássica à mecânica quântica. Tal crítica também se estende à quantização de Heisenberg, embora seja baseado na equação de Newton. Em suma, o único critério que apóia a aceitabilidade destes métodos é o pragmático: *eles simplesmente funcionam* [122,126,133,164,165].

Recentemente nas Refs.[101,103,104,186-188], foi desenvolvido um procedimento alternativo de quantizar baseado essencialmente nas equações de movimento independentemente da existência de hamiltonianas e lagrangianas. Especificamente, generalizamos a abordagem da Ref.[188] para sistemas não-conservativos. Com base neste novo esquema, que chamamos de *QUANTIZAÇÃO DINÂMICA*, mostramos no Apêndice C que o critério de Dirac (Eq.2.7), i.e., a exigência de que a hamiltoniana clássica seja identificada com a energia total, não é necessário para haver quantização. O importante é o teorema de Liouville, que pode ser provado para qualquer hamiltoniana outra que a usual  $\mathcal{H} = E(t)$ . Ainda neste apêndice, comparamos nosso método com o de Feynman, evitando as ambigüidades inerentes a este último. A consistência interna deste esquema é também enfatizada pela quantização em coordenadas generalizadas [188] e ao notarmos que todo o problema relacionado com o ordenamento de operadores é evitado, já que as duas mecânicas são colocadas na mesma linguagem de operadores.

A presente seção visa apresentar as principais características da quantização dinâmica,

tais como, a estrutura de operador e a equação de von Neumann generalizada.

( $\alpha$ ) *Descrição em termos da função de von Neumann  $\rho$*

Vamos supor que a descrição teórica da realidade física seja fundamentada no fato de um sistema estar sempre em interação com o meio que o circunda. Nosso modelo paradigmático é do movimento tipo browniano de um dado sistema. Um sistema isolado se configura apenas como um caso particular e pouco realístico.

Consideremos uma partícula com massa  $m$ , caracterizada por uma posição  $q$  e um *momentum* linear  $p = mdq/dt$ , imersa em um reservatório cuja temperatura de equilíbrio é  $T$ . O movimento unidimensional desta partícula é governado pelas equações de Newton generalizadas ou equações de Langevin (ver Apêndices A e B)

$$\begin{aligned}\dot{p} &= f_1 + f_2 + f_3 + f_4 \\ \dot{q} &= \frac{1}{m}p,\end{aligned}\tag{2.17}$$

sendo  $f_1 = -\partial V/\partial q$  uma força derivada de um potencial escalar externo  $V = V(q, t)$ , e

$$f_2 = -2\gamma \left[ m\dot{q}^k + \frac{1}{m} \frac{\partial Z(q, t)}{\partial q} \right]\tag{2.18}$$

uma força de atrito proporcional a potências da velocidade  $\dot{q}$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) e uma força proporcional à normal  $N = \partial Z/\partial q$  entre as superfícies em contato independente de  $\dot{q}^k$ . Na Eq.(2.18),  $2\gamma$  é o coeficiente de atrito.  $f_3 = \partial V_R/\partial q$  e  $f_4 = f(t)$  são forças devido ao reservatório e  $V_R(q, t)$  um potencial aleatório geral. Estas forças estocásticas dão origem a flutuações no movimento da partícula.

Supondo que a partícula segue uma evolução markoviana, i.e., o termo dissipativo em (2.18) não contém efeitos de memória, e que a força flutuante  $f(t)$  tenha as seguintes propriedades estatísticas

$$\langle f(t) \rangle = 0,\tag{2.19}$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 4m\gamma k_B T \delta(t - t'),\tag{2.20}$$

onde  $\langle \dots \rangle$  denota a média tomada sobre o processo estocástico,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $\delta$  a função delta de Dirac, a Eq.(2.17) passa a ser

$$\begin{aligned} dp &= - \left[ \frac{\partial V}{\partial q} + \frac{2\gamma}{M} p^k + \frac{2\gamma}{m} \frac{\partial Z}{\partial q} + \frac{\partial V_R}{\partial q} \right] dt + (4m\gamma k_B T)^{1/2} dW(t) \\ dq &= \frac{1}{m} p dt, \end{aligned} \quad (2.21)$$

com  $M = m^{k-1}$  e sendo  $dW(t) = (4m\gamma k_B T)^{-1/2} F(t) dt$  o processo de Wiener com  $\langle dW(t) \rangle = 0$  e  $\langle dW(t) dW(t') \rangle = \delta(t - t') dt$ . Assim, a partícula descrita pelas equações de Langevin (2.21) realiza um processo estocástico do tipo browniano.

A equação de Fokker-Planck correspondente às Eqs.(2.21) é dada por (ver Apêndices A e B)

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \left[ \frac{2\gamma}{M} p^k + \frac{\partial U}{\partial q} \right] \frac{\partial F}{\partial p} - \frac{2\gamma}{M} k p^{k-1} F - 2\gamma m k_B T \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} = 0, \quad (2.22)$$

onde  $U = V + V_R + (2\gamma/m)Z$  e  $F = F(p, q, t) \geq 0$  a densidade de probabilidade. Com vistas à representação de Wigner introduzida na Seção 1.5, escolhemos como condição inicial a função  $F(p, q, t = 0) = (1/\pi\ell) e^{-(\alpha/\ell)(q-q')^2} e^{-(\beta/\ell)(p-p')^2}$ , ( $\alpha\beta = 1, p' = p(t = 0), q' = q(t = 0)$ ), que se reduz a  $F(p, q, t = 0) = \delta(p - p')\delta(q - q')$  quando  $\ell \rightarrow 0$ .

Inserindo agora em (2.22) a transformada de Fourier

$$\chi(q + \frac{\ell\eta}{2}, q - \frac{\ell\eta}{2}, t) = \int F e^{ip\eta} dp, \quad (2.23)$$

com  $\ell$  e  $\eta$  tendo dimensões de ação e  $(\text{momentum linear})^{-1}$ , respectivamente, obtemos a equação de evolução na representação de Wigner da mecânica clássica:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} - \frac{i}{m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \eta \partial q} + i\eta \frac{\partial U}{\partial q} \chi + i^{1-k} \frac{2\gamma}{M} \eta \frac{\partial^k \chi}{\partial \eta^k} + 2\gamma m k_B T \eta^2 \chi = 0. \quad (2.24)$$

Notando que  $\ell^3 \ll 1$ , mudando as variáveis

$$q_1 = q + \frac{\ell\eta}{2} \quad ; \quad q_2 = q - \frac{\ell\eta}{2}, \quad (2.25)$$

a Eq.(2.24) lê-se

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} \right] - [U(q_1, t) - U(q_2, t) + O(q_1, q_2, t)] \chi + \mathcal{I}\chi = 0, \quad (2.26)$$

com a condição inicial dada por

$$\chi(q_1, q_2, t = 0) = \left( \frac{\alpha}{\pi \ell} \right)^{1/2} e^{-(\alpha/\ell)(\frac{q_1+q_2}{2} - \frac{q'_1+q'_2}{2})^2} e^{-(\ell/4\beta)(\frac{q_1-q_2}{\ell})^2 + ip'(\frac{q'_1-q'_2}{\ell})} \quad (2.27)$$

e

$$O(q_1, q_2, t) = - \sum_{n=3,5,7,\dots}^{\infty} \frac{2}{n!} \left( \frac{q_1 - q_2}{2} \right)^n \left( \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^n U(q_1, q_2, t) \rightarrow 0, \quad (2.28)$$

$$\mathcal{I} = \frac{2\gamma}{M} i^{2-k} (q_1 - q_2) \left( \frac{\ell}{2} \right)^k \left( \frac{\partial}{\partial q_1} - \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^k + \frac{2\gamma i m k_B T}{\ell} (q_1 - q_2)^2. \quad (2.29)$$

A inversa de (2.23), com  $\ell^3 \ll 1$ , leva à seguinte equação de Fokker-Planck modificada

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \left[ \frac{2\gamma}{M} p^k + \frac{\partial U}{\partial q} \right] \frac{\partial F}{\partial p} - \frac{2\gamma}{M} k p^{k-1} F - 2\gamma m k_B T \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} + \frac{\ell^2}{24} \frac{\partial^3 U}{\partial q^3} \frac{\partial^3 F}{\partial p^3} = 0, \quad (2.30)$$

com  $k$  podendo assumir apenas os valores  $k = 1, 2$ .

Definimos um processo de quantização ao levarmos em consideração o limite quântico

$$\ell \rightarrow \hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad (2.31)$$

de modo que a Eq.(2.26) torna-se a equação quântica de von Neumann

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] - [U(q_1, t) - U(q_2, t)] \rho + \frac{2\gamma}{M} i^{2-k} (q_1 - q_2) \left( \frac{\hbar}{2} \right)^k \left( \frac{\partial}{\partial q_1} - \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^k \rho + \frac{2\gamma i m k_B T}{\hbar} (q_1 - q_2)^2 \rho = 0 \quad (2.32)$$

com a seguinte condição inicial

$$\rho(q_1, q_2, t = 0) = \left( \frac{\alpha}{\pi \hbar} \right)^{1/2} e^{-(\alpha/\hbar) \left( \frac{q_1+q_2}{2} - \frac{q'_1+q'_2}{2} \right)^2} \times \left[ 1 + \frac{ip'}{\hbar} (q_1 - q_2) - \left( \frac{\hbar}{4\beta} + \frac{p'^2}{2} \right) \left( \frac{q_1 - q_2}{\hbar} \right)^2 \right]. \quad (2.33)$$

Fisicamente, além de (2.31) estabelecer a natureza quântica dos fenômenos físicos, ela implica que  $\ell > \hbar$ , i.e., o domínio clássico é caracterizado quando a ação associada com um dado sistema não é da ordem da constante de Planck. Vale notar ainda que classicamente existe a restrição  $\ell^3 \ll 1$ ; tal vínculo não existe sobre  $\hbar$  no domínio quântico.

Com a solução de (2.32), escrevemos (ver Eq.(1.69))

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2\pi} \int \rho\left(q + \frac{\hbar\eta}{2}, q - \frac{\hbar\eta}{2}, t\right) A(p, q, t) e^{-i p \eta} d\eta dp dq \quad (2.34)$$

que, conseqüentemente, dá os operadores <sup>5</sup>

$$\tilde{p} = -i \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (2.35)$$

$$\tilde{q} = q \quad (2.36)$$

atuando sobre  $\rho$ . Vale também a relação de comutação

$$[\tilde{q}^*, \tilde{p}] = 0, \quad (2.37)$$

onde  $q^* = q + \eta\ell$  ou  $q^* = q - \eta\ell$ , que leva às relações de incerteza

$$\Delta q^* \Delta p \geq 0 \quad (2.38)$$

ou

$$\Delta q \Delta p \geq 0. \quad (2.39)$$

Com vistas na Eq.(1.85), desconsideramos a relação  $\Delta q \Delta p = 0$ .

Para o caso em que a força de atrito é linear, i.e., para  $k = 1$  e  $U \equiv V(q, t)$ , obtemos de (2.32) a equação

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] - [V(q_1, t) - V(q_2, t)] \rho + \gamma \hbar (q_1 - q_2) \left( \frac{\partial \rho}{\partial q_1} - \frac{\partial \rho}{\partial q_2} \right) + \frac{2\gamma m k_B T}{\hbar} (q_1 - q_2)^2 \rho = 0 \quad (2.40)$$

que é formalmente similar à equação de Caldeira-Leggett [157] obtida seguindo o método de quantização de Feynman. A Eq.(2.40) possui as seguintes características:

(i) Esta equação mestra não tem a forma de Lindblad [189]. Argumenta-se contra esta Eq.(2.40) porque esta inconsistência matemática implica que  $\rho$  pode ter valores negativos

<sup>5</sup>Na Ref.[188] a construção destes operadores é obtida usando-se um procedimento de limite  $\eta \rightarrow 0$ .

o que dá origem a resultados fisicamente indesejáveis [190-196]. No entanto, vale observar que a mera consistência matemática não basta para assegurar que a equação do tipo Lindblad seja fisicamente aceitável [193,195,197-202]. Isto é, exigir a positividade de  $\rho$  não parece constituir a questão principal.

(ii) A condição inicial (2.33), por exemplo, acopla partícula e o ambiente, desde que as coordenadas do reservatório sejam dadas por  $Q'_{eq} = (q_1 + q_2)/2$  no equilíbrio térmico em  $t = 0$  [195,203]. Além disso, a Eq.(2.33) não representa um estado puro ( $\rho^2 \neq \rho$ ) e não é redutível a função de onda ( $\rho \neq \psi^\dagger\psi$ ). Estas três propriedades inerentes a nossa abordagem podem contribuir para evitar resultados não-físicos associados com  $\rho$ . Na teoria de Caldeira-Leggett a dedução de (2.33) é somente obtida supondo que partícula e meio estão inicialmente não correlacionados. Esta hipótese é não-realística e leva a resultados não-físicos [193,195,198,203-207].

(iii) O meio é sempre tratado classicamente, apenas o movimento da partícula é de fato quantizado <sup>6</sup>. Portanto, não precisamos distinguir regimes de alta e baixa temperatura, ao passo que segundo o método de Caldeira-Leggett o reservatório térmico é tratado classicamente e a equação mestra deles é *somente* válida no domínio semi-clássico da mecânica clássica caracterizado por temperaturas altas [157,208]. De acordo com Polykronakos e Tzani [160], a natureza quântica do reservatório pode ser responsável pela divergência da quantidade  $\langle q^4 \rangle$ .

(iv) Para ilustrar uma aplicação da Eq.(2.33), consideremos um modelo simples de uma partícula onde o termo dominante é o de difusão. Assim, obtemos a seguinte solução

$$\rho(q_1, q_2, t) = \rho(q_1, q_2, t = 0)e^{-(Dt/\hbar^2)(q_1 - q_2)^2},$$

com  $D = 2\gamma m \kappa_B T$  e  $\rho(q_1, q_2, t = 0)$  dado por (2.33). Esta equação dá

$$(\Delta q)^2 = \frac{\hbar}{2\alpha}$$

---

<sup>6</sup>Pode-se argumentar que poderíamos também quantizar os graus de liberdade do banho térmico. No entanto, preferimos explorar a hipótese da classicalidade do meio a fim de fazermos futuras conexões com o problema da medição em mecânica quântica, onde o aparelho de medida, que pode ser modelado por um reservatório, é tratado classicamente.

$$(\Delta p)^2 = 2Dt + \frac{\hbar}{2\beta}.$$

Tais resultados se reduzem aos clássicos quando  $\hbar \rightarrow 0$ .

( $\beta$ ) *Descrição em termos de função de onda  $\psi$*

Vale notar que a Eq.(2.40) é irreduzível a alguma equação de Schrödinger, isto é, é impossível uma descrição de uma partícula browniana em termos de função de onda. No entanto, se desprezarmos a influência do meio sobre a partícula, chegamos à seguinte equação aproximada

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] - [U(q_1, t) - U(q_2, t)] \rho = 0 \quad (2.41)$$

que pode ser reduzida, fazendo  $\rho = \psi^\dagger(q_2)\psi(q_1)$ , a

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_1^2} - [V(q_1, t) + V_R(q_1, t)] \psi + \frac{i\hbar\gamma}{m} \ln \left( \frac{\psi}{\psi^\dagger} \right) \psi = 0 \quad (2.42)$$

no ponto  $q_1$  e sua complexo-conjugada no ponto  $q_2$ . A condição inicial associada a (2.42) é dada por  $\psi(q_1, t=0) = \delta(q_1 - Q'_{eq})$ . Usamos  $U = V + (2\gamma/m)Z + V_R$  e  $\psi = (\rho)^{1/2} \exp(i\hbar Z)$ .

