

# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Curso de Pós-Graduação em Física

## *EFEITOS DE MEMÓRIA EM OSCILADORES QUÂNTICOS*

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Ciências

*Antonio José Farias Nobrega*

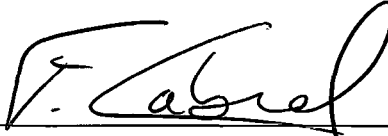
FLORIANÓPOLIS

Agosto -1991

# EFEITOS DE MEMÓRIA EM OSCILADORES QUÂNTICOS

*Antonio José Farias Nobrega*

Esta dissertação foi julgada **adequada** para a obtenção do grau de Mestre em Ciências, especialidade em Física, e aprovada em sua versão final pelo orientador e demais membros da banca examinadora.

  
Prof. Dr. Fernando Cabral  
Orientador

  
Prof. Dr. Hélio José Müller  
Coordenador

Banca examinadora:

  
Prof. Dr. Alexandre Lago

  
Prof. Dr. Fernando Cabral

Prof. Dr. Jason Alfredo Carlson Gallas

## **AGRADECIMENTOS**

- À Universidade Federal de Santa Catarina
- Ao Instituto de Tecnologia da Amazônia
- Ao Prof. Fernando Cabral, por sua orientação e dedicação no decorrer deste trabalho
- Aos Professores da banca examinadora por suas sugestões à dissertação
- À minha esposa Lourdes e à minha filha Bárbara pelo apoio e afeto durante a realização deste trabalho
- Ao amigo Walter Esteves de Castro Júnior, por sua contribuição inicial na digitação deste trabalho
- Ao colega Gean Carlo Dallagnolo, por sua contribuição inicial na construção dos gráficos
- Aos professores que participaram direta e indiretamente em minha formação no decorrer deste trabalho
- Aos funcionários do Departamento de Física que direta ou indiretamente contribuíram na realização deste trabalho
- Aos funcionários da Biblioteca Setorial de Ciências Exatas pela atenção constante às minhas consultas
- Aos colegas do Curso de Pós-Graduação pelo estímulo e amizade demonstrados durante a elaboração deste trabalho e no decorrer do Curso
- Ao agente financiador CNPQ
- A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho

*Ao Criador Supremo,  
com meu louvor e meu espírito*

*A meu pai, por seu exemplo de virtudes  
e imensa gratidão, e a minha mãe, por  
seu laço de amor e dedicação*

## RESUMO

Este trabalho propõe-se a generalizar a equação de Schrödinger-Langevin para sistemas com memória. Essa equação descreve sistemas quânticos dissipativos em que a força dissipativa é proporcional à velocidade de deslocamento da partícula. Essa generalização descreve sistemas em que a partícula quântica é linearmente acoplada a um banho térmico.

O problema da partícula quântica acoplada a um banho térmico aparece em muitos campos da Física, como por exemplo: mecânica estatística, matéria condensada, óptica quântica, física atômica. Para o sistema aqui estudado, considera-se como potencial externo o potencial do oscilador harmônico quântico. O acoplamento do oscilador com o banho térmico leva o sistema a apresentar efeitos de memória. Isto acontece porque o banho, além do sistema, também modifica-se com o decorrer do tempo. Essa interação do sistema com o banho térmico é descrito pela função memória  $\mu(t-t')$ . Assim, a equação obtida neste trabalho, é a **equação de Schrödinger-Langevin para o sistema com memória**, e dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(r, t')}{\Psi(r, t')} - g(t)\Psi$$

Deve-se destacar que, além de se obter a equação de Schrödinger-Langevin para o sistema com memória, obtém-se ainda uma função de onda  $\Psi$  que satisfaz esta equação (para o potencial do oscilador), e permite o cálculo dos valores esperados das variáveis dinâmicas *posição* ( $x$ ), *momento* ( $p$ ) e *energia* ( $E$ ) desses sistemas. Os resultados encontrados para os valores esperados dessas variáveis satisfazem o teorema de Ehrenfest. Calculam-se, também, as relações de dispersão  $\Delta x$  e  $\Delta p$  e a taxa de variação  $\dot{E}(t)$  para a energia, obtendo os seguintes resultados:

$$\langle x \rangle = \xi(t)$$

$$\langle p \rangle = m\dot{\xi}(t)$$

$$\Delta p \Delta x = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

$$\dot{E}(t) = -m\gamma \xi \int_{-\infty}^{\infty} \mu(t-t') \dot{\xi}(t') dt'$$

## ABSTRACT

This working proposes to generalize the Schrödinger-Langevin's equation to systems with memory. This equation describes quantum systems dissipated where the dissipative force is proportional to velocity of particle. The dissipative force is proportional to the displacement's velocity of particle. This generalation describes when the quantum particle is coupled linearly to a termic bath.

The problem of the quantum particle coupled to a termic bath appears in many Phisics fields, for egs.: statistic mechanics, condensed matter, quantum optical, atomic physics. To the system studied, we consider the external potencial like the same that the harmonic oscillator quantum potencial. The coupling of the oscillator with the termic bath takes the system to present effects of memory. This happens because of the bath, besides the system, changes with passing the time. This interaction of the system with the termic bath is described by the memory function  $\mu(t - t')$ .

The equation obted at this work is the **Schrödinger-Langevin's** equation to the **system with memory**, and gives by:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(r, t')}{\Psi(r, t')} - g(t)\Psi$$

We should detach that, besides to obtain the Schrödinger-Langevin's equation to system with memory, we also obtain a wave function that satisfies this equation (to the oscillator's potencial), and permits the calculation of the values expected of the dinamic variables *position* ( $x$ ), *moment* ( $p$ ) and *energy* ( $E$ ) of these systems. The results finded to the expected values of these variables satisfies the Ehrenfest's theorem. We also calcule the dispersion relashion  $\Delta x$  and  $\Delta p$  and the variation rate  $\dot{E}(t)$  to the energy, obtaining the results below:

$$\langle x \rangle = \xi(t)$$

$$\langle p \rangle = m\dot{\xi}(t)$$

$$\Delta p \Delta x = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

$$\dot{E}(t) = -m\gamma \xi \int_{-\infty}^{\infty} \mu(t-t') \dot{\xi}(t') dt'$$

# ÍNDICE

<b>CAPÍTULO I</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>01</b>
<b>CAPÍTULO II</b>	<b>FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA E SISTEMAS DISSIPATIVOS SEM MEMÓRIA</b>	
II.1	Introdução	04
II.2	Formulação hidrodinâmica da mecânica quântica	07
II.3	Equação de Schrödinger-Langevin	12
II.4	Solução da equação de Schrödinger-Langevin	20
II.5	Energia	25
<b>CAPÍTULO III</b>	<b>SISTEMAS DISSIPATIVOS COM MEMÓRIA</b>	
III.1	Introdução	31
III.2	Equação de Schrödinger-Langevin com memória	33
III.3	Solução da equação de Schrödinger-Langevin com memória	38
III.4	Energia	42
III.5	Solução particular da equação de Schrödinger-Langevin com memória	43
<b>CAPÍTULO IV</b>	<b>RELAÇÕES DE INCERTEZA E EVOLUÇÃO TEMPORAL</b>	
IV.1	Introdução	49
IV.2	Equação de Schrödinger-Langevin	52
IV.3	Equação de Schrödinger-Langevin com memória	53
IV.4	Gráficos	61
<b>CAPÍTULO V</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>76</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>78</b>

## CAPÍTULO I INTRODUÇÃO

Um sistema é dissipativo quando a sua energia não se conserva com o decorrer do tempo. Se é clássico, ou quântico, a energia do sistema não é uma constante de movimento. Isto ocorre, porque o sistema ao interagir com a sua vizinhança, forças externas atuam sobre ele de modo a dissipar constantemente sua energia. Essas forças são de natureza não conservativas. Deve-se observar, entretanto, que um sistema dissipativo não viola de nenhum modo um dos princípios mais fundamentais da Física: *A conservação da energia* — a energia total de um sistema isolado é sempre constante. Quando se analisa um sistema isolado, pode acontecer que ele se constitua de vários subsistemas, de modo que, dentre eles, há aqueles que fornecem mais energia do que recebem de sua vizinhança, e evidentemente, são considerados sistemas dissipativos.

Este trabalho trata de sistemas quânticos dissipativos. Para caracterizar um sistema quântico, é preciso que este seja descrito por operadores que representam observáveis e/ou uma função de onda. Um sistema quântico que possui um operador  $H$  independente do tempo que é associado a sua energia, é um sistema conservativo. A equação que descreve a evolução temporal desse sistema é a equação de Schrödinger. Um sistema quântico dissipativo, entretanto, é um sistema em que a energia não é conservada. Neste caso, mesmo sendo possível atribuir um hamiltoniano a sua energia, este será uma função do tempo. No entanto, há sistemas dissipativos em que não é possível fazer essa associação, de modo que usa-se a definição de valor esperado para o cálculo de sua energia. Esse tipo de sistema é caracterizado por uma força externa de natureza puramente dissipativa. Os sistemas aqui tratados levam em consideração as forças dissipativas.

O capítulo II refere-se a um tipo de sistema quântico (análogo a um sistema clássico), em que a força dissipativa é proporcional à velocidade de deslocamento da partícula. A equação que descreve este sistema é a *equação de Schrödinger-Langevin*<sup>1</sup>

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - f(t)\Psi \quad 1.1$$

Propõe-se um tipo de solução<sup>1</sup>, cujos resultados são interessantes à luz da interpretação física. Considera-se o potencial do oscilador, visto que inúmeros fenômenos que ocorrem na natureza apresentam características oscilatórias. A função de onda proposta como solução da equação (1.1) é composta de duas funções, uma



função real e outra imaginária; a parte real é solução da equação de Schrödinger independente do tempo. O outro resultado obtido é a equação de movimento para o oscilador harmônico clássico dissipativo. Isto não significa que o sistema aqui descrito pelo oscilador quântico tenha um comportamento similar ao seu análogo clássico. Segundo o teorema de Ehrenfest, apenas os valores médios das variáveis dinâmicas que descrevem o sistema quântico têm um comportamento clássico.

O capítulo III trata de um sistema quântico em que se consideram os efeitos de memória. De um modo geral, isto significa que a interação que caracteriza esse sistema não depende do tempo atual em que as medidas são feitas, mas de tempos passados. Será mostrado que a equação que descreve este tipo de sistema, é a equação de Schrödinger-Langevin com memória,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(r, t')}{\Psi(r, t')} - g(t)\Psi \quad 1.2$$

onde  $\mu(t-t')$  caracteriza a *função memória* do sistema. Para o caso em que a igualdade  $\mu(t-t') = \delta(t-t')$  for satisfeita, a equação (1.2) reduz-se à equação (1.1).

O procedimento de cálculo e a escolha da função de onda para o sistema acima descrito, foram similares ao sistema sem memória. Os resultados ainda que, semelhantes na forma, são mais abrangentes que os anteriores, pois levam-se em conta os efeitos de memória.

Deve-se destacar que, nas demonstrações das equações (1.1) e (1.2), usou-se o formalismo hidrodinâmico<sup>2</sup> da mecânica quântica, que se caracteriza por introduzir uma velocidade quântica relacionada ao momento da partícula, isto é,

$$\mathbf{p}\Psi = m(\bar{\mathbf{v}} + i\bar{\mathbf{v}}_i)\Psi$$

onde  $\bar{\mathbf{v}}$  é a componente real e  $\bar{\mathbf{v}}_i$  a componente imaginária da velocidade quântica, e  $\Psi$ , a função de onda associada à partícula. Explica-se essa velocidade, porque há sistemas quânticos em que a partícula comporta-se de tal maneira que, na sua energia cinética  $\mathbf{p}^2/2m$ , o momento  $\mathbf{p}$  deve levar em consideração as duas componentes da velocidade quântica, ou seja, a energia cinética da partícula quântica pode ser negativa, ao contrário da energia cinética de qualquer partícula descrita pela mecânica clássica. Um exemplo, é o caso em que a partícula penetra em regiões que, classicamente, seria proibida.

No capítulo IV, calculam-se os valores esperados das variáveis dinâmicas, *posição*, *momento* e *energia* dos sistemas analisados nos capítulos II e III. Como se justifica nesse capítulo, o uso de considerações probabilísticas na mecânica quântica é fundamental para descrever quantitativamente os sistemas quânticos. Na mecânica clássica, a análise estatística é apenas uma maneira prática para tratar sistemas muito complicados.

A equação de Schrödinger-Langevin foi primeiramente derivada por M. D. Kostin<sup>1</sup>, que a obteve a partir da equação de movimento de Langevin (dos operadores de Heisenberg) para a descrição de uma partícula browniana interagindo com um banho térmico. No capítulo II deste trabalho, no entanto, deriva-se essa equação usando a representação de Schrödinger da função de onda, para a descrição de uma partícula quântica interagindo com um meio térmico, cuja interação não apresenta efeitos de memória. Os resultados encontrados para ambas as representações são equivalentes. No capítulo III, até onde se sabe, os resultados obtidos são inéditos. Devido ao fato de que, sistemas quânticos que apresentam efeitos de memória serem dissipativos, até o momento não era conhecida uma 'equação de Schrödinger' que descrevesse esses sistemas. No presente trabalho, generalizou-se o método proposto por Kostin a sistemas em que se consideram esses efeitos.



## CAPÍTULO II FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA E SISTEMAS DISSIPATIVOS SEM MEMÓRIA

### II.1 INTRODUÇÃO

O surgimento da teoria quântica deu-se a partir da divergência apresentada pela física clássica, na segunda metade do século XIX e o início deste século, frente aos resultados experimentais, tendo ocorrido na década de vinte o seu desenvolvimento matemático a partir dos trabalhos de Schrödinger e Heisenberg<sup>3,4</sup>. Entretanto, a equação de Schrödinger e o formalismo de Heisenberg passam a ter significado físico à medida que as quantidades matemáticas usadas tornem possível uma interpretação que possibilite o conhecimento de fenômenos físicos. Deste modo, os trabalhos de Bohr<sup>5</sup>, Born<sup>6</sup>, De Broglie<sup>7</sup> e Pauli<sup>8</sup> fornecem o que chamamos de interpretação usual da teoria quântica.

A teoria quântica trouxe incontestáveis progressos para um conhecimento mais acurado dos fenômenos microscópicos. No entanto, seria errôneo considerá-la como uma teoria final, capaz de nos legar todas as informações possíveis no domínio do mundo pequeno. Para os sistemas quânticos dissipativos, por exemplo, não é possível (através da teoria quântica) descrevê-los completamente. Isto porque o Princípio da Correspondência não conduz a uma relação de comutação que esteja de acordo com um dos princípios mais fundamentais da mecânica quântica, o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Além disso, não se deve arraigar à idéia de uma única interpretação possível do formalismo matemático de Schrödinger e, neste sentido, paralelamente ao desenvolvimento da mecânica ondulatória e sua interpretação probabilística, desenvolveu-se também uma interpretação alternativa da teoria quântica. Essa interpretação, em contraste com a usual, levaria a conceber cada sistema individual como tendo um estado precisamente definido e cujas mudanças no tempo seriam determinadas por leis definidas de forma análoga (mas não idêntica) às equações clássicas de movimento. Segundo essas idéias, as probabilidades quanto-mecânicas seriam consideradas como uma necessidade prática e não como uma manifestação de uma falta inerente na completa determinação das propriedades da matéria no domínio quântico<sup>9</sup>.

De Broglie<sup>7</sup>, Madelung<sup>10</sup> e Rosen<sup>11</sup> sugeriram inicialmente que ao escrever a função de onda no espaço de coordenadas como  $\Psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}$  (onde tanto  $\rho$  como  $S$  são reais), pode-se interpretar  $\rho$  como a densidade de probabilidade de partículas que possuem velocidade  $\vec{v} = \nabla S/m$ . Mais tarde, Bohm<sup>9,12,13</sup> desenvolveu de forma lógica e consistente o raciocínio acima, considerando  $\Psi$  como um campo atuante na partícula que satisfaça a equação de Schrödinger e que o momento da partícula esteja restrito a  $\vec{p} = \nabla S$ . Era o seu ponto de vista, também, que não se pode predizer ou controlar a localização precisa de uma partícula, mas tem-se na prática um 'ensemble' estatístico com densidade de probabilidade  $\rho = |\Psi|^2$ . Além disso, o uso da estatística não seria inerente à estrutura conceitual, mas uma mera consequência da ignorância que se tem acerca das condições iniciais da partícula, isto é, como conhecer no instante  $t = 0$ , o momento e posição da partícula. Paralelamente aos trabalhos de Bohm, houve autores como Takabayasi<sup>14,15</sup>, Epstein<sup>16</sup>, e outros, que atacaram o problema de uma reinterpretação do formalismo de Schrödinger. Nos últimos anos com os trabalhos de Rosen<sup>17</sup>, Berkowitz e Skiff<sup>18</sup>, Vigier<sup>19,20</sup>, Wong<sup>21</sup>, Kan e Grillin<sup>22</sup>, Bialynicki-Birula<sup>23,24</sup>, de la Peña-Averbach<sup>25,26</sup> e colaboradores, Hirschfelder<sup>27,28,29,30</sup> e colaboradores e E. Nelson<sup>31</sup>, delineou-se de forma mais nítida a possibilidade de outras interpretações do formalismo da teoria quântica de modo a atacar problemas quânticos sob outro ponto de vista, como por exemplo, através de uma interpretação estocástica para sistemas markovianos e do formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica. Esse formalismo, que será apresentado no próximo item, foi originalmente desenvolvido por Madelung<sup>10</sup>, e os trabalhos mais recentes de sua aplicação são de C. A. Kuhnen<sup>2</sup>, Fernando Cabral<sup>32</sup> e S. E. Michelin<sup>33</sup>.

A seguir, usando este formalismo, abordam-se problemas onde a energia não é uma constante de movimento, isto é, a energia é constantemente dissipada via uma interação com o meio onde se encontra o sistema. Evidentemente este não é o único caso de dissipação, há também dissipação devido aos graus internos de liberdade do próprio sistema. O atrito seria uma forma na qual essa interação de um objeto com o meio, cujos 'componentes básicos' têm dimensões bem menores que o valor da energia envolvida no processo, é manifestada *macroscopicamente*, mas ainda quanticamente. Embora a concepção do atrito seja essencialmente clássica e macroscópica, existem alguns casos no qual ele pode ser tratado microscopicamente. Como exemplos, tem-se a radiação de freamento, penetração de barreira,

espalhamento de íons pesados e na interação de um objeto quântico com o meio<sup>35</sup>. Quando se estudam os problemas acima enumerados, não se podem tratá-los classicamente, pois os valores da energia, momento, posição, etc, são muito pequenos (comparativamente da ordem de  $\hbar$ ). Neste caso, a melhor forma de tratar esses problemas é através de uma abordagem quântica, mesmo que a resolução de problemas com atrito em sistemas quânticos seja ainda uma questão em aberto. Sabe-se que, para certos sistemas dissipativos, podem-se obter equações de movimento que contenham termos dissipativos, representando a força de atrito. Este procedimento tem sido adotado por autores como Denman<sup>37</sup>, Bateman<sup>38</sup>, Lemos<sup>36,39</sup>, Havas<sup>40,41</sup>, etc.

É notável o contraste entre a facilidade com que se podem tratar forças de atrito em mecânica clássica e a complexidade que envolve o seu tratamento quântico. Uma das razões para o contraste entre esses tratamentos da fricção é que a mecânica quântica é baseada conceitualmente na existência de hamiltonianos e, para um sistema clássico, é suficiente medir as forças de atrito e incluí-las nas equações de movimento de Newton. Desde que forças de atrito não possam ser introduzidas de maneira convencional no formalismo hamiltoniano, apesar de existir tentativas para isso<sup>35,40,42</sup>, é costume estudar os problemas quânticos como um sistema totalmente fechado. Por exemplo, considerando uma partícula dissipando energia em um meio viscoso, trata-se como sistema fechado a partícula mais o meio viscoso. Outra razão para esse contraste seria a complexidade matemática que envolve as soluções, nem sempre se consegue encontrar soluções analíticas para o problema. Nestes casos, utilizam-se o método das tentativas, soluções que poderiam satisfazer alguns dos resultados experimentais, porém nem sempre dá bons resultados.

Tendo em vista o que argumentou-se, diferentes autores têm procurado um caminho mais fácil e mais prático para a resolução de problemas quânticos dissipativos. Assim, é que autores como Stoker e Albrecht<sup>43</sup>, M. Razavy<sup>34,44</sup> e K. Yasue<sup>45</sup>, partindo da observação de que a equação clássica de Hamilton-Jacobi pode ser generalizada para acomodar forças de atrito que dependam essencialmente de uma velocidade arbitrária, tentam solucionar problemas aqui colocados. Embora não seja possível obter um hamiltoniano convencional que contenha tais forças<sup>40,41</sup>, a generalização da equação de Hamilton-Jacobi ajuda a encontrar uma equação de movimento que descreva o fenômeno observado.

Alguns trabalhos têm sido publicados por Caldeira e Leggett<sup>46,47,48,49</sup>, que tratam da aplicação de sistemas dissipativos na mecânica quântica.

Uma equação linear bastante utilizada em sistemas quânticos dissipativos é a equação de Schrödinger-Langevin (II.41). Neste caso, a força dissipativa que os caracteriza é proporcional à velocidade linear da partícula quântica. Como salientou-se no capítulo I, essa equação foi primeiramente descoberta por Kostin e foi determinada a partir das equações de Heisenberg. Posteriormente outros autores, utilizando as relações de comutação associadas a própria mecânica estocástica de Nelson<sup>31</sup>, dentre eles destacamos Yasue<sup>50,51</sup>, J. Messer<sup>52</sup>, M. Razavy<sup>34,44</sup>, K. K. Kan e J. J. Griffin<sup>53</sup> e S. Kagerstam<sup>54,55</sup> rederivam a equação de Schrödinger-Langevin.

Neste capítulo abordar-se-á esse tipo de sistema quântico dissipativo e, através da formulação hidrodinâmica da mecânica quântica, deriva-se a equação de Schrödinger-Langevin.

