

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

UMA ABORDAGEM CLÁSSICA PARA A MECÂNICA QUÂNTICA

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA A UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS

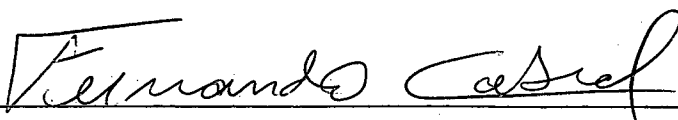
LUIZ ROBERTO EVANGELISTA

MAIO - 1983

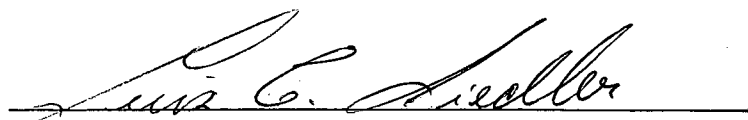
ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

"MESTRE EM CIÊNCIAS"

ESPECIALIDADE EM FÍSICO-QUÍMICA, OPÇÃO FÍSICA TEÓRICA E APROVADA
EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO.

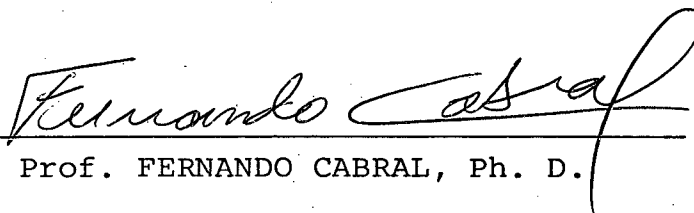


Prof. FERNANDO CABRAL, Ph. D.
Orientador



Prof. LUIS TAYLOR S. SIEDLER, Ph. D.
Coordenador


BANCA EXAMINADORA:



Prof. FERNANDO CABRAL, Ph. D.



Prof. VINCENT BUONOMANO, Ph. D.



Prof. WAGNER DE FIGUEIREDO, Dr.

ὡς οὐδὲν ἀνθρώπῳ λαβεῖζον, οὐ
χαρισασθαὶ θεῷ σεμνότερον ἀληθείας.

*Nem Deus pode dar nem o homem receber
nada mais excelente que a verdade.*

(Plutarco, De Iside I 35 IC)

*A Aparecida Antoniazi
minha esposa, com amor.*

AGRADECIMENTOS

À FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ e ao CNPq, pelo apoio financeiro;

À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA;

Ao Prof. Dr. FERNANDO CABRAL, pela valorosa orientação;

Ao Prof. Dr. SUBRAMANIA JAYARAMAN, por inúmeras sugestões;

Aos amigos CARLOS ALBERTO KUHNEN e SÉRGIO EDUARDO MICHELIN, por incontáveis e proveitosas discussões;

À BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA DA UFRS, pelo pronto atendimento às referências solicitadas;

Aos AMIGOS DA FUEM e aos COLEGAS da Pós-Graduação.

RESUMO

Apresenta-se uma abordagem clássica para a Mecânica Quântica que se desenvolve a partir de uma função lagrangeana geral estabelecida por procedimentos clássicos. Obtém-se uma função hamiltoniana, denominada de função hamiltoniana hidrodinâmica e demonstra-se a equivalência geral entre os cálculos dos valores médios das funções P_f , P_f^2 , H_f e H_f^2 desta formulação e os operadores \hat{P} , \hat{P}^2 , \hat{H} e \hat{H}^2 da formulação usual.

Na seqüência, define-se uma variável temporal hidrodinâmica que envolve duas componentes temporais previamente introduzidas: o parâmetro "t" da formulação usual e o parâmetro " t_i " chamado de componente temporal imaginária. A partir disso se estabelecem as equações de trajetória para alguns problemas unidimensionais, como a partícula livre, a partícula na caixa, o pacote gaussiano e os estados coerentes do oscilador harmônico.

Os resultados obtidos permitem estimar as relações de incerteza energia-tempo para o pacote gaussiano e para os estados coerentes do oscilador harmônico que concordam com os resultados previstos na formulação usual.

Discutem-se, posteriormente, as possibilidades de interpretação do parâmetro temporal em conexão com um operador tempo adequado a ser definido na formulação usual da Mecânica Quântica.

ABSTRACT

A classical approach to Quantum Mechanics which is developed from a general lagrangian function obtained by classical procedures is presented. An hamiltonian function called "hidrodynamical hamiltonian function" is obtained and the general equivalence between the calculation of the mean-values of the functions P_f , P_f^2 , H_f , H_f^2 of this formulation and the operators \hat{P} , \hat{P}^2 , \hat{H} , \hat{H}^2 from usual formulation is demonstrated.

Further, an hidrodynamical time variable is defined, which has two time components introduced previously: the time parameter "t" of the usual formulation and the time parameter " t_i ", called "imaginary time component". From these results the "trajectory equations" are developed for some one dimensional problems (free particle, particle in a box, gaussian wave packet and coherent states of the harmonic oscillator).

The results were used to calculate the energy - time uncertainty relations for the gaussian wave packet and for the coherent states of the harmonic oscillator, which agree with the usual predictions.

The possible interpretations of the time parameter in relation to the time operator in usual formulation of Quantum Mechanics, are also discussed.

INTRODUÇÃO

Desde que foi proposta de maneira mais ou menos definitiva, a Mecânica Quântica tem suscitado não poucos debates em torno de suas interpretações e mesmo em termos de suas previsões, que representam uma das mais drásticas rupturas até hoje sofridas pela ciência.

Na mesma época em que SCHRODINGER publicava sua versão da Mecânica Quântica (1926), pelo menos duas formulações alternativas já se apresentavam para a Teoria Quântica: a formulação hidrodinâmica de MADELUNG⁽⁰¹⁾ e a teoria da onda-piloto de DE BROGLIE⁽⁰²⁾. Na verdade, segundo DE BROGLIE, a interpretação hidrodinâmica foi por ele precisada e denominada de teoria da onda-piloto.⁽⁰³⁾

Novas tentativas surgiriam em torno dos anos cinquenta. Todas elas caracterizavam-se por procurar uma interpretação alternativa para a Mecânica Quântica, sobretudo naqueles aspectos julgados insatisfatoriamente respondidos pela interpretação usual. Dentro dessa tendência geral de questionamento à interpretação corrente, destacam-se alguns trabalhos de maior envergadura, como os de BOHM⁽⁰⁴⁾, TAKABAYASHI⁽⁰⁵⁾, VIGIER⁽⁰⁶⁾, NELSON⁽⁰⁷⁾, HIRSCHFELDER⁽⁰⁸⁾, DE LA PEÑA⁽⁰⁹⁾ entre outros.

De tal forma se avolumaram as alternativas de interpretação para a Mecânica Quântica e tantos e diversos foram seus resultados que torna-se até um pouco trabalhoso situar-se inteiramente dentro de uma delas. O que há, às vezes, é um intercâmbio entre as diversas formulações alternativas que possibilita usarem-se mutuamente como critério de confiabilidade, pelo menos em certos pontos particulares. Tal é, num exemplo bastante trivial, a completa equivalência entre as velocidades sistemática e

e estocástica, da formulação estocástica da Mecânica Quântica, desenvolvida desde o trabalho de NELSON acima referido, e as velocidades "real" e "imaginária" da formulação hidrodinâmica que aqui enfocaremos. Por outro lado, há também muitos outros pontos de divergência. Essas situações e os aspectos particulares das diferentes interpretações alternativas, encontram-se com maiores detalhes sobretudo nos trabalhos de BUNGE⁽¹⁰⁾, JAMMER⁽¹¹⁾ e BOHM⁽¹²⁾ entre outros.