A fim de elucidarmos o verdadeiro significado físico da Eq.(2.42), apresentamos as várias maneiras de deduzi-la. Empregando o *método de quantização de Heisenberg* diretamente sobre a equação de Langevin clássica, que descreve uma partícula browniana em contato com um reservatório térmico, Ford *et al.* [126] obtiveram a chamada equação de Heisenberg-Langevin. Kostin [209], *supondo* que esta partícula browniana possui uma função de onda, foi capaz de associar a ela a equação de Schrödinger-Langevin (2.42). Mais recentemente, contudo, Razavy [210] mostrou que o procedimento de Kostin é válido apenas se as forças conservativas forem lineares. Isto implica que não é sempre garantido que a equação originalmente obtida por Kostin descreva realmente uma partícula browniana. Skagerstam [211] e Yasue [212] também deduziram a Eq.(2.42), usando desta vez as hipóteses da *quantização estocástica de Nelson* [213]. Apesar disso, não é claro nesta abordagem até que ponto a função de onda relacionada à partícula browniana passa a

ser um mero artefato das hipóteses consideradas. Razavy [95,96], modificando arbitrariamente a equação de Hamilton-Jacobi para sistemas dissipativos e usando o *método de quantização de Schrödinger*, chegou também à Eq.(2.42). Herrera *et al.* [79] mostraram que a equação de Razavy-Hamilton-Jacobi pode ser deduzida de um princípio variacional. No entanto, Srisvastava *et al.* [185] baseando-se neste princípio variacional e quantizando via o *método de Feynman* chegaram a resultados não-físicos para o oscilador harmônico linearmente amortecido. Já segundo nossa abordagem, a equação de Schrödinger-Langevin não-linear (2.42) é na verdade uma descrição aproximada de um sistema peculiar: um sistema conservativo cuja força é proporcional à uma força normal  $\partial Z/\partial q$  entre a superfície da partícula e a do meio. Tal força não gera dissipação. Portanto, não é problemático para nós que soluções de (2.42) pareçam ter algumas propriedades esquisitas [214].

Agora, realizando a transformação que não preserva a área no espaço de fase

$$P = e^{2\gamma t}p; Q = q, \quad (2.43)$$

a equação de Fokker-Planck (2.22) torna-se para o caso  $k = 1$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{P}{m}e^{-2\gamma t}\frac{\partial f}{\partial q} - e^{2\gamma t}\frac{\partial U}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial P} - 4\gamma f - 2\gamma P\frac{\partial f}{\partial P} - 2\gamma mk_BTe^{4\gamma t}\frac{\partial^2 f}{\partial P^2} = 0, \quad (2.44)$$

onde  $f \equiv f(P, q, t) = e^{2\gamma t}F$ ; substituindo a função de Wigner clássica

$$\chi(q_1, q_2, t) = \int f(P, q, t)e^{iP\xi}dP, \quad (2.45)$$

com  $q_1 = q + \ell\xi/2$  e  $q_2 = q - \ell\xi/2$ , na Eq.(2.44) e quantizando via Eq.(2.31) chegamos a ( $q_1 - q_2 \ll 1$ ):

$$i\hbar\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}e^{-2\gamma t}\left[\frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2}\right] - e^{2\gamma t}[U(q_1, t) - U(q_2, t)]\rho + 2\gamma i\hbar\rho = 0 \quad (2.46)$$

que é redutível a

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + e^{-2\gamma t}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_1^2} - e^{2\gamma t}U(q_1, t)\psi + \gamma i\hbar\psi = 0 \quad (2.47)$$

e sua complexo-conjugada no ponto  $q_2$ . Se tivéssemos introduzido a transformação que preserva a área

$$P = e^{2\gamma t}p; Q = e^{-2\gamma t}q \quad (2.48)$$

em vez de (2.43), teríamos obtido a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial f'}{\partial t} + \frac{P}{m} e^{-4\gamma t} \frac{\partial f'}{\partial Q} - 2\gamma \frac{\partial V}{\partial Q} \frac{\partial f'}{\partial P} - 2\gamma f' - 2\gamma P \frac{\partial f'}{\partial P} - 2\gamma m k_B T e^{4\gamma t} \frac{\partial^2 f'}{\partial P^2} = 0, \quad (2.49)$$

com  $f' \equiv f'(P, Q, t) = F(p, q, t)$  and  $V = V(Q, t)$ . Usando

$$\chi'(Q + \frac{\ell\xi}{2}, Q - \frac{\ell\xi}{2}, t) = \int f'(P, Q, t) e^{iP\xi} dP, \quad (2.50)$$

definindo novas variáveis  $Q_1 = Q + \ell\xi/2$  e  $Q_2 = Q - \ell\xi/2$ . quantizando e em seguida considerando  $Q_1 - Q_2 \ll 1$ , obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} e^{-4\gamma t} \left[ \frac{\partial^2 \rho'}{\partial Q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho'}{\partial Q_2^2} \right] - [V(Q_1, t) - V(Q_2, t)] \rho' = 0 \quad (2.51)$$

que se reduz a

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} + e^{-4\gamma t} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi'}{\partial Q_j^2} - V(Q_j, t) \psi' = 0. (j = 1, 2) \quad (2.52)$$

As equações (2.47) e (2.52) são equações do tipo Caldirola- Kanai [50,75] que descrevem *aproximadamente* dissipação em mecânica quântica. Aqui, a dissipação é introduzida *cinematicamente* por meio das transformações (2.43) e (2.48).

Quando é possível descrever um sistema quântico em termos de função de onda, i.e., quando a função de von Neumann é fatorada  $\rho = \psi^\dagger \psi = \psi^\dagger(q - \hbar\eta/2) \psi(q + \hbar\eta/2)$ , da Eq.(2.34) obtemos

$$\langle p \rangle = \int \psi^\dagger \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi dq \quad (2.53)$$

e

$$\langle q \rangle = \int \psi^\dagger q \psi dq, \quad (2.54)$$

onde usamos a propriedade da função  $\delta$  de Dirac  $\int g(n) \delta(n) dn = g(0)$  e a expansão de Taylor

$$\psi(q \pm \frac{\eta\hbar}{2}) = \psi(q) \pm \frac{\eta\hbar}{2} \frac{\partial \psi}{\partial q} + \frac{1}{2!} \left( \frac{\eta\hbar}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} \pm \frac{1}{3!} \left( \frac{\eta\hbar}{2} \right)^3 \frac{\partial^3 \psi}{\partial q^3} + O(\eta^4). \quad (2.55)$$

Correspondente à variável física  $p$  existe o operador

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (2.56)$$

e à variável  $q$  o operador multiplicativo

$$\hat{q} = q. \quad (2.57)$$

Estes operadores atuam sobre  $\psi$ . Segue, então, que

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.58)$$

e também

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.59)$$

Este resultado corrobora nosso procedimento de desprezar  $\Delta q \Delta p = 0$  em (2.39).

Uma vez obtidas as expressões (2.53) e (2.54), resolvemos as Eqs.(2.47) e (2.52) para o caso de um potencial harmônico  $U \equiv V = m\omega^2 q^2/2$  com  $V_R, Z = 0$ . A Eq.(2.47) então fornece em um ponto genérico  $q$  as soluções

$$\psi_n = \left( \frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2} e^{-(\frac{\gamma}{2} + \frac{i\epsilon_n}{\hbar})t} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 + \frac{i m \gamma}{\hbar})\xi^2} H_n(\alpha\xi), \quad (2.60)$$

onde  $\xi = qe^{\gamma t}$ ,  $\epsilon_n = (n + (1/2))\hbar\Omega$ ,  $\alpha = (m\Omega/\hbar)^{1/2}$ ,  $\Omega^2 = (\omega^2 - \gamma^2)$  é a frequência amortecida, e  $H_n(\alpha\xi)$  denota os polinômios de Hermite. Assim, achamos

$$\langle E(p, q) \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega^2}{2\Omega} (1 + e^{-4\gamma t}) \quad (2.61)$$

e

$$\Delta q \Delta p = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{2\Omega} e^{-2\gamma t} \quad (2.62)$$

como sendo os valores médios da energia  $E = p^2/2m + m\omega^2 q^2/2$  e a relação de incerteza, respectivamente. Enquanto que em termos de  $Q, P$ , temos

$$\langle E(P, Q) \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega^2}{2\Omega} (1 + e^{-4\gamma t}) \quad (2.63)$$

e

$$\Delta Q \Delta P = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{2\Omega}. \quad (2.64)$$

Por outro lado, as soluções da Eq.(2.52) são dadas por

$$\psi'_n = \left( \frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2} e^{(\gamma + \frac{i\epsilon_n}{\hbar})t} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 + \frac{2im\gamma}{\hbar})Q^2 e^{4\gamma t}} H_n(\alpha Q e^{2\gamma t}), \quad (2.65)$$

que fornecem

$$\langle E(p, q) \rangle = \langle E(P, Q) \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega^2}{\tilde{\Omega}} \quad (2.66)$$

e

$$\Delta q \Delta p = \Delta Q \Delta P = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{\tilde{\Omega}} \quad (2.67)$$

com  $\tilde{\Omega}^2 = \omega^2 - 4\gamma^2$ .

No Apêndice D, estendemos a aplicabilidade do método de quantização dinâmica investigado neste capítulo aos sistemas: partícula linearmente amortecida, sistema de Lotka-Volterra, sistema de Duffing e sistema de van der Pol.

Para terminar, queremos enfatizar que a quantização dinâmica revela que a função de von Neumann (ou matriz densidade) é o objeto matemático fundamental da mecânica quântica. A equação de Schrödinger é *derivada* da equação de von Neumann somente para sistemas sem dissipação e flutuação (sistemas isolados) (ver Apêndices C e D).

# Capítulo 3

## Limite Clássico da Dinâmica

### Quântica

No capítulo anterior, estudamos um modo alternativo de quantizar um dado sistema físico descrito pelas equações de movimento da mecânica clássica. No presente capítulo, queremos verificar a consistência lógica de todo o processo de quantização ao investigarmos a transição da mecânica quântica à clássica. Na Seção 3.1, discutimos os vários critérios de limite clássico, i.e., quando e como um sistema quântico passa a ser descrito pelas leis clássicas. Na Seção 3.2, definimos um NOVO processo de limite clássico tomando  $\hbar \rightarrow 0$  sobre a dinâmica quântica. Aplicamos tal método a várias equações conservativas e não-conservativas.

### 3.1 O Problema do Limite Clássico

A lei de distribuição de energia de Planck na frequência  $\nu$  [105]

$$u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

(onde  $c$ ,  $k_B$  e  $T$  são respectivamente a velocidade da luz, constante de Boltzmann, e a temperatura) e a razão entre a frequência de revolução do elétron antes e depois da emissão de energia [106]

$$\frac{\omega_n}{\omega_{n-1}} = \frac{(n-1)^3}{n^3}$$

achadas no começo da teoria quântica já colocavam em evidência questões relacionadas com a transição *física quântica*  $\rightarrow$  *física clássica*:

(i) *Qual o critério apropriado e geral que deve caracterizar o limite clássico da mecânica quântica: constante de Planck tendendo a zero ( $h \rightarrow 0$ ), limite de temperatura alta ( $T \rightarrow \infty$ ) ou número quântico alto ( $n \rightarrow \infty$ )?* Visto que a constante de Planck é uma quantidade cujo valor é fixo, o limite  $h \rightarrow 0$  é considerado como fisicamente desprovido de sentido [5,215-220]. Conjectura-se também que é o caso de temperatura alta ( $T \rightarrow \infty$ ) o responsável pelo limite clássico [221]. Heller [222] enfatiza a importância de se calcular o limite  $\hbar (= h/2\pi) \rightarrow 0$  para situações de temperatura baixa, enquanto Caldeira e Leggett [157] e Chanana *et al.* [223] combinam os limites  $T \rightarrow \infty$  e  $\hbar \rightarrow 0$  para justificar uma abordagem quântica de uma partícula browniana. Liboff [224-227], por sua vez, mostra que  $n \rightarrow \infty$  e  $\hbar \rightarrow 0$  não são universalmente equivalentes. Além destes, há outros critérios tentando estabelecer o limite clássico da mecânica quântica, tais como o limite de massa grande ( $m \rightarrow \infty$ ) [228,229] e o potencial quântico de Bohm tendendo a zero ( $Q \rightarrow 0$ ) [215,216,218,220].

(ii) *Calcular o limite clássico de algumas quantidades quânticas é o mesmo que obter o limite clássico da mecânica quântica?* Usando a equação de Schrödinger, o comportamento da densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  no limite  $n \rightarrow \infty$  e/ou  $\hbar \rightarrow 0$  é investigado [230-237] resultando em uma densidade de probabilidade clássica que corresponde a um ensemble de uma única partícula. Contudo, não é consenso que o limite clássico da mecânica quântica

corresponda a uma teoria de ensemble [238-240]. Além do mais,  $|\psi|^2$  construído a partir da superposição de estados quânticos não leva, no limite de números quânticos altos, aos mesmos resultados calculados pela física clássica [232,241]. A seleção de estados quânticos especiais que se comportam classicamente [242] possibilita o cálculo (usando pacote de onda bem estreito) da seção de choque de espalhamento [243] e também do tempo de viagem através de uma barreira de potencial [238] coincidindo com o resultado clássico; ou usando estados coerentes, pode-se obter o limite  $\hbar \rightarrow 0$  de funções de correlação e de partição quânticas [244,245], do átomo de hidrogênio [246] e estudar a relação dos vários limites clássicos com o processo de medida quântica [247].

Um modo alternativo de estudar a transição entre a mecânica quântica e a clássica é explorar a hipótese da universalidade da mecânica quântica na descrição de sistemas macroscópicos. Ehrenfest [248] foi o primeiro a obter as equações de Hamilton clássicas, em termos de valores médios, a partir da equação de Schrödinger ao levar em consideração uma partícula livre macroscópica com massa  $m = 1g$  (um grama) representada por uma função de onda bem-localizada  $\psi_{EP}$  (Pacote de Ehrenfest). No entanto, as condições de aplicabilidade do teorema de Ehrenfest não são necessárias nem suficientes para caracterizar o domínio clássico [249]. Para Einstein [250,251], não há nenhuma razão, em princípio, por que o princípio de superposição da mecânica quântica não possa ser aplicado a objetos macroscópicos. A abordagem baseada na hipótese da descoerência [252-260] tenta então justificar a universalidade da teoria quântica propondo um processo de limite clássico (critério de classicalidade) baseado na suposição de que no domínio clássico os sistemas físicos sejam caracterizados como sistemas quânticos *abertos*, de modo que apenas determinadas soluções da equação de Schrödinger sejam permitidas, por causa da influência do meio externo (as soluções superpostas sofrem descoerência). Aqui, portanto, o limite clássico não está associado com a pequenez de  $\hbar$  com relação a outras grandezas com mesma dimensão, mas com um mecanismo físico.

A fim de contribuir para uma teoria geral do limite clássico da mecânica quântica, que envolve questões conceituais e formais, nosso objetivo neste capítulo é duplo:

( $\alpha$ ) Exigir que a transição quântico  $\rightarrow$  clássico ocorra de um modo completo somente se as *equações de movimento quânticas* se reduzirem às *equações de movimento clássicas*, embora outras quantidades físicas possam ser quase-clássicas, tais como os níveis de energia [218].

( $\beta$ ) Estabelecer o limite  $\hbar \rightarrow 0$  como um critério matemático universal para caracterizar o limite clássico da mecânica quântica.

## 3.2 Limite Clássico das Equações de Movimento da Mecânica Quântica

Inspirando-nos nos trabalhos puramente formais de Hermann [261], motivaremos a definição de um processo de limite clássico partindo da equação de Schrödinger em uma dimensão para uma partícula com massa  $m$  sujeita a um potencial escalar externo  $V = V(q, t)$

$$\Theta_{\hbar}\psi_{\hbar}(q, t) = 0, \quad (3.1)$$

onde  $\Theta_{\hbar} = (-\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial q^2) + V - i\hbar\partial/\partial t$ . Tomar o limite  $\hbar \rightarrow 0$  diretamente sobre Eq.(3.1) pode parecer sem sentido. Nossa principal idéia então é realizar a seguinte transformação unitária

$$\psi'_{\hbar} = e^{-i\alpha\xi/\hbar}\psi_{\hbar} \quad ; \quad \Theta'_{\hbar} = e^{-i\alpha\xi/\hbar}\Theta_{\hbar}e^{i\alpha\xi/\hbar}, \quad (3.2)$$

sendo  $\alpha$  um parâmetro com dimensão de ação e tendo um valor tal que  $\alpha^3 \ll 1$  e  $\xi = \xi(q, t)$ .

Assim, (3.1) torna-se

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar\alpha}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \xi}{\partial q^2} + 2 \frac{\partial \xi}{\partial q} \frac{\partial}{\partial q} + 2m \frac{\partial}{\partial t} \right] + \left[ \frac{\alpha^2}{2m} \left( \frac{\partial \xi}{\partial q} \right)^2 + V + \alpha \frac{\partial \xi}{\partial t} \right] \right\} \psi'_{\hbar} = 0. \quad (3.3)$$

Agora podemos tomar  $\hbar \rightarrow 0$  sobre a Eq.(3.3), o que leva a (com  $\alpha\xi = S(q, t)$ )

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (3.4)$$

que por sua vez pode ser colocada na forma  $-\partial S/\partial t = H(\partial S/\partial q, q, t)$ , pois temos  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \{ \hat{p}' = e^{-iS/\hbar} (-i\hbar\partial/\partial q) e^{iS/\hbar} \} = \partial S/\partial q \equiv p$ . Notem que uma vez obtida a equação

clássica (3.4), podemos também calcular o limite clássico da cinemática, e.g., para as relações de Heisenberg  $[\hat{p}, \hat{q}] = \hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p} = -i\hbar$ , achamos que  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \{e^{-iS/\hbar}[\hat{p}, \hat{q}]e^{iS/\hbar}\} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \{e^{-iS/\hbar}(-i\hbar)e^{iS/\hbar}\}$  leva a  $pq = qp$ .