## II.2 FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

A derivação das equações, nas quais se baseia o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica, será feita seguindo-se os trabalhos de Bohm<sup>9</sup> e Madelung<sup>10</sup> e as idéias recentes apresentadas por Hirschfelder<sup>27,28,29,30</sup>. Na representação de coordenadas da mecânica quântica o operador momento de uma partícula é definido por  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ . O formalismo hidrodinâmico sugere a introdução de uma velocidade quântica relacionada ao momento de uma partícula de massa  $m$  através da equação

$$\mathbf{p}\Psi = m\bar{\mathbf{v}}\Psi = m(\bar{\mathbf{v}} + \bar{\mathbf{v}}_i)\Psi \quad \text{II.1}$$

onde  $\bar{\mathbf{v}}$  e  $\bar{\mathbf{v}}_i$  são funções reais que representam, respectivamente, as componentes real e imaginária da velocidade quântica  $\bar{\mathbf{v}}$ , e  $\Psi$  a função de onda que descreve o comportamento da partícula; no caso clássico, temos  $\bar{\mathbf{v}}_i = 0$  e  $\bar{\mathbf{p}} = m\bar{\mathbf{v}}$ . Explica-se a velocidade  $\bar{\mathbf{v}}_i$ , porque há sistemas quânticos em que a partícula comporta-se de tal maneira que, na sua energia cinética  $\mathbf{p}^2/2m$ , o momento  $\mathbf{p}$  deve levar em consideração as duas componentes da velocidade quântica, ou seja, a energia cinética da partícula quântica pode ser negativa, ao contrário da energia cinética de qualquer partícula descrita pela mecânica clássica. Um exemplo, é o caso em que a partícula penetra em regiões que, classicamente, seria proibida. Deve-se enfatizar que o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica é descrito através de funções vetoriais em

vez de operadores. Com isso, pode-se expressar  $\bar{v}$  e  $\bar{v}_i$  em termos da função de onda, tomando a complexa conjugada da equação (II.1)

$$\mathbf{p}^* \Psi^* = m(\bar{v} - i\bar{v}_i) \Psi^* \quad \text{II.2}$$

e reescrevendo as equações (II.1) e (II.2) como

$$\bar{v} + i\bar{v}_i = \frac{1}{\Psi} \mathbf{p} \frac{\Psi}{m}$$

$$\bar{v} - i\bar{v}_i = \frac{1}{\Psi^*} \mathbf{p}^* \frac{\Psi^*}{m}$$

Lembrando que  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ , obtém-se, então, para  $\bar{v}$  e  $\bar{v}_i$

$$\bar{v} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad \text{II.3}$$

$$\bar{v}_i = -\frac{\hbar}{2m} \nabla \ln \Psi \Psi^* \quad \text{II.4}$$

As equações (II.3) e (II.4) são básicas no formalismo hidrodinâmico, pois a partir delas e da equação de Schrödinger, obtém-se as equações da conservação da energia e da continuidade. Começa-se por escrever, sem perda de generalidade, a função de onda como

$$\Psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar} \quad \text{II.5}$$

onde  $\rho$  e  $S$  são reais. Note que a função de onda assim definida permite separar a equação de Schrödinger em uma parte real e outra imaginária; com esse objetivo, substitui-se a função de onda definida em (II.5) na equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2 \Psi}{2m} + V\Psi$$

obtendo para potenciais independentes da velocidade

$$\frac{1}{\Psi} \frac{\mathbf{p}^2 \Psi}{2m} = -\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho - V \quad \text{II.6}$$

Expandindo o lado esquerdo da equação acima, vem

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Psi} \frac{\mathbf{p}^2 \Psi}{2m} &= \frac{1}{2\Psi} \mathbf{p} \circ \frac{\mathbf{p}\Psi}{m} = \frac{1}{2\Psi} \mathbf{p} \circ (\vec{v} + i\vec{v}_i)\Psi \\ &= \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i + i \left( m \vec{v} \circ \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v} \right) \end{aligned} \quad \text{II.7}$$

Substituindo a expressão para  $\frac{1}{\Psi} \frac{\mathbf{p}^2 \Psi}{2m}$  dada na equação (II.7), na equação (II.6), e igualando as partes reais e imaginárias de ambos os membros, obtém-se

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + V + \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i \quad \text{II.8}$$

e

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} = m \vec{v} \circ \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v} \quad \text{II.9}$$

A partir da função de onda (II.5), as expressões para  $\vec{v}$  e  $\vec{v}_i$  serão

$$\vec{v} = \frac{\nabla S}{m} \quad \text{II.10}$$

$$\vec{v}_i = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla \rho}{\rho} \quad \text{II.11}$$



Inserindo esta última expressão para  $\vec{v}_i$  na equação (II.9), resulta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \circ (\rho \vec{v}) = 0 \quad \text{II.12}$$

que é a *equação de continuidade* para um fluido com densidade  $\rho$  e velocidade  $\vec{v}$ . Por este motivo, o desenvolvimento aqui adotado é chamado de *formulação hidrodinâmica*. Mas para sistemas quânticos a equação (II.12) é apresentada<sup>56,57</sup> como uma equação de continuidade para a densidade de probabilidade, ou seja,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \circ \vec{J} = 0$$

onde  $\rho = |\Psi|^2$  é a densidade de probabilidade e

$$\vec{J} = (i\hbar/2m)(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

é o fluxo de densidade de probabilidade. A relação entre  $\vec{v}$  e  $\vec{J}$  é dada por  $\vec{v} = \vec{J}/\rho$ ; relação usada inicialmente por Madelung<sup>10</sup>, Landau<sup>58</sup> e London<sup>59</sup> para definição de  $\vec{v}$  na formulação hidrodinâmica.

Examina-se agora a equação (II.8) para os estados estacionários  $E = -\partial S/\partial t$ , de modo que

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{2}mv_i^2 + V + \frac{\hbar}{2} \nabla \circ v_i^2 \quad \text{II.13}$$

Utilizando as definições para  $\vec{v}$  e  $\vec{v}_i$  dadas nas equações (II.10) e (II.11), pode-se escrever a equação (II.13) como

$$E = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \rho^{1/2}}{\rho^{1/2}} \quad \text{II.14}$$

que é uma generalização da *equação de Hamilton-Jacobi* da mecânica clássica; tomando o limite  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $S$  é a solução da equação de Hamilton-Jacobi<sup>9</sup>

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0 \quad \text{II.15}$$

Isto implica que a partícula descreve uma trajetória clássica, mas existe além do potencial externo, a influência de um potencial quântico

$$V_{\text{quântico}} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta \rho^{1/2}}{\rho^{1/2}} \quad \text{II.16}$$

que provém da interação da partícula com seu próprio campo  $\Psi$ , segundo D. Bohm<sup>9,12</sup>. Isto explica porque uma partícula não pode alcançar pontos onde a função de onda é nula, pois para estes pontos o potencial quântico torna-se infinito. Além do mais, salienta o efeito de uma medida sobre o estado quântico de um sistema, pois ao se efetuar a medida de um observável, altera-se o campo  $\rho$  levando a uma alteração no potencial quântico e, portanto, na descrição do movimento da partícula.

Um limite da equação (II.14) que teria algum interesse, corresponde ao caso das funções de onda com parte espacial real. Neste caso, a velocidade quântica possui apenas a componente imaginária, e a equação (II.13) pode ser escrita como<sup>60,61</sup>

$$E - V = \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i - \frac{1}{2} m v_i^2 \quad \text{II.17}$$

que é uma equação *multidimensional de Riccati*. Note que a equação (II.17) deveria ser escrita formalmente como

$$E_{(n)} - V = \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_{i(n)} - \frac{1}{2} m v_{i(n)}^2 \quad \text{II.18}$$

onde  $E_{(n)}$  é a energia do  $n$ -ésimo auto-estado de  $H$ , e  $\vec{v}_{i(n)}$  é a componente imaginária da velocidade quântica

$$\bar{v}_{i(n)} = -\frac{\hbar}{m} \nabla \ln |\Psi_n|$$

onde  $\Psi_n$  é a autofunção correspondente ao n-ésimo estado. A equação (II.18) por se tratar de uma equação diferencial de primeira ordem, embora não linear, pode ser integrada numericamente de forma mais rápida, em alguns casos, do que a equação de Schrödinger correspondente<sup>60,61</sup>, fornecendo como era de se esperar os mesmos resultados<sup>32</sup>. Neste ponto, é importante frizar que o procedimento seguido na formulação hidrodinâmica original, é sempre no sentido de que, a partir da equação de Schrödinger, pode-se obter a equação de continuidade (II.12) e de Hamilton-Jacobi generalizada (II.14), sendo que esta descreve a conservação de energia do sistema para os casos estacionários.

### II.3 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN

**E**m geral, quando se estuda um sistema clássico dissipativo, a força de atrito possui uma expressão conhecida e, neste caso, pode-se montar uma equação de movimento dada pelas leis de Newton. Considere-se, por exemplo, um sistema clássico que consista de uma partícula movendo-se em um meio viscoso sujeito a ação de uma força resistiva proporcional à velocidade de deslocamento dessa partícula.

A equação clássica de movimento que descreve esse fenômeno é da forma

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{F} = -\nabla V \quad \text{II.19}$$

onde  $m$  é a massa da partícula,  $\vec{r}$  o vetor posição,  $\gamma$  o coeficiente de atrito e  $V$  é um potencial externo.

A equação (II.19) não pode ser derivada de um lagrangeano convencional  $L = m\dot{u}^2/2 + V$ , mas é possível, através de condições adequadas, encontrar um lagrangeano modificado que conduza a essa equação. Isto têm sido feito por muitos autores<sup>33,35,40,62,63,64</sup> e não interessa mostrar aqui os passos que fornecem esse lagrangeano. O lagrangeano modificado é da forma

$$L = \left[ \frac{1}{2} m u^2 + V \right] \exp(\gamma t)$$

Aplicando as equações de Euler-Lagrange na equação acima, nota-se que a equação de movimento obtida para o sistema clássico dissipativo, é a equação (II.19). Esse lagrangeano é apresentado por autores<sup>35,37,39,55,64,66,67</sup> para descrever sistemas clássicos dissipativos, onde a força de atrito é proporcional à velocidade de deslocamento. O lagrangeano modificado difere do lagrangeano de uma partícula, não sujeita a forças de atrito, pelo "fator integrante"  $\exp(\gamma t)$ <sup>33</sup>. O interesse neste momento, é atacar os problemas quânticos dissipativos.

Aborda-se o problema do oscilador harmônico que, por ser um caso mais simples, são inúmeros os fenômenos que ocorrem na natureza que apresentam comportamento oscilatório.

Para uma partícula de massa  $m$  sob a ação de um potencial  $\Phi(\vec{r}, t)$ , um lagrangeano que descreve este movimento é da forma

$$L = \frac{1}{2} m (\bar{u} + i\bar{u}_i)^2 + \Phi(\vec{r}, t) \quad \text{II.20}$$

onde  $\Phi(\vec{r}, t)$  é um potencial quântico que pode ser complexo. Separando o lagrangeano dado pela expressão (II.20) em uma parte real e outra imaginária, tem-se, respectivamente

$$L_r = \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 + \text{Re}\Phi(\vec{r}, t) \quad \text{II.21}$$

$$L_i = m(\bar{u} \circ \bar{u}_i) + \text{Im}\Phi(\vec{r}, t)$$

Aplicando a equação de Euler-Lagrange generalizada na parte real do lagrangeano (II.21), obtém-se uma equação do tipo  $\vec{F} = m\vec{a}$  que descreve sistemas quânticos<sup>31,33</sup>

$$\frac{d}{dt} m\bar{u} - \frac{d}{dt_i} m\bar{u}_i = -\nabla[\text{Re}\Phi(\vec{r}, t)] \quad \text{II.22}$$

A equação de movimento (II.22) deve ser generalizada para incluir forças dissipativas que dependam linearmente da velocidade. Forças dissipativas que não dependam linearmente da velocidade como, por exemplo, aquela em que a dependência se faça com o quadrado da velocidade<sup>33</sup>, não é de interesse tratá-los neste trabalho.

Assim, a equação de movimento que descreve o caso de uma partícula de massa  $m$  sob a ação de um potencial externo, deslocando-se com uma velocidade  $\bar{u}$  em um meio viscoso é,

$$\frac{d}{dt}m\bar{u} - \frac{d}{dt_i}m\bar{u}_i + m\gamma\bar{u} = -\nabla[\text{Re}\Phi(\bar{r}, t)] \quad \text{II.23}$$

onde

$$\bar{F}_{\text{atrito}} = m\gamma\bar{u} \quad \text{II.24}$$

representa a força dissipativa proporcional à velocidade  $\bar{u}$  de deslocamento. A equação (II.23) foi obtida por analogia com o caso clássico, equação (II.19). Como a equação (II.23) não pode ser derivada da parte real do Lagrangeano (II.21), pode-se encontrar um Lagrangeano modificado que conduza àquela equação. Do mesmo modo que anteriormente, não se mostram os passos que fornecem o seguinte Lagrangeano<sup>33</sup>

$$L_r = \left[ \frac{1}{2}m\bar{u}^2 - \frac{1}{2}m\bar{u}_i^2 + \text{Re}\Phi(\bar{r}, t) \right] \exp(\gamma t) \quad \text{II.25}$$

Similarmente, aplicando a equação de Euler-Lagrange generalizada na equação acima, a equação de movimento obtida coincide com a equação (II.23). O fator integrante  $\exp(\gamma t)$  não é incluído na parte imaginária do lagrangeano (II.21), pois desse lagrangeano obtém-se uma equação de continuidade, a qual expressa a conservação da densidade de probabilidade do sistema, e esta densidade de probabilidade não se altera, pois a dissipação ocorre somente na energia.

Como foi visto, o lagrangeano dado pela equação (II.25) fornece a seguinte equação de movimento

$$\frac{d}{dt}m\bar{u} - \frac{d}{dt_i}m\bar{u}_i + m\gamma\bar{u} = -\nabla[\text{Re}\Phi(\bar{r}, t)] \quad \text{II.26}$$

e da parte imaginária do lagrangeano (II.21), obtém-se

$$\frac{d}{dt}m\bar{u}_i - \frac{d}{dt_i}m\bar{u} = -\nabla[\text{Im}\Phi(\bar{r}, t)] \quad \text{II.27}$$

Das equações (II.26) e (II.27) é possível obter uma equação semelhante à equação de Schrödinger que trata de sistemas quânticos dissipativos, cuja força dissipativa é dada pela equação (II.24). Para isso, faz-se as seguintes transposições

$$\begin{aligned} \bar{u}(t, t_i) &\rightarrow \bar{v}(\bar{r}, t) \\ \bar{u}_i(t, t_i) &\rightarrow \bar{v}_i(\bar{r}, t) \end{aligned} \quad \text{II.28}$$

e desde que o potencial  $\Phi(\bar{r}, t)$  seja colocado na forma

$$\Phi(\bar{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2} \nabla \circ \bar{v} + V(\bar{r}) \quad \text{II.29}$$

onde

$$\bar{v} = \bar{v} + i\bar{v}_i$$

As velocidades  $\bar{u}(t, t_i)$  e  $\bar{u}_i(t, t_i)$ , são as velocidades real e imaginária para o formalismo de partículas e as velocidades  $\bar{v}(\bar{r}, t)$  e  $\bar{v}_i(\bar{r}, t)$  são as velocidades real e imaginária para o formalismo hidrodinâmico, definidas nas equações (II.3) e (II.4). O potencial quântico dado pela equação (II.29) contém dois termos: um potencial externo  $V(\bar{r})$  e um potencial que caracteriza a natureza quântica do sistema, expresso pela constante  $\hbar$  e pela velocidade quântica  $\bar{v}$  definida na equação (II.1).

Fazendo um ligeiro comentário, deve-se ter em mente que, ao introduzir os parâmetros  $t$  e  $t_i$ , está-se tentando tratar o "tempo quântico" como uma grandeza bidimensional, possível de representação em um sistema de coordenadas<sup>2,68</sup> com

componentes  $(t, t_i)$ , tal que, ao se efetuar a transição à mecânica clássica, este tempo quântico deverá tornar-se o parâmetro tempo como se conhece usualmente.

Portanto, com o auxílio das transposições (II.28), do potencial (II.29) e das derivadas hidrodinâmicas

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &\rightarrow \bar{\mathbf{v}} \circ \nabla + \frac{\partial}{\partial t} \\ \frac{d}{dt_i} &\rightarrow \bar{\mathbf{v}}_i \circ \nabla + \frac{\partial}{\partial t_i} \end{aligned} \quad \text{II.30}$$

a equação (II.26) fornece

$$m(\bar{\mathbf{v}} \circ \nabla)\bar{\mathbf{v}} + \frac{\partial}{\partial t}m\bar{\mathbf{v}} - m(\bar{\mathbf{v}}_i \circ \nabla)\bar{\mathbf{v}}_i + m\gamma\bar{\mathbf{v}} = -\nabla \left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \bar{\mathbf{v}}_i + V(\mathbf{r}) \right]$$

a derivada parcial em  $t_i$  é nula, pois a função  $\bar{\mathbf{v}}_i$  não possui uma dependência explícita com o tempo  $t_i$ . A equação anterior torna-se, após desenvolvê-la,

$$\frac{1}{2}m\nabla v^2 - \frac{1}{2}m\nabla v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right) + \frac{i\hbar}{2} \gamma \nabla \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} = -\nabla \left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \bar{\mathbf{v}}_i + V(\mathbf{r}) \right]$$

Integrando de forma conveniente a expressão anterior, tem-se

$$\frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{2}mv_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} = -\left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \bar{\mathbf{v}}_i + V(\mathbf{r}) \right] + f(t) \quad \text{II.31}$$

Face à integração,  $f(t)$  é uma função somente do tempo.

A equação (II.31) é análoga à equação de Ricatti para os sistemas sem dissipação, e denomina-se, então, equação de Ricatti modificada. As velocidades real e imaginária definidas nas equações (II.3) e (II.4) são, agora, substituídas na equação (II.31), de modo que,

$$-\frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 - 2 \frac{\nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi}{\Psi^* \Psi} \right] - \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 + 2 \frac{\nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi}{\Psi^* \Psi} \right]$$

$$+ \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} = \frac{\hbar^2}{4m} \left[ - \left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] - V(r) + f(t)$$

Eliminando e agrupando os termos semelhantes, chega-se a

$$f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \gamma \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] + V(r) \quad \text{II.32}$$

Usando, agora, as mudanças de variáveis (II.28), o potencial e as derivadas hidrodinâmicas na equação (II.27), tem-se

$$m(\vec{v} \circ \nabla) \vec{v}_i + \frac{\partial}{\partial t} m \vec{v}_i + m(\vec{v}_i \circ \nabla) \vec{v} = \nabla \left( \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v} \right)$$

de modo que, pela definição de  $\vec{v}_i$ , a derivada parcial em  $t_i$  é nula. Após desenvolver essa expressão, segue

$$m \nabla(\vec{v} \circ \vec{v}_i) - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \ln \Psi^* \Psi) = \nabla \left( \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v} \right)$$

E integrando convenientemente a expressão acima, vem

$$m(\vec{v} \circ \vec{v}_i) - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v} \quad \text{II.33}$$

Substituindo a velocidade imaginária  $\vec{v}_i$  na última equação, e sabendo que  $\rho = \Psi^* \Psi$ , obtém-se

$$-\vec{v} \circ \frac{\nabla \rho}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \circ \vec{v}$$



o que fornece a equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \circ (\rho \vec{v}) = 0 \quad \text{II.34}$$

que é a *equação da continuidade*, já apresentada na seção anterior.

Substituindo na expressão (II.33) as velocidades real e imaginária, e depois eliminando e agrupando os termos, vem

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = -\frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right]$$

ou ainda

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] \quad \text{II.35}$$

Adicionando as equações (II.32) e (II.35), e após simplificação, obtém-se

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - f(t)\Psi \quad \text{II.36}$$

A 'constante de integração'  $f(t)$  que aparece na equação acima pode ser avaliada usando-se a condição de que o valor da energia total do sistema  $E(t)$  é igual ao valor esperado da energia cinética  $(2m)^{-1} \langle p^2 \rangle$  mais o valor médio do potencial de interação  $\langle V \rangle$ , ou seja,

$$E(t) = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \langle V \rangle \quad \text{II.37}$$

onde assume-se o problema em uma dimensão, isto é,

$$E(t) = i\hbar \int \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx$$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) dx \quad \text{II.38}$$

$$\langle V \rangle = \int \Psi^*(x, t) V(x) \Psi(x, t) dx$$

A primeira das equações acima é a definição de energia total usada por Kostin<sup>1</sup>, Skagerstam<sup>54,55</sup> e outros autores para os sistemas dissipativos. Multiplicando a equação (II.36) por  $\Psi^*(x, t)$  e integrando, obtém-se

$$i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx + \int \Psi^* V \Psi dx + \int \Psi^* V_L \Psi dx \quad \text{II.39}$$

onde  $V_L$  é o potencial não linear da forma

$$V_L(x, t) = \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*(x, t)}{\Psi(x, t)} - f(t)$$

Como este potencial é uma função do tempo, isto mostra que o sistema aqui descrito é dissipativo. Pode-se ver isto de imediato na equação (II.36), onde os dois últimos termos do lado direito dessa equação é o potencial  $V_L(x, t)$  multiplicado pela função  $\Psi$ . Tendo em vista as equações (II.37) e (II.38), da equação (II.39) tira-se

$$\int \Psi^* V_L \Psi dx = 0$$

Como o valor esperado de uma constante é ela mesma, obtém-se da última expressão

$$\boxed{f(t) = \frac{i\hbar}{2} \gamma \int_{-\infty}^t \Psi^*(x, t) \ln \frac{\Psi^*(x, t)}{\Psi(x, t)} \cdot \Psi(x, t) dx} \quad \text{II.40}$$

e a equação final (II.36) toma a forma

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \cdot \Psi dr} \quad \text{II.41}$$

A equação (II.41) foi obtida primeiramente por Kostin<sup>1</sup> que a derivou a partir das equações movimento de Heisenberg, e recebeu o nome de *equação de Schrödinger-Langevin*. Esta equação também foi derivada por outros autores para descrever sistemas dissipativos com forças de atrito linear; dentre esses autores pode-se destacar M. Razavy, que obteve a equação de Schrödinger-Langevin utilizando-se do método de Schrödinger, o qual define um funcional  $I(S)$  e procura o seu extremo associado  $S$  com a equação clássica de Hamilton-Jacobi.

A equação (II.41) possui uma classe de soluções não triviais e essas soluções têm a propriedade de serem assintoticamente estacionárias. Devido a este fato, pode ser demonstrado, mas não o faremos aqui, que essa propriedade determina uma única solução para àquela equação.

Kostin, J.Messer, Skagerstan, M.Razavy e outros, propuseram funções de onda que fossem soluções da *equação de Schrödinger-Langevin*, e com isso obtiveram a energia total e a energia dissipada do sistema.

A seguir, é proposta uma função de onda (análogo à função proposta por Kostin) que satisfaça a equação (II.41). Neste trabalho escolhe-se como potencial de interação  $V$ , o potencial do oscilador harmônico, apresentado em diversos trabalhos da literatura específica.

## II.4 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN

**C**onhecendo-se a função de onda  $\Psi$  que satisfaça a *equação de Schrödinger-Langevin*, podem-se encontrar as expressões para as componentes real  $\bar{V}$  e imaginária  $\bar{V}_i$  da velocidade quântica e, ainda, obter as energias total e dissipada do sistema quântico em estudo. O potencial considerado é

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{II.42}$$

Para a função de onda  $\Psi$ , uma solução possível é da forma

$$\Psi(x, t) = \phi_n(x - \xi(t)) \exp\left[-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} + \frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar} + ik(t)\right] \quad \text{II.43}$$

A escolha é conveniente por ter um aspecto geral. Como será visto adiante, a função  $\phi_n(x - \xi)$  descreve os vários estados do oscilador harmônico quântico, ao passo que antes, tinha-se um estudo que descrevia apenas o estado fundamental do oscilador. Nas demonstrações recorre-se ao espaço de uma dimensão.