Neste nosso trabalho pretendemos retomar a formulação originariamente proposta por MADELUNG e, passando por algumas contribuições posteriores - notadamente as de HIRSCHFELDER - desenvolver uma formulação hidrodinâmica mais geral, onde a Equação de Schrödinger apareça por derivação a partir de uma função Lagrangeana obtida por procedimentos clássicos. Este fato é digno de nota, pois o que se pretende é, de fato, manter uma analogia forte com a Mecânica Clássica, no interior da Mecânica Quântica.

Como é bem sabido, essa tentativa de uma abordagem clássica para a Mecânica Quântica não é nova. Para voltarmos a ela com alguma esperança de êxito, devemos estabelecer algum critério de demarcação - não no sentido filosófico pleno do termo, mas num sentido metodológico restrito - que nos permita avaliar qual a probabilidade de que nosso desenvolvimento apresente - se como contribuição de algum valor.

Para tanto, deveremos estar sempre atentos aos casos limites das equações e, sobretudo, atentos à possibilidade de equivalência entre os nossos desenvolvimentos e os resultados já estabelecidos. Seria inútil o esforço de desenvolver qualquer trabalho que, ao invés de representar uma contribuição no sentido de crescimento para a teoria, fosse ao contrário, um retorno a posições ultrapassadas.

Pensando nisso, toda a primeira parte do trabalho consiste em estabelecer as equações que têm estrutura essencialmente clássicas, como é o caso das duas equações de conservação obtidas por separação da Equação de Schrödinger, já na primeira seção do CAPÍTULO I, e todo o desenvolvimento posterior calcado na analogia com as equações de movimento de Hamilton. A ênfase, de

fato, deve ser sobre a generalização do Princípio de Hamilton, de onde toda a formulação procede. Faz-se portanto, um movimento num duplo sentido. Tanto se busca uma forma quântica para as equações clássicas quanto uma forma clássica para as equações quânticas. Note-se, no entanto, que não há uma tentativa de reduzir as equações quânticas em equações clássicas. O conteúdo delas é radicalmente diverso. As formas são semelhantes.

Numa segunda parte, o trabalho concentra-se em demonstrar, no seio da física quântica, uma equivalência de tratamento. No cálculo dos valores médios das funções da formulação hidrodinâmica, que agora se associam às variáveis dinâmicas como na formulação usual se faz com os operadores hermitianos, pode-se obter um método de resolução mais rápido e de estrutura em geral mais simples. Assim, essa segunda parte é dedicada à demonstração genérica da equivalência dos valores médios calculados a partir das funções hidrodinâmicas e dos operadores da formulação usual.

Se nesses aspectos gerais o trabalho se mostra em analogia com a formulação usual e a Mecânica Clássica - ressalvada a tentativa de uma generalização da relatividade em caráter de investigação preliminar, sem grandes pretensões - no momento da introdução do parâmetro temporal denominado de "imaginário" (porque efetivamente a variável temporal hidrodinâmica é complexa e esse parâmetro corresponde à parte imaginária dessa variável), há uma divergência digna de ser mencionada. Esse tempo "imaginário" é, em princípio, algo estranho em termos de Mecânica Quântica. Todavia, é ainda mais estranho em termos clássicos, onde não há analogia possível. Sobre os parâmetros temporais inicialmente se estudam as trajetórias quânticas, pois sua introdução na teoria tem, primariamente, esse objetivo.

Contudo, num segundo momento, os parâmetros temporais são analisados em conexão com as relações de incerteza energia-tempo, na tentativa de desenvolver um método para o estabelecimento direto das dispersões associadas às variáveis temporais.

Antes dessa análise propriamente dita, o problema do operador tempo na formulação usual é ligeiramente sugerido, de modo a preparar um desfecho em termos de possibilidades de que

as tais variáveis temporais da formulação hidrodinâmica possam sugerir uma forma para o operador tempo na formulação usual.

Finalizando esta introdução, devemos esclarecer um ponto de vital importância. O título de nosso trabalho pode sugerir uma abrangência e profundidade muito maior do que a abrangência e profundidade efetivas. Esse título se deve muito mais à linha de alternatividade desenvolvida na esteira dos trabalhos de MADELUNG e HIRSCHFELDER, sobretudo, do que a uma possível pretensão de absoluta originalidade.

SUMÁRIO

| | | |
|--|----|----|
| CAPÍTULO I - FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA | | |
| 1.1. Formulação hidrodinâmica original | 01 | |
| 1.1.1. Exemplos ilustrativos | 06 | |
| 1.2. Formulação hidrodinâmica recente | 11 | |
| 1.3. As equações da formulação hidrodinâmica e a equação de Schrödinger | 17 | |
| 1.4. Esboço de uma formulação hidrodinâmica relativística | 22 | |
| CAPÍTULO II - CÁLCULO DOS VALORES DAS FUNÇÕES \bar{P}_ϕ , P^2_ϕ , H_ϕ , H^2_ϕ , NA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA | | 27 |
| CAPÍTULO III - AS RELAÇÕES DE INCERTEZA ENERGIA-TEMPO | | |
| 3.1. O tempo como um observável na Mecânica Quântica | 36 | |
| 3.2. O operador tempo e a partícula livre | 37 | |
| 3.3. O tempo de estacionariedade | 40 | |
| 3.4. O papel das componentes "real" e "imaginária" do tempo na formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica | 42 | |
| 3.4.1. Introdução | 43 | |
| 3.4.2. Exemplos | 43 | |
| 3.5. As relações de incerteza energia-tempo | 50 | |
| 3.6. O operador tempo e a formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica | 59 | |
| CAPÍTULO IV - CONCLUSÕES | | 64 |
| BIBLIOGRAFIA | | 68 |

ADVERTÊNCIA

Por razões de ordem técnica, em todo o trabalho a constante h deve ser tomada como

$$h = \frac{\text{(constante de Planck)}}{2\pi}$$

que, numericamente, vale:

$$h = 1.054 \times 10^{-27} \text{ ergs} \cdot \text{s}$$

CAPÍTULO I

FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

1.1. Formulação hidrodinâmica original.

A Formulação Hidrodinâmica da Mecânica Quântica foi inicialmente proposta por MADELUNG⁽⁰¹⁾ que pretendia encontrar uma interpretação da Mecânica Quântica em termos da Física Clássica, como Schrödinger, por sua vez, tencionava interpretá-la em conexão com os fenômenos ondulatórios.⁽¹³⁾

Na esteira desse trabalho, apareceram outras publicações que aprofundavam o tema e davam-lhe uma versão mais elaborada.⁽⁴⁻⁹⁾ Dentre elas, destacaremos os trabalhos mais recentes de HIRSCHFELDER⁽⁰⁸⁾ a partir do qual faremos nossos posteriores desenvolvimentos.