A equação (3.4) é exatamente a bem conhecida equação diferencial parcial de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica. Portanto, o limite clássico da equação de Schrödinger (3.1) é a equação de Hamilton-Jacobi (3.4). Um importante ponto a ser enfatizado é que o limite  $\hbar \rightarrow 0$  sobre (3.3) somente existe se as seguintes condições *assintóticas*<sup>1</sup> forem obedecidas:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \psi'_\hbar \sim \psi''_\hbar \neq 0 \quad (3.5)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \psi'_\hbar \sim 0 \quad (3.6)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial \psi'_\hbar}{\partial x} \sim 0, (x = q, t) \quad (3.7)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi'_\hbar}{\partial q^2} \sim 0. \quad (3.8)$$

Em suma, se um dado sistema físico for descrito pela equação de Schrödinger, apenas para aquelas soluções  $\psi'_\hbar$  obedecendo às relações assintóticas acima quando  $\hbar \rightarrow 0$ , ele pode ser classicamente descrito pela equação de Hamilton-Jacobi. Por exemplo, consideremos  $\psi_\hbar = e^{iA/\hbar}$  como solução da Eq.(3.1). Expandindo a função  $A(q, t)$  em potências de  $\hbar/i$  [262-264]:  $A = S_0 + (\hbar/i)S_1 + (\hbar/i)^2 S_2 + \dots$ , segue que  $\psi'_\hbar = e^{-i\alpha\xi/\hbar} e^{i[S_0 + (\hbar/i)S_1 + (\hbar/i)^2 S_2 + \dots]/\hbar}$ . Usando as condições de validade do método WKB [119-120] a fim de desprezar termos de ordem de  $\hbar^3$  em diante, obtemos a condição assintótica

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \psi'_\hbar \sim \psi''_\hbar = e^{S_1} e^{\hbar S_2/i},$$

onde usamos o fato de que  $\xi$  e  $S_0$  obedecem à mesma equação de movimento, por isso,  $\alpha\xi \equiv S_0 = S$ . Vale notar que, para a superposição de funções WKB  $\psi_\hbar = e^{iA/\hbar} + e^{iB/\hbar}$ ,  $B = S_0 - (\hbar/i)S_1 - (\hbar/i)^2 S_2 - \dots$ , nossas condições (3.5-3.8) são também satisfeitas. Isto significa que as condições de validade da aproximação WKB não são necessárias para obter o limite clássico da equação de Schrödinger [265].

<sup>1</sup>Por limite assintótico, entende-se que antes que a função divirja, no limite  $\hbar \rightarrow 0$ , temos de fazer uso de um processo de truncamento [119]; usamos, para isto o símbolo  $\sim$ .

Com base no procedimento acima, propomos o seguinte método geral de limite clássico da dinâmica quântica:

*DEFINIÇÃO.* Seja uma equação diferencial quântica dada por

$$D_{\hbar}\Psi_{\hbar} = 0. \quad (3.9)$$

Realizando a transformação

$$\Psi'_{\hbar} = e^{-\alpha\xi/\hbar}\Psi_{\hbar}, \quad (3.10)$$

sendo  $\alpha$  um parâmetro arbitrário e com dimensão de ação, a Eq.(3.9) torna-se

$$D'_{\hbar}\Psi'_{\hbar} = 0, \quad (3.11)$$

onde  $D'_{\hbar} = e^{-\alpha\xi/\hbar}D_{\hbar}e^{\alpha\xi/\hbar}$ . Tomando o limite  $\hbar \rightarrow 0$  sobre a Eq.(3.11), chegamos à equação de evolução para a função  $\xi$  (independente de  $\hbar$ ):  $D^{\xi} = 0$ , desde que condições assintóticas sejam impostas sobre o comportamento das funções  $\Psi'_{\hbar}$ ,  $\hbar\Psi'_{\hbar}$ , etc., e suas derivadas.

A fim de aplicar nossa definição acima, calculemos o limite clássico da equação de evolução da função de Wigner  $W(p, q, t)$

$$\left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial t} + \hbar \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} - \hbar \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-)^k (\hbar/2)^{2k}}{(2k+1)!} \frac{\partial^{2k+1} V}{\partial q^{2k+1}} \frac{\partial^{2k+1}}{\partial p^{2k+1}} \right\} W = 0, \quad (3.12)$$

obtida da equação de von Neumann para a matriz densidade  $\rho(q+\hbar\eta/2, q-\hbar\eta/2) = \psi^*(q+\hbar\eta/2)\psi(q-\hbar\eta/2)$  e fazendo uso da transformada de Wigner  $W(p, q, t) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(q+\hbar\eta/2, q-\hbar\eta/2) e^{ip\eta} d\eta$  [266]. Na literatura [267-273], acredita-se que basta fazer  $\hbar \rightarrow 0$  diretamente sobre a Eq.(3.12) (dividida por  $\hbar$ ) para obter de imediato a equação de Liouville clássica. Este procedimento não é geralmente correto, simplesmente porque  $W$  é na verdade um objeto quântico e não possui um limite quando  $\hbar \rightarrow 0$  [222]. Além disso, fazer a função de Wigner  $W$  propagar classicamente não significa obter o limite clássico da Eq.(3.12). Contudo, é fácil mostrar que, por meio da transformação (3.10) para  $\Psi_{\hbar} \equiv W$ , e supondo primeiro que o parâmetro  $\alpha$  seja infinitesimal, i.e.,  $\alpha^2 \approx 0$ ,

obtemos depois, no limite  $\hbar \rightarrow 0$ , a equação de Liouville clássica para a densidade de probabilidade  $\xi \equiv F(p, q, t) \geq 0$ :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} + \frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial F}{\partial p}, \quad (3.13)$$

desde que as seguintes condições assintóticas sejam satisfeitas:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} W' \sim W'' \neq 0 \quad (3.14)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n W' \sim 0, \quad (n = 2, 4, 6, \dots, \infty) \quad (3.15)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial W'}{\partial x} \sim 0, \quad (x = q, t) \quad (3.16)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^j \frac{\partial^n W'}{\partial p^n} \sim 0, \quad (j, n = 1, 2, 3, \dots, \infty). \quad (3.17)$$

Na expressão (3.17),  $n \leq j$  para  $j$  par e  $n = j$  para  $j$  ímpar. Como já é bem conhecido, a representação no espaço de fase da mecânica quântica não é única. Usando a função de Kirkwood  $K(p, q, t) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(q + \hbar\eta, q) e^{ip\eta} d\eta$  [274] em lugar da função de Wigner, achamos

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\hbar)^m}{m!} \frac{\partial^m V}{\partial q^m} \frac{\partial^m}{\partial p^m} \right\} K = 0. \quad (3.18)$$

Devido à presença de  $i^2 = -1$ ,  $K$  é uma função complexa. Agora, realizando a transformação (3.10) para  $\Psi_{\hbar} \equiv K$ , e  $\alpha = i\beta$  (com  $\beta^2 \approx 0$ ) chegamos à Eq.(3.13) com as condições assintóticas

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} K' \sim K'' \neq 0 \quad (3.19)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n K' \sim 0, \quad (n = 1, 2, 3, \dots, \infty) \quad (3.20)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial K'}{\partial x} \sim 0, \quad (x = q, t) \quad (3.21)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^j \frac{\partial^m K'}{\partial p^m} \sim 0, \quad (m, j = 1, 2, \dots, \infty), \quad m \leq j. \quad (3.22)$$

Considerando a equação de movimento para a função de Husimi  $H_u(p, q, t; \gamma = \hbar/m\omega) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(q', p', t) e^{-(q'-q)^2/\gamma} e^{-\gamma(p'-p)^2/\hbar^2} dq' dp'$ , dada por [275]

$$\left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial t} + \hbar \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\hbar^2}{2\gamma m} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} - \hbar \sum_{k\lambda\mu} \frac{(i\hbar)^{\lambda-1} \gamma^{\mu-1}}{2^{\lambda+\mu-1} \lambda! k! (\mu-2k)!} \frac{\partial^{\lambda+\mu} V}{\partial q^{\lambda+\mu}} \frac{\partial^{\lambda}}{\partial p^{\lambda}} \frac{\partial^{\mu-2k}}{\partial q^{\mu-2k}} \right\} H_u = 0, \quad (3.23)$$

usando (3.10) com  $\alpha^2 \approx 0$  obtemos, no limite clássico, a Eq.(3.13), também. Este resultado é apenas conjecturado por O'Connell e Wigner [275]. Na Eq.(3.23),  $\lambda = 1, 3, 5, \dots, \infty$ ,  $\mu = 0, 1, 2, \dots, \infty$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, \infty$  desde que  $\mu - 2k > 0$ . As condições assintóticas são

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} H'_u \sim H''_u \neq 0 \quad (3.24)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n H'_u \sim 0, (n = 1, 2, 3, \dots, \infty) \quad (3.25)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n \frac{\partial^{i+j} H'_u}{\partial x^i \partial y^j} \sim 0, (x, y = q, q), (n, i, j = 1, 2, 3, \dots, \infty), n \geq i + j \quad (3.26)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n \frac{\partial^j H'_u}{\partial x^j} \sim 0, (x = p, q), (n, j = 1, 2, \dots, \infty). \quad (3.27)$$

Nosso objetivo agora é estender a aplicação do método de limite clássico definido acima à equação de von Neumann generalizada (2.32) no espaço de fase quântico, à equação de Schrödinger-Langevin não-linear (2.42), e às equações do tipo Caldirola-Kanai (2.47) e (2.52), e também suas respectivas expressões no espaço de fase. Começemos, então, com o movimento browniano quântico com atrito não-linear descrito por (2.32) no espaço de fase

$$\hbar \frac{\partial W}{\partial t} + \hbar \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} - \left[ \hbar \frac{2\gamma}{M} p^k + \hbar \frac{\partial U}{\partial q} \right] \frac{\partial W}{\partial p} - \hbar \frac{2\gamma}{M} k p^{k-1} W - 2\hbar \gamma m k_B T \frac{\partial^2 W}{\partial p^2} + GW = 0, \quad (3.28)$$

com

$$GW = -\frac{2}{i3!} \left( \frac{-\hbar}{2i} \right)^3 \frac{\partial^3 U}{\partial q^3} \frac{\partial^3 W}{\partial p^3} - \frac{2}{i5!} \left( \frac{-\hbar}{2i} \right)^5 \frac{\partial^5 U}{\partial q^5} \frac{\partial^5 W}{\partial p^5} - \dots, \quad (3.29)$$

obtida depois de usarmos a função de Wigner quântica [266]:

$$W(p, q, t) = \frac{1}{2\pi} \int \rho\left(q + \frac{\hbar\eta}{2}, q - \frac{\hbar\eta}{2}, t\right) e^{-i p \eta} d\eta. \quad (3.30)$$

A transformação (3.10) dada na forma  $W' = e^{-\epsilon\xi/\hbar} W$ ,  $\epsilon$  sendo infinitesimal, ou seja,  $\epsilon^2 \approx 0$ , e o limite  $\hbar \rightarrow 0$  fornecem a equação

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \xi}{\partial q} - \left[ \frac{2\gamma}{M} p^k + \frac{\partial U}{\partial q} \right] \frac{\partial \xi}{\partial p} - \frac{2\gamma}{M} k p^{k-1} \xi - 2\gamma m k_B T \frac{\partial^2 \xi}{\partial p^2} = 0, \quad (3.31)$$

que passa a ser realmente a Eq.(2.22) quando  $\xi \equiv F \geq 0$ . Esta Eq.(3.31) é obtida desde que as seguintes condições assintóticas forem obedecidas:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} W' \sim W'' \neq 0 \quad (3.32)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar W' \sim \epsilon \xi W'' \quad (3.33)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n W' \sim 0, (n = 2, 4, 6, \dots) \quad (3.34)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial W'}{\partial x} \sim 0, (x = q, t) \quad (3.35)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\partial W'}{\partial p} \sim 0 \quad (3.36)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^j \frac{\partial^n W'}{\partial p^n} \sim 0, (j, n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.37)$$

Na expressão (3.37),  $n \leq j$  para  $j$  par e  $n = j$  para  $j$  ímpar. As Eqs.(3.32-37) são válidas em um domínio semi-clássico da mecânica quântica, não necessariamente especificado por temperatura alta como exigido na abordagem de Caldeira-Leggett para o caso linear  $k = 1$ .

Aplicando (3.10) sobre a equação de Schrödinger-Langevin (2.42), obtemos

$$\left[ -\alpha \frac{\partial \xi}{\partial t} - \frac{\alpha^2}{2m} \left( \frac{\partial \xi}{\partial q} \right)^2 - V - V_R - \frac{2\gamma}{m} Z \right] \psi' + \alpha i \hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} - \alpha \frac{i \hbar}{2m} \frac{\partial^2 \xi}{\partial q^2} \psi' - \alpha \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \xi}{\partial q} \frac{\partial \psi'}{\partial q} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi'}{\partial q^2} = 0. \quad (3.38)$$

Desde que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \psi' \sim \psi'' \neq 0 \quad (3.39)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial \psi'}{\partial x} \sim 0, (x = q, t) \quad (3.40)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^l \frac{\partial^l W'}{\partial p^l} \sim 0, (l = 1, 2) \quad (3.41)$$

$$(3.42)$$

chegamos a ( $\alpha \xi = S(q, t)$ )

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V + V_R + \frac{2\gamma}{m} Z = 0, \quad (3.43)$$

que é uma equação de Hamilton-Jacobi conservativa; enquanto que o cálculo do limite clássico de (2.42) no espaço de fase dá

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \left[ V + V_R + \frac{2\gamma}{m} Z \right] \frac{\partial F}{\partial p} = 0. \quad (3.44)$$

Analogamente, obtemos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{e^{-2\gamma t}}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + e^{2\gamma t} \left( V + V_R + \frac{2\gamma}{m} Z \right) = 0. \quad (3.45)$$

como o limite clássico da Eq.(2.47). Já do limite  $\hbar \rightarrow 0$  sobre (2.47) no espaço de fase quântico, temos

$$\frac{\partial F}{\partial t} + e^{-2\gamma t} \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - e^{2\gamma t} \frac{\partial}{\partial q} \left[ V + V_R + \frac{2\gamma}{m} Z \right] \frac{\partial F}{\partial p} = 0. \quad (3.46)$$

De (3.45) e (3.46) com  $V_R, Z = 0$ , achamos a hamiltoniana de Bateman [49]

$$\frac{e^{-2\gamma t}}{2m} p^2 + e^{2\gamma t} V \quad (3.47)$$

que, apesar de levar às mesmas equações de movimento de um sistema dissipativo, não o descreve fisicamente de acordo com o critério (1.9) e (1.10). Aqui, o interessante é que a hamiltoniana (3.47) é obtida como o limite clássico de uma equação cuja dissipação aparece apenas *cinematicamente*. Finalmente, o limite da Eq.(2.52) e sua correspondente no espaço de fase são dadas por

$$\frac{\partial S'}{\partial t} + \frac{e^{-4\gamma t}}{2m} \left( \frac{\partial S'}{\partial Q} \right)^2 + e^{2\gamma t} \left( V' + V'_R + \frac{2\gamma}{m} Z' \right) = 0, \quad (3.48)$$

e

$$\frac{\partial F'}{\partial t} + e^{-4\gamma t} \frac{p}{m} \frac{\partial F'}{\partial Q} - \frac{\partial}{\partial Q} \left[ V' + V'_R + \frac{2\gamma}{m} Z' \right] \frac{\partial F'}{\partial P} = 0, \quad (3.49)$$

respectivamente.

No Apêndice D, calculamos ainda o limite clássico de uma partícula linearmente amortecida, de um sistema de Lotka-Volterra, de um sistema de Duffing e de um sistema de van der Pol, sistemas que não possuem função de onda. Assim, apesar do caráter arbitrário do parâmetro  $\alpha$  e da ausência de um significado físico que o justifique na transformação

(3.10), acreditamos dar generalidade e solidez ao método de limite clássico proposto neste capítulo, o que não se encontra nos métodos usuais, tais como, o método WKB, o teorema de Ehrenfest, o potencial quântico de Bohm e a abordagem da descoerência que se baseiam na *universalidade da função de onda*.