Reescrevendo a equação (II.43) em forma mais adequada, tem-se

$$\Psi = \phi_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar + imx\dot{\xi}/\hbar + ik} \quad \text{II.44}$$

Levando as equações (II.42) e (II.44) na equação (II.41), e desenvolvendo todos os cálculos, chega-se a

$$i\hbar \frac{\partial \phi_n}{\partial t} + \varepsilon_n \phi_n - mx\ddot{\xi}\phi_n - \hbar K\phi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} - i\hbar\dot{\xi} \frac{\partial \phi_n}{\partial x} + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 \phi_n + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \phi_n + mx\gamma\dot{\xi}\phi_n - m\gamma\dot{\xi}\xi\phi_n$$

Fazendo a troca de variáveis  $\eta = x - \xi$ , ou  $x = \eta + \xi$ , e desenvolvendo a última expressão, resulta

$$-m\eta\ddot{\xi}\phi_n - m\eta\gamma\dot{\xi}\phi_n - m\eta\omega^2\xi\phi_n = -\varepsilon_n\phi_n - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial \eta^2} + \frac{1}{2} m\omega^2\eta^2\phi_n + \hbar k\phi_n + m\dot{\xi}\ddot{\xi}\phi_n + \frac{1}{2} m\omega^2\xi^2\phi_n + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2\phi_n \quad \text{II.45}$$

Os termos do lado esquerdo da equação (II.45) fornece a equação de movimento do oscilador harmônico clássico dissipativo, onde  $\gamma$  é o coeficiente de atrito, e os três primeiros termos do lado direito serão termos da equação de

Schrödinger se, a solução  $\phi_n$ , for solução desta equação. Portanto, da equação (II.45), tiram-se

$$\varepsilon_n \phi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial \eta^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \eta^2 \phi_n \quad \text{II.46}$$

e ainda

$$\ddot{\xi} + \gamma \dot{\xi} + \omega^2 \xi = 0 \quad \text{II.47}$$

de modo que  $K$  é uma função de  $\xi(t)$  e de sua derivada primeira.

A solução da equação (II.47) é a conhecida solução da *equação de movimento do oscilador harmônico clássico dissipativo*, e tem a forma

$$\xi(t) = A_0 \exp\left(-\frac{\gamma}{2} t\right) \cos\left[\left(\omega^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} t + \delta\right] \quad \text{II.49}$$

onde  $A_0$  e  $\delta$  são constantes. Note, então, que a equação de Schrödinger-Langevin possui toda uma gama de validade, desde que  $\xi(t)$  possua a forma da equação (II.49) para o caso linear.

Portanto, a função de onda pesquisada  $\Psi(x,t)$  tem a forma dada pela equação (II.43), onde a função  $\phi_n(x - \xi)$  é solução da equação de Schrödinger e  $\varepsilon_n$  são os valores para a energia correspondentes. Este trabalho restringe-se ao oscilador harmônico quântico, de modo que,  $\varepsilon_n$ , são os autovalores da energia referente aos auto-estados  $\phi_n$  deste oscilador, ou seja,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \eta^2$$

onde

$$\mathbf{H}_0 \phi_n = \varepsilon_n \phi_n$$

é a equação de autovalores para o oscilador harmônico quântico.

Deve-se entender que  $\mathbf{H}_0$  não é o operador associado à energia do sistema quântico aqui considerado. Como este sistema é de natureza dissipativa, com uma força de atrito linear, encontrar um hamiltoniano que se associe a sua energia, seria permitir usar um operador momento da forma  $\mathbf{p} = (\hbar/i) \exp(\gamma t) \nabla$  (como é discutido no capítulo IV), de modo que esse hamiltoniano não iria satisfazer as regras de quantização de Heisenberg, e que conduziria à relação de comutação incorreta para os operadores  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{x}$ . Note que  $\mathbf{H}_0$  está associado ao autovalor da energia  $\varepsilon_n$  e à autofunção  $\phi_n$  do oscilador. Isto pode ser confirmado através da equação (II.46), de onde obteve-se a equação de autovalores, que é a equação de Schrödinger independente do tempo, e a solução de  $\phi_n$  é dado pela equação (II.52) em termos dos polinômios de Hermite na variável  $\eta$ . Portanto, a solução que descreve a evolução temporal do sistema quântico descrito pela equação (II.41), é a função de onda (II.43); e como argumentou-se no início deste capítulo, não há um operador hamiltoniano associado a essa função e à energia total do sistema físico. Observe que a função  $\xi(t)$  satisfaz a solução da equação de movimento do oscilador harmônico clássico dissipativo.

Conhecida a função de onda da equação de Schrödinger-Langevin, pode-se calcular os componentes, em uma dimensão, das velocidades real e imaginária,  $\bar{\mathbf{v}}$  e  $\bar{\mathbf{v}}_i$ . Das equações (II.3) e (II.4) obtém-se

$$\mathbf{v}_{(x)} = \dot{\xi} \tag{II.50}$$

$$\mathbf{v}_{i(x)} = -\frac{\hbar}{m} \frac{1}{\phi_n} \frac{\partial \phi_n}{\partial x} \tag{II.51}$$

Sendo  $\phi_n$  solução da equação de Schrödinger para o potencial harmônico, e dada por

$$\phi_n(x - \xi) = C_n \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - \xi)^2\right] \mathbf{H}_n(x - \xi) \tag{II.52}$$

temos, então, para a velocidade  $\bar{V}_i$

$$v_{i(x)} = \omega(x - \xi) - \frac{\hbar}{m} \frac{1}{H_n} \frac{\partial H_n}{\partial(x - \xi)} \quad \text{II.53}$$

A constante  $C$  é a constante de normalização e  $H_n(x - \xi)$  são os polinômios de Hermite.

É importante notar que, na literatura acadêmica,  $\phi_n$  é função apenas da variável  $x$  quando em uma dimensão. Aqui, entretanto,  $\phi_n$  é função da variável  $x - \xi$  onde  $\xi$  é função somente do tempo; foi de grande conveniência esta escolha face aos resultados encontrados, os quais não diferem aos da literatura específica.

É fácil ainda comprovar a validade da função de onda  $\Psi(x, t)$  verificando se ela é solução da equação de continuidade. Sendo  $\rho = \Psi\Psi^*$ , da equação (II.34), tem-se

$$\nabla(\Psi\Psi^*\bar{v}) + \frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) = 0$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial x}(\Psi\Psi^*\dot{\xi}) + \frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) = 0 \quad \text{II.54}$$

é a equação de continuidade em uma dimensão. Substituindo agora a função de onda  $\Psi(x, t)$  e sua complexa conjugada  $\Psi^*(x, t)$  na equação acima, e desenvolvendo-a, obtém-se uma identidade que comprova a validade da função de onda proposta.

Em seu trabalho, Skagerstan<sup>55</sup> define as velocidades real  $v$  e imaginária  $\bar{v}_i$ , respectivamente, por velocidade de corrente  $v$  e velocidade estacionária  $\mu$ , e estas guardam a mesma forma das expressões encontradas para o estado fundamental, isto é,

$$v_{(x)} = \dot{\xi}$$

II.55

$$v_{i(x)} = \omega(x - \xi)$$

As equações (II.50) e (II.53) são as expressões para as velocidades real e imaginária para os demais estados do oscilador harmônico aqui considerado. É interessante observar que, independente do estado quântico, a componente real da velocidade quântica, em uma dimensão tem valor sempre definido por

$$v_{(x)} = \dot{\xi}(t)$$

## II.5 ENERGIA

**P**ara alguns casos de sistemas quânticos não dissipativos, a energia do sistema é um valor conhecido, ou pelo menos de fácil determinação, e possui níveis característicos, isto é, a energia de cada estado é conhecida. Porém, quando trata-se com um problema quântico dissipativo a energia nem sempre possui um operador definido, ou seja, a energia não é uma constante de movimento. A energia e o hamiltoniano diferem justamente devido ao fator que descreve a dissipação, ou mais claramente, a energia total do sistema, neste caso, não pode ser colocada como a soma da energia cinética mais energia potencial.

Entretanto, nada impede de uma tentativa para escrever essa energia total em termos de valores médios. Utiliza-se, então, o valor médio da energia cinética mais o valor médio da energia potencial para obter a energia total do sistema. Isto pode ser feito recordando-se da definição dada pela equação (II.37), onde

$$E(t) \xrightarrow{\text{def.}} \langle E(t) \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \langle V \rangle \quad \text{II.56}$$

Na mecânica quântica, o que importa, são os valores médios dos observáveis ou as probabilidades dos autovalores desses observáveis. Assim, a definição de energia neste trabalho será em termos de valores médios. Porém, parte-se diretamente da equação de Ricatti modificada obtida na seção (II.3).



A equação de Ricatti modificada foi obtida através da equação de movimento (II.26) e pode ser escrita como

$$\frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{2}mv_i^2 + \frac{\hbar}{2}\nabla \circ \vec{v}_i + V = -\frac{i\hbar}{2}\ln\frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2}\gamma\frac{\partial}{\partial t}\ln\frac{\Psi^*}{\Psi} + f(t) \quad \text{II.57}$$

onde  $f(t)$  é dado por

$$f(t) = \frac{i\hbar}{2}\gamma \int \Psi^* \ln\frac{\Psi^*}{\Psi} \cdot \Psi dr$$

Observe que o lado esquerdo da equação (II.57) é composto pela soma das energias cinética e potencial, enquanto que o lado direito contém os termos responsáveis pela dissipação da energia do sistema.

Calcula-se agora o valor médio dos termos da equação (II.57). Assim,

$$\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2}mv_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2}\nabla \circ \vec{v}_i \right\rangle + \langle V \rangle = -\left\langle \frac{i\hbar}{2}\ln\frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \left\langle \frac{i\hbar}{2}\gamma\frac{\partial}{\partial t}\ln\frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle + \langle f(t) \rangle \quad \text{II.58}$$

Entende-se aqui como valor médio a integração dos termos da última equação, com base na definição sugerida pela equação (II.56). Rigorosamente, o valor médio na mecânica quântica refere-se a operadores. O lado esquerdo da equação acima representa o valor médio da energia cinética mais o valor médio da energia potencial e que, pela nossa definição, nada mais é que o valor da energia total do sistema. Assim,

$$E(t) = \left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2}mv_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2}\nabla \circ \vec{v}_i \right\rangle + \langle V \rangle \quad \text{II.59}$$

Utilizando as equações (II.42), (II.50) e (II.51) na equação anterior, tem-se, em uma dimensão,

$$E(t) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 - \left\langle \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_n} \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle$$

Tendo em vista a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico quântico, equação (II.46), e fazendo a troca de variáveis de  $x$  por  $\eta + \xi$  na última equação, obtém-se

$$E(t) = \varepsilon_n + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 \quad \text{II.60}$$

Da equação acima, pode-se concluir que os valores iniciais da função  $\xi(t)$  e de sua derivada  $\dot{\xi}(t)$  determinam os valores iniciais da energia do sistema.

O lado direito da equação (II.58), por razões óbvias, deve também fornecer o valor da energia total do sistema. Assim,

$$E(t) = - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle + \langle f(t) \rangle \quad \text{II.61}$$

Utilizando a função de onda  $\Psi(x, t)$  e a constante de integração  $f(t)$  na equação anterior, e desenvolvendo-a, tem-se

$$E(t) = \varepsilon_n - \langle m x \ddot{\xi} \rangle - \langle m \gamma x \dot{\xi} \rangle + m \gamma \xi \dot{\xi} - \hbar k$$

Das equações (II.47) e (II.48), a equação acima fornece para  $E(t)$

$$E(t) = \varepsilon_n + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$$

que é o mesmo valor da equação (II.60). Note que esta equação deveria ser escrita formalmente como

$$E_n(t) = \varepsilon_n + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$$

pois, para cada estado  $\phi_n$  do oscilador harmônico,  $E_n(t)$  é o valor da energia para o estado correspondente.

Para obter a energia dissipada em função do tempo basta derivar a equação (II.60). Desse modo

$$E(t) = m \ddot{\xi} \dot{\xi} + m \omega^2 \xi \dot{\xi}$$

e recordando a equação (II.47), obtém-se

$$\dot{E}(t) = -m \gamma \dot{\xi}^2 \quad \text{II.62}$$

A equação acima descreve a taxa de variação da energia total do sistema em função do tempo. Note que esta variação representa a energia dissipada face ao sinal negativo, e é proporcional ao coeficiente de atrito.

É feito agora uma análise da equação da energia total. Como ela depende da função  $\xi(t)$  e de sua derivada primeira  $\dot{\xi}(t)$ , sem perda de generalidade, toma-se o fator de fase nulo,  $\delta = 0$ , de modo que

$$\xi(t) = A_0 \exp\left(-\frac{\gamma}{2} t\right) \cos\left[\left(\omega^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} t\right] \quad \text{II.63}$$

$$\begin{aligned} \dot{\xi}(t) = & -\frac{\gamma}{2} A_0 \exp\left(-\frac{\gamma}{2} t\right) \cos\left[\left(\omega^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} t\right] - \\ & A_0 \left(\omega^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\gamma}{2} t\right) \text{sen}\left[\left(\omega^2 - \frac{\gamma^2}{4}\right)^{1/2} t\right] \end{aligned} \quad \text{II.64}$$

Assim, para  $t \ll 1$ , as equações (II.63) e (II.64) fornecem

$$\xi(t)|_{t \rightarrow 0} = A_0$$

II.65

$$\dot{\xi}(t)|_{t \rightarrow 0} = -\frac{\gamma}{2} A_0$$

Logo, o valor da energia no limite  $t \rightarrow 0$ , é

$$E(t)|_{t \rightarrow 0} = \varepsilon_n + \frac{1}{8} m \gamma^2 A_0^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 A_0^2$$

II.66

e do mesmo modo, para  $t \gg 1$ , as equações (II.63) e (II.64) fornecem

$$\xi(t)|_{t \rightarrow \infty} = 0$$

$$\dot{\xi}(t)|_{t \rightarrow \infty} = 0$$

II.67

Logo, o valor da energia no limite  $t \rightarrow \infty$ , é

$$E(t)|_{t \rightarrow \infty} = \varepsilon_n$$

II.68

Vê-se que, inicialmente ( $t = 0$ ), a energia possui um valor máximo conhecido que é especificado em termos da constante  $A_0$  em consequência da dependência da função  $\xi(t)$  com esta constante. Porém, a energia dissipada em função do tempo, para o limite  $t \rightarrow \infty$ , possui um valor nulo, isto é, o sistema já encontra-se no estado estacionário e, conseqüentemente, não sofre mais dissipação. No limite  $t \rightarrow 0$ , a taxa de dissipação tem um valor máximo dado pelo valor que a constante  $A_0$  assumir. Assim,

$$\dot{E}(t)|_{t \rightarrow 0} = -\frac{1}{4} m \gamma^3 A_0^2$$

II.69

Nemes e Piza<sup>69</sup> usando operadores, obtiveram uma expressão para a energia dissipada que possui a mesma forma da equação (II.60), ou seja, a energia dissipada pelo sistema é uma função exponencial dependente do tempo. Kostin<sup>1</sup>, também

usando operadores (de forma idêntica à primeira das equações (II.38)), obteve uma expressão mais geral para a energia dissipada, mas ainda guardando a forma exponencial na dependência temporal.

Skagerstam, utilizando uma definição de operador energia na forma

$$E \xrightarrow{\text{def.}} \langle E_{\text{op.}} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle + \langle \phi \rangle \quad \text{II.70}$$

obtem para a energia total do sistema a mesma equação aqui encontrada, onde a energia total do sistema depende dos valores da função  $\xi(t)$ , de sua derivada primeira e mais a energia do estado estacionário.



## CAPÍTULO III SISTEMAS DISSIPATIVOS COM MEMÓRIA

### III.1 INTRODUÇÃO

o capítulo anterior argumentou-se que, quando se estuda um sistema clássico dissipativo, pode-se montar uma equação de movimento dada pelas leis de Newton. Pode-se também, através de certas condições, encontrar um lagrangeano que conduza àquela equação. Quando se estuda, porém, um sistema quântico dissipativo, encontrar um lagrangeano que conduza a uma equação que descreva a evolução temporal desse sistema, por exemplo, a equação (II.19), surge uma dificuldade inerente ao problema. A mecânica quântica por ser baseada conceitualmente em hamiltonianos, forças de atrito não podem ser incluídas de maneira convencional nesse formalismo. Entretanto, autores como Kostin<sup>1</sup>, O'Connell e colaboradores, e outros, usam a representação de Heisenberg e a definição de valor esperado para os operadores, no cálculo das equações que descrevem a evolução temporal de sistemas quânticos dissipativos.

A equação (II.26) que representa a equação de movimento de uma partícula de massa  $m$  sob a ação de um potencial deslocando-se com velocidade  $\vec{V}$  em um meio viscoso, tem o lagrangeano dado pela equação (II.25). Nem sempre, porém, é fácil ou possível encontrar um lagrangeano que forneça uma equação de movimento para o sistema dissipativo, sendo melhor obter uma equação do tipo  $\vec{F} = m\vec{a}$  e tratar o problema quanticamente. Seguindo a Nelson<sup>31</sup>, assim é feito *neste capítulo* para os sistemas quânticos com memória, análogo ao desenvolvimento para os sistemas analisados no Capítulo II. No trabalho de Nelson, considera-se esse tratamento para um caso especial. Este examina uma partícula sujeita a um movimento browniano, sob a influência de um campo externo expresso pela lei de Newton. Considerando o sistema sem dissipação, a hipótese leva a equação de Schödinger, porém, a interpretação física é inteiramente clássica.

Um sistema quântico com memória tem uma peculiaridade em relação aos outros sistemas dissipativos. Suponha que um sistema quântico isolado interaja com a sua vizinhança, por exemplo, um banho térmico. Suponha, ainda, que a interação se deu no tempo  $t_1$ . Admite-se que, não apenas o sistema evolui com o tempo, mas também o banho. Em um instante depois, no tempo  $t_2$ , a interação sistema/banho modifica-se pelo que ocorreu em  $t_1$ . Do mesmo modo, a interação no tempo  $t_3$  modifica-se pelo que ocorreu em  $t_2$ . Portanto, a interação do sistema com o banho térmico apresenta efeitos de memória. Essencialmente, surgem esses efeitos de

modifica-se pelo que ocorreu em  $t_2$ . Portanto, a interação do sistema com o banho térmico apresenta efeitos de memória. Essencialmente, surgem esses efeitos de memória, face ao sistema quântico evoluir de forma intrínseca com a evolução do banho térmico, isto é, o sistema não só depende do tempo atual em que é observado, mas de tempos passados.

A função que descreve os efeitos da interação do sistema quântico com um dado banho térmico, é a função memória  $\mu(t - t')$ , onde  $t$  é o parâmetro para o tempo atual e  $t'$  para o tempo passado. Evidentemente, o observador deve ter informações suficientes de como o sistema interage com o banho, para especificar, analiticamente, a função memória. *Fundamentalmente*, as contribuições deste trabalho são duas:

- **No capítulo II, generalizou-se a função de onda para todos estados de energia do oscilador harmônico, a qual é solução da equação de Schrödinger-Langevin (II.41). Kostin, obteve esta equação usando a representação de Heisenberg e, neste trabalho, utilizou-se a representação de Schrödinger;**
- **No capítulo III, generaliza-se a equação (II.41), onde considera-se no termo dissipativo da equação de movimento (II.26), os efeitos de memória que o sistema físico apresenta na interação com o banho térmico. Isto leva à equação de Schrödinger-Langevin com memória, equação (III.8).**

A literatura que trata dos sistemas quânticos que apresentam efeitos de memória é recente<sup>70,71,72,73,74,75</sup>. Um dos modelos mais aceito é o de Ford, Lewis e O'Connell<sup>65</sup>. Neste modelo, considera-se uma partícula quântica de massa  $m$  movendo-se em uma dimensão com potencial  $V(x)$ , e linearmente acoplada a um banho térmico à temperatura  $T$ . A equação que descreve a evolução temporal do movimento da partícula é a *equação quântica de Langevin*

$$m\ddot{x} + \int_{-\infty}^t dt' \mu(t - t') \dot{x}(t') + V'(x) = F(t) \quad \text{III.1}$$

Esta é a *equação de movimento de Heisenberg* para o operador  $X$ . O acoplamento com o banho térmico é descrito por dois termos: um operador que caracteriza a função radômica  $F(t)$  com valor esperado nulo, e uma força significativa caracterizada pela função memória  $\mu(t - t')$ .

A equação quântica de Langevin (III.1) é uma descrição "abreviada" do sistema; as variáveis dinâmicas do banho quente não aparecem. Ela também é uma equação "fenomenológica". Com isso, quer se dizer que a interação com o banho quente é unicamente caracterizada por uma distribuição espectral, que a princípio poderia ser determinada experimentalmente, contudo, ela é derivada em base de um modelo microscópico do banho. Como toda descrição macroscópica, esta tem uma dificuldade sutil (embora acredite-se que ela é apropriada à descrição de uma extensa variedade de sistemas, por exemplo, uma partícula browniana em um fluido denso, ou elétrons em um metal, ou a junção de Josephson), pode-se somente derivá-la por modelos microscópicos simples, por exemplo, sistemas de osciladores acoplados. Se esta é uma descrição fenomenológica macroscópica geral, então algumas restrições gerais são colocadas pela intuição em relação aos sistemas a que elas se aplicam. Uma restrição, é supor que a força média exercida pelo banho quente (às vezes chamada de força de reação da radiação) é linear no movimento da partícula. O que é diferente, é que essa força resulta de um movimento "conhecido" da partícula e é independente de como esse movimento aparece. Esta última implica que a função memória  $\mu(t-t')$  deve ser independente do potencial de interação  $V(x)$ , e que a partícula depende somente dos parâmetros que descrevem o acoplamento ao banho quente.

O modelo de O'Connell é descrito através dos operadores de Heisenberg. Este trabalho, porém, utiliza as funções de onda, que é a descrição de Schrödinger. Do mesmo modo que no trabalho de O'Connell, escolhe-se o *reservatório de calor* para ser o sistema da partícula quântica acoplada ao banho quente, caracterizado pelos efeitos de memória.

### III.2 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN COM MEMÓRIA

No capítulo II, fêz-se um breve estudo do formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica, e dada as considerações, aplicou-se esse formalismo para se obter a *equação de Schrödinger-Langevin*, a qual descreve sistemas quânticos dissipativos em que a partícula está sujeita a uma força dissipativa proporcional à velocidade de deslocamento dessa partícula. Análogo a esse desenvolvimento, propõe-se aqui, pela primeira vez, uma equação que descreve a evolução temporal de um sistema quântico, que interage com um banho térmico, cuja interação apresenta efeitos de memória. Até o momento não era conhecida uma "equação de Schrödinger" que os descrevesse. A



equação obtida é denominada de *equação de Schrödinger-Langevin com memória*, face ao termo que descreve os efeitos de memória.

Ainda do capítulo II, foi proposta uma função de onda para solução da *equação de Schrödinger-Langevin*, solução esta, análogo à proposta por Kostin. Na próxima seção, entretanto, propõe-se aqui uma solução para a *equação de Schrödinger-Langevin com memória* semelhante à função (II.43), porém mais geral que esta. Deve-se salientar que, o procedimento dos cálculos neste capítulo, é idêntico ao do capítulo anterior, mas os resultados obtidos são mais abrangentes, pois descrevem os sistemas quânticos com memória.

A equação (II.26), é a equação de movimento para uma partícula de massa  $m$  sujeita à força dissipativa (II.24); introduz-se agora, nesta equação, a função memória  $\mu(t-t')$ . Este novo termo deve, em condição particular, reduzir-se a situação em que a força de atrito é apenas função linear da velocidade. Com efeito, pode-se reescrever as equações (II.26) e (II.27) como

$$\frac{d}{dt} m\bar{u} - \frac{d}{dt_i} m\bar{u}_i + m\gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') u(t') = -\nabla[\text{Re}\phi(r, t)] \quad \text{III.2}$$

$$\frac{d}{dt} m\bar{u}_i - \frac{d}{dt_i} m\bar{u} = -\nabla[\text{Im}\phi(r, t)] \quad \text{III.3}$$

onde apenas na equação (III.2) fêz-se a introdução da função memória. A equação (III.3) deve, como no capítulo II, levar à equação de continuidade e ao mesmo tempo verificar a validade da nova função de onda, semelhante a equação (II.43), que será solução da *equação de Schrödinger-Langevin com memória*.