Começemos por introduzir uma função de onda, genericamente escrita como:

$$\psi = \rho^{1/2} \exp \left[i \frac{S}{\hbar} \right] \quad (1.1)$$

onde ρ é a densidade de probabilidade e S a ação, ambas funções da posição e do tempo, a saber,

$$\rho = \rho(\vec{r}, t)$$

$$S = S(\vec{r}, t)$$

Ora, a forma clássica, $\vec{P} = m \vec{V}$, sugere-nos uma forte analogia na Mecânica Quântica e, assim, conforme HIRSCHFELDER⁽⁰⁸⁾, pomos,

$$\vec{P} \psi = m \vec{V} \psi \quad (1.2)$$

onde \vec{V} é agora a velocidade quântica, que é imaginária e constituída de duas componentes reais, ou seja,

$$\vec{V} = \vec{v} + i \vec{v}_i$$

Isso posto, podemos reescrever a equação (2) na forma explícita

$$\hat{P} \Psi = m (\vec{v} + i \vec{v}_i) \Psi \quad (1.3)$$

mantendo a correspondência para o operador \hat{P} , isto é,

$$\hat{P} \rightarrow -ih \vec{\nabla}$$

Usando a equação (1.3) e sua conjugada complexa e explicitando o operador \hat{P} , obtemos uma expressão mais geral e detalhada para as componentes da velocidade quântica, a saber,

$$\vec{v} = \frac{i^0 h}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^*/\Psi$$

$$\vec{v}_i = - \frac{h}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^*\Psi \quad (1.4)$$

que, com o auxílio da equação (1.1) ainda se escreve:

$$\vec{v} = \frac{\vec{\nabla} S}{m}$$

$$\vec{v}_i = \frac{h}{2m} \frac{\vec{\nabla} \rho}{\rho} \quad (1.5)$$

Estas velocidades permitem-nos encontrar e investigar as "trajetórias quânticas" da partícula sob consideração, a partir de integração sobre o conjunto (1.4). Para tanto, lembramos que classicamente tínhamos:

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} \quad (1.6)$$

e agora por analogia, definiremos:

$$\vec{v} = \left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \right|_{t_i = \text{cte}} \quad (1.7)$$

$$\vec{v}_i = \left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial t_i} \right|_{t = \text{cte}}$$

onde "t" é a componente usual do tempo e "t_i" a "componente imaginária" agora introduzida. As derivações são efetuadas tomando-se separadamente ora a "componente imaginária" para \vec{v} , ora a componente real para \vec{v}_i . Os parâmetros temporais "t" e "t_i" têm por finalidade precípua a de auxiliar a obtenção das equações de trajetória, isto é, equações da forma:

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}(t, t_i) \\ \vec{v} &= \vec{v}(t, t_i) \\ \vec{v}_i &= \vec{v}_i(t, t_i) \end{aligned} \quad (1.8)$$

Esta nova possibilidade introduzida por "t_i" tem uma consequência bastante relevante, que é a de permitir a abordagem das "trajetórias quânticas", o que não é factível na formulação usual da Mecânica Quântica, sendo essa "impossibilidade" uma nota distintiva entre ela e a Física Clássica.⁽¹⁴⁾

Mais adiante, tentaremos uma interpretação mais apurada do parâmetro "t_i" a partir da resolução de alguns problemas simples e do cálculo dos valores médios hidrodinâmicos, ($\bar{\quad}$), desse parâmetro bem como da inspeção sobre a relação de incerteza Energia-Tempo, envolvendo a componente "t_i".

Salientamos ainda, acerca da equação (1.5), que tais velocidades têm completa analogia com as velocidades sistemática (\vec{v}) e estocástica (\vec{u}) surgidas na formulação estocástica da Mecânica Quântica, que vem sendo desenvolvida em inúmeras publicações, notadamente nos trabalhos de LA PEÑA^(08,15) e BUONOMANO⁽¹⁶⁾ entre outros.

Podemos, pois, mediante as equações propostas, separar a Equação de Schrödinger em uma parte real e outra imaginária. Com a equação (1.3) escrevemos:

$$\hat{\vec{P}} \cdot (\vec{P}\Psi) = \vec{P} \cdot [(m\vec{v} + im\vec{v}_i) \Psi] \quad (1.9)$$

que, multiplicada por Ψ^{-1} e usando a correspondência $\hat{\vec{P}} \rightarrow -ih \vec{\nabla}$, fornece:

$$\Psi^{-1} \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} \Psi = \frac{1}{2m} \Psi^{-1} [-ihm \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} + mh \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i + m^2 v^2 - m^2 v_i^2 + 2_i m^2 \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i] \Psi$$

ou:

$$\Psi^{-1} \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} \Psi = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i + i (m\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_i - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) \quad (1.10)$$

Ora, a Equação de Schrödinger é:

$$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} \Psi + V\Psi = ih \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.11)$$

onde, com o recurso à forma (1.1) da função de onda, temos:

$$ih \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{ih}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t} \right) \Psi$$

de modo que (1.11) se escreve:

$$\Psi^{-1} \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} \Psi + \Psi^{-1} V\Psi = \frac{ih}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.12)$$

e já podemos introduzir, no lado esquerdo da equação (1.12), os resultados de (1.10) e obter, portanto,

$$\frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i + V + i (m\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_i - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) = \frac{ih}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.13)$$

Tomando separadamente a parte real e imaginária da equação (1.13), obtemos:

$$\frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i + V = - \frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.14)$$

e

$$m\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\hbar}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.15)$$

A equação (1.15) pode ser mais facilmente identificada se nela substituirmos " \vec{v}_i " por sua expressão em (1.5). Assim,

$$\frac{\hbar}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\hbar}{2\rho} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho) - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$$

ou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho) - \rho (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (1.16)$$

e finalmente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1.17)$$

se em (1.16) usarmos a identidade vetorial

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \rho + \vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \rho)$$

A equação (1.17) é conhecida como a Equação de Continuidade para um fluido clássico.

Além disso, uma generalização da Equação clássica de Hamilton-Jacobi se obtém a partir de (1.14), para casos estacionários, ao fazermos $\vec{v}_i = 0$ ou $\vec{P} = m\vec{v}$, o que corresponde ao limite clássico. Assim,

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 = E - V \quad (1.18)$$

onde $E = - \frac{\partial S}{\partial t}$.

Por outro lado, naqueles problemas onde a função de onda é real, $\vec{v} = 0$ e temos, então, apenas contribuições da velocidade imaginária " \vec{v}_i " de modo que podemos reescrever a equação (1.14) como:

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i = (E - V) + \frac{1}{2} m v_i^2 \quad (1.19)$$

que é uma equação de conservação de energia (Equação Multidimensional de Ricatti) e pode ser resolvida, em muitos problemas de utilidade, mais diretamente que a Equação de Schrödinger⁽¹⁷⁾. Assim, o procedimento desenvolvido nesta seção, leva-nos a um conjunto de equações em geral mais acessíveis matematicamente e acentua a viabilidade de uma analogia clássica mais estrita e permite, além de tudo, incorporar às interpretações da Equação de Schrödinger, a descrição do movimento de um fluido clássico. Daí a denominação "Hidrodinâmico" atribuída ao formalismo.