# Capítulo 4

## Conclusão e Perspectivas

A temática principal desta tese é a relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. De um lado, procuramos responder de um modo geral à seguinte questão: dado um sistema inicialmente descrito pelas equações de movimento da mecânica clássica, como passar a descrevê-lo quanticamente? Por outro lado, uma vez obtida a dinâmica quântica, como reobter a dinâmica clássica, da qual partimos, por um processo de limite clássico?

O fio condutor do trabalho foi a existência de um critério matemático capaz de distinguir um sistema conservativo de um não-conservativo. Tal critério foi estabelecido classicamente: o sinal da divergência associada a um sistema dinâmico (um conjunto de equações diferenciais ordinárias). Como exemplo particular, obedecendo tal critério, temos os sistemas mecânicos newtonianos que podem ser tanto conservativos como não-conservativos, dependendo da natureza da força. Vimos também que o formalismo analítico (Hamilton, Lagrange, Hamilton-Jacobi) é adequado apenas para tratar dos sistemas conservativos, ou seja, este formalismo não exaure toda a riqueza inerente aos sistemas newtonianos. Por outro lado, usando a formulação liouvilliana, além de a natureza de tais sistemas ser tratada em pé de igualdade, a noção de *ensemble* dota a mecânica clássica de uma estrutura probabilística fundamental para a definição de um processo de quantização sem fazer qualquer alusão a hamiltonianas e lagrangianas.

O ponto fulcral do presente estudo consistiu em explorar a generalidade e a fertilidade de um método de quantização (a quantização dinâmica) e em definir um processo de limite clássico sobre a dinâmica quântica. Da formulação liouvilliana, introduzimos a representação de Wigner da mecânica clássica por meio de uma transformada de Fourier (a transformada de Wigner clássica  $\chi$ ), e, por conseguinte, colocamos a teoria clássica em uma estrutura de operador (número- $q$ ) similar àquela da mecânica quântica. A partir desta nova formulação, a condição de quantização Eq.(2.31), independente de hamiltoniana e lagrangiana, foi definida sobre a equação de evolução para  $\chi$ . Assim, obtivemos o importante resultado: a função de onda  $\psi$  é *derivada* da função de von Neumann  $\rho$ , apenas para sistemas isolados. Isto é,  $\psi$  possui um papel secundário dentro do esquema teórico da teoria quântica. Como consequência disso, em geral, sistemas não-conservativos não são descritos em termos de  $\psi$ . A natureza *igualitária* entre sistemas conservativos e não-conservativos é mantida graças à prioridade lógica e à generalidade física de uma descrição quântica em termos da matriz densidade  $\rho$ .

Resumindo, com a quantização dinâmica superamos as restrições inerentes ao formalismo analítico e evitamos o problema de ordenamento de operadores comuns aos métodos usuais de passagem da teoria clássica à quântica, tais como, a quantização de Schrödinger, de Heisenberg, de Dirac e de Feynman. *Resta-nos, ainda, justificar teoricamente o motivo de levarmos em consideração o fato de  $\ell^3 \ll 1$  na transformada de Wigner clássica.*

A fim de munirmos de consistência interna o processo de quantização dinâmica, definimos e aplicamos um método geral de limite clássico  $\hbar \rightarrow 0$  das equações de movimento da mecânica quântica. Tal método não sustenta a hipótese da universalidade da função de onda. Por exemplo, conseguimos quantizar e calcular o limite clássico de uma partícula linearmente amortecida, que não possui função de onda, e depois calcular o seu limite clássico sem em nenhum momento falar de processo de descoerência (*decoherence*), muito menos associar-lhe um potencial quântico de Bohm. *Contudo, nosso método de limite clássico é dependente de um parâmetro  $\alpha$  arbitrário cujo significado físico ainda está abscôndito.*

Conceitualmente, vale enfatizar que com a quantização dinâmica fica evidente que a física quântica pode ser formulada sem fazer qualquer apelo a uma estrutura dualística da matéria (onda X partícula); um outro ponto importante é que o conceito de trajetória não é incompatível com relações de incerteza. Tanto a uma *partícula clássica* quanto a uma *partícula quântica*, pode-se atribuir uma *trajetória intrínseca*, seja determinística ou estocástica. Um elétron, por exemplo, em um átomo segue *realmente* uma certa trajetória quântica dada pela equação de evolução temporal para a função de Wigner (quântica).

Quando se postula a universalidade da mecânica quântica, acredita-se deduzir a física Newtoniana como uma aproximação [248]; enquanto que, de uma axiomática baseada na mecânica clássica deduz-se a física quântica como caso particular [188,213]. Ao contrário, a existência do método de quantização dinâmica e do processo de limite clássico estudados na presente tese podem levar a novas maneiras de visualizar a relação entre a mecânica quântica e a clássica. *Ambas as mecânicas não têm validade universal*, ou seja, uma não pode ser “deduzida” logicamente a partir da outra. As duas teorias são necessárias para descrever determinados setores da realidade física. Especificamente, podemos considerar um processo de medição a ser modelado por meio da interação de uma partícula com um reservatório térmico. Ao quantizarmos (dinamicamente) este sistema, como foi visto no Capítulo 2 (ver também Apêndice B), apenas as variáveis da partícula são descritas quanticamente, o banho (o aparelho de medida) permanece inteiramente clássico. Esta é a velha tese de Bohr quanto à classicalidade do instrumento de medida. Contudo, vale observar que, na nossa abordagem, a partícula não adquire realidade apenas quando é medida. Ao contrário, a matriz densidade  $\rho$  tem o mesmo *status* ontológico que a função de Wigner clássica  $\chi$ . Esta característica não é destruída pelo processo de quantização. Aqui, também nenhum colapso da função de onda é exigido.

Para concluir, queremos indicar algumas perspectivas que podem ser vislumbradas a partir do nosso trabalho:

( $\alpha$ ) resolver as equações quânticas de movimento para uma partícula linearmente amortecida e para os sistemas de van der Pol, de Duffing e de Lotka-Volterra;

( $\beta$ ) estudar pormenorizadamente as conseqüências filosóficas de se considerar a função de onda fora do coração da mecânica quântica;

( $\gamma$ ) a quantização e o limite clássico de sistemas newtonianos com vínculos. Esta abordagem diferiria da teoria de sistemas com vínculos de Dirac baseada nas propriedades da transformada de Legendre, ou seja, na passagem do formalismo lagrangiano ao hamiltoniano;

( $\delta$ ) a generalização relativística da representação de Wigner da mecânica clássica, e conseqüentemente, a quantização e o limite clássico de sistemas relativísticos;

( $\epsilon$ ) a elaboração de uma possível teoria de campo sem lagrangianas, ou seja, a partir da formulação liouvilliana.

# Apêndice A

## Equações Diferenciais Estocásticas e Equação de Fokker-Planck

No Capítulo 1, ênfase foi dada aos sistemas dinâmicos determinísticos que podem ser isolados ou fechados. Neste apêndice, queremos apresentar a relação entre equações diferenciais estocásticas, que descrevem sistemas abertos, ou seja, sistemas sob a influência estocástica do meio externo, e a equação de Fokker-Planck no espaço de fase. Mais detalhes técnicos podem ser encontrados nas Refs.[276-279].

### (i) *Equações Diferenciais Estocásticas.*

Uma variável determinística  $z(t)$  é sempre obtida em qualquer tempo  $t$  uma vez dadas as condições iniciais em  $t = 0$ . Ao contrário, uma variável  $Y(t)$  é dita randômica quando, em qualquer tempo  $t$ , ela pode assumir qualquer valor  $y$  dentro do seu domínio de variação  $\Omega(y)$ . Assim, associada a  $Y(t)$  existe uma densidade de probabilidade  $P(y, t) \geq 0$  que dá a probabilidade  $P(y, t)dy$  de achar o valor de  $y$  no intervalo infinitesimal  $(y, y + dy)$  no tempo  $t$ . Além disso,  $P$  é responsável pelo cálculo dos valores médios de qualquer função randômica  $\xi(y, t)$ , que realiza um processo estocástico quando um dos possíveis valores de  $y$  é dado,

$$\langle \xi(t) \rangle = \int_{\Omega} \xi(y, t) P(y, t) dy. \quad (\text{A.1})$$

Um processo estocástico é completamente caracterizado na medida em que são especificadas todas as densidades de probabilidades condicionais  $P_2(y_2, t_2|y_1, t_1)$ , que dá a probabilidade de achar  $y$  no intervalo  $(y_1, y_1 + dy_1)$  no tempo  $t_1$  e no intervalo  $(y_2, y_2 + dy_2)$  no tempo  $t_2$ ,  $P_3(y_3, t_3|y_2, t_2|y_1, t_1)$ , que dá a probabilidade de encontrar  $y$  nos intervalos  $(y_1, y_1 + dy_1)$ ,  $(y_2, y_2 + dy_2)$  e  $(y_3, y_3 + dy_3)$  nos respectivos tempos  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_3$ , etc.. Como exemplo de processo estocástico caracterizado apenas pelas probabilidades  $P_1(y_1, t_1)$  e  $P_2(y_2, t_2|y_1, t_1)$ , temos o processo de Markov. Aqui se introduz o conceito de probabilidade de transição  $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$  de  $y_1$  em  $t_1$  a  $y_2$  no tempo  $t_2 - t_1$  definido por

$$P_2(y_2, t_2|y_1, t_1) = \omega(y_2, t_2|y_1, t_1)P_1(y_1, t_1). \quad (\text{A.2})$$

Suas propriedades são

$$\omega(y_2, t_2|y_1, t_1) \geq 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\int \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) dy_2 = 1 \quad (\text{A.4})$$

$$P_1(y_2, t_2) = \int \omega(y_2, t_2|y_1, t_1)P_1(y_1, t_1)dy_1. \quad (\text{A.5})$$

A dinâmica das variáveis estocásticas é dada por uma equação diferencial com coeficientes aleatórios

$$\dot{y}_\nu = K_\nu(y_1, y_2, \dots, y_n, t), \nu = 1, \dots, n. \quad (\text{A.6})$$

Como exemplo, citemos a equação de Langevin

$$\dot{y} = K(y, t) + L(t), \quad (\text{A.7})$$

onde  $L(t)$  é um função estocástica com as seguintes propriedades

$$\langle L(t) \rangle = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$\langle L(t)L(t') \rangle = C\delta(t - t') \quad (\text{A.9})$$

determinadas *a priori*, independentemente da solução da Eq.(A.7). A função  $L(t)$  assinala a influência estocástica do meio sobre o sistema de interesse.

(i) *Equação de Fokker-Planck.*

Consideremos as seguintes equações de Langevin em termos das variáveis estocásticas  $x$  e  $y$ :

$$\dot{x} = K_1(x, t) + g_1 L(t) \quad (\text{A.10})$$

$$\dot{y} = K_2(y, t) + g_2 L(t), \quad (\text{A.11})$$

onde o termo estocástico  $L(t)$  tem as propriedades acima (A.8) e (A.9), enquanto que  $g_1$  e  $g_2$  são constantes. A média é tomada com relação a um processo estocástico gerado por  $x$  e  $y$

$$\langle L(t) \rangle = \int_{\Omega} L(t; x, y) P(x, y, t) dx dy. \quad (\text{A.12})$$

Usando o conceito de probabilidade de transição na forma

$$P_2(x, y, t_1 | x_1, y_1, t) = \omega(x, y, t_1 | x_1, y_1, t) P_1(x_1, y_1, t) \quad (\text{A.13})$$

e levando em consideração (A.5), temos

$$P(x, y, t_1) = \int \omega(x, y, t_1 | x_1, y_1, t) P_1(x_1, y_1, t) dx_1 dy_1. \quad (\text{A.14})$$

Expandimos o integrando de (A.14) em uma série de Taylor para  $\eta$  e  $\zeta$  pequenos

$$x - x_1 = \eta \quad (\text{A.15})$$

$$y - y_1 = \zeta \quad (\text{A.16})$$

e obtemos

$$P(x, y, t + \Delta t) - P(x, y, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \langle \eta \rangle P(x, y, t) - \frac{\partial}{\partial y} \langle \zeta \rangle P(x, y, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle \eta^2 \rangle P(x, y, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle \zeta^2 \rangle P(x, y, t) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \langle \eta \zeta \rangle P(x, y, t). \quad (\text{A.17})$$

Os momentos são dados por

$$\langle \eta \rangle = K_1(x, t) \Delta t \quad (\text{A.18})$$

$$\langle \zeta \rangle = K_2(y, t) \Delta t \quad (\text{A.19})$$

$$\langle \eta^2 \rangle = g_1^2 C \Delta t \quad (\text{A.20})$$

$$\langle \zeta^2 \rangle = g_2^2 C \Delta t \quad (\text{A.21})$$

$$\langle \zeta \eta \rangle = g_1 g_2 C \Delta t. \quad (\text{A.22})$$

Tomando o limite  $\Delta \rightarrow 0$ , chegamos a

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [K_1(x, t)P] - \frac{\partial}{\partial y} [K_2(x, t)P] + g_1^2 \frac{C}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + g_2^2 \frac{C}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + g_1 g_2 C \frac{\partial^2 P}{\partial x \partial y} \quad (\text{A.23})$$

que é a equação de Fokker-Planck associada às equações diferenciais estocásticas (A.10) e (A.11).

# Apêndice B

## Dedução da Equação de Langevin

Supondo que sejamos capazes de descrever de modo *exato* os fenômenos da natureza, surge a questão de como a *descrição probabilística* emerge da *descrição determinística*. O objetivo, portanto, deste apêndice é mostrar como a equação estocástica de Langevin, considerada *fenomenológica*, pode ser deduzida a partir dos *primeiros princípios*, ou seja, levando em conta um modelo hamiltoniano para o reservatório térmico.

Consideremos um sistema (sistema A) em interação com um reservatório térmico (sistema B), de modo que o sistema total seja visto como isolado. O sistema A é descrito pela hamiltoniana

$$H_A(p, q, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q, t), \quad (\text{B.1})$$

enquanto que a hamiltoniana do sistema B — consistindo de um conjunto de partículas com massa  $M$  e coordenadas canônicas  $(P_n, Q_n)$ , e em interação com o sistema A via um potencial harmônico dependente das distâncias relativas  $(Q_n - q)$  — é dada por

$$H_B(P, Q - q) = \sum_n \left[ \frac{P_n^2}{2M} + \frac{M\omega_n^2}{2}(Q_n - q)^2 \right]. \quad (\text{B.2})$$

A hamiltoniana para o sistema total tem então a forma

$$H_{\text{tot}} = H_A(p, q, t) + H_B(P, Q - q). \quad (\text{B.3})$$

A hamiltoniana (B.2) pode ser interpretada como aquela de um conjunto de osciladores

com posições de equilíbrio  $Q_n = q$ . A natureza de longo alcance do potencial quadrático em (B.2) faz com que os dois sistemas estejam sempre em interação.