A equação (III.2) deve reduzir-se à equação de movimento em que a força de atrito é proporcional à velocidade  $\bar{v}$ . Neste caso, a função memória é simplesmente uma função delta de Dirac, isto é,

$$\boxed{\mu(t-t') = \delta(t-t')} \quad \text{III.4}$$

tal que

$$\int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \bar{u}(t') = \bar{u}(t)$$

A função memória  $\mu(t-t')$  tem toda uma gama de aplicabilidade<sup>63</sup>, desde que se conheça as variáveis envolvidas no sistema quântico acoplado ao banho quente.

Utilizando as transposições (II.28), o potencial externo (II.29), a definição de velocidade quântica ( $\vec{v} = \vec{v} + i\vec{v}_i$ ) e as derivadas hidrodinâmicas (II.30), a equação (III.2) fornece

$$m(\vec{v} \circ \nabla) \vec{v} + \frac{\partial}{\partial t} m \vec{v} - m(\vec{v}_i \circ \nabla) \vec{v}_i + m \gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \vec{v}(t') = -\nabla \left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i + V(r) \right]$$

onde a derivada parcial em  $t_i$  é nula, pois não há uma dependência explícita da função  $\vec{v}_i$  com o tempo  $t_i$ . Desenvolvendo a equação anterior, tem-se

$$\frac{1}{2} m \nabla v^2 - \frac{1}{2} m \nabla v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right) + \frac{i\hbar}{2} \gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \nabla \ln \frac{\Phi^*}{\Phi} = -\nabla \left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i + V(r) \right]$$

onde

$$\Phi = \Psi(r, t')$$

Integrando de forma conveniente a última equação, obtém-se

$$\frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + \frac{i\hbar}{2} \gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Phi^*}{\Phi} = - \left[ \frac{\hbar}{2} \nabla \circ \vec{v}_i + V(r) \right] + g(t) \quad \text{III.5}$$

Face à integração,  $g(t)$  é uma função somente do tempo.

A equação (III.5) é uma equação íntegro-diferencial e é semelhante à equação de Ricatti modificada para os casos dissipativos sem memória, e denominada aqui de equação de Ricatti modificada com memória. É mais abrangente que a equação (II.31) devido ao termo de memória. Substituindo as velocidades real e imaginária definidas nas equações (II.3) e (II.4) na equação acima, segue

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 - 2 \frac{\nabla \Psi^* \nabla \Psi}{\Psi^* \Psi} \right] \\
& -\frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 + 2 \frac{\nabla \Psi^* \nabla \Psi}{\Psi^* \Psi} \right] \\
& + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + \frac{i\hbar}{2} \gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Phi^*}{\Phi} \\
& = \frac{\hbar^2}{4m} \left[ -\left( \frac{\nabla \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \left( \frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] - V(r) + g(t)
\end{aligned}$$

Eliminando e agrupando os termos semelhantes, chega-se a

$$g(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \gamma \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Phi^*}{\Phi} = -\frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] + V(r) \quad \text{III.6}$$

Como salientou-se, a equação (III.3) deve levar à equação de continuidade e ao mesmo tempo verificar a validade da nova função de onda. Como essa equação é idêntica à (II.27), pois nesta não se incluiu o termo que descreve os efeitos de memória, obtém-se aqui o mesmo resultado em que se refere a equação (III.3), isto é,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \circ (\rho \vec{v}) = 0 \quad \text{II.34}$$

que é a equação de continuidade. Substituindo agora, nesta equação, as componentes real e imaginária da velocidade quântica, e tendo em vista que  $\rho = \Psi^* \Psi$ , obtém-se

$$\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] \quad \text{III.7}$$

que é idêntica à equação (II.35), como era de se esperar. Adicionando as equações (III.6) e (III.7) resulta, portanto,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(r,t')}{\Psi(r,t')} - g(t)\Psi} \quad \text{III.8}$$

Da mesma forma que na seção (II.3), a constante  $g(t)$  que aparece na equação acima pode ser avaliada se for usada a condição de que o valor da energia total  $E(t)$ , é igual ao valor esperado da energia cinética  $(2m)^{-1} \langle p^2 \rangle$  mais o valor esperado do potencial de interação  $\langle V \rangle$ , isto é, equações (II.37) e (II.38). Multiplicando a equação (III.8) por  $\Psi^*(x, t)$ , e integrando, em uma dimensão, tem-se

$$i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx + \int \Psi^* V \Psi dx + \int \Psi^* V_{L\mu} \Psi dx \quad \text{III.9}$$

onde  $V_{L\mu}$  é o potencial não linear da forma

$$V_{L\mu}(x, t) = \frac{i\hbar}{2} \gamma \int dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(x, t')}{\Psi(x, t')} - g(t)$$

Como este potencial é uma função do tempo, isto mostra que o sistema aqui descrito é dissipativo. Basta observar a equação (III.8), onde os dois últimos termos do lado direito dessa equação é o potencial  $V_{L\mu}(x, t)$  multiplicado pela função de onda  $\Psi$ .

Tendo em vista as equações (II.37) e (II.38), da equação (III.9) tira-se

$$\int \Psi^* V_{L\mu} \Psi dx = 0$$

Como o valor esperado de uma constante é ela mesma, obtém-se da última expressão

$$g(t) = \frac{i\hbar}{2} \gamma \iint dt' \mu(t-t') \Psi^*(x,t) \ln \frac{\Psi^*(x,t')}{\Psi(x,t')} \cdot \Psi(x,t) dx \quad \text{III.10}$$

A proposta essencial deste trabalho era obter um tipo de equação que fosse semelhante à *equação de Schrödinger-Langevin*, porém mais geral que esta, na qual tivesse um termo que relacionaria a dependência do sistema em estudo com um determinado banho térmico, onde este termo seria representado pela função memória. Esta função seria mais abrangente possível, onde para um caso particular, teriam-se as equações a priori conhecidas. Com efeito, a equação (III.8) expressa literalmente este pensamento. Esta equação é denominada de *equação de Schrödinger-Langevin com memória*, face a integral que contém a função memória  $\mu(t-t')$ . Note que esta equação reduz-se imediatamente à equação de Schrödinger-Langevin, equação (II.41), para o caso em que a função memória for a função delta de Dirac (III.4).

Assim como na equação de Schrödinger e na equação de Schrödinger-Langevin, atribui-se a mesma interpretação probabilística para a função de onda da equação (III.8), sendo  $|\Psi(r,t)|^2$  a densidade de probabilidade. No próximo capítulo, avaliam-se as quantidades dinâmicas posição e momento e, também, a energia, em termos de seus valores esperados.

### III.3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN COM MEMÓRIA

**N**esta seção é proposta uma função de onda  $\Psi$  para solução da *equação de Schrödinger-Langevin com memória*. Os resultados aqui obtidos são semelhantes aos resultados correspondentes da *equação de Schrödinger-Langevin* sem memória, porém mais abrangentes que estes. Similarmente à seção (II.4), tem-se como potencial de interação, o potencial do oscilador harmônico quântico, em uma dimensão, dado por

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{III.11}$$

Deve-se enfatizar que é somente para o potencial do oscilador harmônico (até o momento), que se tem solução para a equação (III.8), e a escolha desse potencial, é

devido a ocorrência muito frequente de fenômenos físicos que apresentam oscilação e, portanto, muito expressivo na literatura científica.

Como tentativa para solução da equação (III.8), escolhe-se para  $\Psi$  a mesma forma da equação (II.43), ou seja,

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Phi_n(\mathbf{x} - \xi(t)) \exp\left[-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} + \frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar} + iK_\mu(t)\right] \quad \text{III.12}$$

De modo análogo à seção (II.4), e sem perda de generalidade, nestas demonstrações recorre-se ao espaço de uma dimensão.

Pondo a equação (III.12) em forma mais adequada, tem-se

$$\Psi = \Phi_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar + imx\dot{\xi}/\hbar + ik_\mu} \quad \text{III.13}$$

Levando a equação (III.13) na equação (III.10), obtém-se para a constante  $g(t)$

$$g(t) = \gamma\varepsilon_n \int \mu(t-t')t'dt' - m\gamma\xi \int \mu(t-t')\dot{\xi}(t')dt' - \hbar\gamma \int \mu(t-t')k_\mu(t')dt' \quad \text{III.14}$$

Quando a função memória for uma função delta, a "constante de integração"  $g(t)$  tem como um caso particular a equação (II.40), isto é, o sistema não mais apresenta os efeitos de memória. Levando agora as equações (III.11), (III.13) e (III.14) na equação (III.8), vem

$$i\hbar \frac{\partial \Phi_n}{\partial t} + \varepsilon_n \Phi_n - mx\ddot{\xi}\Phi_n - \hbar k_\mu \dot{\Phi}_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2} - i\hbar \dot{\xi} \frac{\partial \Phi_n}{\partial x} + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 \Phi_n + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Phi_n + mx\gamma \dot{\xi}_\mu \Phi_n - m\gamma \xi \dot{\xi}_\mu \Phi_n$$

onde

$$\dot{\xi}_\mu(t) = \int_{-\infty}^t \mu(t-t') \dot{\xi}(t') dt' \quad \text{III.15}$$

Fazendo a troca de variáveis de  $X$  por  $\eta + \xi$  de modo análogo à seção (II.4), e desenvolvendo a expressão acima, obtém-se

$$-m\eta\ddot{\xi}\Phi_n - m\eta\gamma\dot{\xi}_\mu\Phi_n - m\eta\omega^2\xi\Phi_n = -\varepsilon_n\Phi_n - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Phi_n}{\partial\eta^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\eta^2\Phi_n + \hbar\dot{k}_\mu\Phi_n + m\xi\ddot{\xi}\Phi_n + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2\Phi_n + \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2\Phi_n \quad \text{III.16}$$

Os termos do lado esquerdo da equação (III.16) fornecem uma equação semelhante à equação de movimento do oscilador harmônico clássico dissipativo, onde  $\gamma$  é o coeficiente de atrito, enquanto os três primeiros termos do lado direito são a equação de Schrödinger. Portanto, da equação (III.16) tiram-se

$$\varepsilon_n\Phi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Phi_n}{\partial\eta^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\eta^2\Phi_n \quad \text{III.17}$$

e ainda

$$\ddot{\xi} + \gamma\dot{\xi}_\mu + \omega^2\xi = 0 \quad \text{III.18}$$

$$\hbar\dot{k}_\mu = m\gamma\xi\dot{\xi}_\mu + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2 - \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2 \quad \text{III.19}$$

sendo  $\dot{\xi}_\mu$  dado pela equação (III.15). A função  $\dot{\xi}_\mu(t)$  será igual a  $\dot{\xi}(t)$  no caso em que a função memória for uma função delta e, neste caso, a equação (III.18) reduz-se à equação de movimento do oscilador harmônico clássico dissipativo.

Observe que a equação integro-diferencial (III.18) é mais geral que a equação (II.47). Conhecendo-se a função memória  $\mu(t-t')$  para um sistema quântico que interage com um dado banho térmico e, admitindo uma solução para a função  $\xi(t)$ , resolve-se, portanto, a equação (III.18).

Pode-se colocar a equação (III.19) na forma

$$k_{\mu} = \frac{1}{\hbar} \int \left( m\gamma\xi(t)\dot{\xi}_{\mu}(t) + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2(t) - \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2(t) \right) dt \quad \text{III.20}$$

ou

$$k_{\mu} = k_{\mu}(\xi(t), \dot{\xi}(t), \dot{\xi}_{\mu}(t))$$

Observa-se que a função de onda (III.12) não é idêntica à função de onda (II.43) para o caso dissipativo sem memória, apenas tem a mesma forma, diferindo entre si pelas constantes de integração  $k_{\mu}(t)$  e  $k(t)$ , e porque a função  $\xi(t)$  para o sistema sem memória é diferente da função correspondente  $\xi(t)$  para o sistema com memória. Isto é fácil de verificar, pois  $\xi(t)$  e suas derivadas estão relacionadas com a função memória como indica a equação (III.18). Portanto, a função de onda pesquisada para o sistema quântico dissipativo com memória tem a mesma forma da função de onda para o sistema sem memória, porém os resultados obtidos no primeiro caso são mais abrangentes face ao termo que descreve os efeitos de memória.

Note como é simples e interessante a mesma forma para  $\Psi(x, t)$  para os dois casos aqui analisados, assim expressos pelos seus resultados. A função  $\Phi_n(x - \xi)$  é ainda solução da equação de Schrödinger e  $\varepsilon_n$  são os valores da energia correspondentes. Como considerou-se o potencial do oscilador quântico, também, para o sistema com memória,  $\varepsilon_n$  são os autovalores da energia referente aos auto-estados  $\Phi_n$  deste oscilador, de modo que

$$H_0 \Phi_n = \varepsilon_n \Phi_n$$

é a equação de autovalores para o oscilador harmônico quântico, onde  $H_0$  é o operador hamiltoniano associado, obtido da equação de Schrödinger independente do tempo (III.17), escrita em termos da variável  $\eta$ , análogo à seção (II.4). Os mesmos argumentos daquela seção são válidos aqui, pois não há hamiltoniano que se possa associar ao sistema com memória face a sua natureza dissipativa, de modo que



satisfaça as regras de quantização de Heisenberg, e que leva à relação de comutação para os operadores momento e posição.

As componentes das velocidades real e imaginária são, também, da forma

$$v_{(x)} = \dot{\xi} \quad \text{III.21}$$

$$v_{i((x))} = \omega(x - \xi) - \frac{\hbar}{m} \frac{1}{H_n} \frac{\partial H_n}{\partial (x - \xi)} \quad \text{III.22}$$

onde  $\Phi_n$  tem a mesma forma da equação (II.52). Embora as equações acima sejam semelhantes às equações (II.50) e (II.53), observe que elas são funções diferentes de  $t$ .

Similarmente à seção (II.4), é fácil comprovar a validade da equação (III.12), verificando se ela é solução da equação de continuidade (II.34).

### III.4 ENERGIA

Sabe-se que, para um sistema quântico dissipativo, a sua energia não é uma constante de movimento. Neste trabalho, porém, não é possível colocar a energia total como a soma das energias cinética e potencial. No entanto, é possível escrever a energia total do sistema em termos de valores esperados. Deste modo, utiliza-se o valor esperado da energia cinética mais o valor esperado da energia potencial para obter a energia total. Na seção (II.5) obteve-se a energia total através da *equação de Ricatti modificada* para os sistemas quânticos sem memória. Utilizou-se, também, para o cálculo dos potenciais não lineares  $V_L$  e  $V_{L\mu}$ , a definição de energia de acordo com Skagerstan, Kostin e outros autores, em termos de operadores,

$$E(t) = \left( \Psi, i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \quad \text{III.23}$$

que, literalmente, é a primeira das equações (II.38). Para o cálculo de  $E(t)$ , a forma mais conveniente para a função (III.12), é

$$\Psi(x, t) = \Phi_n(x - \xi(t))e^z \quad \text{III.24}$$

onde

$$z = -\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} + \frac{imx\xi(t)}{\hbar} + ik_\mu(t)$$

Tendo em vista as equações (III.23) e (III.24), segue, após alguns cálculos,

$$i\hbar\Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\hbar\dot{\xi}\Phi_n \frac{\partial\Phi_n}{\partial\eta} + \varepsilon\Phi_n^2 - m\ddot{\xi}\Phi_n^2 - m\xi\ddot{\xi}\Phi_n^2 - \hbar\dot{k}_\mu\Phi_n^2$$

de modo que a equação (III.23) fornece

$$E(t) = \varepsilon_n - m\xi\ddot{\xi} - \hbar\dot{k}_\mu$$

ou

$$E(t) = \varepsilon_n + \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2$$

III.25

Esta equação conserva a mesma forma da equação (II.60), onde  $\xi(t)$  e  $\dot{\xi}(t)$ , para uma solução particular, determinam os valores iniciais da energia do sistema. Como estas funções estão relacionadas entre si por equações de movimento, o valor para a energia do sistema sem memória é diferente do valor da energia do sistema com memória. Isto é visto claramente ao derivar-se a equação (III.25) em função do tempo para obter a energia dissipada do sistema quântico com memória, ou seja,

$$\dot{E}_\mu(t) = m\dot{\xi}\ddot{\xi} + m\omega^2\xi\dot{\xi}$$

e recordando a equação (III.18) obtém-se

$$\dot{E}_\mu(t) = -m\gamma\dot{\xi}\ddot{\xi}$$

III.26

de modo que a energia dissipada é proporcional ao coeficiente de atrito e depende da interação do sistema com o banho térmico, este representado pela equação (III.15).

Quando a função memória for uma função delta, a equação (III.26) reduz-se à equação (II.62). Note que a equação (III.25) deveria ser escrita formalmente como

$$E_n(t) = \varepsilon_n + \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2$$

pois, para cada estado  $\Phi_n$  do oscilador harmônico,  $E_n(t)$  é o valor da energia para o estado correspondente.

### III.5 SOLUÇÃO PARTICULAR DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN COM MEMÓRIA

Como foi dito na seção (III.3), é possível obter soluções para a equação (III.18). É proposta nesta seção, uma solução para esta equação baseada no trabalho de Ford, Lewis e O'Connell<sup>[74]</sup>, em que a função memória é dada por

$$\mu(t) = C[\delta(t) - \Omega e^{-\Omega t}] \quad \text{III.27}$$

onde a constante  $C$  depende da interação do sistema com o meio. Neste caso,  $C$  está relacionada à carga do elétron e à velocidade da luz.  $\Omega$  é uma frequência definida como frequência de corte (cut-off frequency).

Neste trabalho, é analisado a propagação da radiação eletromagnética através de um meio, consistindo de um conjunto de osciladores interagindo não harmonicamente em um banho quente de radiação de corpo negro. O acoplamento do oscilador com o campo de radiação corresponde a dois termos: o termo *reação de radiação* caracterizado pela função memória  $\mu(t)$  e o termo *flutuação* caracterizado pela força radômica  $F(t)$ . No presente trabalho, toma-se a equação (III.27) para obter uma solução particular da *equação de Schrödinger-Langevin com memória*.

Colocando a equação (III.27) em forma mais adequada

$$\mu(t-t') = C\delta(t-t') - C\Omega e^{-\Omega(t-t')}$$

Faz-se por conveniência de cálculo e sem perda de generalidade  $C = 1$ , de modo que

$$\mu(t-t') = \delta(t-t') - \Omega e^{-\Omega(t-t')} \quad \text{III.28}$$

onde para  $\Omega = 0$  ou  $\Omega \rightarrow \infty$ , a função memória é uma função delta e, obtém-se assim, os resultados já conhecidos no capítulo II.

Como solução da função  $\xi(t)$ , propõe-se a mesma forma da solução do oscilador quântico dissipativo, isto é,

$$\xi(t) = A_0 e^{\alpha t} \cos(\beta t + \delta) \quad \text{III.29}$$

onde  $A_0$  e  $\delta$  são constantes. Substituindo a equação (III.28) na equação (III.15), vem

$$\dot{\xi}_\mu(t) = \dot{\xi}(t) - \Omega e^{-\Omega t} \int_{-\infty}^t e^{\Omega t'} \dot{\xi}(t') dt' \quad \text{III.30}$$

Derivando em relação ao tempo a equação (III.29), tem-se

$$\dot{\xi}(t) = A_0 \alpha e^{\alpha t} \cos(\beta t + \delta) - A_0 \beta e^{\alpha t} \sin(\beta t + \delta) \quad \text{III.31}$$

Substituindo agora a equação (III.31) na equação (III.30), desenvolvendo os termos e simplificando-os, resulta

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_\mu(t) = & [A_0 \alpha - A_0 \Omega (\alpha^2 + \alpha \Omega + \beta^2)] \cos(\beta t + \delta) \\ & + [-A_0 \beta + A_0 \beta \Omega^2] e^{\alpha t} \sin(\beta t + \delta) \end{aligned} \quad \text{III.32}$$

Derivando agora a equação (III.31) em relação ao tempo, segue

$$\ddot{\xi}(t) = (A_0 \alpha^2 - A_0 \beta^2) e^{\alpha t} \cos(\beta t + \delta) - 2A_0 \alpha \beta e^{\alpha t} \sin(\beta t + \delta) \quad \text{III.33}$$

Substituindo finalmente as equações (III.29), (III.33) e (III.34) na equação de movimento (III.18), e sabendo que as funções seno e cosseno são linearmente independentes,

após o desenvolvimento e a simplificação dos termos, obtém-se para as constantes  $\alpha$  e  $\beta$

$$\alpha = -\frac{\gamma}{2}(1 - \Omega^2) \quad \text{III.34}$$

$$\beta^2 = \frac{\omega^2}{1 + \gamma\Omega} - \frac{\gamma^2}{4}(1 - \Omega^2)^2 \quad \text{III.35}$$

Assim a equação (II.29) se reescreve

$$\xi(t) = A_0 \exp\left[-\frac{\gamma}{2}(1 - \Omega^2)t\right] \cdot \cos\left\{\left[\frac{\omega^2}{1 + \gamma\Omega} - \frac{\gamma^2}{4}(1 - \Omega^2)^2\right]^{1/2} t + \delta\right\} \quad \text{III.36}$$

de modo que, para  $\Omega = 0$  ou  $\Omega \rightarrow \infty$ , a equação acima reduz-se à equação (II.49). Observe que, dependendo dos valores de  $\omega$ ,  $\gamma$ ,  $\Omega$ , o parâmetro  $\beta$  pode assumir um valor complexo, levando a uma forma matemática diferente para a equação (III.36), em termos de funções hiperbólicas.

É feito agora uma análise da equação da energia total do sistema, tendo em vista a solução da equação de movimento escolhida nesta seção. Sem perda de generalidade, faz-se o fator de fase nulo nas equações (III.29) e (III.31), isto é,  $\Omega = 0$ . Assim, para  $t \ll 1$ , as equações (III.29) e (III.31) fornecem

$$\xi(t)|_{t \rightarrow 0} = A_0 \quad \text{III.37}$$

$$\dot{\xi}(t)|_{t \rightarrow 0} = -\frac{\gamma}{2}A_0(1 - \Omega^2)$$

Logo, o valor da energia no limite  $t \rightarrow 0$ , é

$$E(t)|_{t \rightarrow 0} = \varepsilon_n + \frac{1}{8}m\gamma^2A_0^2(1 - \Omega^2)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2A_0^2 \quad \text{III.38}$$

e do mesmo modo, para  $t \ll 1$ , as equações (III.29) e (III.31) fornecem

$$\begin{aligned}\xi(t)|_{t \rightarrow \infty} &= 0 \\ \dot{\xi}(t)|_{t \rightarrow \infty} &= 0\end{aligned}\quad \text{III.39}$$

Logo, o valor da energia no limite  $t \rightarrow \infty$ , é

$$E(t)|_{t \rightarrow \infty} = \varepsilon_n \quad \text{III.40}$$

O valor da energia para o limite  $t \rightarrow \infty$  possui um valor constante, isto é, o sistema já encontra-se no estado estacionário e, conseqüentemente, não sofre mais dissipação, de modo que a energia dissipada em função do tempo é nula. No limite  $t \rightarrow 0$  a taxa de dissipação tem o valor dado por

$$\dot{E}(t)|_{t \rightarrow 0} = -\frac{1}{2} m \gamma^2 A_0^2 (1 - \Omega^2) \left[ \frac{\gamma}{2} (1 - \Omega^2)^2 + \frac{\omega^2 \Omega}{1 + \gamma \Omega} \right] \quad \text{III.41}$$

de modo a depender do valor inicialmente definido para a freqüência de corte  $\Omega$ . Observe que a taxa de dissipação da energia para o sistema sem memória tem sempre um valor negativo. Basta verificar a equação (II.62), isto é,

$$\dot{E}(t) = -m \gamma \dot{\xi}^2 < 0$$

pois  $\dot{\xi}^2 > 0$ . Para o sistema com memória, entretanto, deve-se atentar para a equação (III.26), pois a princípio, não se pode garantir que o sistema para  $t \rightarrow 0$  terá um valor máximo para a sua energia e, a partir daí, sofrer um decréscimo; se, inicialmente ( $t = 0$ ), os valores para as funções  $\xi(0)$  e  $\dot{\xi}_\mu(0)$  forem tais que,  $E_\mu(0) > 0$ , o sistema quântico estará recebendo neste instante energia do banho térmico. Observe que a equação (III.41), não impõe que a taxa de dissipação da energia para o instante inicial seja máxima, de modo que depende do valor tomado para o parâmetro  $\Omega$ .