1.1.1. Exemplos ilustrativos.

Para ilustrar a aplicabilidade da formulação hidrodinâmica nesta versão original, tomemos um exemplo simples que é o cálculo da energia para o estado fundamental do Oscilador Harmônico Unidimensional. Neste caso, a função de onda já normalizada é:

$$\Psi_0 = \left(\frac{M\omega}{h\pi}\right)^{1/4} \exp[-M\omega/2h x^2]$$

e $\Psi_0^* \Psi_0 = \left(\frac{M\omega}{h\pi}\right)^{1/2} \exp[-\frac{M\omega X^2}{h}]$. Assim, $\vec{v} = 0$ e $v_i = \omega x$. A equação

(1.19) fornece então:

$$\frac{h}{2} \omega = (E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (1.20)$$

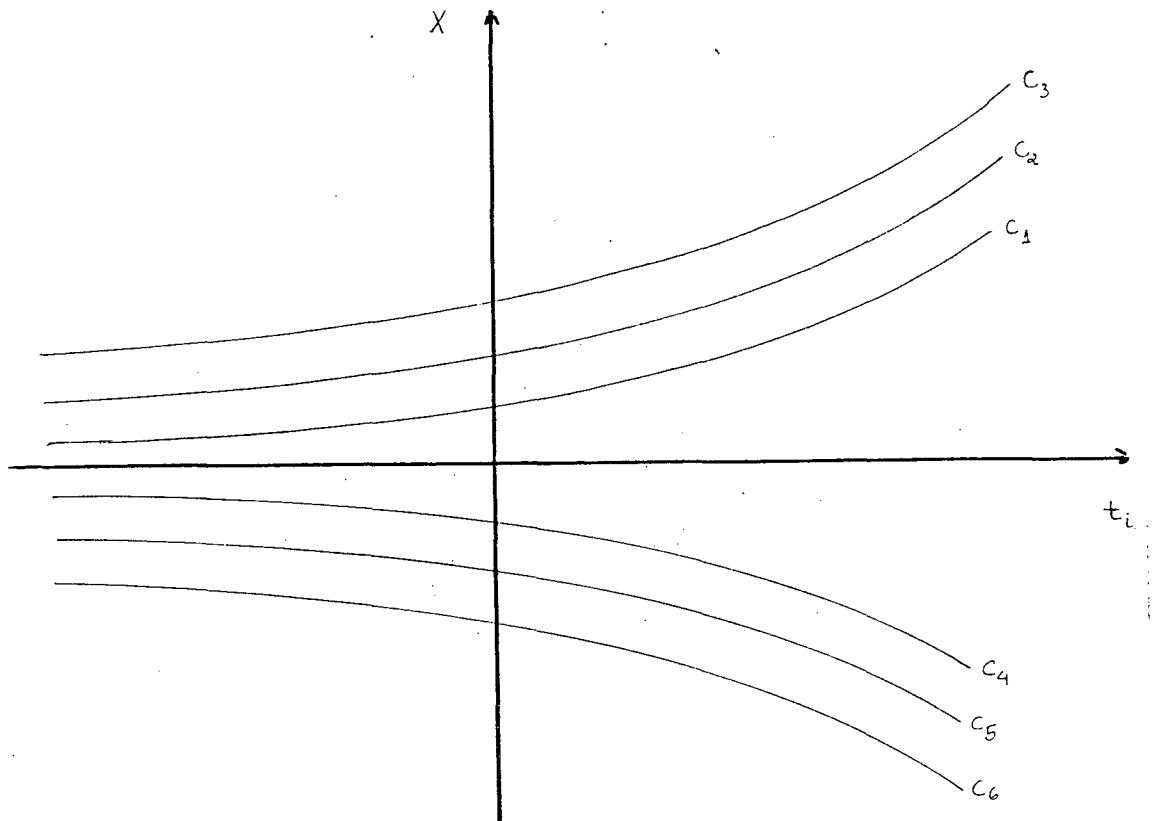
ou diretamente,

$$E = \frac{1}{2} h\omega$$

que é o valor conhecido da energia para o estado fundamental do sistema. Além disso, em virtude das formas (1.7) podemos obter a equação de trajetória, que é

$$X = A \exp(\omega t_i) \quad (1.21)$$

ou, graficamente,



As curvas c_1, c_2, c_3 são resultantes de três escolhas distintas para valores positivos de A e da mesma forma, c_4, c_5 e c_6 , para valores negativos, ou seja,

$$X = A \exp(\omega t_i) \quad \text{para } X \geq 0$$

$$X = -A \exp(\omega t_i) \quad \text{para } X < 0$$

Neste primeiro exemplo, supusemos o conhecimento antecipado da função de onda ψ_0 . Poderíamos, no entanto, resolvê-lo sem tal suposição. Neste caso, a equação (1.19) se escreveria diretamente como:

$$\frac{h}{2} \frac{dv_i}{dx} = E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2} mv_i^2 \quad (1.20')$$

cuja solução pode ser obtida diretamente por simples inspeção, fazendo:

$$v_i = \omega x$$

e assumindo que E é uma constante (caso estacionário). Assim, mediante a velocidade v_i dada, a equação (1.20') fornece:

$$E = \frac{1}{2} h\omega$$

que é o resultado anteriormente obtido.

Um outro exemplo, resolvido por KUHNEN⁽¹⁸⁾ é ainda mais significativo. Trata-se de um problema de amplo interesse para a física molecular cuja solução - que dificilmente pode ser encontrada a partir da Equação de Schrödinger - foi obtida na literatura através do cálculo variacional linear e de métodos semi-clássicos: o hamiltoniano isotrópico de Barbanis,

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) - \alpha xy^2. \quad (1.22)$$

Para estados estacionários, as funções de onda devem ser reais, de modo que devemos usar a equação (1.19) e escrevermos:

$$E - V(x,y) = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - \frac{1}{2} \mu v_i^2 \quad (1.23)$$

Ao considerarmos $\vec{v}_i = v_{ix}(x,y) \hat{x} + v_{iy}(x,y) \hat{y}$, a equação (1.23) se torna:

$$E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) + \alpha xy^2 = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial v_{ix}}{\partial x} - \frac{1}{2} \mu v_{ix}^2 + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial v_{iy}}{\partial y} - \frac{1}{2} \mu v_{iy}^2 \quad (1.24)$$

Como o problema (para o caso estacionário) é basicamente o de um oscilador harmônico, torna-se pertinente considerar que \vec{v}_i é sempre ortogonal às linhas equipotenciais e também que \vec{v}_i tem a forma de um gradiente de potencial, a saber:

$$\vec{\nabla} V = (\mu \omega^2 x - \alpha y^2) \hat{x} + (\mu \omega^2 y - 2\alpha xy) \hat{y} \quad (1.25)$$

e assim,

$$\begin{aligned} v_{ix} &= ax + b_1 y + b_2 \\ v_{iy} &= by + c_1 xy \end{aligned} \quad (1.26)$$

onde, a , b , b_1 , b_2 , c_1 são constantes. A energia do sistema é dada por:

$$\langle E \rangle_\infty = \iiint \Psi_0^* H \Psi_0 d^3x \quad (1.27)$$

com Ψ_0 sendo a função de onda aproximada que corresponde ao estado fundamental do sistema caracterizado por H . Então a equação (1.27) se reescreve:

$$\langle E \rangle_\infty = \iiint \left[\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i - \frac{1}{2} \mu v_i^2 + V \right] \rho \, d^3x \quad (1.28)$$

com $\rho = |\Psi_0|^2$. Lembrando que $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}_i = 0$, obtemos $c_1 = 2b_1$. Substituindo este resultado em (1.26) e reescrevendo (1.28) temos:

$$\langle E \rangle_\infty = \frac{\hbar}{2} (a+b) - \frac{1}{2} \mu b_2^2 - \frac{1}{2} \mu b_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (y^4 + 4x^2 y^2) dx dy \quad (1.29)$$

donde, por comparação, temos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= a^2 \\ \omega^2 &= b^2 + 2b_1 b_2 \\ \alpha &= -\mu b_1 (a + 2b) \\ b_1 h &= \mu a b_2 \end{aligned} \quad (1.30)$$

cuja solução conduz a:

$$b^4 + \omega b^3 - \frac{3}{4} \omega^2 b^2 - \omega^3 b + \frac{1}{4} (\gamma^2 - \omega^4) = 0 \quad (1.31)$$

com

$$\gamma^2 = \frac{2\alpha^2 \hbar}{\mu^3 \omega}$$

Conhecidas as constantes, a solução de (1.29) requer o conhecimento de ρ isto é, Ψ_0 . A partir da definição de $\vec{\nabla}_i$ e das expressões (1.26) escreve-se:

$$\Psi_0(x, y) = A \exp \left[-\frac{\lambda_1 x^2}{2} - \frac{\lambda_2 y^2}{2} + \frac{\lambda_3 xy^2}{2} + \frac{\lambda_4 x}{2} \right] \quad (1.32)$$

com

$$\lambda_1 = \frac{\mu \omega}{\hbar}, \quad \lambda_2 = \frac{\mu b}{\hbar}, \quad \lambda_3 = \frac{2\alpha}{\hbar(\omega + 2b)} \quad e \quad \frac{2\alpha}{\mu \omega (\omega + 2b)}$$