Da hamiltoniana (B.3), obtemos

$$M\ddot{Q}_n + M\omega_n^2 Q_n = M\omega_n^2 q. \quad (\text{B.4})$$

$$m\ddot{q} + M\omega_n^2 q = M\omega_n^2 Q_n - \frac{\partial V}{\partial q}. \quad (\text{B.5})$$

Substituímos a solução de (B.4)

$$Q_n(t) = q(t) + (Q'_n - q')\cos[\omega_n(t - t')] + \frac{P'_n}{M\omega_n}\text{sen}[\omega_n(t - t')] - \int_{t'}^t \cos[\omega_n(t - s)]\dot{q}(s)ds \quad (\text{B.6})$$

(dada em termos da função  $q(t)$  e dos valores das coordenadas  $Q'_n = Q_n(t')$ ,  $P'_n = P_n(t')$  e  $q' = q(t')$  no tempo inicial  $t'$ ) na Eq.(B.5), de tal modo que ficamos apenas com a equação em termos das variáveis do sistema A:

$$m\frac{d^2q}{dt^2} + \int_{t'}^t K(t - s)\dot{q}(s)ds + \frac{\partial V}{\partial q} = \Omega(t) \quad (\text{B.7})$$

com

$$K(t - s) = \sum_n M\omega_n^2 \cos[\omega_n(t - s)] \quad (\text{B.8})$$

e

$$\Omega(t) = \sum_n M\omega_n^2 \left( (Q'_n - q')\cos[\omega_n(t - s)] + \frac{P'_n}{M\omega_n}\text{sen}[\omega_n(t - s)] \right). \quad (\text{B.9})$$

Notemos que a Eq.(B.7) é uma equação essencialmente determinística. Agora, vamos supor que não temos conhecimento completo para especificar o estado inicial das partículas do sistema B e que a densidade de probabilidade seja dada por

$$F(P', Q') = e^{-H_{\mathbf{B}}(P', Q')/k_B T}$$

que dá  $\langle Q'_n \rangle = q_n$ ,  $\langle P'_n \rangle = 0$ ,  $\langle Q'_n P'_n \rangle = 0$ ,  $\langle (P'_n)^2 \rangle = Mk_B T$  e  $\langle (Q'_n - q')^2 \rangle = k_B T / M\omega_n^2$ . Isto implica que a função  $\Omega(t)$  tem as seguintes propriedades estatísticas

$$\langle \Omega(t) \rangle = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$\langle \Omega(t)\Omega(t') \rangle = k_B T K(t-t'), \quad (\text{B.11})$$

onde usamos

$$\langle \dots \rangle = \frac{\int dP' dQ' \dots e^{-H_B(P', Q' - q')/k_B T}}{\int dP' dQ' e^{-H_B(P', Q' - q')/k_B T}}. \quad (\text{B.12})$$

Com as propriedades (B.10) e (B.11), a Eq.(B.7) torna-se uma *equação diferencial estocástica não-markoviana*. O termo de atrito possui efeitos de memória. Uma evolução markoviana pode ser obtida considerando um número infinito de partículas no banho de tal modo que as frequências  $\omega_n$  estejam distribuídas continuamente. Assim, a Eq.(B.8) é substituída pela integral

$$K(t-s) = \int_{-\omega'}^{\omega'} d\omega \frac{dN}{d\omega} M\omega^2 \cos[\omega(t-s)] = \int_{-\omega'}^{\omega'} \frac{2m\gamma}{\pi M\omega^2} \theta(\omega' - \omega) M\omega^2 \cos[\omega(t-s)] d\omega \quad (\text{B.13})$$

sendo

$$\rho(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{2m\gamma}{\pi M\omega^2} \theta(\omega' - \omega) \quad (\text{B.14})$$

a densidade de frequência, com  $\theta(\omega' - \omega) = 1$ , se  $\omega' > \omega$  e  $\theta(\omega' - \omega) = 0$ , se  $0 \geq \omega'$ .

No limite  $\omega' \rightarrow \infty$ , a Eq.(B.13) pode ser aproximada por

$$K(t-s) \approx 2m\gamma\delta(t-s). \quad (\text{B.15})$$

Esta aproximação é válida para  $(\omega')^{-1} \ll (t-s)$  e está relacionada com o tempo de interação entre os sistemas A e B. Inserindo (B.15) na Eq.(B.7), chegamos a

$$\dot{p} = - \left( 2\gamma p + \frac{\partial V}{\partial q} \right) + \Omega(t)$$

$$\dot{q} = \frac{p}{m},$$

com

$$\langle \Omega(t) \rangle = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$\langle \Omega(t)\Omega(t') \rangle = 2m\gamma k_B T \delta(t - t'), \quad (\text{B.17})$$

que é a equação de Langevin estocástica. Na dedução desta equação, seguimos mais de perto as Refs.[195,280] . Outros métodos de deduzi-la podem ser encontrados nas Refs.[126,281-286]. O aspecto principal em todas estas deduções é que a equação de Langevin é obtida como aproximação em decorrência de hipóteses extra-mecânicas.

Como uma última observação, queremos enfatizar que, para efeito de quantização (dinâmica), *não precisamos* de um modelo hamiltoniano específico descrevendo a interação de um sistema com um banho térmico. Precisamos apenas da própria equação de Langevin e da sua correspondente equação de Fokker-Planck.

# Apêndice C

## Comparação com os Métodos de Quantização de Dirac e de Feynman

Nosso objetivo neste apêndice é comparar o processo de quantização que chamamos de *quantização dinâmica* com os métodos usuais: o de Dirac e o de Feynman. Vimos na Seção 2.4 que existe um critério (Eq.(2.7)) para o uso sem ambigüidade das regras de quantização de Dirac (2.8-2.10) na obtenção da equação de Schrödinger. Aqui queremos mostrar que tal critério não é necessário nem suficiente. Começamos ilustrando sua insuficiência (resultado primeiro achado por Podolsky [138]). Ao realizarmos a transformação das coordenadas cartesianas às coordenadas polares  $(q_1, q_2, p_1, p_2) \mapsto (r, \theta, p_r, p_\theta)$ , a hamiltoniana

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2, t) = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + V(q_1, q_2, t) = E(t). \quad (\text{C.1})$$

passa a ser

$$K(r, \theta, p_r, p_\theta, t) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r, t) \quad (\text{C.2})$$

que também é igual à energia total do sistema em termos das coordenadas polares. Isto significa que podemos quantizar a hamiltoniana (C.2) segundo a prescrição

$$p_r \implies \hat{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{C.3})$$

$$p_\theta \implies \hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{C.4})$$

$$r \implies \hat{r} = r \quad (\text{C.5})$$

$$E \implies \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (\text{C.6})$$

Contudo, a quantização da Eq.(C.2) não é correta, posto que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{C.7})$$

é diferente fisicamente da equação de Schrödinger em coordenadas polares

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \right) + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (\text{C.8})$$

O uso da quantização de Dirac (2.8-2.10) é adequado *apenas* em coordenadas cartesianas. Ao contrário, a quantização dinâmica permite a quantização em coordenadas generalizadas [188].

Notemos que a hamiltoniana usual

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

e a hamiltoniana [43]

$$H(p, q) = \sqrt{V(q)} \cosh\left(p \sqrt{\frac{2}{m}}\right)$$

levam às mesmas equações de Newton

$$\dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial q}$$

$$\dot{q} = \frac{p}{m}$$

a partir das quais deduzimos a equação de Liouville

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial F}{\partial q} + \dot{p} \frac{\partial F}{\partial p} = 0.$$

Assim, ao contrário do que é exigido pela quantização de Dirac, facilmente vemos que *não é necessário* identificarmos a hamiltoniana clássica com a energia total do sistema  $E = p^2/2m + V(q)$  a fim de quantizá-lo.

Em suma, vimos que o critério de Dirac não é necessário nem suficiente para corretamente quantizar um sistema clássico. Tais regras são inteiramente arbitrárias.

Abaixo, comparamos nosso método de quantização com o de Feynman. Consideremos a seguinte transformação no espaço de fase

$$Q = e^{\beta(t)} q \quad (\text{C.9})$$

$$P = e^{-\beta(t)} p - \alpha(t) e^{\beta(t)} q, \quad (\text{C.10})$$

recentemente estudada por Yeon *et al.* [184].  $\beta(t)$  e  $\alpha(t)$  são funções arbitrárias do tempo  $t$ . Se (C.9) e (C.10) definem uma transformação canônica, então, usando  $H' = H + dF/dt$ , onde  $F$  é uma função geradora dependente explicitamente do tempo, a hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q, t) \quad (\text{C.11})$$

passa a ser escrita em termos de  $P, Q$  como ( $\dot{y} = dy/dt; y = \beta, \alpha$ )

$$H'(P, Q, t) = e^{2\beta} \frac{P^2}{2m} + \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) PQ + \frac{1}{2} \left( e^{2\beta} \frac{\alpha^2}{m} + 2\alpha\dot{\beta} + \dot{\alpha} \right) Q^2 + V(Q, t) \quad (\text{C.12})$$

que é *diferente* da energia total em termos das novas variáveis. Expressando a equação de Liouville como

$$\frac{\partial F'}{\partial t} + \frac{dQ}{dt} \frac{\partial F'}{\partial Q} + \frac{dP}{dt} \frac{\partial F'}{\partial P} = 0, \quad (\text{C.13})$$

onde

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\partial H'}{\partial P} = e^{2\beta} \frac{P}{m} + \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) Q \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial Q} = -\left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) P - \left( 2\alpha\dot{\beta} + \dot{\alpha} + e^{2\beta} \frac{\alpha^2}{m} \right) Q - \frac{\partial V}{\partial Q} \quad (\text{C.15})$$

$$F' = F'(P, Q, t) = F(p, q, t), \quad (\text{C.16})$$

e usando a função de Wigner clássica

$$\chi'(Q + \frac{\lambda\ell}{2}, Q - \frac{\lambda\ell}{2}, t) = \int F'(P, Q, t) e^{iP\lambda} dP, \quad (\text{C.17})$$

obtemos ( $Q_1 = Q + \lambda\ell/2; Q_2 = Q - \lambda\ell/2$ )

$$i\ell \frac{\partial \chi'}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} e^{2\beta} \left[ \frac{\partial^2 \chi'}{\partial Q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi'}{\partial Q_2^2} \right] - [V(Q_1, t) - V(Q_2, t)] \chi' + \mathcal{B} \chi' = 0 \quad (\text{C.18})$$

com

$$\mathcal{B} = i\ell \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) \left[ 1 + Q_1 \frac{\partial}{\partial Q_1} + Q_2 \frac{\partial}{\partial Q_2} \right] - \frac{1}{2} \left( e^{2\beta} \frac{\alpha^2}{m} + 2\alpha\dot{\beta} + \dot{\alpha} \right) (Q_1^2 - Q_2^2). \quad (\text{C.19})$$

Agora quantizamos a Eq.(C.17), ou seja, fazemos  $\ell \rightarrow \hbar$ , e obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} e^{2\beta} \left[ \frac{\partial^2 \rho'}{\partial Q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho'}{\partial Q_2^2} \right] - [V(Q_1, t) - V(Q_2, t)] \rho' + i\hbar \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) \rho' + i\hbar \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) \left[ Q_1 \frac{\partial \rho'}{\partial Q_1} + Q_2 \frac{\partial \rho'}{\partial Q_2} \right] - \frac{1}{2} \left( e^{2\beta} \frac{\alpha^2}{m} + 2\alpha\dot{\beta} + \dot{\alpha} \right) (Q_1^2 - Q_2^2) \rho' = 0 \quad (\text{C.20})$$

que, por sua vez, dá ( $\rho' = \Psi^\dagger(Q_2, t)\Psi(Q_1, t)$ )

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} e^{2\beta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Q^2} + \frac{i\hbar}{2} \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) \Psi + i\hbar \left( \dot{\beta} + e^{2\beta} \frac{\alpha}{m} \right) Q \frac{\partial \Psi}{\partial Q} - \frac{1}{2} \left( e^{2\beta} \frac{\alpha^2}{m} + 2\alpha\dot{\beta} + \dot{\alpha} \right) Q^2 \Psi - V(Q, t)\Psi = 0, \quad (\text{C.21})$$

em um ponto genérico  $Q$ , que é a equação achada por Yeon *et al.* [184]. No entanto, em nossa dedução foram evitadas as ambigüidades e inconsistências inerentes à quantização de Feynman (ver Seção 2.5), tal como o problema da escolha do ponto médio.

## Apêndice D

# Quantização e Limite Clássico dos Sistemas: partícula linearmente amortecida, sistema de van der Pol, sistema de Duffing e sistema de Lotka-Volterra

(i) *partícula linearmente amortecida*. As equações de Newton para este sistema dissipativo são dadas por

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \beta p \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}\end{aligned}\tag{D.1}$$

com divergência igual a  $-\beta$ . A equação de Liouville generalizada correspondente é

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \left( \beta p + \frac{\partial V}{\partial q} \right) \frac{\partial F}{\partial p} = \beta F,\tag{D.2}$$

enquanto que, em termos da função de Wigner clássica, temos

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} \right] + \frac{i\ell\beta}{2} (q_1 - q_2) \left( \frac{\partial \chi}{\partial q_1} - \frac{\partial \chi}{\partial q_2} \right) - \mathcal{A}\chi = 0\tag{D.3}$$

onde

$$\mathcal{A} = V(q_1, t) - V(q_2, t). \quad (\text{D.4})$$

Quantizando de acordo com a Eq.(2.31), chegamos a

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] + \frac{i\hbar\beta}{2} (q_1 - q_2) \left( \frac{\partial \rho}{\partial q_1} - \frac{\partial \rho}{\partial q_2} \right) - [V(q_1, t) - V(q_2, t)] \rho = 0. \quad (\text{D.5})$$

Esta equação descreve quanticamente uma partícula com atrito linear. Ela é irreduzível à equação do tipo Schrödinger. Em particular, temos que um oscilador harmônico amortecido não possui função de onda. Com exceção dos trabalhos de Dekker[81,82], a maioria da literatura tratando de dissipação em mecânica quântica procura associar uma função de onda a um sistema dissipativo. Notemos ainda que (D.5) é a equação de Caldeira-Leggett (2.40) sem o termo de flutuação.

Para calcularmos o limite clássico da Eq.(D.5), usamos a função de Wigner quântica  $W(q, p, t)$  de modo que

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} - \left[ \beta p + \frac{\partial V}{\partial q} \right] \frac{\partial W}{\partial p} + GW = \beta W, \quad (\text{D.6})$$

com

$$GW = -\frac{2}{i3!} \left( \frac{-\hbar}{2i} \right)^3 \frac{\partial^3 V}{\partial q^3} \frac{\partial^3 W}{\partial p^3} - \frac{2}{i5!} \left( \frac{-\hbar}{2i} \right)^5 \frac{\partial^5 V}{\partial q^5} \frac{\partial^5 W}{\partial p^5} - \dots \quad (\text{D.7})$$

Realizamos a transformação

$$W' = e^{-\epsilon\xi/\hbar} W; (\epsilon^2 \approx 0), \quad (\text{D.8})$$

tomamos  $\hbar \rightarrow 0$  e obtemos a Eq.(D.2) para  $\xi \equiv F$ , desde que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} W' \sim W'' \neq 0 \quad (\text{D.9})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\hbar W'}{\epsilon} \sim \xi W' \quad (\text{D.10})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^n W' \sim 0, (n = 2, 4, 6, \dots, \infty) \quad (\text{D.11})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial W'}{\partial x} \sim 0, (x = q, t) \quad (\text{D.12})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^j \frac{\partial^n W'}{\partial p^n} \sim 0, (j, n = 1, 2, 3, \dots, \infty), n \leq j(\text{par}), n = j(\text{ímpar}). \quad (\text{D.13})$$

(ii) *sistema de van der Pol*. As equações diferenciais não-lineares de van der Pol são

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} + \beta p(1 - q^2) \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}. \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

É um sistema com amortecimento não-linear, originalmente concebido para modelar um circuito elétrico [15,287]. Sua divergência é  $\beta(1 - q^2)$ , ao passo que a equação de Liouville é dada por

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} + \left( \beta p(1 - q^2) - \frac{\partial V}{\partial q} \right) \frac{\partial F}{\partial p} = -\beta(1 - q^2)F. \quad (\text{D.15})$$

Na representação de Wigner, a Eq.(D.15) passa a ser

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} \right] - \frac{i\ell\beta}{2} (q_1 - q_2) \left[ 1 - \left( \frac{q_1 - q_2}{2} \right)^2 \right] \left( \frac{\partial \chi}{\partial q_1} - \frac{\partial \chi}{\partial q_2} \right) - \mathcal{A}\chi = 0, \quad (\text{D.16})$$

$\mathcal{A}$  é a mesma expressão (D.4). No domínio quântico, obtemos a equação

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] - \frac{i\hbar\beta}{2} (q_1 - q_2) \left[ 1 - \left( \frac{q_1 - q_2}{2} \right)^2 \right] \left( \frac{\partial \rho}{\partial q_1} - \frac{\partial \rho}{\partial q_2} \right) - \mathcal{B}\rho = 0, \quad (\text{D.17})$$

com

$$\mathcal{B}\rho = [V(q_1, t) - V(q_2, t)]\rho. \quad (\text{D.18})$$

No espaço de fase quântico a Eq.(D.17) tem a forma

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} + \left[ \beta p(1 - q^2) - \frac{\partial V}{\partial q} \right] \frac{\partial W}{\partial p} + GW = -\beta(1 - q^2)W. \quad (\text{D.19})$$

Realizando a transformação (D.8) obtemos, no limite clássico, a equação de Liouville generalizada (D.15) com as mesmas condições assintóticas (D.9-D.13).