No trabalho de G. W. Ford, J. T. Lewis e R. F. O'Connell define-se  $\Omega$  como freqüência de corte quando  $\Omega \equiv \Omega_e = \tau_e^{-1}$ , onde  $\tau_e = 6.10^{-24}$  s, é (2/3) do tempo de passagem do fóton através do "raio clássico" do elétron, um tempo extremamente curto, ainda assim, refletindo em efeitos observáveis, ou seja, de modo que expresse sucintamente a influência dos efeitos de memória. Neste trabalho, como a equação

(III.27), trata-se de uma solução particular da equação (III.8), o papel relevante do parâmetro  $\Omega$  é limitar a ação de tempos anteriores, isto é, o intervalo de tempo em que é considerado no sistema quântico os efeitos de memória em relação ao tempo atual.

Como salientou-se, qualquer sistema quântico dissipativo que seja descrito pela equação de *Schrödinger-Langevin com memória*, a interação que caracteriza esse sistema não só depende do tempo presente em que as medidas são feitas, mas de tempos passados, de modo que a interação é caracterizada pela função memória  $\mu(t - t')$ . Assim, a contribuição efetiva deste trabalho, foi generalizar a equação de *Schrödinger-Langevin* para sistemas quânticos que apresentam efeitos de memória, propor uma função de onda  $\Psi(r, t)$  que seja solução dessa equação, e considerar uma solução particular para uma dada função memória  $\mu(t - t')$ .



## CAPÍTULO IV RELAÇÕES DE INCERTEZA E EVOLUÇÃO TEMPORAL

### IV.1 INTRODUÇÃO

Nos capítulos II e III foram feitas as demonstrações e considerações a respeito das equações que descrevem a influência de forças dissipativas em sistemas quânticos; essas equações reduzem-se a equações mais simples em situações particulares, a saber:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - f(t)\Psi} \quad \text{IV.1}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \Psi \int_{-\infty}^t dt' \mu(t-t') \ln \frac{\Psi^*(r,t')}{\Psi(r,t')} - g(t)\Psi} \quad \text{IV.2}$$

A equação (IV.2) descreve a evolução temporal de um sistema físico que apresenta efeitos de memória (neste trabalho considera-se o oscilador harmônico), e reduz-se à equação (IV.1) quando a função memória  $\mu((t-t'))$  for uma função delta, isto é, obtém-se um sistema em que não há esses efeitos de memória; e no caso, quando o coeficiente de dissipação for igual a zero (sistemas sem dissipação), obtém-se finalmente a equação de Schrödinger.

Nas últimas três décadas, diversos trabalhos têm aparecido na literatura em que são feitos tratamentos quânticos de sistemas dissipativos. No capítulo II deste trabalho considerou-se a *equação de Schrödinger-Langevin* (IV.2), que tem sido usada para estudar a difusão, dissipação e outros fenômenos de não-equilíbrio. Este capítulo é fundamentalmente baseado nos trabalhos de Kostin<sup>1</sup>, Nelson<sup>31</sup> e Michelin<sup>33</sup>. No primeiro, a *equação de Schrödinger-Langevin* é obtida a partir dos operadores de Heisenberg, e aqui usou-se o formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica. No segundo, partindo de uma equação do tipo  $\vec{F} = m\vec{a}$  para uma partícula sujeita a um movimento browniano sem dissipação, obtém-se a equação de Schrödinger, e de modo análogo, utiliza-se aqui o mesmo tratamento, e no terceiro, é proposta uma solução para a *equação de Schrödinger-Langevin*, na qual a função de onda descreve apenas o estado fundamental do oscilador harmônico; neste, entretanto, a



generalização é para todos os estados de energia. No capítulo III obteve-se uma equação mais geral que a equação de Schrödinger-Langevin, onde leva-se em consideração o comportamento do sistema quântico quando acoplado a um banho térmico, de modo que a interação apresenta efeitos de memória. Nas próximas seções calculam-se os valores esperados e as incertezas das variáveis dinâmicas dos sistemas dissipativos aqui tratados.

No capítulo II foi salientado que é possível, através de certas condições<sup>33</sup>, obter um lagrangeano modificado de modo a descrever sistemas quânticos dissipativos. Uma das equações (II.21) e a equação (II.25) são as partes imaginária e real, respectivamente, desse lagrangeano; a seguir, obtém-se as equações de movimento correspondentes. A partir dessas equações, e usando a formulação hidrodinâmica da mecânica quântica, chega-se a equação de Schrödinger-Langevin. A quantidade  $e^{\gamma t}$  na parte real do lagrangeano, é que leva àquela equação. Esse fator, onde  $\gamma$  é o coeficiente de atrito, acrescenta ao sistema uma força dissipativa e que é proporcional à velocidade de deslocamento da partícula.

Por razões a considerar, calcula-se agora o valor do momento  $p$  usando a equação de Schrödinger. Aplicando  $p = \partial L / \partial v$  no lagrangeano (II.25) e conforme as transposições (II.28), obtém-se

$$p = (mv)e^{\gamma t} \quad \text{IV.3}$$

Por simplicidade usa-se o espaço de uma dimensão, isto é,  $v = v_x$  e  $p = p_x$ . Brevemente são feitos os comentários a respeito da equação (IV.3). O lagrangeano (II.25) leva à equação de Schrödinger na condição de que  $\gamma = 0$  e, conseqüentemente,

$$p = mv$$

Usando-se a definição para valor esperado de qualquer função de  $x$  e  $t$

$$\langle F(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) F(x, t) \Psi(x, t) dx$$

obtém-se, portanto,

$$\mathbf{p} \equiv \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \quad \text{IV.4}$$

onde  $\mathbf{p}$ , o momento quântico, é um operador. De modo análogo, a posição  $\mathbf{x}$  também é um operador. Esse resultado e outras considerações para os operadores em mecânica quântica é largamente encontrado na literatura acadêmica.

A identidade (IV.4) foi obtida considerando um sistema descrito pela equação de Schrödinger. Pode-se provar que o momento  $\mathbf{p}$  na forma apresentada, está completamente de acordo com o Princípio da Incerteza, isto é,  $\mathbf{p}$  obedece à condição de que  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ .

A questão vital está em considerar o momento no caso em que o sistema quântico é dissipativo ( $\gamma \neq 0$ ). O momento dado pela equação (IV.3) corresponde a esse sistema. Usando a equação de Schrödinger-Langevin para o cálculo de  $\mathbf{p}$  (dissipativo) e procedendo de maneira semelhante como nos cálculos anteriores, obtém-se

$$\mathbf{p}_d \equiv e^{\alpha t} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \quad \text{IV.5}$$

onde o índice 'd' significa que o momento considerado *evidencia* os sistemas quânticos dissipativos. Este momento, na forma em que é apresentado, leva a uma relação de incerteza do tipo  $\Delta p \Delta x \geq (\hbar/2)e^{-\gamma t}$ . Para o instante inicial  $t \rightarrow 0$ , a relação é consistente com a relação  $\Delta p \Delta x = \hbar/2$  e, à medida que o tempo passa,  $t \rightarrow \infty$ , o produto das incertezas  $\Delta p$  e  $\Delta x$  tende ao um valor finito (igual a zero), de modo que em uma medida simultânea de ambos contradiz o Princípio da Incerteza. Em vista disso, a escolha da identidade (IV.4) é imediata. Na literatura específica,  $\mathbf{p}$  é definido da mesma maneira.

Como é visto nas próximas seções, não se perde nenhuma informação na obtenção dos valores esperados das grandezas dinâmicas na escolha de  $\mathbf{p}$ . Os resultados encontrados além de estarem de acordo com o Princípio da Incerteza, pois retratam o comportamento de sistemas quânticos, reduzem-se a resultados conhecidos quando  $\gamma = 0$ .

## IV.2 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN

A solução da equação de Schrödinger-Langevin proposta no capítulo II, é dada pela seguinte equação

$$\Psi = \phi_n \exp \left[ -\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} + \frac{imx\dot{\xi}}{\hbar} + ik \right] \quad \text{IV.6}$$

e

$$\Psi = \Psi(x, t), \quad \phi_n = \phi_n(x - \xi), \quad \xi = \xi(t), \quad k = k(\xi(t), \dot{\xi}(t)) \quad \text{e} \quad \eta = x - \xi$$

é a função de onda para o oscilador harmônico quântico.

Face aos cálculos, aos resultados referentes aos valores esperados e às incertezas das variáveis dinâmicas dos sistemas dissipativos analisados no capítulo II serem conhecidos da literatura<sup>1,31,46,76</sup>, é conveniente apenas considerar esses resultados, de modo que

$$\langle x \rangle = \xi(t) \quad \text{IV.7}$$

$$\langle p \rangle = m\dot{\xi}(t) \quad \text{IV.8}$$

e

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle - \gamma \langle p \rangle$$

como o potencial é do oscilador harmônico, obtém-se

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2 \xi(t) - m\gamma \dot{\xi}(t) \quad \text{IV.9}$$

Tendo em vista a equação (IV.8), a equação anterior fornece

$$\ddot{\xi} + \gamma \dot{\xi} + \omega^2 \xi = 0$$

que é a mesma equação (II.47) obtida no capítulo II. Isto não significa que a partícula quântica se comporta igual à partícula clássica, apenas, a função  $\xi(t)$  satisfaz a equação clássica do oscilador harmônico dissipativo; e para o produto das incertezas  $\Delta x$  e  $\Delta p$  tem-se, portanto,

$$\Delta p \Delta x = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad \text{IV.10}$$

As quantidades  $\langle \mathbf{x} \rangle$ ,  $\langle \mathbf{p} \rangle$  e  $d\langle \mathbf{p} \rangle/dt$  apresentam, segundo os resultados acima, uma descrição clássica na evolução temporal dessas grandezas; isto não quer dizer, como já salientou-se, que a partícula quântica tenha o seu comportamento semelhante a uma descrição clássica, visto que não obteve-se uma descrição instantânea dessas grandezas, mas uma média das medidas efetuadas sobre ela, para o mesmo instante  $t$ , sobre todo o intervalo em que a partícula pode ser encontrada. O que se tem, portanto, quando se interpreta fisicamente esses resultados, é que os mesmos satisfazem ao teorema de Ehrenfest. Na próxima seção faz-se uma rápida discussão sobre o operador momento e esses resultados.

### IV.3 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN COM MEMÓRIA

A solução da equação de Schrödinger-Langevin com memória proposta no capítulo III é dada pela seguinte equação

$$\Psi = \Phi_n \exp \left[ -\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar} + \frac{imx\xi}{\hbar} + ik_\mu \right] \quad \text{IV.11}$$

e

$$\Psi = \Psi(\mathbf{x}, t), \quad \Phi_n = \Phi_n(\mathbf{x} - \xi), \quad \xi = \xi(t), \quad k_\mu = k_\mu(\xi(t), \dot{\xi}(t), \ddot{\xi}(t)) \quad \text{e} \quad \eta = \mathbf{x} - \xi$$

é a função de onda para o oscilador harmônico quântico. Convém frisar mais uma vez que, embora as funções de onda propostas como soluções das equações (IV.1) e (IV.2), por serem semelhantes entre si, elas são funções diferentes de  $t$ . Vê-se claramente esta afirmação, ao considerar a equação (II.47) para o sistema sem memória e a equação (III.18) para o sistema com memória; as funções  $\xi(t)$ ,  $\dot{\xi}(t)$ ,  $\dot{\xi}_\mu(t)$  e  $\ddot{\xi}(t)$  estão relacionadas entre si com essas equações.

Como salientou-se no capítulo III, foi obtida pela primeira vez uma equação do tipo de Schrödinger e ainda, proposta uma solução para essa equação, a qual descreve sistemas quânticos em que a partícula é linearmente acoplada a um banho térmico, de modo que a interação apresenta efeitos de memória. Os resultados dos valores esperados e das incertezas das variáveis dinâmicas referentes a esses sistemas, também são obtidos pela primeira vez; é essencial que se obtenha esses resultados, pois na mecânica quântica é relevante conhecer como o valor esperado dessas variáveis evoluem com o tempo. Deve-se salientar que a função de onda considerada nestes cálculos, evidentemente, é a função (IV.11), e mais uma vez, tem-se o espaço de uma dimensão.

• *Cálculo do valor esperado*  $\langle x \rangle = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$

$$\langle x \rangle = \int \Phi_n^2(x - \xi) x dx = \int \Phi_n^2(\eta) (\eta + \xi) d\eta$$

portanto,

$$\langle x \rangle = \xi(t)$$

IV.12

• *Cálculo do valor esperado*  $\langle p \rangle = \int \Psi^*(x, t) p \Psi(x, t) dx$

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \frac{\hbar}{i} \int \left( \Phi_n \frac{\partial \Phi_n}{\partial x} + \frac{im\dot{\xi}}{\hbar} \Phi_n^2 \right) dx$$

portanto,

$$\langle \mathbf{p} \rangle = m\dot{\xi}(t)$$

IV.13

• *Cálculo do valor esperado*  $\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int \Psi^*(x, t) \mathbf{p} \Psi(x, t) dx$

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \int \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \mathbf{p} \Psi - \Psi^* \mathbf{p} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = \frac{\hbar}{i} \int \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \right) dx$$

pois  $\partial \mathbf{p} / \partial t = 0$ . Em vez de efetuar as derivadas parciais a partir da equação (IV.11), toma-se a equação (IV.2), sua conjugada complexa, e o potencial na forma  $V = V(x)$ , de modo que

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle - m\gamma \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \mu(t-t') \bar{v}(x, t') dt' \right\rangle$$

Como o potencial é do oscilador harmônico, obtém-se

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -m\omega^2 \xi(t) - m\gamma \dot{\xi}_\mu(t) \quad \text{IV.14}$$

Considerando a equação (IV.13), a equação anterior leva a

$$\ddot{\xi} + \gamma \dot{\xi}_\mu + \omega^2 \xi = 0$$

que é a mesma equação (III.18) obtida no capítulo III. Portanto, não se pode dizer que a partícula quântica tem um comportamento segundo uma descrição clássica, pode-se dizer apenas que a função  $\xi(t)$  satisfaz a equação do oscilador harmônico clássico dissipativo quando a função memória for uma função delta. É relevante que se destaque, que a equação acima pode ser obtida calculando-se os valores esperados dos operadores da equação de Langevin (III.1), de modo que  $d\langle \mathbf{p} \rangle / dt$  satisfaz essa equação para o caso particular do oscilador harmônico quântico.

Procede-se agora o cálculo do produto  $\Delta x \Delta p$ .

• *Cálculo da Incerteza*  $\Delta x = [\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2]^{1/2}$

A equação (IV.11) fornece

$$\langle x \rangle^2 = \xi^2$$

O valor esperado de  $\langle x^2 \rangle = \int \Psi^*(x,t) x^2 \Psi(x,t) dx$ , é

$$\langle x^2 \rangle = \int \Phi_n^2(\eta) (\eta^2 + \xi^2 + 2\xi\eta) d\eta = \int \Phi_n^2(\eta) \eta^2 d\eta + \xi^2$$

portanto,

$$(\Delta x)^2 = \int \Phi_n^2(\eta) \eta^2 d\eta = \frac{\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{IV.15}$$

• *Cálculo da Incerteza*  $\Delta p = [\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2]^{1/2}$

A equação (IV.13) fornece

$$\langle p \rangle^2 = m^2 \xi^2$$

O valor esperado de  $\langle p^2 \rangle = \int \Psi^*(x,t) p^2 \Psi(x,t) dx$ , é

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx \\ &= -\hbar^2 \int \left( \Phi_n \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2} - \frac{2im\xi}{\hbar} \Phi_n \frac{\partial \Phi_n}{\partial x} - \frac{m^2 \xi^2}{\hbar^2} \Phi_n^2 \right) dx \\ &= -\hbar^2 \int \Phi_n \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial \eta^2} d\eta + m^2 \xi^2 \end{aligned}$$

portanto,

$$(\Delta p)^2 = -\hbar^2 \int \Phi_n \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial \eta^2} d\eta = m\omega\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{IV.16}$$

Finalmente, em vista dos resultados (IV.15) e (IV.16), a relação de incerteza para  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{x}$  é dada por

$$\Delta p \Delta x = \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{IV.17}$$

• *Cálculo do valor esperado*  $\langle E(t) \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$

segundo Kostin<sup>1</sup>, Skagerstan<sup>54</sup>, entre outros que utilizaram a definição de energia total em termos de operadores.  $\langle T \rangle$  e  $\langle V \rangle$  são os valores esperados das energias cinética e potencial.

O valor esperado de  $\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle$ , é

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \int \Phi_n^2(\eta) \eta^2 d\eta + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2$$

O valor esperado de  $\langle T \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle$ , é

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \int \Phi_n \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial \eta^2} d\eta \right) + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2$$

portanto,

$$\langle E(t) \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 \quad \text{IV.18}$$



o que concorda com a equação (III.25) para a definição de energia total, onde

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

A energia total de sistemas quânticos descritos pela equação de Schrödinger, pode ser colocada como a soma da energia cinética e energia potencial, de modo que há um operador associado com esta energia, o operador hamiltoniano. Quando se estuda, porém, sistemas quânticos que sejam dissipativos, para obter um operador hamiltoniano equivalente, surge uma dificuldade que é intrínseca ao problema. Face a isto, formulou-se neste trabalho que a energia total do sistema é a soma do valor esperado da energia cinética e o valor esperado da energia potencial, a mesma definição apresentada comumente na literatura específica. Note que a energia total obtida

$$E = \varepsilon_n + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2$$

varia com o tempo conforme as funções  $\xi(t)$  e  $\dot{\xi}(t)$  variam. Isto mostra, sob outro ponto de vista, que os sistemas aqui estudados são dissipativos. A taxa de dissipação de energia, como sabe-se do capítulo III, tem o valor

$$\frac{dE}{dt} = -m\gamma \dot{\xi} \dot{\xi}_\mu$$

de modo que depende da natureza da interação do sistema com o banho térmico. Quando não há efeitos de memória<sup>1,69</sup>, a taxa de dissipação de energia é dada pela equação (II.62), isto é,  $\dot{\xi}_\mu = \dot{\xi}$ .

As funções de onda escolhidas aqui como soluções das equações que descrevem sistemas dissipativos, não são estacionárias. Caso se quisesse propor uma solução para a equação de Schrödinger-Langevin com memória que fosse estacionária (o mesmo raciocínio vale para o sistema sem memória), não se obteriam resultados matematicamente coerentes e que possuíssem alguma interpretação física; como exemplo, cita-se a equação (III.16). Considerando que o potencial foi do oscilador

harmônico, essa equação fornece duas equações conhecidas (uma é semelhante a do oscilador dissipativo e a outra é a de Schrödinger). Se a função de onda utilizada fosse estacionária, a equação citada resultaria em uma complexa! A autofunção  $\Phi_n$  do oscilador quântico faz com que  $\Psi(x, t)$  não seja estacionária, pois  $\Phi_n$  é função de  $(x - \xi)$ . Em outras palavras, não há como obter um fator de fase global.

Para entender porque os valores esperados da posição e do momento são diferentes de zero, considere a *equação de Schrödinger-Langevin com memória* (também válido para o sistema *sem memória*). A solução  $\Psi = \Phi_n e^z$  é tal que,  $\Phi_n$  é autofunção da equação de Schrödinger, mas dada em função das variáveis  $x$  e  $t$ . A integral de  $\langle p \rangle$ , consiste de uma integral em  $x$ , que se anula, e uma integral em  $t$  que é diferente de zero. Como  $\langle p \rangle$  é real, é fácil verificar que a integral em  $t$  também o é. Sob o ponto de vista físico, de imediato não se pode escrever  $p^2/2m = E$ , pois não há hamiltoniano associado à energia na *equação de Schrödinger-Langevin com memória*. A energia total do sistema não tem um valor constante, ao contrário do hamiltoniano associado a *equação de Schrödinger*, de modo que decresce com o tempo. Como a partícula muda constantemente o sinal de seu momento, entre as regiões em torno de sua posição de equilíbrio, e o valor esperado da energia cinética decresce continuamente nessas regiões, a média das medidas do momento em uma dada região não é, portanto, igual à média das medidas na região subsequente. Portanto, o valor esperado de  $p$  não é nulo. Um instante de reflexão deve tornar claro que a média das medidas da posição da partícula seja, também, diferente de zero.

As equações (IV.12), (IV.13) e (IV.14) são iguais aos resultados clássicos. Deve-se observar, no entanto, que não calculou-se  $x$ ,  $p$  e  $dp/dt$ , em analogia a mecânica clássica, mas os valores esperados dessas grandezas, visto que não é possível determinar quanticamente  $x$  e  $p$  simultaneamente, ou escrever  $p$  em função de  $t$ . O valor esperado não descreve instantaneamente como uma grandeza evolui, mas para um mesmo instante, a média das medidas efetuadas sobre ela, de modo que o resultado é apenas probabilístico, sem o determinismo da mecânica clássica.

Finalmente, a relação de incerteza (IV.17) é coerente com a relação de incerteza de Heisenberg para  $x$  e  $p$ , o número  $n$  caracteriza o  $n$ -ésimo nível de energia para o oscilador harmônico quântico; e as quantidades  $\langle x \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  e  $d\langle p \rangle/dt$ , satisfazem o teorema de Ehrenfest. Os resultados encontrados para essas grandezas, embora

fossem esperados, não são óbvios. Isto porque considerou-se nesta e na seção anterior, o momento  $\mathbf{p}$  quântico definido como  $i\hbar\nabla$ , de modo que leva a relação de comutação  $[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \hbar/i$ , consistente com o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Como é conhecido da literatura, este momento é obtido considerando a equação de Schrödinger, a qual descreve sistemas quânticos que possuem operadores hamiltonianos bem definidos. Para os sistemas aqui analisados, o momento obtido, tendo em vista a equação de Schrödinger-Langevin, tem a forma  $\mathbf{p} = \exp(\gamma t)(\hbar/i)\nabla$ , e, de imediato, leva à relação de comutação  $[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \exp(-\gamma t)(\hbar/i)$ , onde para  $t > 0$  contradiz o Princípio da Incerteza. Rigorosamente, esse seria o momento que deveria ser considerado para o cálculo dos valores esperados e das relações de incerteza. Entretanto, em um trabalho recente de E. D. Harris<sup>76</sup>, mostra-se claramente que a relação de comutação para o momento e a posição do oscilador não viola esse Princípio. Ele parte das equações clássicas de movimento de um oscilador harmônico clássico dissipativo,

$$\dot{q} = p/m, \quad \dot{p} = -m\Omega_0^2 q - 2\gamma p$$

com coordenada  $q(t)$ , momento  $p(t)$ , coeficiente de fricção  $\gamma$  e frequência  $\Omega_0$  acoplado a um campo escalar unidimensional  $\Phi(x, t)$ . Após um cálculo tedioso, ele obtém para a relação de comutação entre  $p$  e  $q$

$$[q(t), p(t)] = [q(0), p(0)](f_1 f_2 - f_1 f_2) - (\varepsilon^2/L) \sum_k [Q_k(0), P_k(0)](f_3 f_4 - f_3 f_4)$$

onde  $\varepsilon^2 = 4\gamma$ ,  $L$  a densidade lagrangiana e  $f_1, f_2, f_3$  e  $f_4$  são funções do tempo. A relação de comutação anterior leva ao resultado

$$[q(t), p(t)] = i\hbar$$

é importante que os valores iniciais para  $Q_k$  e  $P_k$  devam ser diferentes de zero, para que a relação de comutação entre o momento e a posição não viole o Princípio da Incerteza. Desses resultados, pode-se concluir que não há inconsistência na teoria quântica para sistemas dissipativos em usar o operador momento dado pela identidade

(IV.4), pois satisfaz a relação de comutação para o momento e posição. Como se depreende do trabalho de Harris, para os sistemas quânticos em que a partícula é o oscilador harmônico, esses sistemas não são mais colocados em uma categoria de sistemas quânticos em "aberto", de modo que, neste trabalho, as grandezas dinâmicas e momento descrevem *consistemente* os sistemas dissipativos considerados.