Além disso, como:

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2 + \lambda_3 xy^2 + \lambda_4 x} dx dy = 1 \quad (1.33)$$

que é a condição de normalização para Ψ_0 , ao expandirmos os dois últimos termos do integrando em série, desprezando os termos de ordem superior, teremos

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + \lambda_4 x + \frac{\lambda_4^2}{2} x^2 + \lambda_3 xy^2 + \lambda_4 \lambda_3 x^2 y^2 + \frac{\lambda_3^2}{2} x^2 y^4) e^{-\lambda_1 x^2 - \lambda_2 y^2} dx dy = 1 \quad (1.34)$$

que fornece o valor aproximado para A^2 , que é

$$A^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}}{\pi \left[1 + \frac{\lambda_3 \lambda_4}{4 \lambda_1 \lambda_2} + \frac{\lambda_4^2}{4 \lambda_1 \lambda_2} + \frac{3 \lambda_3^2}{16 \lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{9}{16} \frac{1}{16 \lambda_1^2 \lambda_2^2} \right]} \quad (1.35)$$

Agora, usando as equações (1.22) e (1.23) pode-se calcular aproximadamente os dois últimos termos da equação (1.29):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y^4 \rho dx dy = \frac{A^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{3}{\lambda_2^2} + \frac{3 \lambda_4^2}{16 \lambda_1 \lambda_2^2} + \frac{15}{16} \frac{\lambda_4 \lambda_3}{\lambda_1 \lambda_2^3} + \frac{105}{64} \frac{\lambda_3^2}{\lambda_1 \lambda_4^4} \right\} \quad (1.36)$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} 4x^2 y^2 dx dy = \frac{A^2 \pi}{(\lambda_1 \lambda_2)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{3}{4} \frac{\lambda_4^2}{\lambda_1^2 \lambda_2} + \frac{9}{4} \frac{\lambda_1 \lambda_4}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} + \frac{45}{16} \frac{\lambda_3^2}{\lambda_1 \lambda_2^2} \right\} \quad (1.37)$$

Estes resultados permitem estudar o comportamento das soluções em função de α , e também - ainda que para valores limitados - a estimativa dos valores da energia, também como função de α . Este método mostra-se equivalente à aplicação de teoria de perturbação e ilustra a aplicação de um formalismo alternativo à Equação de Schrödinger, já que, neste último caso, o problema foi resolvido sem o prévio conhecimento da função de onda (que foi posteriormente obtida), bastando a suposição de que a velocidade \vec{v}_i tem a forma de um gradiente de potencial. Tal suposição, porém, é um comportamento verificado em geral para o oscilador harmônico.

1.2. Formulação hidrodinâmica recente.

Dos desenvolvimentos efetuados até aqui, podemos extrair informações importantes, tais como a possibilidade de encarmos a Equação de Schrödinger como sendo aplicável a um fluido hidrodinâmico irrotacional. No entanto, o ponto de partida é a mesma Equação de Schrödinger. Ora, é possível desenvolver uma formulação alternativa na qual a Equação de Schrödinger aparece não como um elemento postulado, mas derivado de uma função lagrangeana obtida - por sua vez - a partir de considerações de simetria e isotropia do espaço, o que é um procedimento comum em física clássica. (19)

Trata-se, pois, de manter uma analogia com a Mecânica Clássica no interior da formulação hidrodinâmica e chegar, com isto, à Equação de Schrödinger. Esse desenvolvimento é, em sua estrutura essencial, devido a CABRAL. (20)

Começemos por lembrar que na Mecânica Clássica a função lagrangeana é do tipo:

$$L = L (q_j, \dot{q}_j, t) \quad (1.38)$$

ao passo que, a partir de agora, assumiremos que essa função é uma função de cinco variáveis, a saber,

$$L = L (q_j, \dot{q}_j, q'_j, t, t_i) \quad (1.39)$$

O surgimento dessas duas novas variáveis (isto é, " t_i " e a velocidade $v_i = q'_j$, onde (') indica derivação com respeito à nova componente " t_i ", não viola uma simetria sabidamente existente em (1.38), como teremos ocasião de ver adiante em sua forma geral.

Por outro lado, a função lagrangeana mais geral (1.39) é uma função complexa e pode ser escrita de maneira genérica por:

$$L = L_R + i \tilde{L} \quad (1.40)$$

onde L_R é a parte real da função e \tilde{L} sua parte imaginária.

Por considerações de analogia com a Mecânica Clássica é de se supor velocidades quadráticas no termo de energia cinéti

ca e dependências de posição no termo de potencial, tais que haja a preservação da reversibilidade espaço-temporal (de fato, a lagrangeana é invariante perante a reversão $q_j \rightarrow -q_j$ e $t \rightarrow -t$, mudando-se a função de onda de Ψ para Ψ^*).

Diante disso, sugerimos que (1.39) se escreva como:

$$L = T - U = \frac{1}{2} m (v^2 + 2i\vec{v} \cdot \vec{v}_i - v_i^2) + \frac{i\hbar}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} + i\vec{v}_i) - V_{int} \quad (1.41)$$

ou

$$L = \frac{1}{2} m \vec{V}^2 - U \quad (1.42)$$

onde \vec{V} é a velocidade quântica anteriormente introduzida ($\vec{V} = \vec{v} + i\vec{v}_i$) que reduz-se à velocidade clássica para $v_i = 0$, i.ê., $\vec{V} = \vec{v}$ e quando a função de onda é real, $v = 0$ e, então $\vec{V} = i\vec{v}_i$; U é o potencial total, composto do potencial de interação V_{int} (normalmente uma função da posição relativa) e de uma contribuição tipicamente quântica, também função exclusiva de variáveis espaciais, já presente na Equação de Ricatti (1.19).

De fato, o "potencial quântico" conforme designado por BOHM⁽²¹⁾ aparece na referida equação sob a forma:

$$Q = \frac{\hbar}{2} \vec{V} \cdot \vec{v}_i = \frac{-\hbar^2}{4m} \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \left(\frac{\nabla \rho}{\rho} \right)^2 \right] \quad (1.43)$$

e o mesmo BOHM interpreta-o como a interação da partícula com o seu próprio campo Ψ , o que explica porque uma partícula não pode atingir pontos onde a função de onda se anula, já que nesse caso, o "potencial quântico" se torna infinito. Esse "potencial quântico" pode ser usado para fornecer uma compreensão diferente e mais detalhada do fenômeno de interferência quântica, como se depreende, por exemplo, do trabalho de PHILIPPIDIS *et al.*⁽²²⁾

Aqui, entretanto, uma nova expressão é obtida para o potencial quântico e está presente na equação (1.41) sob a forma

$$U_{quântico} = \frac{i\hbar}{2} \vec{V} \cdot (\vec{v} + i\vec{v}_i) \quad (1.44)$$

Em (1.44) aparece, ao invés de simplesmente " \vec{v}_i ", toda a velocidade quântica \vec{V} , o que confere ao "potencial quântico"

uma forma mais simétrica e nos leva a interpretá-lo como uma interação da partícula com um "campo de fundo", cuja noção foi introduzida por DE LA PEÑA. ⁽¹⁵⁾

Se encararmos cada carga como um radiador elementar, esse "campo de fundo" seria produzido pelo conjunto de cargas de todo o universo e estaria presente em cada ponto do espaço, de forma que uma partícula individual estaria sempre sujeita à ação do campo produzido pelas demais partículas do universo. Por esse motivo aparecem as duas componentes da velocidade quântica, pois completam a descrição do movimento da partícula. Esta interpretação leva-nos a supor - ainda que não exclusivamente - uma interação da partícula com ela mesma, i.é., com o campo Ψ por ela produzido.