(iii) *Sistema de Duffing*. É um sistema não-linear com força de atrito linearmente proporcional à velocidade sob a ação de um potencial generalizado  $V + (\kappa/4)q^4$ . A equação

de Liouville generalizada associada ao sistema de equações de Duffing

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -\frac{\partial V}{\partial q} - \beta p - \kappa q^3 \\ \dot{q} &= \frac{p}{m}\end{aligned}\tag{D.20}$$

é

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial F}{\partial q} - \left( \beta p + \kappa q^3 \frac{\partial V}{\partial q} \right) \frac{\partial F}{\partial p} = \beta F,\tag{D.21}$$

com divergência  $-\beta$ . O termo  $\kappa q^3$  está relacionado originalmente com a tensão (*stiffness*) sob a qual um dado sistema mecânico está submetido [15]. Na representação de Wigner, encontramos

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\ell^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial q_2^2} \right] + \frac{i\ell\beta}{2} (q_1 - q_2) \left( \frac{\partial \chi}{\partial q_1} - \frac{\partial \chi}{\partial q_2} \right) - \kappa \left( \frac{q_1 + q_2}{2} \right)^3 (q_1 - q_2) \chi - \mathcal{A}\chi = 0\tag{D.22}$$

que ao ser quantizada nos leva a

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial q_2^2} \right] + \frac{i\hbar\beta}{2} (q_1 - q_2) \left( \frac{\partial \rho}{\partial q_1} - \frac{\partial \rho}{\partial q_2} \right) - \kappa \left( \frac{q_1 + q_2}{2} \right)^3 (q_1 - q_2) \rho - \mathcal{B}\rho = 0,\tag{D.23}$$

com

$$\mathcal{B}\rho = [V(q_1, t) - V(q_2, t)] \rho.\tag{D.24}$$

Segue facilmente que o limite clássico sobre a equação

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} - \left( \beta p + \kappa q^3 \frac{\partial V}{\partial q} \right) \frac{\partial W}{\partial p} + GW = \beta W,\tag{D.25}$$

depois de efetuada a transformação (D.8), é a Eq.(D.21).

(iv) *Sistema de Lotka-Volterra*. Este sistema modela dinâmica de populações (Ver Seção 1.1). Partimos de um modelo simplificado do sistema de Lotka-Volterra dado por

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \lambda_1 x + \alpha xy \\ \dot{y} &= \lambda_2 x + \beta xy\end{aligned}\tag{D.26}$$

cuja divergência é  $\lambda_1 + \lambda_2 + \alpha y + \beta x$ . A equação de Liouville assume a forma

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (\lambda_1 + \alpha y)x \frac{\partial F}{\partial x} + (\lambda_2 + \beta x)y \frac{\partial F}{\partial y} = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \alpha y + \beta x)F. \quad (\text{D.27})$$

Correspondentemente, temos a seguinte equação no espaço de Wigner clássico

$$i\ell \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\alpha \ell^2}{2} \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_2^2} \right] + i\ell \lambda_1 \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial \chi}{\partial x_1} + \frac{\partial \chi}{\partial x_2} \right] - \\ i\ell \left[ \lambda_2 + \beta \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \right] \left( \frac{x_1 - x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial \chi}{\partial x_1} - \frac{\partial \chi}{\partial x_2} \right] = -i\ell \lambda_1 \chi - \frac{\alpha \ell^2}{2} \left( \frac{\partial \chi}{\partial x_1} - \frac{\partial \chi}{\partial x_2} \right) \quad (\text{D.28})$$

Ao quantizarmos esta expressão levando em conta

$$\ell \rightarrow \hbar, \quad (\text{D.29})$$

obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\alpha \hbar^2}{2} \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_2^2} \right] + i\hbar \lambda_1 \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial \rho}{\partial x_1} + \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \right] - \\ i\hbar \left[ \lambda_2 + \beta \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \right] \left( \frac{x_1 - x_2}{2} \right) \left[ \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \right] = -i\hbar \lambda_1 \rho - \frac{\alpha \hbar^2}{2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \right) \quad (\text{D.30})$$

Considerando  $x_1 \approx x_2$ , chegamos a uma equação de Schrödinger descrevendo aproximadamente um sistema de Lotka-Volterra:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial t} + \left( i\hbar \lambda_1 x_1 + \frac{\alpha \hbar^2}{2} \right) \frac{\partial \psi(x_1, t)}{\partial x_1} + \frac{\hbar^2 \alpha}{2} x_1 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = -\frac{i\hbar \lambda_1}{2} \psi. \quad (\text{D.31})$$

Como limite clássico da Eq.(D.30) no espaço de fase dada por

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\lambda_1 + \alpha y)x \frac{\partial W}{\partial x} + (\lambda_2 + \beta x)y \frac{\partial W}{\partial y} = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \alpha y + \beta x)W, \quad (\text{D.32})$$

obtemos novamente a equação de Liouville generalizada (D.27) da qual partimos, desde que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} W' \sim W'' \neq 0 \quad (\text{D.33})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\hbar}{\epsilon} W' \sim \xi W'' \quad (\text{D.34})$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \frac{\partial W'}{\partial z} \sim 0, (z = t, x, y) \quad (\text{D.35})$$

onde  $W' = e^{-\epsilon\xi/\hbar} W$ .

Neste apêndice nos limitamos apenas a investigar a *consistência lógica* do processo de quantização (quantização dinâmica) quando aplicado a uma partícula linearmente amortecida e aos sistemas de van der Pol, de Duffing e de Lotka-Volterra. Isto já se mostra suficiente para notarmos que uma descrição quântica de sistemas não-conservativos em termos de função de onda é algo secundário e, em geral, impossível de ser implementada. Tais sistemas são descritos quanticamente por meio da função de von Neumann ou equivalentemente pela função de Wigner no espaço de fase quântico. Relegamos um estudo das soluções destes sistemas quantizados para outra oportunidade.

# Bibliografia

- [1] Heidegger, M., *Que é uma Coisa?* (Edições 70, Lisboa, 1992). Tradução de Carlos Morujão; Título original: *Die Frage nach dem Ding* (Max Niemeyer Verlag, Tübingen, 1987).
- [2] Burt, E. A., *As Bases Metafísicas da Ciência Moderna* (Universidade de Brasília, Brasília, 1991). Tradução de José Viegas Filho e Orlando Araújo Henriques; Título original: *The Metaphysical Foundations of Modern Physical Science* (Routledge and Kegan Paul, 1984).
- [3] Maxwell, J. C., *Matter and Motion* (Doubleday, New York, 1952).
- [4] Wheeler, J. A. and Zurek, W. H., *Quantum Theory and Measurement* (Princeton University Press, Princeton, 1983).
- [5] Rohrlich, F., *From Paradox to Reality* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987).
- [6] Kolmogorov, A. N., *The general theory of dynamical systems and classical mechanics*, Proceedings of the 1954 International Congress of Mathematicians (North-Holland, Amsterdam, 1957).
- [7] Prigogine, I., *From Being to Becoming* (W. H. Freeman, San Francisco, 1980); Prigogine, I., *O Fim das Certezas: Tempo, Caos e Leis da Natureza* (UNESP, São Paulo, 1996); Tradução de Roberto Leal Ferreira; Título original: *La Fin des Certitudes: Temps, Chaos et les Lois de la Nature* (Édition Odile Jacob, 1996).

- [8] Prigogine, I. e Stengers, I., *A Nova Aliança* (Universidade de Brasília, Brasília, 1991); Tradução de Miguel Faria e Maria Joaquina Machado Trincheira; Título original: *La Nouvelle Alliance* (Galimard, Paris, 1984);
- Prigogine, I. e Stengers, I., *Entre o Tempo e a Eternidade* (Gradiva, Lisboa, 1990); Tradução de Florbela Fernandes e José Carlos Fernandes; Título original: *Entre les Temps et l'Éternité* (Libraire Arthème Fayard, 1988).
- [9] Born, M. and Hooton, D. J., *Statistical dynamics of multiply-periodic systems*, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **52** (1956) 287-300;
- [10] Born, M., *Continuity, determinism and reality*, Det Kongelige Danske Videnskaberne Selskab Matematisk-fysiske Meddelelser **30** (1955) 1-26;
- Born, M., *Is classical mechanics in fact deterministic?*, Physikalische Blätter **11** (1955) 49-54;
- Born, M., *Vorhersagbarkeit in der klassischen Mechanik*, Zeitschrift für Physik **153** (1958) 372-388.
- [11] Silva Filho, O. L., *A Mecânica Quântica Enquanto Teoria Clássica: Prolegômenos a uma Física Futura*, Tese de Doutorado (Universidade de Brasília, Brasília, 1995).
- [12] Lemos, N. A., *Quantização de Sistemas Dissipativos*, Tese de Doutorado (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 1981).
- [13] Percival, I. and Richards, D., *Introduction to Dynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1982).
- [14] Hénon, M., *Numerical exploration of hamiltonian systems*, in Les Houches, Session XXXVI, 1981 - Comportement Chaotic des Systèmes Déterministes/Chaotic Behaviour of Deterministic Systems, G. Iooss, R. H. G. Helleman and R. Stora, eds. (North-Holland, 1983).
- [15] Guckenheimer, J. and Holmes, P., *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields* (Springer-Verlag, New York, 1983).

- [16] Tabor, M., *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics* (John Wiley and Sons, New York, 1989).
- [17] Arnold, V. I., *Ordinary Differential Equations* (Massachusetts Institute of Technology Press, Massachusetts, 1973).
- [18] Byron, F. W. and Fuller, R. W., *Mathematics of Classical and Quantum Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1970).
- [19] Fronteau, J., *Vers une description non conservative de l'evolution en physique*, *Hadronic Journal* **2** (1979) 727-829.
- [20] Lichtenberg, A. J. and Lieberman, M. A., *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag, New York, 1983).
- [21] Nicolis, G. and Prigogine, I., *Exploring Complexity* (W. E. Freeman, New York, 1989).
- [22] Ott, E., *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [23] Nicolis, G., *Introduction to Nonlinear Science* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [24] Tarasov, V. E., *Quantum dissipative systems.III. Definition and algebraic structure*, *Theoretical and Mathematical Physics* **110** (1997) 57-67.
- [25] Arnold, V. I., *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [26] Nicolis, G. and Daems, D., *Probabilistic and thermodynamic aspects of dynamical systems*, *Chaos* **8** (1998) 311-320.
- [27] Nicolis, G. and Nicolis, C., *Thermodynamic dissipation versus dynamical complexity*, *Journal of Chemical Physics* **110** (1999) 8889-8898.

- [28] Minorsky, N., *Nonlinear Oscillations* (D. van Norstrand, Princeton, 1962).
- [29] Lorenz, E. N., *Deterministic nonperiodic flow*, *Journal of the Atmospheric Sciences* **20** (1963) 130-141.
- [30] Ruelle, D., *Strange attractors*, *The Mathematical Intelligencer* **2** (1980) 126-137.
- [31] Kuś, M., *Integrals of motion for the Lorentz system*, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **16** (1983) L689-L691.
- [32] Kerner, E. H., *Statistical-mechanical theories in biology*, *Advances in Chemical Physics* **19** (1971) 325-352.
- [33] Goel, N. S., Maitra, S. C. and Montroll, E. W., *On the Volterra and other nonlinear models of interacting populations*, *Reviews of Modern Physics* **43** (1971) 231-275.
- [34] Hofbauer, J. and Sigmund, K., *The Theory of Evolution and Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).
- [35] Kerner, E. H., *Note on Hamiltonian format of Lotka-Volterra dynamics*, *Physics Letters A* **151** (1990) 401-402.
- [36] Kerner, E. H., *Comment on Hamiltonian structures for the n-dimensional Lotka-Volterra equations*, *Journal of Mathematical Physics* **38** (1997) 1218-1223.
- [37] Santilli, R. M., *Foundations of Theoretical Mechanics I* (Springer-Verlag, New York, 1978).
- [38] Whittaker, E. T., *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies* (Cambridge University Press, Cambridge, 1904).
- [39] Lanczos, C., *The Variational Principles of Mechanics* (University of Toronto Press, Toronto, 1949)
- [40] Sommerfeld, A., *Mechanics* (Academic Press, New York, 1952) .

- [41] Pars, L. A., *A Treatise on Analytical Dynamics* (Ox Bow Press, Woodbridge, 1965).
- [42] Dodonov, V. V., Man'ko, V. I. and Skarzhinsky, V. D., *Classically equivalent Hamiltonians and ambiguities of quantization: a particle in a magnetic field*, *Nuovo Cimento B* **69** (1982) 185-205.
- [43] Kennedy Jr., F. J. and Kerner, E. H., *Note on the inequivalence of classical and quantum Hamiltonians*, *American Journal of Physics* **33** (1965) 463-466.
- [44] Currie, D. G. and Saletan, E. J., *q-Equivalent particle Hamiltonians.I. The classical one-dimensional case*, *Journal of Mathematical Physics* **7** (1966) 967-974.
- [45] Gelman, Y. and Saletan, E. J., *q-Equivalent particle Hamiltonians.II. The two-dimensional classical oscillator*, *Nuovo Cimento B* **18** (1973) 53-71.
- [46] Marmo, G. and Saletan, E. J., *Ambiguities in the Lagrangian and Hamiltonian formalism: transformation properties*, *Nuovo Cimento B* **40** (1977) 67-89.
- [47] Okubo, S., *Does the equation of motion determine commutation relations?*, *Physical Review D* **22** (1980) 919-923.
- [48] Okubo, S., *Canonical quantization of some dissipative systems and nonuniqueness of Lagrangians*, *Physical Review A* **23** (1981) 2776-2784.
- [49] Bateman, H., *On dissipative systems and related variational principles*, *Physical Review* **38** (1931) 815-819.
- [50] Kanai, E., *On the quantization of the dissipative systems*, *Progress of the Theoretical Physics* **3** (1948) 440-442.
- [51] Brittin, W. E., *A note on the quantization of dissipative systems*, *Physical Review* **77** (1950) 396-397.
- [52] Havas, P., *The range of application of the Lagrange formalism*, *Nuovo Cimento (Supplemento)* **5** (1957) 363-388.

- [53] Kerner, E. H., *Note on the forced and damped oscillator in quantum mechanics*, Canadian Journal of Physics **36** (1958) 371-377.
- [54] Stevens, K. W. H., *The wave mechanical damped harmonic oscillator*, Proceedings of the Physical Society **62** (1958) 1027-1036.
- [55] Myers, V. W., *Quantum mechanical treatment of systems with a damping force proportional to the velocity*, American Journal of Physics **27** (1979) 507-508.
- [56] Denman, H. H., *On the linear friction in Lagrange's equation*, American Journal of Physics **34** (1966) 1147-1149.
- [57] Denman, H. H. and Buch, L. H., *Solution of the classical Hamilton-Jacobi equation for certain dissipative classical mechanical systems*, Journal of Mathematical Physics **14** (1973) 326-329.
- [58] Hasse, R. W., *On the quantum mechanical treatment of dissipative systems*, Journal of Mathematical Physics **16** (1975) 2005-2011.
- [59] Dodonov, V. V. and Man'ko, V. I., *Loss energy states of nonstationary quantum systems*, Nuovo Cimento B **44** (1978) 265-274.
- [60] Edwards, I. K., *Quantization of inequivalent classical Hamiltonians*, American Journal of Physics **47** (1979) 153-155.
- [61] Lemos, N. A., *Canonical approach to the damped harmonic oscillator*, American Journal of Physics **47** (1979) 857-858.
- [62] Pedrosa, I. A. and Baseia, B., *Dissipative systems and Bateman's Hamiltonian*, Hadronic Journal **6** (1983) 1733-1741.
- [63] Kobe, D. H., Reali, G., and Sieniutycz, S., *Lagrangian for dissipative systems*, American Journal of Physics **54** (1986) 997-999.

- [64] Ulm, C.I., Yeon, K. H. and Kahng, W. H., *The quantum damped driven harmonic oscillator*, Journal of Physics A: Mathematical and General **20** (1987) 611-626.
- [65] Marchioli, M. A. and Mizrahi, S. S., *Dissipative mass-accreting quantum oscillator*, Journal of Physics A: Mathematical and General **30** (1997) 2619-2635.
- [66] Menon, V., Chanana, N. and Singh, Y., *A fresh look at the BCK frictional Lagrangian*, Progress of Theoretical Physics **98** (1997) 321-329.
- [67] Ray, J. R., *Lagrangians and systems they describe- how not to treat dissipation in quantum mechanics*, American Journal of Physics **47** (1979) 626-629;  
Ray, J. R., *Dissipation and quantum theory*, Lettere al Nuovo Cimento **25** (1979) 47-50.
- [68] Greenberger, D. M., *A critique of the major approaches to damping in quantum theory*, Journal of Mathematical Physics **20** (1979) 762-770.
- [69] Cervero, J. M. and Villarroel, J., *On the quantum theory of the damped harmonic oscillator*, Journal of Physics A: Mathematical and General **17** (1984) 2963-2971.
- [70] Hojman, S. y Shepley, L. C., *Lagrangianos equivalentes*, Revista Mexicana de Física **28** (1982) 149-205.
- [71] Plank, M., *Hamiltonian structures for the n-dimensional Lotka-Volterra equations*, Journal of Mathematical Physics **36** (1995) 3520-3534.
- [72] Havas, P., *On the range of application of the Lagrange and Hamilton formalisms*, Physical Review **83** (1951) 224-225.
- [73] Havas, P., *Generalized Lagrange formalism and quantization rules*, Bulletin of the American Physical Society **1** (1956) 337-338.
- [74] Havas, P., *The connection between conservation laws and invariance groups: folklore, fiction, and fact*, Acta Physica Austriaca **38** (1973) 145-167.