É feito, a seguir, a análise de alguns gráficos, referente aos valores esperados das grandezas aqui obtidas.

#### IV.4 GRÁFICOS

É conveniente atentar para a notação aqui adotada. A variável  $t$  usada no eixo horizontal de cada gráfico, é a *evolução temporal* do sistema em relação à função que se está considerando, por exemplo:  $\dot{E}(t) \times t$ ; no eixo vertical, coloca-se por extenso o nome da função, isto é, 'taxa de variação da energia'. Para a enumeração de cada gráfico, usam-se um conjunto de letras e um algarismo separados por um hífen, por exemplo: **TVE - 3**; as letras identificam a função plotada, 'Taxa de Variação da Energia' — e o algarismo '3', trata-se do terceiro gráfico desta função. Cada função pode ter um ou mais gráficos plotados.

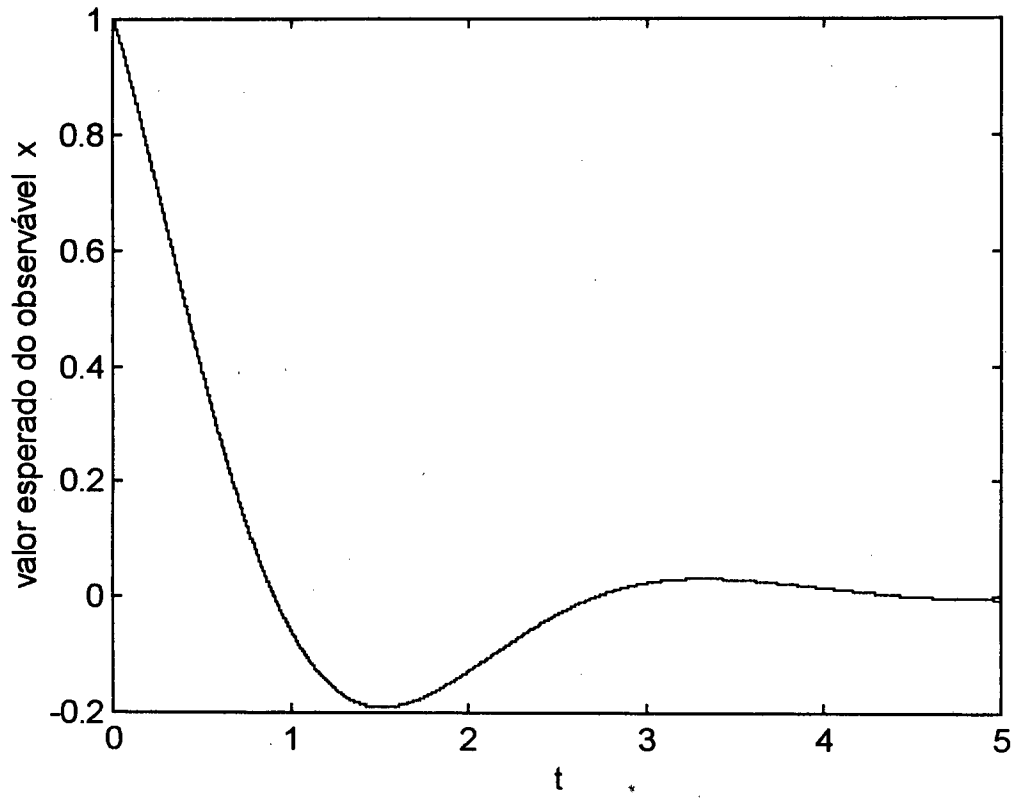
Observe que adota-se uma escala arbitrária para todos os gráficos, e ainda, embora as unidades das grandezas físicas e das funções estejam omitidas, considera-se o Sistema Internacional de Unidades (SI). Não se perde qualquer informação neste sentido, haja visto que este trabalho é essencialmente teórico, e se deseja apenas *conhecer* como algumas das equações aqui obtidas *evoluem com o tempo*. Os valores das constantes nas equações de  $\langle \mathbf{x} \rangle = \xi(t)$ ,  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  e  $\dot{E}(t)$  para os sistemas *sem e com memória* são, também, arbitrárias.

#### SISTEMAS SEM MEMÓRIA

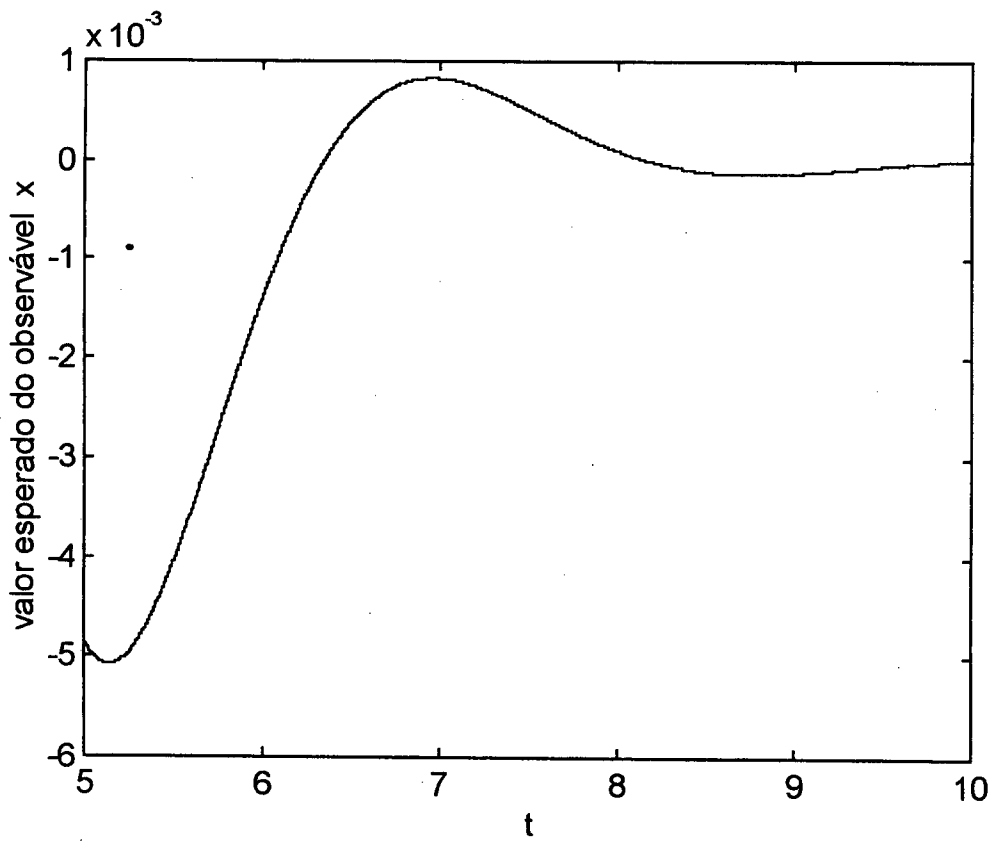
##### *Gráficos de* $\xi(t) \Rightarrow \mathbf{VEx}$

São construídos a seguir alguns gráficos da equação  $\xi(t)$ , onde  $\xi(t)$  mede a 'evolução temporal do **Valor Esperado** da grandeza dinâmica  $\mathbf{x}$ ', isto é,  $\langle \mathbf{x} \rangle = \xi(t)$ .

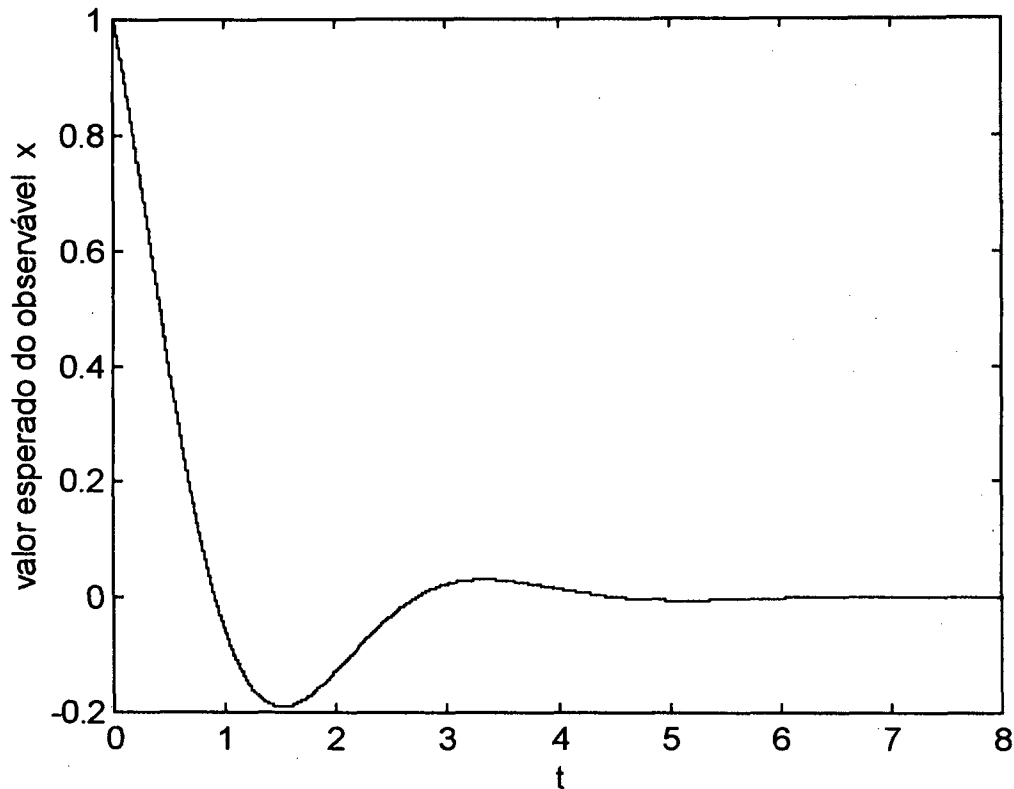
**VEx - 1:**



**VEx - 2:**



### VEx - 3:



Nota : Observe que, com o decorrer do tempo, o valor médio do observável  $x$  vai a zero, pois para tempos muito grandes o sistema não mais evolui, indo ao estado estacionário. É interessante observar o fator de escala no eixo vertical da fig.

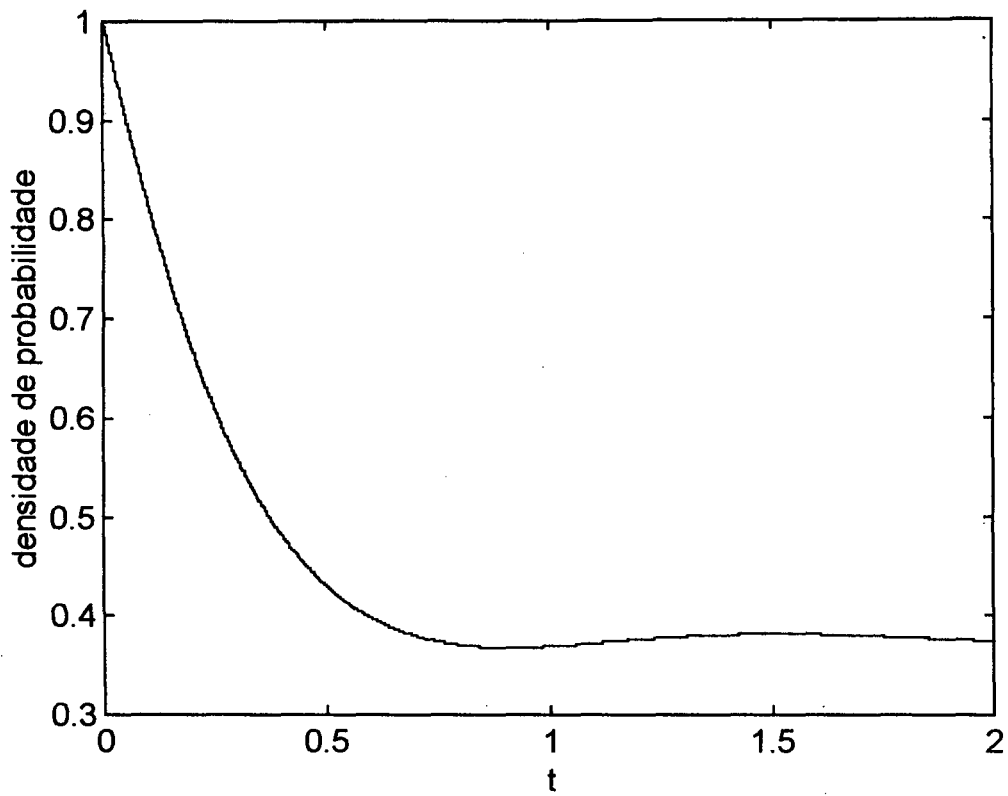
### VEx - 2.

*Gráficos de  $|\Psi(x,t)|^2 \Rightarrow$  FDP*

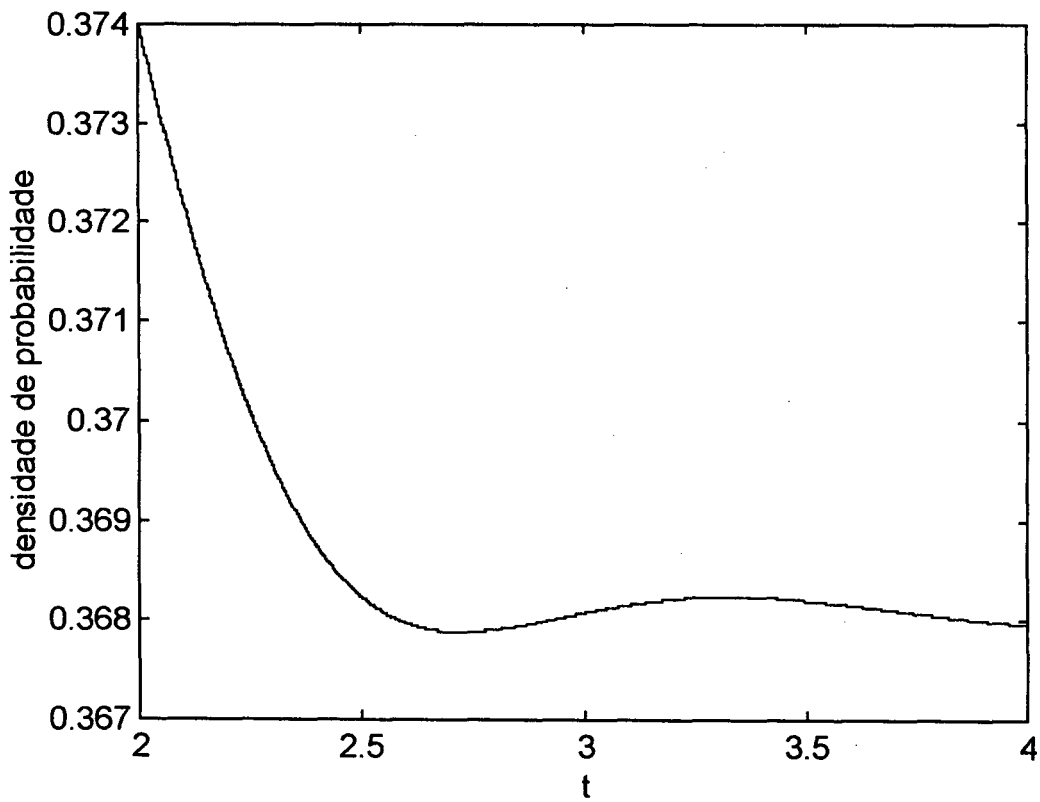
Constroem-se a seguir gráficos da equação  $|\Psi(x,t)|^2$ , onde  $|\Psi(x,t)|^2$  é a 'Função Densidade de Probabilidade.

Para a coordenada espacial  $x = 0$ :

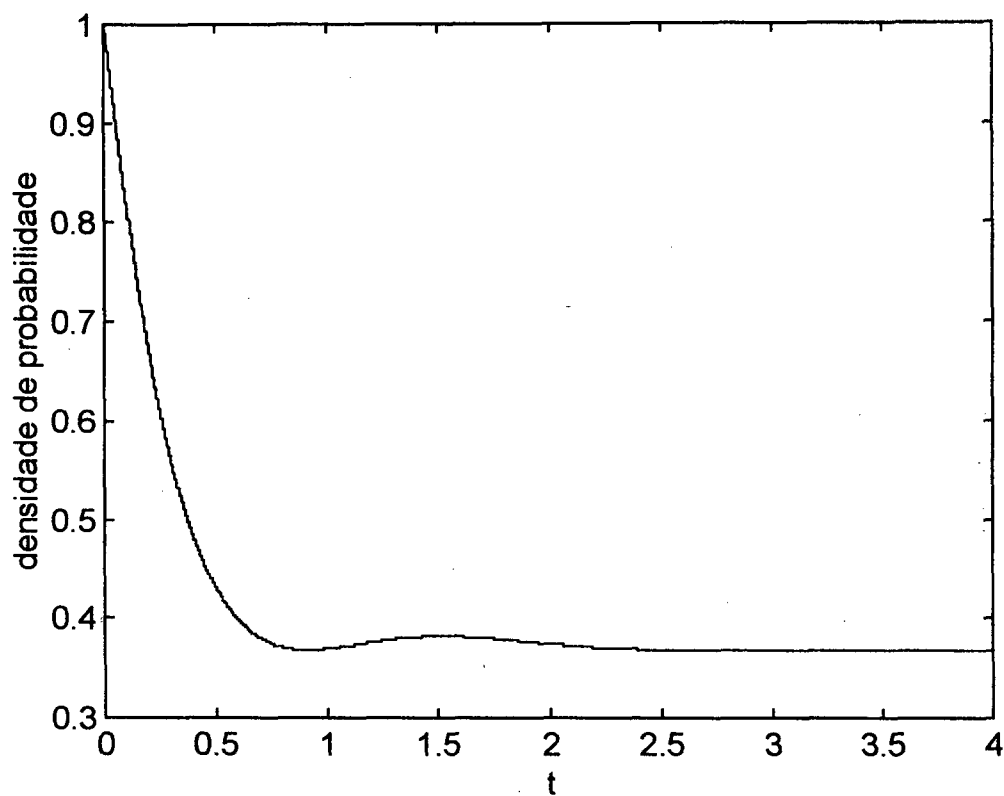
**FDP - 1:**



**FDP - 2:**



### FDP - 3:

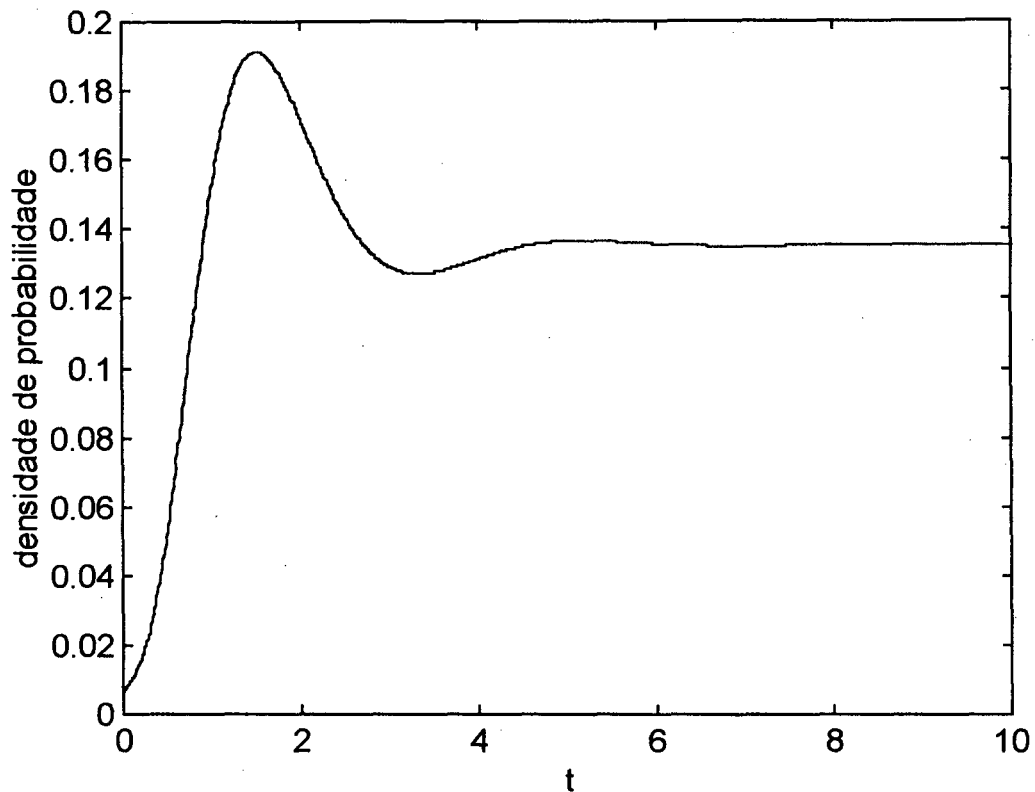


Nota : A fig. **FDP - 1** mostra que o pacote de ondas associado à partícula oscila e decai rapidamente de um valor máximo e essa oscilação tende a um valor constante, como se vê na figs. **FDP - 2** e **FDP - 3**. O pacote de ondas está evoluindo para outros pontos da coordenada  $x$ . São feitos mais alguns gráficos, agora para a coordenada  $x = 1$ .