Podemos prosseguir com o desenvolvimento do formalismo e generalizarmos o Princípio de Hamilton ou de Mínima Ação que envolve a lagrangeana (1.39). Temos,

$$\delta \int L(q_j, \dot{q}_j, q'_j, t, t_i) dt dt_i = 0 \quad (1.45)$$

ou ainda,

$$\delta \int L_R dt dt_i + i \delta \int \tilde{L} dt dt_i = 0 \quad (1.46)$$

onde se nota que a minimização é feita em termos também da nova componente temporal introduzida (" t_i "). A solução ⁽²³⁾ fornece equações análogas às Equações de EULER-LAGRANGE. De fato, para a parte real de (1.45) temos:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_R}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{d}{dt_i} \left(\frac{\partial L_R}{\partial q'_j} \right) = \frac{\partial L_R}{\partial q_j} \quad (1.47)$$

e para a parte imaginária:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{d}{dt_i} \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_j} \right) = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} \quad (1.48)$$

Podemos agora identificar cada um dos termos que aparecem em (1.47) e (1.48) e observar a semelhança que há entre eles e os termos clássicos. Da lagrangeana (1.41) temos:

$$\frac{\partial L_R}{\partial \dot{q}_j} = mv = \frac{\partial L_R}{\partial v} \quad \frac{\partial L_R}{\partial q_j} = - \frac{\partial R_e U}{\partial q_j} \quad (1.49)$$

$$\frac{\partial L_R}{\partial q'_j} = -mv_i = \frac{\partial L_R}{\partial v_i}$$

e, também,

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_j} = mv_i = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial v} \quad \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} = - \frac{\partial I_m U}{\partial q_j} \quad (1.50)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_j} = mv = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial v_i}$$

As equações (1.49) e (1.50) levadas em (1.47) e (1.48) respectivamente, fornecem as equações:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} - m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla}_{q_j} \left(\frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right) \quad (1.51)$$

e

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} + m \frac{d\vec{v}}{dt_i} = - \vec{\nabla}_{q_j} \left(- \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (1.52)$$

Como se mostrará adiante, a equação (1.51) leva a uma equação de conservação de energia (Equação de Ricatti) e a equação (1.52) leva à equação de continuidade, ambas obtidas na formulação hidrodinâmica original pela separação da Equação de Schrödinger e aqui, obtidas diretamente das equações de movimento.

O próximo passo a ser dado no desenvolvimento da formulação hidrodinâmica será obter uma função hamiltoniana a partir da lagrangeana (1.41) já estabelecida. Isto é feito classicamente, mediante as transformações de Legendre que permitem passar de uma formulação que descreve a Mecânica em termos das coordenadas generalizadas e das velocidades (q_j, \dot{q}_j, t) a uma outra formulação cujas variáveis são as coordenadas generalizadas e o momento generalizado (q_j, p_j, t) .⁽²⁴⁾

Em nosso caso, devemos operar a transformação do conjunto de variáveis $(q_j, \dot{q}_j, q'_j, t, t_i)$ para o conjunto $(q_j, \dot{P}_j, P'_j, t, t_i)$ e, em decorrência disso, várias formas diferentes para a função hamiltoniana podem ser obtidas nas transformações. No entanto, definiremos a hamiltoniana

$$H_f = \sum_j \vec{v}_j \cdot \vec{P}_j - L \quad (1.53)$$

onde $\vec{P}_j = (\vec{p}_j + i \vec{p}_{ij})$ e $\vec{v}_j = \vec{v} + i \vec{v}_i = \dot{q}_j + i q'_j$, pois com ele preservamos a forma clássica da hamiltoniana $[\sum_j P_j \dot{q}_j - L]$. Além disso, razões *a posteriori* como o cálculo de $\frac{\partial H_f}{\partial q_j}$, ΔH_f e a obtenção da Equação de Schrödinger, motivaram tal escolha.

A função definida em (1.53) é uma função complexa já que a Lagrangeana também o é. Logo, pode escrever-se como:

$$H_f = H_R + i \tilde{H} \quad (1.54)$$

Tomemos agora a diferencial dH de (1.53) explicitando a Lagrangeana na forma (1.40)

$$\begin{aligned} dH = & \sum_j P_j d\dot{q}_j + \dot{q}_j dp_j - p_{ij} dq'_j - q'_j dp_{ij} \\ & + i(p_j dq'_j + q'_j dp_j + p_{ij} d\dot{q}_j + \dot{q}_j dp_{ij}) - \frac{\partial L_R}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j - \frac{\partial L_R}{\partial q'_j} dq'_j \\ & - \frac{\partial L_R}{\partial q_j} + i \left(- \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_j} dq'_j - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} dq_j \right) - \frac{\partial L_R}{\partial t} dt - \frac{\partial L_R}{\partial t_i} dt_i + \\ & + i \left(- \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt \right) \end{aligned} \quad (1.55)$$

A partir de (1.49) e (1.50) obtemos as definições de momento:

$$\frac{\partial L_R}{\partial \dot{q}_j} = p_j; \quad \frac{\partial L_R}{\partial q'_j} = -p_{ij}; \quad \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_j} = p_{ij}; \quad \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q'_j} = p_j \quad (1.56)$$

identificando $\vec{p}_j = m\vec{v}$ e $\vec{p}_{ij} = m\vec{v}_i$, que são o análogo às equações de Lagrange da Mecânica Clássica. Levando, (1.56) em (1.55) eliminamos a

guns termos e obtemos:

$$\begin{aligned}
 dH = & \sum_j [(\dot{q}_j dp_j - q_j' dp_{ij}) + i(q_j' dp_j + \dot{q}_j dp_{ij})] - \\
 & - \frac{\partial L_R}{\partial q_j} dq_j - i \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} dq_j - \frac{\partial L_R}{\partial t} dt - \frac{\partial L_R}{\partial t_i} dt_i + \\
 & + i(-\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t_i} dt_i)
 \end{aligned} \tag{1.57}$$

Diferenciando, agora, a função hamiltoniana $H = H(P_j, p_{ij}, q_j, t, t_i)$ explicitada na forma (1.54), vem

$$\begin{aligned}
 dH = & \sum_j \frac{\partial H_R}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial H_R}{\partial p_{ij}} dp_{ij} + \frac{\partial H_R}{\partial q_j} dq_j \\
 & + i(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_j} dp_j + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_{ij}} dp_{ij} + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_j} dq_j) \\
 & + \frac{\partial H_R}{\partial t} dt + \frac{\partial H_R}{\partial t_i} dt_i + i(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial t} dt + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial t_i} dt_i)
 \end{aligned} \tag{1.58}$$

Comparando as expressões (1.57) e (1.58) obtemos:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H_R}{\partial p_j}; \quad q_j' = -\frac{\partial H_R}{\partial p_{ij}}; \quad \frac{\partial L_R}{\partial q_j} = -\frac{\partial H_R}{\partial q_j} \tag{1.59}$$

para a parte real, e

$$q_j' = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_j}; \quad \dot{q}_j = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_{ij}}; \quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_j} = -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} \tag{1.60}$$

para a parte imaginária. Também,

$$-\frac{\partial}{\partial t}(L_R + i\tilde{L}) = \frac{\partial}{\partial t}(H_R + i\tilde{H}); \quad -\frac{\partial}{\partial t_i}(L_R + i\tilde{L}) = -\frac{\partial}{\partial t_i}(H_R + i\tilde{H})$$

ou seja,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t} ; \quad \frac{\partial H}{\partial t_i} = - \frac{\partial L}{\partial t_i} \quad (1.61)$$

O conjunto de equações definido por (1.59), (1.60) e (1.61) são o análogo hidrodinâmico das Equações Canônicas de Hamilton e substituem as Equações de Lagrange (1.56) na descrição dos fenômenos mecânicos.