- [75] Caldirola, P., *Forze non conservative nella meccanica quantistica*, Nuovo Cimento **18** (1941) 393-400.
- [76] Caldirola, P., *Dissipation in quantum theory (40 years of research)*, Hadronic Journal **6** (1983) 1400-1433.
- [77] Caldirola, P., *Quantum theory of nonconservative systems*, Nuovo Cimento B **77** (1983) 241-262.
- [78] Tarasov, V. E., *Quantum dissipative systems. I. Canonical quantization and quantum Liouville equation*, Theoretical and Mathematical Physics **100** (1994) 1100-1112.
- [79] Herrera, L., Núñez, L., Patiño, A. and Rago, H., *A variational principle and the classical and quantum mechanics of the damped harmonic oscillator*, American Journal of Physics **54** (1986) 273-277.
- [80] Dekker, H., *On the quantization of dissipative systems in the Lagrange-Hamilton formalism*, Zeitschrift für Physik B **21** (1975) 295-300.
- [81] Dekker, H., *Quantization of the linearly damped harmonic oscillator*, Physical Review A **16** (1977) 2126-2134.
- [82] Dekker, H., *On the phase space quantization of the linearly damped harmonic oscillator*, Physica A **95** (1979) 311-323.
- [83] Enz, C. P., *Hamiltonian description and quantization of dissipative systems*, Foundations of Physics **24** (1994) 1281-1292.
- [84] Rosen, G., *Formulations of Classical and Quantum Dynamical Theory* (Academic Press, New York, 1969).
- [85] Davis, D. R., *The inverse problem of the calculus of variations in a space of  $(n+1)$  dimensions*, Bulletin of the American Physical Society **35** (1929) 371-380.

- [86] Sarlet, W., *The Helmholtz conditions revisited. A new approach to the inverse problem of Lagrangian dynamics*, Journal of Physics A: Mathematical and General **15** (1982) 1503-1517.
- [87] Henneaux, M., *Equations of motion, commutation relations and ambiguities in the Lagrangian formalism*, Annals of Physics **140** (1982) 45-64.
- [88] Della Riccia, G., *On the Lagrange representation of a system of Newton equations*, in Dynamical Systems and Microphysics Geometry and Mechanics; André Avez, Austin Blaquiére and Angelo Marzollo, eds., (Academic Press, New York, 1982).
- [89] Engels, E., *On the Helmholtz conditions for the existence of a Lagrange formalism*, Nuovo Cimento B **26** (1975) 481-492;  
Engels, E., *A method for the computation of a Lagrangian within the context of the inverse problem of Newtonian mechanics*, Hadronic Journal **1** (1978) 465-469.
- [90] Yan, C. C., *Construction of Lagrangians and Hamiltonians from the equation of motion*, American Journal of Physics **46** (1978) 671-675.
- [91] Kobussen, J. A., *Some comments on the Lagrangian formalism for systems with general velocity-dependent forces*, Acta Physica Austriaca **51** (1979) 293-309.
- [92] Hojman, R., Hojman, S. and Sheinbaum, J., *Shortcut for constructing any Lagrangian from its equations of motion*, Physical Review D **28** (1983) 1333-1336.
- [93] Hojman, S. and Urrutia, L. F., *On the inverse problem of the calculus of variations*, Journal of Mathematical Physics **22** (1981) 1896-1903.
- [94] Henneaux, M. and Shepley, L.C., *Lagrangians for spherically symmetric potentials*, Journal of Mathematical Physics **23** (1982) 2101-2107.
- [95] Razavy, M., *On the quantization of dissipative systems*, Zeitschrift für Physik B **26** (1977) 201-206.

- [96] Razavy, M., *Hamilton's principal function for the Brownian motion of a particle and the Schrödinger-Langevin equation*, Canadian Journal of Physics **56** (1978) 311-320.
- [97] Gibbs, J. W., *Elementary Principles in Statistical Mechanics* (Yale University Press, 1902).
- [98] Tolman, R. C., *The Principles of Statistical Mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 1938).
- [99] Gerlich, G., *Die Verallgemeinerte Liouville-Gleichung*, Physica **69** (1973) 458-466.
- [100] Steeb, W-H., *Generalized Liouville equation, entropy, and dynamic systems containing limit cycles*, Physica A **95** (1979) 181-190.
- [101] Bolivar, A. O., *Quantization of non-Hamiltonian physical systems*, Physical Review A **58** (1998) 4330-4335.
- [102] Barnes, R. B. and Silverman, S., *Brownian motion as a natural limit to all measuring processes*, Reviews of Modern Physics **6** (1934) 162-192.
- [103] Dechoum, K., França, H. M. and Malta, C. P., *Classical aspects of the Pauli-Schrödinger equation*, Physics Letters A **248** (1998) 93-102.
- [104] Dechoum, K. and França, H. M., *Non-Heisenberg states of the harmonic oscillator*, Foundations of Physics **25** (1995) 1599-1620;  
Dechoum, K. and França, H. M., *Erratum*, Foundations of Physics **26** (1996) 1573.
- [105] Planck, M., *Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum*, Annalen der Physik **4** (1901) 553-566.
- [106] Bohr, N., *On the constitution of atoms and molecules*, Philosophical Magazine **26** (1913) 1-25.
- [107] Wilson, W., *The quantum-theory of radiation and line spectra*, Philosophical Magazine **29** (1915) 795-802.

- [108] Planck, M., *Die physikalische Struktur des Phasenraumes*, Annalen der Physik **50** (1916) 385-418.
- [109] Sommerfeld, A., *Zur Quantentheorie der Spektrallinien*, Annalen der Physik **51** (1916) 1-94.
- [110] Schwarzschild, K., *Zur Quantenhypothese*, Sitzungsberichte Preussische Akademie der Wissenschaften zu Berlin (1916) 548-568.
- [111] Epstein, P. S., *Zur Theorie des Starkeffektes*, Annalen der Physik **50** (1916) 489-520.
- [112] Pauling, L. and Wilson Jr., *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1935).
- [113] Jammer, M., *Conceptual Developments of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1966).
- [114] Yourgrau, W. and Mandelstam, S., *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory* (Dover, New York, 1968).
- [115] Einstein, A., *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **19** (1917) 82-92.
- [116] Gutzwiller, M. C., *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 1990).
- [117] Heller, E. J. and Tomsovic, S., *Postmodern quantum mechanics*, Physics Today (July) **38** (1993) 38-46.
- [118] Wise, M. N. and Brock, D. C., *The culture of quantum chaos*, Studies in History and Philosophy of Modern Physics **29** (1998) 369-389.
- [119] Bohm, D., *Quantum Theory* (Prentice-Hall, New York, 1951).
- [120] Pauli, W., *General Principles of Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1980).

- [121] Heisenberg, W., *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, Zeitschrift für Physik **33** (1925) 879-893.
- [122] Heisenberg, W., *Über quantentheoretische Kinematik und Mechanik*, Mathematische Annalen **95** (1926) 683-705.
- [123] van der Waerden, B. L., *Sources of Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1967).
- [124] Born, M. und Jordan, P., *Zur Quantenmechanik*, Zeitschrift für Physik **34** (1925) 858-888.
- [125] Dirac, P. A. M., *The fundamental equations of quantum mechanics*, Proceedings of the Royal Society A **109** (1926) 642-653.
- [126] Ford, G. W., Kac, M. and Mazur, P., *Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators*, Journal of Mathematical Physics **6** (1965) 504-515.
- [127] Ford, G. W., Kac, M., *On the quantum Langevin equation*, Journal of Statistical Physics **46** (1987) 803-810.
- [128] Schrödinger, E., *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik **79** (1926) 361-376.
- [129] Schönberg, M., *A non-linear generalization of the Schrödinger and Dirac equations*, Nuovo Cimento **11** (1953) 674-682.
- [130] Pal, S., *Theory of quantum friction and the deep inelastic process*, Physical Review A **39** (1989) 3825-3832.
- [131] Schrödinger, E., *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik **79** (1926) 489-527.
- [132] Dirac, P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics* ( Clarendon, London, 1930).
- [133] Dirac, P. A. M., *Generalized Hamiltonian dynamics*, Canadian Journal of Mathematics **2** (1950) 129-149.

- [134] Dirac, P. A. M., *Lectures on Quantum Theory* (Yeshiva University, New York, 1964).
- [135] Lemos, N. A., *Physical consequences of the choice of the Lagrangian*, *Physical Review D* **24** (1981) 1036-1039.
- [136] Lemos, N. A., *Note on the Lagrangian description of dissipative systems*, *American Journal of Physics* **49** (1981) 1181-1182.
- [137] d'Espagnat, B., *Veiled Reality* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1995).
- [138] Podolsky, B., *Quantum-mechanical correct form of Hamiltonian function for conservative systems*, *Physical Review* **32** (1928) 812-816.
- [139] Heisenberg, W., *The Physical Principles of Quantum Theory* (Doubleday, New York, 1930).
- [140] Balachandran, A. P., Govindarajan, T. R. and Vijayalakshmi, B., *Particles of half-integral helicity by quantization of a nonrelativistic free particle, and related topics*, *Physical Review D* **18** (1978) 1850-1959.
- [141] Marmo, G. and Saletan, E. J., *q-Equivalent particle Hamiltonians, III. The two-dimensional quantum oscillator*, *Hadronic Journal* **1** (1978) 955-965.
- [142] Hojman, S. and Montemayor, R., *S-Equivalent Lagrangians for free particles and canonical quantization*, *Hadronic Journal* **3** (1980) 1644-1657.
- [143] Dodonov, V. V., Man'ko V. I. and Skarzhinsky, V. D., *The inverse problem of the variational calculus and the nonuniqueness of the quantization of classical systems*, *Hadronic Journal* **4** (1981) 1734-1804.
- [144] Dodonov, V. V., Man'ko, V. I. and Skarzhinsky, V. D., *Nonuniqueness of the variational description of classical systems and the quantization problem*, *Proceedings of the Lebedev Physics Institute*, A. A. Komar, ed., (Nova Science, New York, 1988) pp.: 49-122.

- [145] Stevens, K. W. H., *A comment on quantum-mechanical damping*, Physics Letters A **75** (1980) 463-464.
- [146] Senitzky, I. R., *Dissipation in quantum mechanics. The harmonic oscillator*, Physical Review **15** (1960) 670-679.
- [147] Dekker, H., *Classical and quantum mechanics of the damped harmonic oscillator*, Physics Reports **80** (1981) 1-112.
- [148] Remaud, B. and Hernandez, E. S., *Damping of the wave packet motion in a general time-dependent quadratic field*, Journal of Physics A: Mathematical and General **13** (1980) 2013-2028.
- [149] Brinati, J. R. and Mizrahi, S. S., *Quantum friction in the c-number picture: the damped harmonic oscillator*, Journal of Mathematical Physics **21** (1980) 2154-2158.
- [150] Tartaglia, A., *General Lagrangians for the motion of a point particle in a viscous medium and the problem of quantization*, Nuovo Cimento B **57** (1980) 131-145.
- [151] Negro, F. and Tartaglia, A., *Quantization of motion in a velocity-dependent field: the  $v^2$  case*, Physical Review A **23** (1981) 1591-1593;  
Negro, F. and Tartaglia, A., *The quantization of friction quadratic*, Physics Letters A **77** (1980) 1-2.
- [152] Lemos, N. A., *The Heisenberg picture is not privileged for the canonical quantization of dissipative systems*, Physical Review D **24** (1981) 2328-2340.
- [153] Colegrave, R. K. and Abdalla, M. S., *Harmonic oscillator with exponentially decaying mass*, Journal of Physics A: Mathematical and General **14** (1981) 2269-2280.
- [154] Geicke, J., *Semi-classical quantisation of dissipative equations*, Journal of Physics A: Mathematical and General **22** (1989) 1017-1025.
- [155] Cavalcanti, R. M., *Wave function of a Brownian particle*, Physical Review E **58** (1998) 6807-6809.

- [156] Harris, E. G., *Quantum Theory of the damped harmonic oscillator*, Physical Review A (1990) 3685-3694.
- [157] Caldeira, A. O. and Leggett, A. J., *Path integral approach to quantum Brownian motion*, Physica A **121** (1983) 587-616.
- [158] Toledo Piza, F. R. and Nemes, M. C., *A quantum phenomenology of viscosity*, Revista Brasileira de Física **7** (1977) 261-271.
- [159] Ghosh, G. and Hasse, R. W., *Coherent state and the damped harmonic oscillator*, Physical Review A **24** (1981) 1621-1623.
- [160] Polykronakos, A. P. and Tzani, R., *Schrödinger equation for particle with friction*, Physics Letters B **302** (1993) 255-260.
- [161] Temple, G., *The fundamental paradox of the quantum theory*, Nature **135** (1935) 957.
- [162] Temple, G., *The fundamental paradox of the quantum theory*, Nature **136** (1935) 179-180.
- [163] Frölich, H. and Guth, E., *The fundamental paradox of the quantum theory*, Nature **136** (1935) 179-180.
- [164] Peierls, R., *The fundamental paradox of the quantum theory*, Nature **136** (1935) 395.
- [165] Shewell, J. R., *On the formation of quantum-mechanical operators*, American Journal of Physics **27** (1959) 16-21.
- [166] Ashtekar, A., *On the relation between classical and quantum observables*, Communications in Mathematical Physics **71** (1980) 59-64.
- [167] Feynman, R. P., *Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics*, Review Modern of Physics **20** (1948) 367-387;

- Dirac, P. A. M., *The Lagrangian in quantum mechanics*, Physicalische Zeitschrift der Sowjetunion **3** (1933) 64-72.
- [168] Cheng, K-S., *Equivalent Lagrangians and path integration for generalized mechanics*, Journal of Mathematical Physics **20** (1974) 808-811.
- [169] Schweber, S. S., *On Feynman quantization*, Journal of Mathematical Physics **3** (1962) 831-842.
- [170] Ali, M. K., *Quantization of the double pendulum*, Canadian Journal of Physics **74** (1996) 255-262.
- [171] Schulman, L. S., *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [172] Cohen, L., *Hamiltonian operators via Feynman path integrals*, Journal of Mathematical Physics **11** (1970) 3296-3297.
- [173] Kerner, E. H. and Sutcliffe, W. G., *Unique Hamiltonian operators via Feynman path integrals*, Journal of Mathematical Physics **11** (1970) 391-393.
- [174] Testa, F. J., *Quantum operator ordering and the Feynman formulation*, Journal of Mathematical Physics **12** (1971) 1471-1474.
- [175] Mayes, I. W. and Dowker, J. S., *Hamiltonian orderings and functional integrals*, Journal of Mathematical Physics **14** (1973) 434-439.
- [176] Dowker, J. S., *Path integrals and ordering rules*, Journal of Mathematical Physics **17** (1976) 1873-1874.
- [177] Dewey, T. G., *Numerical mathematics of Feynman path integrals and the operator ordering problem*, Physical Review A **42** (1990) 32-37.
- [178] Jannussis, A. D., Brodimas, G. N. and Streclas, A., *Propagator with friction in quantum mechanics*, Physics Letters A **74** (1979) 6-10.

- [179] Cheng, B. K., *Exact propagator for damped time-dependent harmonic oscillator*, Revista Brasileira de Física **13** (1983) 360-368.
- [180] Cheng, B. K., *Exact evaluation of the propagator for the damped harmonic oscillator*, Journal of Physics A: Mathematical and General **17** (1984) 2475-2484.
- [181] Cheng, B. K., *The propagator of the time-dependent forced harmonic oscillator with time-dependent damping*, Journal of Mathematical Physics **27** (1986) 217-220.
- [182] Botelho, L. C. L., and Silva, E. P. da, *Feynman path-integral for the damped Caldirola-Kanai action*, Physical Review E **58** (1998) 1141-1143.
- [183] Botelho, L. C. L., and Silva, E. P. da, *Quantum geometry for the Brownian particle*, Modern Physics Letters B **12** (1998) 1191-1194.
- [184] Yeon, K-H., Walls, D-F., Um, C. I., George, T. F. and Pandey, L. N., *Quantum correspondence for linear canonical transformations on general Hamiltonian systems*, Physical Review A **58** (1998) 1765-1774.
- [185] Srivastava, S., Vishwamittar and Minhas, I. S., *On the quantization of linearly damped harmonic oscillator*, Journal of Mathematical Physics **32** (1991) 1510-1515.
- [186] Hayakawa, S., *Atomism and cosmology*, Progress of Theoretical Physics (Supplement) (1965) 532-541.
- [187] Surdin, M., *Derivation of Schrödinger's equation from stochastic electrodynamics*, International Journal of Theoretical Physics **4** (1971) 117-123.
- [188] Olavo, L. S. F., *Foundations of quantum mechanics: non-relativistic theory*, Physica A **262** (1999) 197-214.
- [189] Lindblad, G., *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Communications in Mathematical Physics **48** (1976) 119-130.