**Para a coordenada espacial  $x = 1$ :**



## FDP - 6:

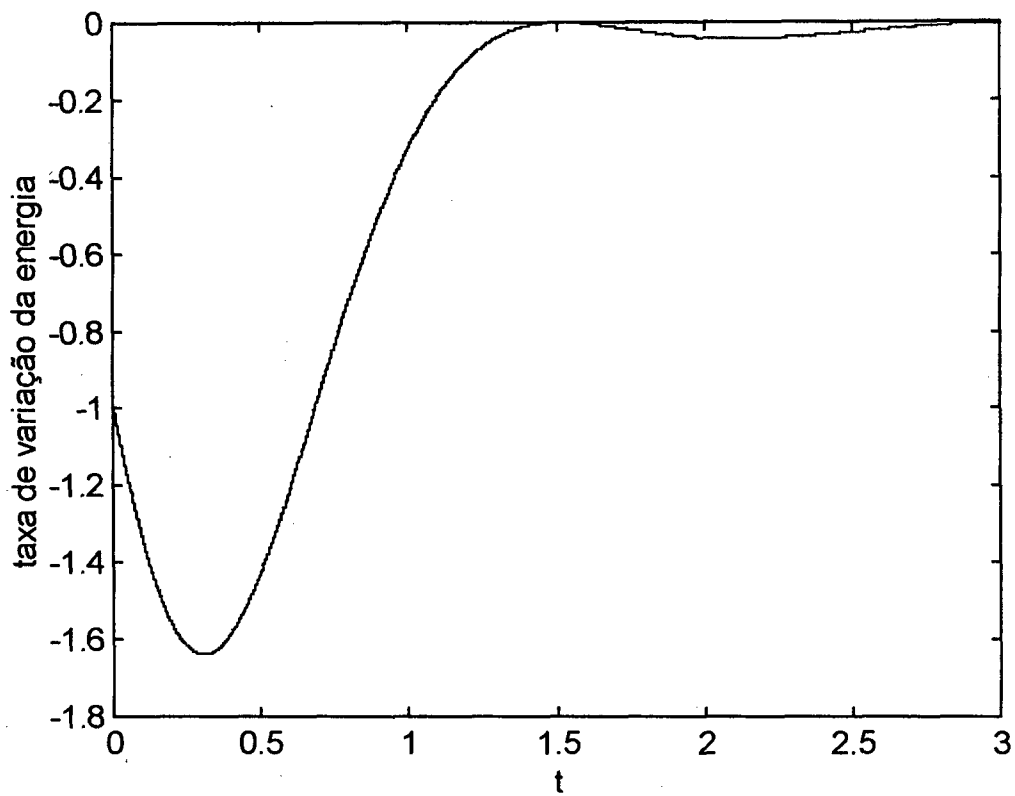


Nota : Da mesma forma que nos três gráficos iniciais, os três últimos gráficos mostram que a evolução temporal do pacote de ondas associado à partícula, oscila e decai tendendo rapidamente a outro valor constante. Isto é bem razoável, pois a 'função densidade de probabilidade' dá a probabilidade de encontrar a partícula em algum ponto do espaço, e essa probabilidade diminui para grandes valores de  $x$ . Gráficos similares poderão ser obtidos para outros valores da coordenada espacial  $x$ .

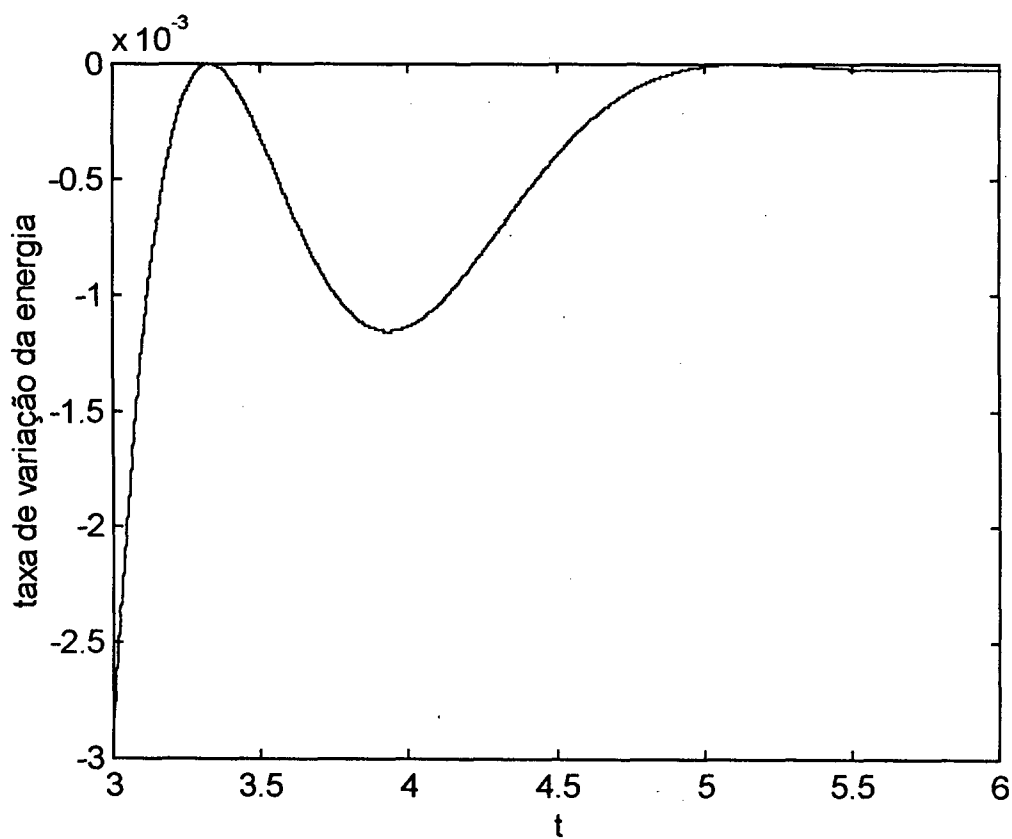
### *Gráficos de $\dot{E}(t) \Rightarrow$ TVE*

São construídos a seguir alguns gráficos da equação  $\dot{E}(t)$ , onde  $\dot{E}(t)$  é a 'Taxa de Variação da Energia'.

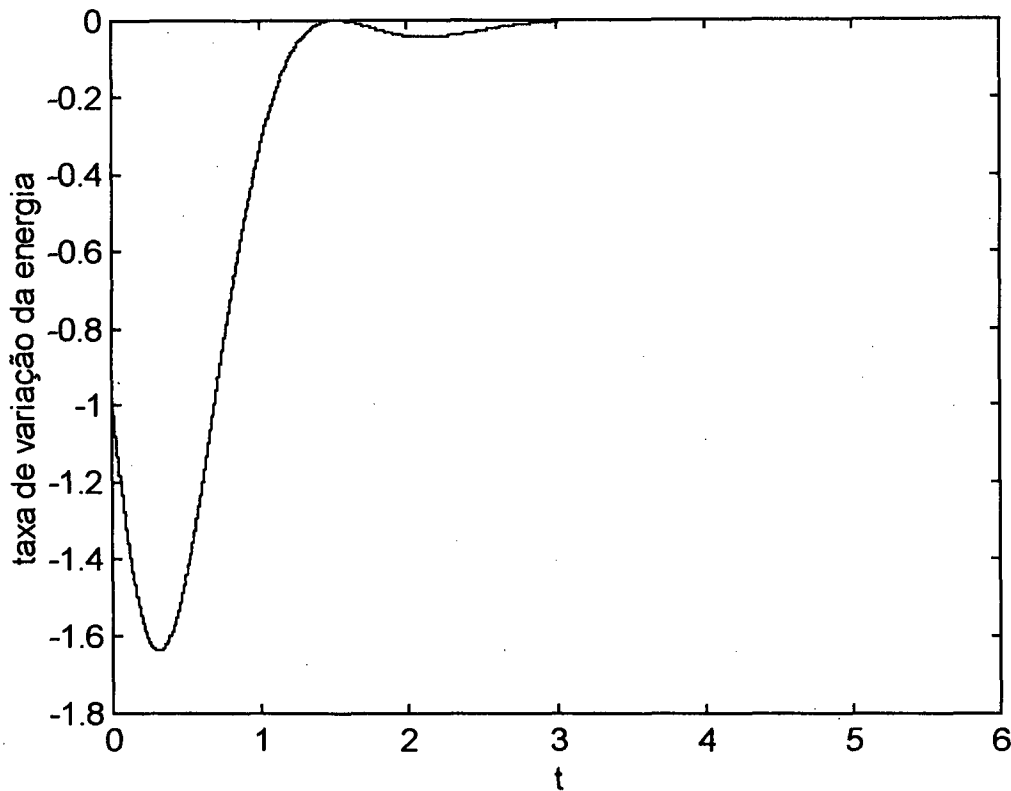
**TVE - 1:**



**TVE - 2:**



### TVE - 3:



Nota : Para os gráficos da taxa de variação da energia, observe que a energia do sistema quântico para tempos grandes, tende a um valor mínimo constante, ou seja, o sistema vai para o estado estacionário com um valor mínimo de energia, onde não sofre mais dissipação em sua energia.

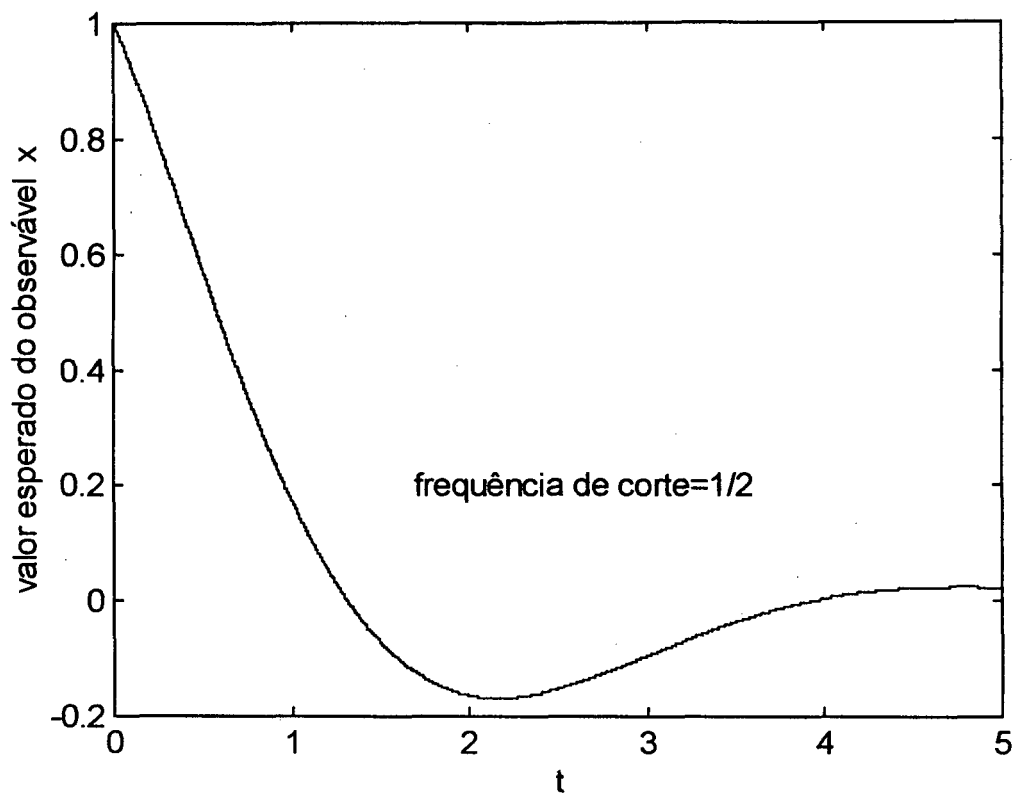
### SISTEMAS COM MEMÓRIA

(considerações para  $x = 0$ )

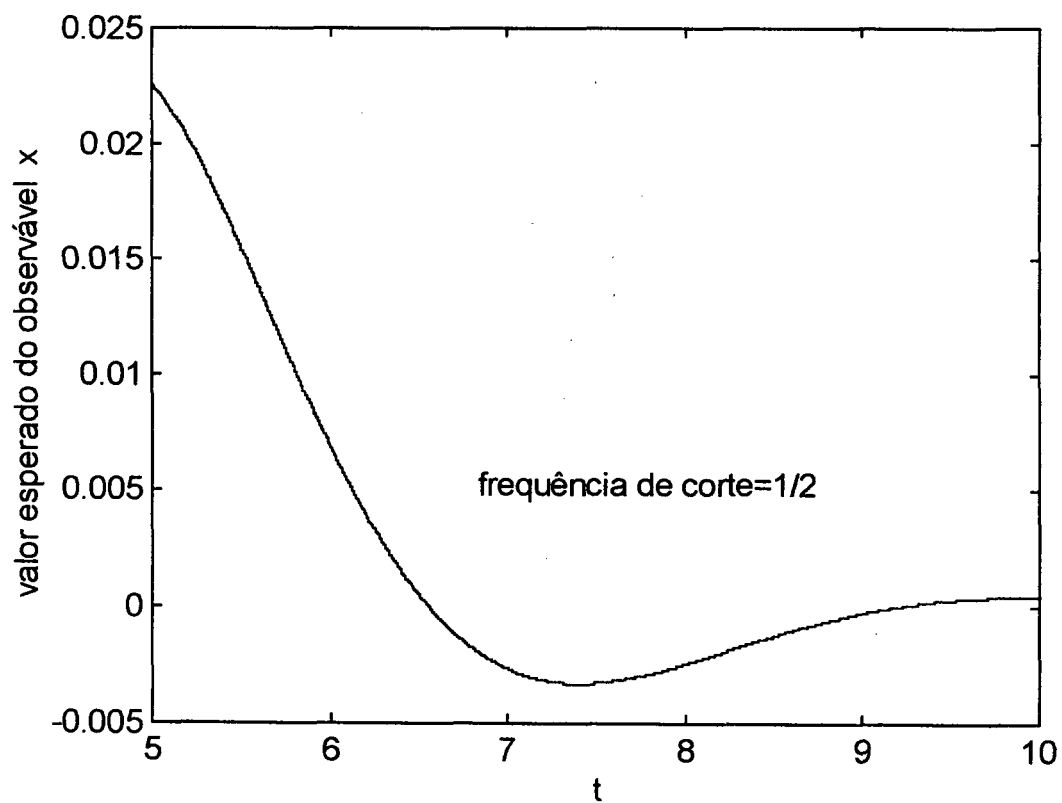
*Gráficos de  $\xi(t) \Rightarrow VEx$*

São construídos a seguir alguns gráficos da equação  $\xi(t)$ , onde  $\xi(t)$  mede a 'evolução temporal do Valor Esperado da grandeza dinâmica  $x$ ', isto é,  $\langle x \rangle = \xi(t)$ , para os sistemas dissipativos com memória. Como, neste caso, tomou-se um exemplo em particular, dado pela equação III. 28, consideram-se, aqui, as seguintes frequências de corte:  $\Omega = 1/2$ ,  $\Omega = 1$  e  $\Omega = 2$ . Os comentários são feitos após as figuras.

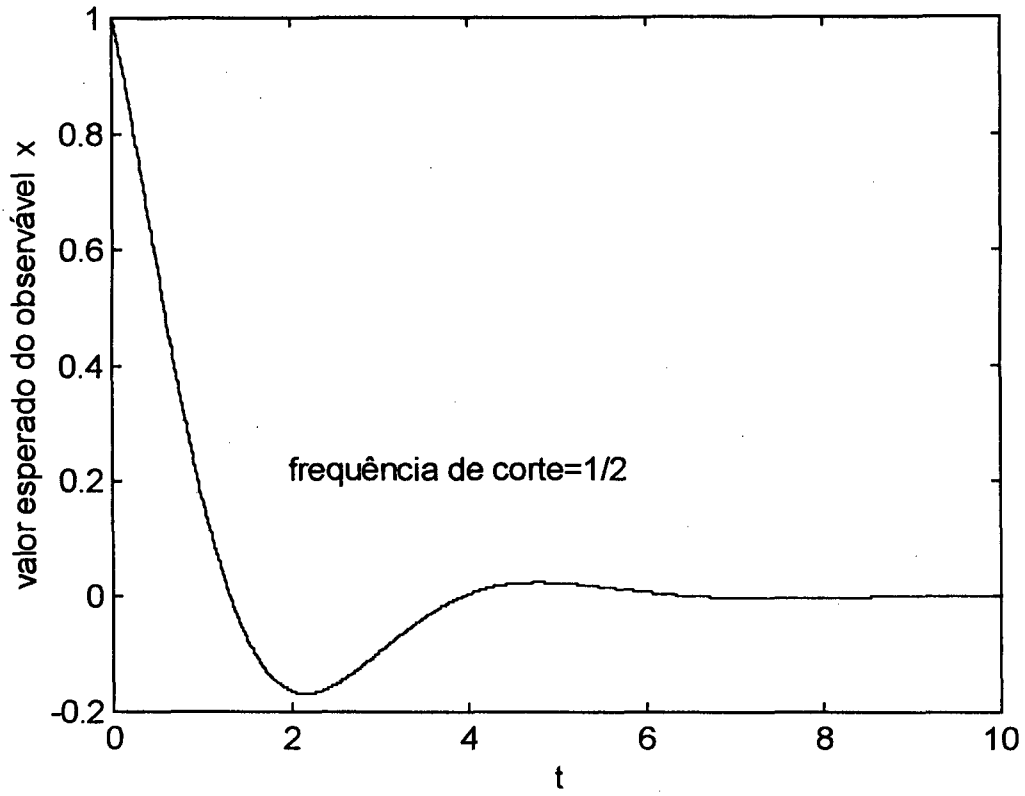
**VEx - 1:**



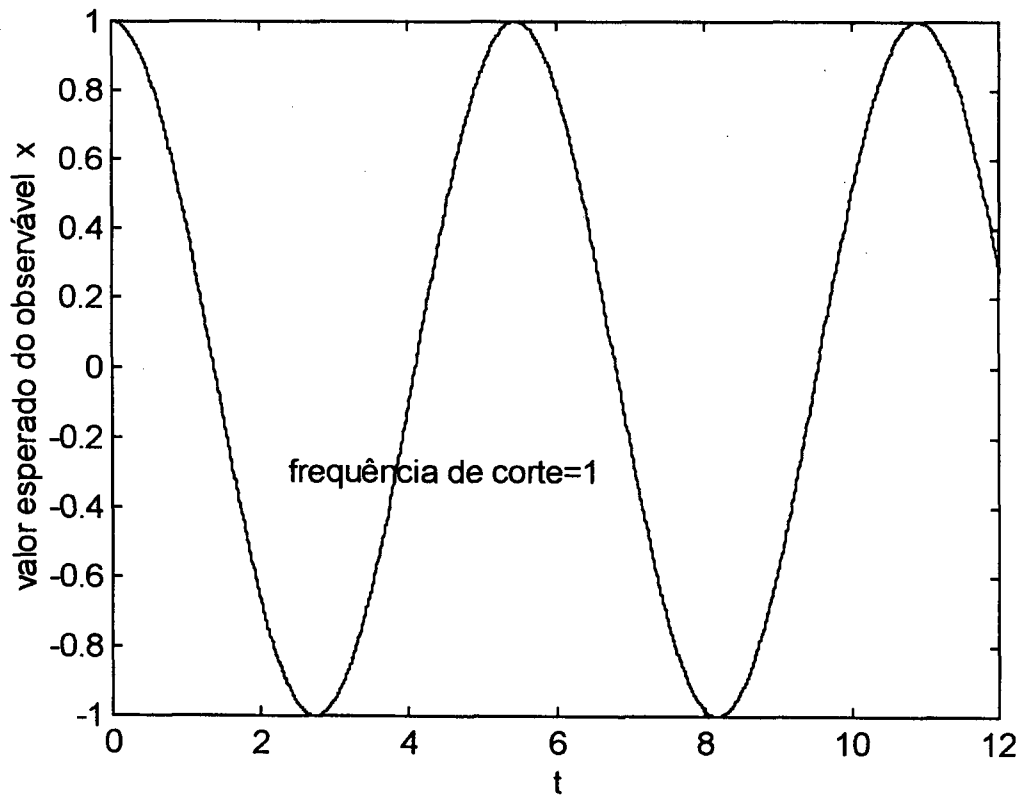
**VEx - 2:**



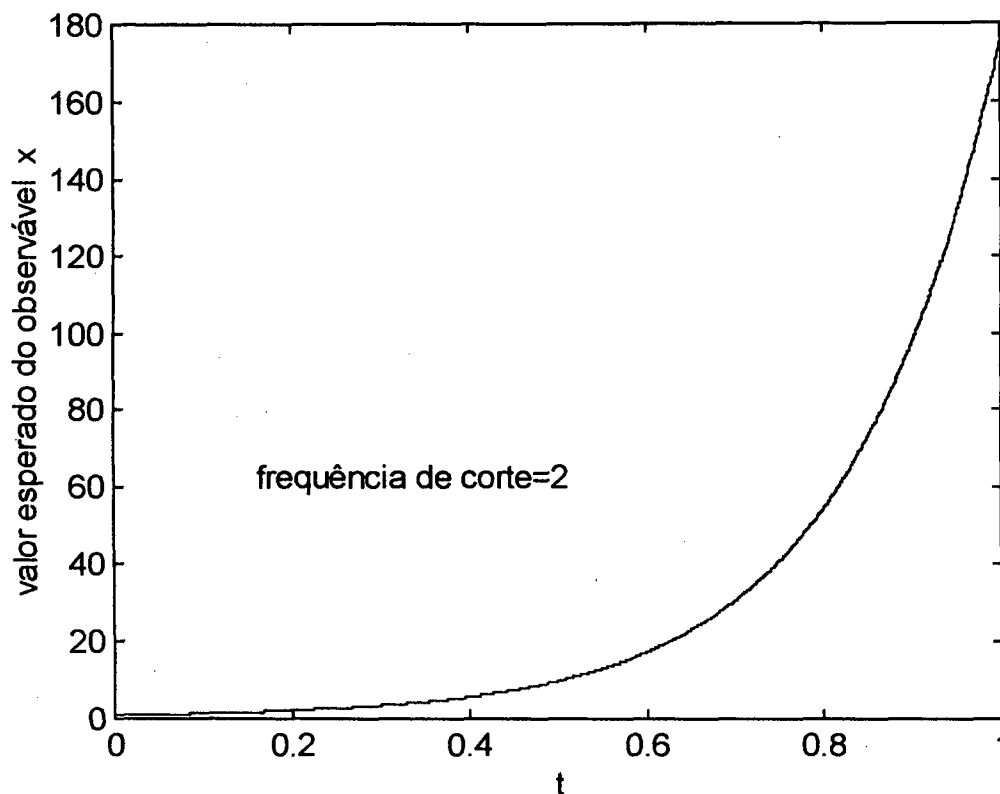
**VEx - 3:**



**VEx - 4:**



### VEx - 5:

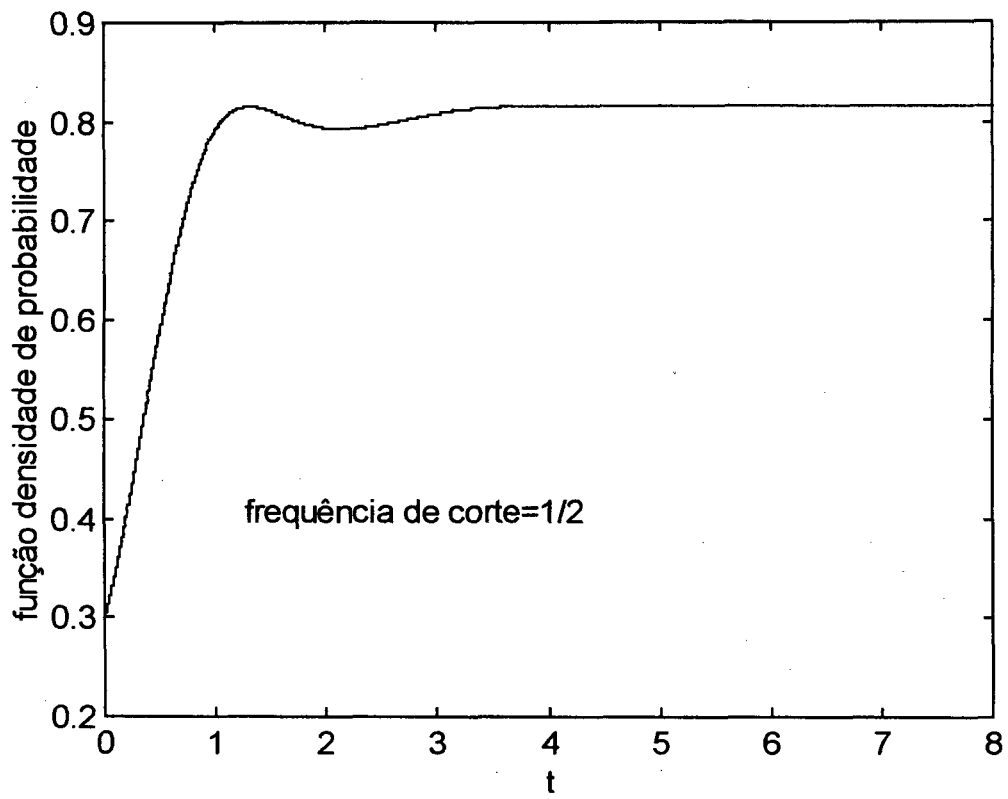


Nota : Observam-se nos gráficos das figuras **VEx - 1** a **VEx - 3**, com o decorrer do tempo, que o valor médio do observável  $x$  tende a zero, pois o sistema vai ao estado estacionário para tempos grandes. O gráfico da figura **VEx - 4** mostra que o valor esperado desse observável permanece constante. O gráfico da fig. **VEx - 5** mostra que o valor esperado diverge para tempos muito grandes; assim, não há interpretação física para a frequência de corte  $\Omega = 2$ .