A função hamiltoniana (1.53) deve ser reescrita novamente em termos de $(p_j, p_{ij}, q_j, t, t_i)$. Para isso, na Lagrangeana (1.41) pomos:

$$q'_j = p_{ij}/m \quad ; \quad \dot{q}_j = p_j/m$$

Assim,

$$H_f = \sum_j \frac{1}{2m} (\vec{p}_j + i\vec{p}_{ij})^2 + U \quad (1.62)$$

obtivemos finalmente, uma função hamiltoniana que é fundamental no desenvolvimento da formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica. Pode-se mostrar, ainda, que o primeiro dos termos em (1.62) mais exatamente o seu valor médio - identifica-se com o valor médio da energia cinética na formulação usual.

1.3. As equações da formulação hidrodinâmica e a equação de Schrödinger.

Na formulação hidrodinâmica em sua versão mais antiga (apresentada em linhas gerais na seção 1-1), separavam-se as partes real e imaginária da Equação de Schrödinger - mediante a introdução de uma função de onda genérica $\psi = \rho^{1/2} e^{iS/\hbar}$ - em uma equação de conservação de energia e em outra equação, que é uma equação de continuidade para um fluido clássico. Agora, é possível a obtenção dessas duas equações, sem o conhecimento prévio da Equação de Schrödinger, a partir da lagrangeana derivada em (1.41).

Tomemos inicialmente a equação (1.51), já obtida da lagrangeana em questão:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} - m \frac{d\vec{v}_i}{dt_i} = - \vec{\nabla} \left[\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right] \quad (1.63)$$

A equação (1.63) nos dá as seguintes funções:

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \vec{v}(t, t_i) \\ \vec{v}_i &= \vec{v}_i(t, t_i) \end{aligned}$$

que completam a descrição das "trajetórias quânticas" evocadas por (1.8). Por outro lado, a integração da equação (1.63) permite-nos o retorno ao formalismo usual, devolvendo-nos as funções:

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \vec{v}(\vec{r}, t) \\ \vec{v}_i &= \vec{v}_i(\vec{r}, t) \\ \Psi &= \Psi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

que descrevem o movimento da partícula na formulação usual. Assim (1.63) funciona como um ponto de transposição entre as duas formulações.

Neste ponto, introduziremos as derivadas hidrodinâmicas que são:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t_i} = \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \quad (1.64)$$

$$\left. \frac{d}{dt_i} \right|_t = \frac{\partial}{\partial t_i} + (\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla})$$

sendo a primeira delas obtida mantendo-se a componente " t_i " constante e a segunda, por sua vez, mantendo-se " t " constante. Usando (1.64), a equação (1.63) se torna:

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - m \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t_i} - (\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_i = - \vec{\nabla} \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right) \quad (1.65)$$

Recorrendo às definições de " \vec{v} " e " \vec{v}_i " dadas em (1.5) teremos

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\vec{\nabla} S}{m} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t}$$

e

$$\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t_i} = - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial t_i} \vec{\nabla} \ln \rho = - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

pois mudamos a ordem de derivação trocando o operador gradiente pelas derivadas temporais e levamos em conta o fato de que ρ não depende explicitamente de t_i . Então, (1.65) fica:

$$\vec{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t} + m(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - m(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \vec{v} = - \vec{\nabla} \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right) \quad (1.66)$$

Podemos agora rearranjar os termos que contêm " \vec{v} " e " \vec{v}_i " e então teremos

$$\vec{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v^2 - \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v_i^2 = - \vec{\nabla} \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \right) \quad (1.67)$$

que pode ser integrada para fornecer

$$- \frac{\partial}{\partial t} (S + ct) = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \quad (1.68)$$

onde c é uma constante de integração que determina o nível de referência que se toma para o potencial e para a energia. Por comodidade, fazemos $c = 0$. A equação (1.68) se transforma enfim em:

$$E = - \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \quad (1.69)$$

pois para casos estacionários, identificamos o termo $E = - \frac{\partial S}{\partial t}$ com a energia E do sistema e temos, então, em (1.69) uma equação de conservação de energia, já obtida na forma (1.14), quando da separação da Equação de Schrödinger.

Tomando a equação (1.52) e promovendo substituições análogas às anteriores, vem:

$$m(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + m(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \vec{v}_i + m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t_i} + m \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t_i} = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (1.70)$$

Em virtude das equações (1.5) teremos: $\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t} = - \frac{h}{2m} \vec{\nabla} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t}$
 e $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t_i} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t_i} = 0$, neste último caso, S não depende explicitamente de "t_i". Ora, a equação (1.70) então é:

$$m[(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_i] - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho = \frac{h}{2} \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{v}) \quad (1.71)$$

Em (1.71) substituiremos a identidade vetorial

$$\vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{v}_i) = (\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}_i$$

pois, $\vec{v}_i \times (\vec{\nabla} \times \vec{v}) = \vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{v}_i) = 0$. Então, (1.71) reescreve-se:

$$m \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{v}_i) - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{h}{2} \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{v}) \quad (1.72)$$

e mais uma vez trocamos a ordem dos operadores gradiente e derivada temporal. Integrando a equação (1.72) obtêm-se:

$$m \vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{h}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + D \quad (1.73)$$

que é a mesma equação (1.15) já obtida, a menos da constante D, que aparece na integração sempre que se considera que o potencial de interação possui uma parte real e outra complexa. E é justamente a parte complexa do potencial que determina a existência de fontes ou sumidouros de partículas. Como, neste caso, o potencial de interação é real, D = 0 e, portanto, explicitando em (1.73) a velocidade " \vec{v}_i " como aparece em (1.5), podemos escrever:

$$- \frac{h}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho / \rho - \frac{h}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{h}{2\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

ou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - [\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho + \rho (\vec{\nabla} \cdot \vec{v})] \quad (1.74)$$

Finalmente, se em (1.74) usarmos a identidade vetorial

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho) + \rho (\vec{\nabla} \cdot \vec{v})$$

teremos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) \quad (1.75)$$

ou seja, obtemos a equação de continuidade. Diante disso, pelo que foi mostrado na seção 1.1, a Equação de Schrödinger - mediante a função de onda genérica - separava-se nestas equações aqui obtidas. O caminho oposto pode ser seguido e fornecer-nos a referida Equação de Schrödinger.