- [190] Ambegaokar, V., *Quantum Brownian-motion and its classical limit*, Berliner Bunsen-gesellschaft für Physikalische Chemie **95** (1991) 400-404.
- [191] Diósi, L., *On high-temperature Markovian equation for quantum Brownian motion*, Europhysics Letters **22** (1993) 1-3.
- [192] Diósi, L., *Caldeira-Leggett master equation and medium temperatures*, Physica A **199** (1993) 517-526.
- [193] Munro, W. J. and Gardiner, C. W., *Non-rotating-wave master equation*, Physical Review A **53** (1996) 2633-2640.
- [194] Gao, S., *Dissipative quantum dynamics with a Lindblad functional*, Physical Review Letters **79** (1997) 3101-3104.
- [195] Presilla, C., Onofrio, R. and Patriarca, M., *Classical and quantum measurements of position*, Journal of Physics A: Mathematical General **30** (1997) 7385-7411.
- [196] Jakobs K., Tuttonen I., Wisemann, H. M. and Schiller, S., *Quantum noise in the position measurement of a cavity mirror undergoing Brownian motion*, Physical Review A **60** (1999) 538-548.
- [197] Pechukas, P., *Reduced dynamics need not be completely positive*, Physical Review Letters **73** (1994) 1060-1062.
- [198] Tameshitit, A. and Sipe, J. E., *Positive quantum Brownian evolution*, Physical Review Letters **77** (1996) 2600-2603.
- [199] Kohen D., Marston, C. C. and Tannor, D. J., *Phase space approach to theories of quantum dissipation*, Journal of Chemical Physics **107** (1997) 5236-5253.
- [200] Peixoto de Faria, J. G. and Nemes, M. C., *Phenomenological criteria for the validity of quantum Markovian equations*, Journal of Physics A: Mathematical General **31** (1998) 7095-7103.

- [201] Wiseman, H. M. and Munro, W. J., *Comment on "Dissipative quantum dynamics with a Lindblad functional"*, Physical Review Letters **80** (1998) 5702;  
Gao, S., (Reply) Physical Review Letters **80** (1998) 5703.
- [202] Ford, G. W. and O'Connell, R. F., *Comment on "Dissipative quantum dynamics with a Lindblad functional"*, Physical Review Letters **82** (1999) 3376;  
Gao, S., (Reply) Physical Review Letters **82** (1998) 3377.
- [203] Patriarca M., *Statistical correlations in the oscillator model of quantum dissipative systems*, Nuovo Cimento B **111** (1996) 61-72.
- [204] Morais Smith, C. and Caldeira, A. O., *Generalized Feynman-Vernon approach to dissipative quantum systems*, Physical Review A **36** (1987) 3509-3511.
- [205] Morais Smith, C. and Caldeira, A. O., *Application to the generalized Feynman-Vernon approach to a single system: the damped harmonic oscillator*, Physical Review A **41** (1990) 3103-3115.
- [206] Hakim, V. and Ambegaokar, V., *Quantum theory of a free particle interacting with a linearly dissipative environment*, Physical Review A **32** 423-434.
- [207] Grabert, H., Schramm, P. and Ingold, G-L., *Quantum Brownian motion: The functional integral approach*, Physics Reports **168** (1998) 115-207.
- [208] Stenholm, S., *Quantum theory of linear friction*, Brazilian Journal of Physics **27** (1997) 214-237,
- [209] Kostin, M. D., *On the Schrödinger-Langevin equation*, Journal of Chemical Physics **57** (1972) 3589-3591.
- [210] Razavy, M., *Equation-of-motion approach to the problem of damped motion in quantum mechanics*, Physical Review A **41** (1990) 1211-1217.

- [211] Skagerstam, B. K., *Stochastic mechanics and dissipative forces*, Journal of Mathematical Physics **18** (1977) 308-311.
- [212] Yasue, K., *Quantum mechanics of nonconservative systems*, Annals of Physics **114** (1978) 479-496.
- [213] Nelson, E., *Derivation of the Schrödinger equation from Newtonian mechanics*, Physical Review **150** (1966) 1079-1085.
- [214] Schuch, D., *Effective description of the dissipative interaction between simple model-systems and their environment*, International Journal of Quantum Chemistry **72** (1999) 537-547.
- [215] Bohm D. and Hiley, B. J., *Unbroken quantum realism, from microscopic to macroscopic levels*, Physical Review Letters **55** (1985) 2511-2514.
- [216] Bohm, D. and Hiley, B. J., *The Undivided Universe: An Ontological Interpretation of Quantum Mechanics* (Routledge, London, 1993).
- [217] Rohrlich, F., *There is good physics in theory reduction?*, Foundations of Physics **20** (1990) 1399-1412.
- [218] Holland, P. R., *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [219] Busch, P., Lahti, P. J. and Mittelstädt, P., *The Quantum Theory of Measurement* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [220] Home, D., *Conceptual Foundations of Quantum Physics* (Plenum Press, New York, 1997)
- [221] Bohm, D. and Hiley, B. J., *On a quantum algebraic approach to a generalized phase space*, Foundations Physics **11** (1981) 179-203.

- [222] Heller, E. J., *Wigner phase space method: Analysis for semiclassical applications*, Journal of Chemical Physics **65** (1976) 1289-1298.
- [223] Chanana, N., Menon, V. J., and Singh Y., *Classical limit of quantum Brownian probability*, Physical Review E **53** (1996) 5477-5479.
- [224] Liboff, R. L., *Bohr correspondence principle for large quantum numbers*, Foundations of Physics **5** (1975) 271-283.
- [225] Liboff, R. L., *On the potential  $x^{2N}$  and the correspondence principle*, International Journal of Theoretical Physics **18** (1979) 185-191.
- [226] Liboff, R. L., *On the validity of the Bohr correspondence principle*, Annales de la Fondation Louis de Broglie **5** (1980) 215-224.
- [227] Liboff, R. L., *The correspondence principle revisited*, Physics Today (February) **37** (1984) 50-55.
- [228] Rosen, N., *The relation between classical and quantum mechanics*, American Journal of Physics **32** (1964) 597-600.
- [229] Rosen, N., *Quantum particles and classical particles*, Foundation of Physics **16** (1986) 687-700.
- [230] Brown, L. S., *Classical limit and the WKB approximation*, American Journal of Physics **40** (1972) 371-376.
- [231] Home, D. and Sengupta, S., *Classical limit of quantum mechanics*, American Journal of Physics **51** (1983) 265-267.
- [232] Home, D. and Sengupta, S., *Classical limit of quantum mechanics. A paradoxal example*, Nuovo Cimento B **82** (1984) 214-223.
- [233] Qian, S. W. and Huang, X. Y., *On the classical limit of the hydrogen wavefunction*, Physics Letters A **115** (1986) 319-321.

- [234] Qian, S. W. and Huang, X. Y., *On the classical limit of the stationary state wavefunction*, Physics Letters A **117** (1986) 166-168.
- [235] Qian, S. W. and Huang, X. Y., *On the classical limit of the quantum mechanical wavepacket*, Physics Letters A **121** (1987) 211-212.
- [236] Rowe, P. E. G., *The classical limit of quantum mechanical Coulomb scattering*, Journal of Physics A: Mathematical and General **20** (1987) 1419-1431.
- [237] Leubner, C., Margot, A. and Schupfer, N., *Critique and correction of the textbook comparison between classical and quantum harmonic oscillator probability densities*, American Journal of Physics **56** (1988) 1123-1129.
- [238] Sen, D., Basu, A. N. and Sengupta, S., *Quantum-mechanical calculation of travel time across a potential barrier and the problem of classical limit*, Nuovo Cimento B **110** (1995) 133-144.
- [239] Liu, Q-H., *The classical limit of quantum mechanics and the Fejér sum of the Fourier series expansion of a classical quantity*, Journal of Physics A: Mathematical and General **32** (1999) L57-L62.
- [240] Ajanapon, P., *Classical limit of the path-integral formulation of quantum mechanics in terms of the density matrix*, American Journal of Physics **55** (1987) 159-163.
- [241] Cabrera, G. G. and Kiwi, M., *Large quantum-number states and the correspondence principle*, Physical Review A **36** (1987) 2995-2998.
- [242] Davidovic, D. M. and Lalovic, D., *Quantum states which behave classically*, Journal of Physics A: Mathematical and General **31** (1998) 2281-2285.
- [243] Basu, A. N. and Sengupta, S., *Quantum-mechanical theory of scattering and the problem of classical limit*, Nuovo Cimento B **106** (1991) 511-523.
- [244] Hepp, K., *The classical limit of quantum mechanical correlation functions*, Communications in Mathematical Physics **35** (1974) 265-277.

- [245] Simon, B., *The classical limit of quantum partition functions*, Communications in Mathematical Physics **71** (1980) 247-276.
- [246] Bhaumik, D., Dutta-Roy, B. and Ghosh, G., *Classical limit of the hydrogen atom*, Journal of Physics A: Mathematical and General **19** (1986) 1355-1364.
- [247] Kakazu, K., *Various classical limits, centre of mass and coherent states*, Nuovo Cimento B **109** (1994) 371-386,
- [248] Ehrenfest, P., *Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik*, Zeitschrift für Physik **45** (1927) 455-457.
- [249] Ballentine, L. E., Yang, Y. and Zibin, J. P., *Inadequacy of Ehrenfest's theorem to characterize the classical regime*, Physical Review A **50** (1994) 2854-2859.
- [250] Einstein, A., *Elementare Überlegungen zur Interpretation der Grundlagen der Quantenmechanik*, in Scientific Papers Presented to Max Born on his Retirement from the Tait Chair of Natural Philosophy in the University of Edinburgh (Olivier and Boyd, Edinburgh, 1953) pp.: 33-40.
- [251] Einstein, A., in The Born-Einstein Letters, M. Born, ed., (Walker and Company, New York, 1969)
- [252] Joos, F. and Zeh, H. D., *The emergence of classical properties through interaction with the environment*, Zeitschrift für Physik B **59** (1985) 223-243.
- [253] Zurek, W. H., *Decoherence and the transition from quantum to classical*, Physics Today **44** (October) (1991) 36-44.
- [254] Zurek, W. H., *Preferred states, predictability, classicality and the environment-induced decoherence*, Progress of Theoretical Physics **89** (1993) 281-312.
- [255] Zurek, W. H., *Decoherence, einselection and the existential interpretation (the rough guide)*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London A **356** (1998) 1793-1821.

- [256] Zurek, W. H., *Decoherence, Chaos, quantum-classical correspondence, and the algorithmic arrow of time*, Physica Scripta T **76** (1998) 186-198.
- [257] Zurek, W. H., *Decoherence, Chaos, quantum-classical correspondence, and the arrow of time*, Acta Physica Polonica B **29** (1998) 3689-3709.
- [258] Zurek, W. H. and Paz, J. P., *Decoherence, chaos, and second law*, Physical Review Letters **72** (1994) 2508-2511.
- [259] Zurek, W. H. and Paz, J. P., *Decoherence, chaos, the quantum and the classical*, Nuovo Cimento B **110** (1995) 611-624.
- [260] Habib, S., Shizume, K. and Zurek, W. H., *Decoherence, chaos and the correspondence principle*, Physical Review Letters **80** (1998) 4361-4365.
- [261] Hermann, R., *Geometry, Physics, and System* (Marcel Dekker, New York, 1973).
- [262] Wenzel, G., *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik*, Zeitschrift für Physik **38** (1926) 518-529.
- [263] Kramers, H., *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, Zeitschrift für Physik **39** (1926) 828-840.
- [264] Brillouin, L., *Remarques sur la mécanique ondulatoire*, Journal Physique et Radium **6** (1926) 333-363.
- [265] Korsch, H. J. and Möhlenkamp, R., *A note on multidimensional WKB wavefunctions: local and global semiclassical approximations*, Physics Letters A **67** (1978) 110-112.
- [266] Wigner, E. P., *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Physical Review **40** (1932) 749-759.
- [267] Moyal, J. E., *Quantum mechanics as a statistical theory*, Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **45** (1949) 99-124.

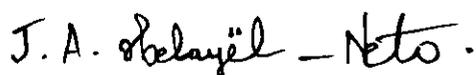
- [268] Kursunoglu, B., *Modern Quantum Theory* (W E Freeman, San Francisco, 1962)
- [269] Cohen, L., *Generalized phase-space distribution functions*, *Journal of Mathematical Physics* **7** (1966) 781-786.
- [270] Margenau, H. and Cohen, L., *Probabilities in quantum mechanics*, in *Quantum Theory and Reality*, M. Bunge, ed., (Springer-Verlag, Berlin, 1967) vol.2.
- [271] Lee, H-W. and Scully, M. O., *Wigner phase-space description of a Morse oscillator*, *Journal of Chemical Physics* **77** (1982) 4604-4610.
- [272] Hillery, M., O'Connell, R. F., Scully, M. O. and Wigner, E. P., *Distribution functions in physics: Fundamentals*, *Physics Reports* **106** (1984) 121-167.
- [273] Lee, H-W., *Theory and application of the quantum phase-space distribution functions*, *Physics Reports* **259** (1995) 147-211.
- [274] Kirkwood, J. G., *Quantum statistics of almost classical assemblies*, *Physical Review* **44** (1933) 31-37.
- [275] O'Connell, R. F. and Wigner, E. P., *Some properties of a non-negative quantum-mechanical distribution function*, *Physics Letters A* **85** (1981) 121-126.
- [276] Wang, M. C., *On the theory of the Brownian motion II*, *Reviews of Modern Physics* **17** (1945) 323-342.
- [277] Balescu, R., *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (John Wiley, New York, 1975).
- [278] van Kampen, N. G., *Stochastic differential equations*, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, vol. 3, E. D. G. Cohen, ed., (North-Holland, Amsterdam, 1975).
- [279] van Kampen, N. G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).

- [280] Zwanzig, R., *Nonlinear generalized Langevin equations*, Journal of Statistical Physics **9** (1973) 215-220.
- [281] Mazur, P. and Braun, E., *On the statistical mechanics theory of Brownian motion*, Physica **30** (1964) 1973-1988.
- [282] Mori, H., *Transport, collective motion, and Brownian motion*, Progress of Theoretical Physics **33** (1965) 423-455.
- [283] Ullersma, P., *An exactly solvable model for Brownian motion*, Physica **32** (1966) 27-55.
- [284] Oppenheim, I., *Probabilistic and dynamic approaches to the theory of stochastic processes*, Advances in Chemical Physics (Stochastic Processes in Chemical Physics, 1969) 1-10.
- [285] Haken, H., Synergetics (Springer-verlag, Berlin, 1977).
- [286] Caldeira, A. O., *Interference and coherent tunnelling in dissipative quantum systems*, Helvetica Physica Acta **61** (1988) 611-621.
- [287] van der Pol, B., *Forced oscillations in a circuit with non-linear resistance. (Receptive with reactive triode)*, Philosophical Magazine **3** (1927) 65-80.

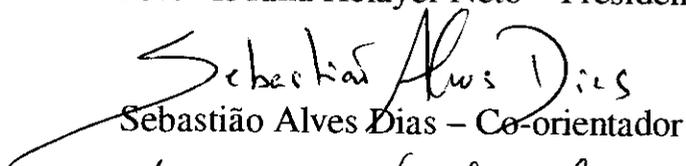
**“REPRESENTAÇÃO DE WIGNER DA MECÂNICA CLÁSSICA,  
QUANTIZAÇÃO E LIMITE CLÁSSICO”**

***Bolivar Alves Oliveira***

Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



José Abdalla Helayël-Neto – Presidente



Sebastião Alves Dias – Co-orientador



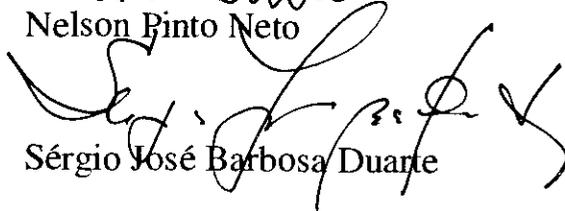
Nivaldo Agostinho Lemos



Olavo Leopoldino da Silva Filho



Nelson Pinto Neto



Sérgio José Barbosa Duarte

Rio de Janeiro, 25 de maio de 2000