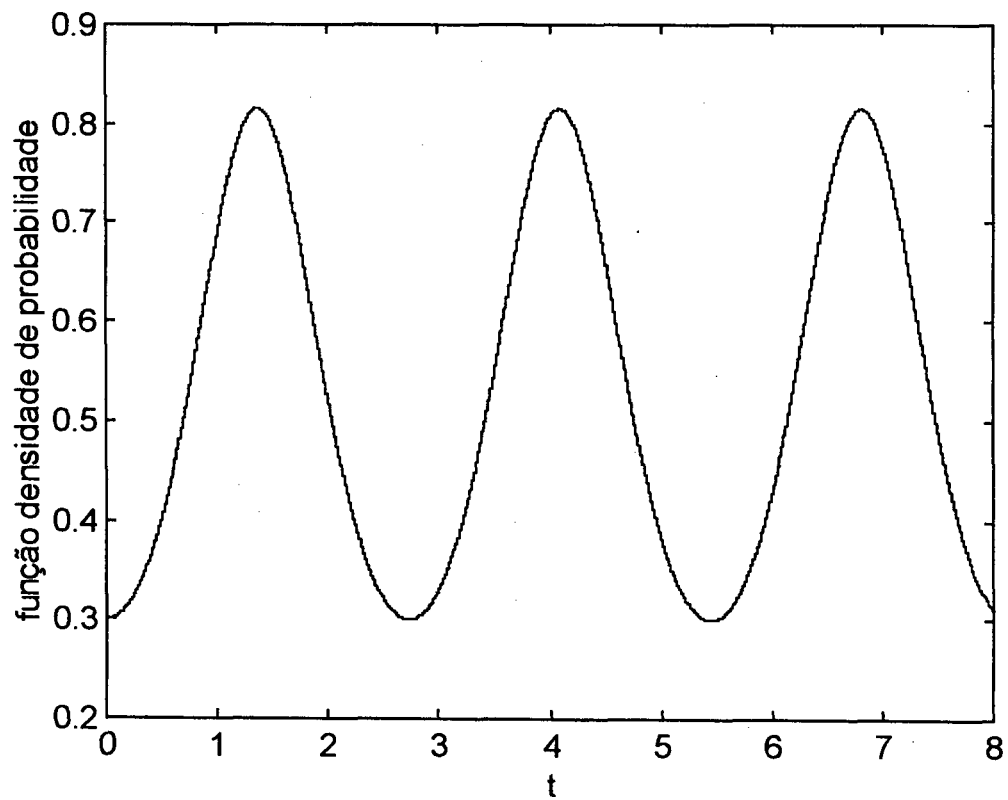
### *Gráficos de $|\Psi(x,t)|^2 \Rightarrow$ FDP*

Constroem-se a seguir gráficos da equação  $|\Psi(x,t)|^2$ , onde  $|\Psi(x,t)|^2$  é a **Função Densidade de Probabilidade**. Da mesma forma que antes, consideram-se os gráficos para as frequências de corte:  $\Omega = 1/2$ ,  $\Omega = 1$  e  $\Omega = 2$ . Os comentários são feitos após as figuras.

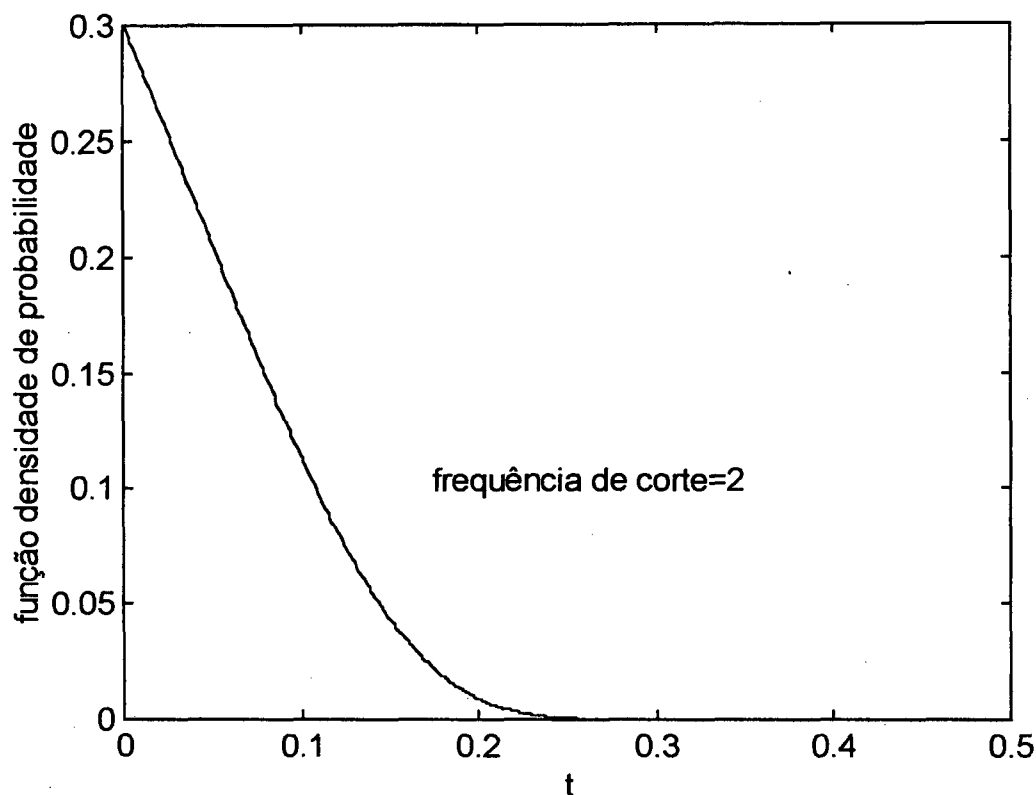
**FDP - 1:**



**FDP - 2:**



### FDP - 3:



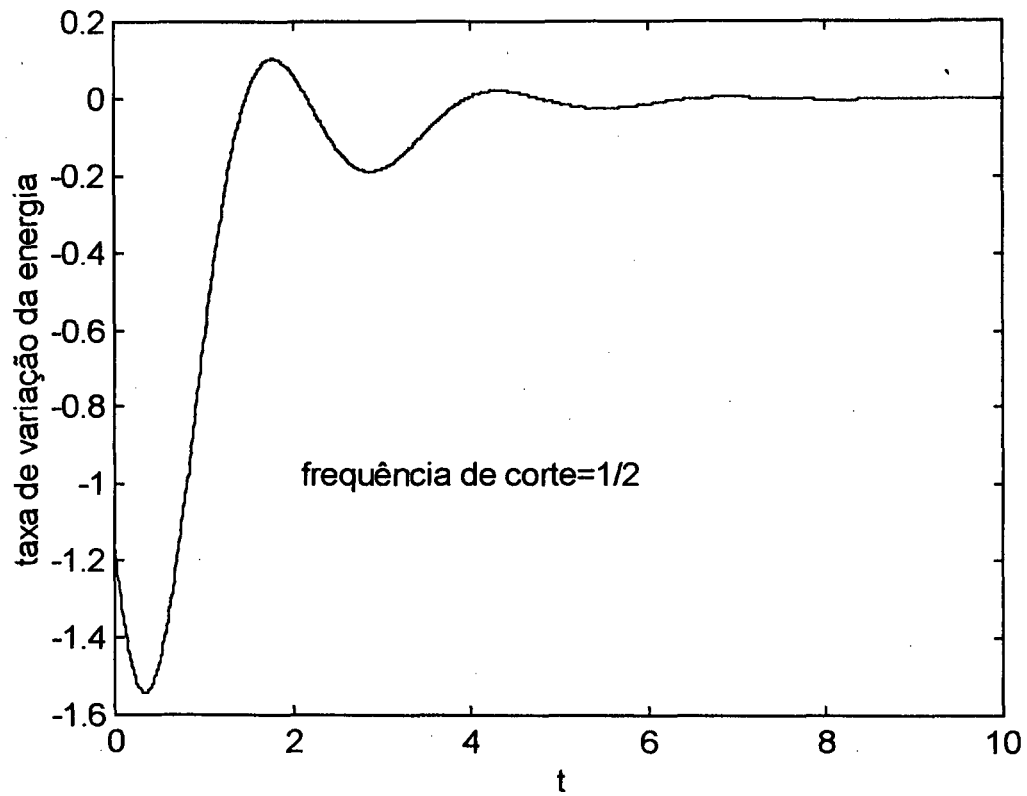
Nota : O gráfico da figura **FDP - 1**, correspondente à frequência de corte  $\Omega = 1/2$ , mostra que o pacote de ondas cresce e oscila tendendo a um valor constante. Para a fig. **FDP - 2**,  $\Omega = 1$ , mostra que a oscilação é periódica. No caso da fig. **FDP - 3**, onde a frequência de corte é  $\Omega = 2$ , a densidade de probabilidade vai a zero, de modo que não há uma interpretação física para os valores da frequência  $\Omega > 1$ .

### *Gráficos de $\dot{E}(t) \Rightarrow$ TVE*

É construído a seguir um gráfico da equação  $\dot{E}(t)$ , onde  $\dot{E}(t)$  é a 'Taxa de Variação da Energia', considerando-se a frequência de corte  $\Omega = 1/2$ .



### TVE - 1:



Nota : O gráfico dessa figura mostra a evolução temporal da taxa de dissipação da energia do sistema para  $\Omega = 1/2$ . Observe, como é razoável, a taxa oscila e decresce e tende a zero para tempos muito grandes.



## CAPÍTULO V CONCLUSÕES

Os sistemas físicos que descrevem fenômenos que correm frequentemente na natureza, muitas vezes, a energia total desses sistemas não é conservada. Os sistemas quânticos estudados nos capítulos II e III têm, assim, a sua energia dissipada devido a um tipo de atrito considerado. Portanto, os sistemas estudados neste trabalho, pela natureza destes, são sistemas quânticos mais realistas.

No capítulo II, fez-se um breve estudo do formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica<sup>2</sup>, e no capítulo III (dada as considerações), aplicou-se esse formalismo para se obter a equação de Schrödinger-Langevin com memória. Essa equação, é uma generalização da equação de Schrödinger-Langevin<sup>1</sup>, de modo que na interação do sistema quântico acoplado a um dado banho térmico, consideram-se os efeitos de memória especificado pela função memória  $\mu(t - t')$ . Foi proposta uma função de onda  $\Psi$  que satisfaz a essa equação, e também a equação de continuidade, análoga à solução para o sistema sem memória, e que permite o cálculo dos valores esperados dos observáveis. Os resultados encontrados no capítulo III, como eram de se esperar, são mais abrangentes que os resultados do capítulo anterior, pois levam em conta os efeitos de memória da interação sistema/banho.

A proposta essencial deste trabalho era obter um tipo de equação que fosse semelhante à equação de Schrödinger-Langevin, porém mais geral que esta, na qual tivesse um termo que relacionaria a dependência do sistema em estudo com um determinado banho térmico, onde este termo seria representado pela função memória. Esta função seria mais abrangente possível, onde para um caso particular, teriam-se as equações a priori conhecidas. Com efeito, a *equação de Schrödinger-Langevin com memória*, equação (III.8), expressa literalmente este pensamento. Se diz *com memória*, face a integral que contém a função memória  $\mu(t - t')$ . Note que esta equação reduz-se imediatamente à *equação de Schrödinger-Langevin*, equação (II.41), para o caso em que a função memória for a função delta de Dirac (III.4).

Em resumo, qualquer sistema quântico dissipativo que seja descrito pela equação de Schrödinger-Langevin com memória, a interação que caracteriza esse sistema não só depende do tempo presente em que as medidas são feitas, mas de tempos passados, de modo que a interação é caracterizada pela função memória  $\mu(t - t')$ . Assim, a contribuição efetiva deste trabalho, foi generalizar a *equação de Schrödinger-Langevin* para sistemas quânticos que apresentam efeitos de memória,

propor uma função de onda  $\Psi(r, t)$  que seja solução dessa equação, e considerar uma solução particular para uma dada função memória  $\mu(t - t')$ .

No Capítulo IV foi calculado os valores esperados dos operadores momento, posição, energia e a taxa com que evolui o valor esperado do momento. Fisicamente são resultados relevantes, pois satisfazem o teorema de Ehrenfest. Finalmente, a relação de comutação para o momento e a posição considerados<sup>76</sup> satisfaz o Princípio da Incerteza. Este trabalho levou em consideração sistemas em que a dissipação é proporcional à velocidade linear de deslocamento da partícula; para um trabalho futuro, considere-se, talvez, sistemas quânticos que tenham uma função mais abrangente para a velocidade, isto é,

$$\int_{-\infty}^t \mu(t - t') F[v(r, t')] dt'.$$



## REFERÊNCIAS

01. **KOSTIN, M. D.** The Journal of Chem. Physics, 57/9(3589), 1972.
02. **KHUNEN, C. A.** Aplicações da formulação hidrodinâmica a sistemas moleculares. Dissertação de Mestrado, UFSC, 1981.
03. **SCHRODINGER, E.** Ann. Phys. (Leipz.) 6(23), 1926.
04. **HEISENBERG, W.** The physical principles of the quantum theory. Chicago Press, 1930.
05. **BOHR, N.** Atomic theory and the description of nature. Cambridge University Press, 1934
06. **BORN, M. Z.** Phys. 38 (803), 1926.
07. **DE BROGLIE, L.** An introduction to the study of wave mechanics. New York, E. P. Dutton and Company Inc., 1930.
08. **PAULI, W.** Z. Phys. 31(373), 1925.
09. **BOHM, D.** Physical Review, 85(166), 1952.
10. **MADLUNG, E.** Z. Phys. 40(332), 1926.
11. **ROSEN, N.** J. Elisha Mitchel Sci. Soc., 61 (nº. 1 e 2), 1945.
12. **BOHM, D.** A Physical Review, 85(180), 1952.
13. **BOHM, D.** Physical Review, 89(458), 1953.
14. **TAKABAYASI, T.** Progress of theoretical Physics, 8(143), 1952.
15. **TAKABAYASI, T.** Progress of Theoretical Physics, 9(187), 1953.
16. **EPSTEIN, SAUL T.** Physical Review, 91(985), 1953.
17. **ROSEN, N.** American J. Physical, 32(377), 1964.
18. **BERKOWITZ, D. B. & SKIFF, P. D.** American J. Phy., 40(1625), 1972.
19. **VIGIER, J. P.** Lettere Al Nuovo Cimento, 24(258), 1979.
20. **VIGIER, J. P.** Lettere Al Nuovo Cimento, 24(265), 1979.
21. **WONG, C. Y.** Journal Math. Phys., 17(1008), 1976.
22. **KAN, KIT-KEUNG & GRIFFIN, J.** Phy. Review C, 15(1126), 1977.
23. **BIALYNICKI-BIRULA, I. & BIALYNICKA-BIRULA, Z.** Physical Review D, 3(2410), 1971
24. **BIALYNICKI-BIRULA, I.** Physical Review D, 3(2413), 1971.
25. **DE LA PEÑA-AUERBACH, L. & GARCIA-COLIN, L. S.** Journal of Math. Phys., 9(916), 1968.

26. **DE LA PEÑA-AUERBACH, L.; VELASCO, R. M. & CETTO, A. M.** Revista Mexicana de Física, 19(193), 1970.
27. **HIRSCHFELDER, J. O.; CHRISTOPH, A. C. & PALKE, W. E.** The Journal of Chem. Phys., 61(5435), 1974.
28. **HIRSCHFELDER, J. O.; GOEBEL, C. J. & BRUCH, L. W.** The Journal of Chem. Phys., 61(5456), 1974.
29. **HIRSCHFELDER, J. O. & TANG, K. T.** The Journal of Chem. Phys., 64(760), 1976.
30. **HIRSCHFELDER, J. O. & TANG, K. T.** The Journal of Chem. Phys., 65(470), 1976.
31. **NELSON, E.** Physical Review, 150(1079), 1966.
32. **CABRAL, F.** Aplicações da formulação hidrodinâmica da mecânica quântica. UFSC, 1979.
33. **MICHELIN, S. E.** Aplicações do formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica a sistemas dissipativos. UFSC, 1984.
34. **RAZAVYI, M.** Can. Journal Physical, 56(311), 1978.
35. **NEGRO, F. & TARTAGLIA, A.** Physical Review A, 23(1591), 1981.
36. **LEMONS, N. A.** Physical Review D, 24(1036), 1981.
37. **DENMAN, H. H.** American Journal Physical, 34(1147), 1966.
38. **BATEMAN, H.** Physical Review, 38(815), 1931.
39. **LEMONS, N. A.** American Journal Physical, 49(12), 1981.
40. **HAVAS, P.** Nuovo Cimento, 5(10) 1957.
41. **HAVAS, P.** Acta Phys. Austriaca, 38(145), 1973.
42. **SONA, P. G.** Energia Nucleare, 13(6)(318), 1966.
43. **STOKER, W. & ALBERCHT, K.** Annals of Physics, 117(436), 1979.
44. **RAZAVY, M.** Z. Physik B, 26(201), 1977.
45. **YASUE, K.** Annals of Physics, 114(479), 1978.
46. **CALDEIRA, A. O. & LEGGETT, A. J.** Physical Review Letters, 46(4)(211), 1981.
47. **CALDEIRA, A. O. & LEGGETT, A. J.** Physica A, 121(587), 1983.
48. **CALDEIRA, A. O. & LEGGETT, A. J.** Ann. Phys. (N.Y.) 149(374), 1983.
49. **CALDEIRA, A. O. & LEGGETT, A. J.** Phys. Rev. A, 31(1057), 1985.
50. **YASUE, K.** Journal Stat. Phys., 16(1)(113), 1977.
51. **YASUE, K.** Phys. Lett., 64B(3)(239), 1976.
52. **MESSER, J.** Lett. Math. Phys., 214(281), 1978.

53. **KAN, K. K. & GRIFFIN, J. J.** Phys. Lett., 150B/2(241), 1974.
54. **SKAGERSTAM, B. K.** Phys. Lett., 58B/1(21), 1975.
55. **SKAGERSTAM, B. K.** Journal Math. Phys., 18/2(308), 1977.
56. **MERZBACHER, E.** Quantum mechanics. New York, John Wiley & Sons Inc., 1970.
57. **SCHIFF, L. I.** Quantum mechanics. New York, McGraw-Hill Book Company, 1968.
58. **LANDAU, L.** Journal of Physics, 5(71), 1941.
59. **LONDON, F.** Reviews of Modern Physics, 17(310), 1945.
60. **NEWMAN, W. I. & THORSON, W.** Phys. Rev. Lett., 29(1350), 1972.
61. **NEWMAN, W. I. & THORSON, W.** Com. J. Phys., 50(2997), 1972.
62. **CALDIROLA, P.** Nuovo Cimento, 18(393), 1941.
63. **RAZAVY, M.** Can. J. Phys., 50(2037), 1972.
64. **TARTAGLIA, A.** Nuovo Cimento, 57B/1(130), 1980.
65. **HASS, R. W.** Journal Math. Physical, 16(2005), 1975.
66. **EDWARDS, I. K.** American Journal Physical, 47/2(153), 1979.
67. **BAHAR, L. Y. & KWANTY, H. G.** American Journal Physical, 49(11), 1981.
68. **OKAMOTO, H.** Journal Physical A: Math. Gen. 23(5535), 1990.
69. **NEMES, M. C. & PIZA, A. F. R. de Toledo.** Physical Review A, 27/2 (1199), 1983.
70. **FORD, G. W.; LEWIS, J. T. & O'CONNELL, R. F.** Physical Review A, 37/11(4419), 1988.
71. **FORD, G. W.; LEWIS, J. T. & O'CONNELL, R. F.** Physical Review Letters, 55/21(2273), 1985.
72. **FORD, G. W.; LEWIS, J. T. & O'CONNELL, R. F.** Physics Letters A, 128 (n<sup>os</sup>. 1 e 2), 1988.
73. **GRAHAM, R.** Europhysics Letters, 6/6(477), 1988.
74. **FORD, G. W.; LEWIS, J. T. & O'CONNELL, R. F.** Private communication. "Memory effects in transport".
75. **FORD, G. W.; LEWIS, J. T. & O'CONNELL, R. F.** Private communication. "Commutation relations for a quantum oscillator in a blackbody radiation heat bath".
76. **HARRIS, E. G.** Physical Review A, 42/7(3685), 1990.



## REFLEXÕES

- O mundo, visto experimentalmente à nossa escala, é um imenso tenteio, uma imensa procura, um imenso ataque; seus progressos só se podem fazer à custa de muitos fracassos e ferimentos.
- Um desapego mais apaixonado, uma resignação mais combativa, uma caridade mais criadora, uma pureza mais carregada de iniciação; uma humildade mais orgulhosa de sua sujeição ao Universo; uma doçura mais animada pelo espírito de conquista; uma virtude menos semelhante à impotência ou à mediocridade; uma salvação mais próxima do sucesso de um esforço universal do que do escapismo individual; uma propagação da Fé mais distinta claramente de um proselitismo sectário — eis o que esperamos todos para sentir o Cristianismo, à altura de nossas necessidades.
- O Homem não truncou a Natureza ao penetrar nela, (...). Ele era um fruto esperado e, de alguma forma, implícito desde as origens.
- Deixe-se levar pelos acontecimentos quando eles forem mais fortes que voce (...). Não é necessário que compreendamos absolutamente e distintamente nossa vida para que ela seja bela e bem-sucedida. Muitas vezes uma existência é fecunda exatamente por aquele lado que tenderíamos a desdenhar.
- A Matéria está toda carregada de possibilidades sublimes.
- Não há, concretamente, Matéria e Espírito, mas existe só Matéria tornando-se Espírito. Não há no Mundo, nem Espírito, nem Matéria: o estofa do Universo é o Espírito-Matéria.
- Tudo tentar, até o fim.
- Tudo o que sobe, converge.
- Se eu pudesse mostrar, apenas, por um instante que fosse, aquilo que eu vejo, acho que valeriam a pena todos os esforços de uma vida inteira.
- O Futuro é como as águas sobre as quais se aventurou o Apóstolo: carrega-nos na proporção de nossa Fé.

*Marie-Joseph Pierre Teilhard de Chardin*  
padre e filósofo francês: 1881-1955