Prosseguindo, partimos da função hamiltoniana hidrodinâmica

$$H_f = \frac{1}{2} m [\vec{v} + i\vec{v}_i]^2 - \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot [\vec{v} + i\vec{v}_i] + V \quad (1.62)$$

e nela explicitamos as velocidades " \vec{v} " e " \vec{v}_i " que aparecem em (1.4). Então, já que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m [\vec{v} + i\vec{v}_i]^2 &= - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right]^2 \\ - \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot [\vec{v} + i\vec{v}_i] &= - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} - \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

temos:

$$H_f = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} + V \quad (1.76)$$

Esta equação (1.76) é uma equação diferencial cujo lado direito corresponde ao operador hamiltoniano usual \hat{H} . Então, outro resultado importante fornecido pelo formalismo hidrodinâmico é:

$$\hat{H}_{op} \Psi = H_f \Psi \quad (1.77)$$

De fato, o operador hamiltoniano agindo sobre a função de onda Ψ resulta no produto da mesma função de onda Ψ e da função hamiltoniana hidrodinâmica H_f que pode fornecer os autovalores da energia, pois $\langle \hat{H}_{op} \rangle = (\overline{H_f})$, como mostraremos adiante. Notar-se-á que H_f é uma função complexa, mas seus valores médios são reais e identificam-se com a energia do sistema.

1.4. Esboço de uma formulação hidrodinâmica relativística.

Uma das conseqüências mais estimulantes da formulação hidrodinâmica é a possibilidade de introduzir o parâmetro "t_i" na descrição dos fenômenos relativísticos e investigar então a forma posterior das equações.

O primeiro passo no desenvolvimento de um tal formalismo consiste em introduzir uma matriz de transformação análoga à de Lorentz, mas que envolva as velocidades \vec{V} e \vec{V}_i e os parâmetros "t" e "t_i" e que, no limite apropriado, reduza-se os resultados conhecidos.

Esta matriz foi obtida considerando que as velocidades \vec{V} e \vec{V}_i estivessem alinhadas com o eixo X₃ e deve fornecer as transformações de coordenadas desde um referencial K a um outro referencial K'.

Os elementos de matriz são dados por

$$X'_\mu = \sum_{\nu=1}^5 a_{\mu\nu} X_\nu \quad (1.78)$$

e obedecem à condição de ortogonalidade:

$$\sum_{\nu} a_{\mu\nu} a_{\lambda\nu} = \delta_{\mu\lambda} \quad (1.79)$$

Esta condição (1.79) permite escrever o conjunto de equações abaixo:

$$a_{33}^2 + a_{34}^2 + a_{35}^2 = 1$$

$$a_{43}^2 + a_{44}^2 + a_{45}^2 = 1$$

$$a_{53}^2 + a_{54}^2 + a_{55}^2 = 1$$

$$a_{43} a_{33} + a_{44} a_{34} + a_{45} a_{35} = 0$$

$$a_{53} a_{33} + a_{54} a_{34} + a_{55} a_{35} = 0$$

$$a_{53} a_{43} + a_{54} a_{44} + a_{55} a_{45} = 0$$

de modo que, com algumas suposições adicionais ($a_{34} = -a_{43}$, $a_{35} = -a_{53}$, etc), obtemos finalmente a matriz de transformação geral que é:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & i\beta\gamma & i\beta_i\gamma \\ 0 & 0 & -i\beta\gamma & \frac{\gamma}{1+\beta_i^2/\beta^2} + \frac{1}{1+\beta^2/\beta_i^2} & \frac{\beta\beta_i(\gamma-1)}{\beta^2 + \beta_i^2} \\ 0 & 0 & -i\beta_i\gamma & \frac{\beta\beta_i(\gamma-1)}{\beta^2 + \beta_i^2} & \frac{\gamma}{1+\beta^2/\beta_i^2} + \frac{1}{1+\beta_i^2/\beta^2} \end{pmatrix} \quad (1.81)$$

onde $\beta = \frac{v}{c}$, $\beta_i = \frac{v_i}{c}$ e $\gamma = (1 - \beta^2 - \beta_i^2)^{-1/2}$

As novas coordenadas são obtidas da transformação:

$$\begin{pmatrix} X'_1 \\ X'_2 \\ X'_3 \\ X'_4 \\ X'_5 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \end{pmatrix} \quad (1.82)$$

e assim:

$$X'_1 = X_1$$

$$X'_2 = X_2$$

$$X'_3 = \gamma X_3 + i\beta\gamma X_4 + i\beta_i X_5$$

$$X'_4 = -i\beta\gamma X_3 + \left(\frac{\gamma}{1+\beta_i^2/\beta^2} + \frac{1}{1+\beta^2/\beta_i^2} \right) X_4 + \left(\frac{\beta\beta_i(\gamma-1)}{\beta^2 + \beta_i^2} \right) X_5$$

$$X'_5 = -i\beta_i\gamma X_3 + \left(\frac{\beta\beta_i(\gamma-1)}{\beta^2 + \beta_i^2} \right) X_4 + \left(\frac{\gamma}{1+\beta^2/\beta_i^2} + \frac{1}{1+\beta_i^2/\beta^2} \right) X_5$$

No caso limite em que $\beta_i \rightarrow 0$ ($v_i \rightarrow 0$) temos que $\gamma \rightarrow \gamma' = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ e assim as transformações dadas em (1.83) reduzem-se às seguintes:

$$\begin{aligned} X'_1 &= X_1, \\ X'_2 &= X_2, \\ X'_3 &= \gamma' X_3 + i\beta\gamma' X_4, \\ X'_4 &= -i\beta\gamma' X_3, \\ X'_5 &= X_5 \end{aligned} \quad (1.84)$$

[Devemos lembrar, porém que $\beta_i \rightarrow 0$ está relacionado com o fato de que $t_i \rightarrow 0$.] Assim, as transformações dadas em (1.83) se reduzem efetivamente à situação relativística usual, isto é, às transformações de Lorentz, no limite apropriado ($v_i \rightarrow 0$, $t_i \rightarrow 0$).

Outro limite importante é aquele que se obtém ao fazermos $v \rightarrow 0$. Ou seja: se $\beta \rightarrow 0$, $\gamma \rightarrow \gamma'' \rightarrow (1 - \beta_i^2)^{-1/2}$ e as transformações (1.83) tornam-se:

$$\begin{aligned} X'_1 &= X_1, \\ X'_2 &= X_2, \\ X'_3 &= \gamma'' X_3 + i \beta_i X_5, \\ X'_4 &= X_4, \\ X'_5 &= -i\beta_i X_3 + \gamma'' X_5 \end{aligned} \quad (1.85)$$

As transformações (1.85) constituem um análogo às transformações de Lorentz envolvendo a componente \vec{v}_i da velocidade quântica e também o parâmetro " t_i ", elementos típicos da formulação hidrodinâmica.

Do conjunto de transformações expresso em (1.83) é possível estabelecer as leis de adição de velocidades, seguindo o procedimento de tomar as diferenciais dessas expressões e usar as definições usuais

$$v'_x = \frac{dx'}{dt'} ; \quad v'_y = \frac{dy'}{dt'} ; \quad v'_z = \frac{dz'}{dt'} \quad (1.86)$$

e as definições próprias do formalismo hidrodinâmico:

$$v'_{ix} = \frac{dx'}{dt'_i} ; \quad v'_{iy} = \frac{dy'}{dt'_i} ; \quad v'_{iz} = \frac{dz'}{dt'_i} \quad (1.87)$$

Pode-se ir além e tentar uma construção de um formalismo hidrodinâmico relativístico, generalizando a definição de momento dada em (1.83) e escrevendo:

$$\vec{P}\Psi = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \beta^2 - \beta_i^2}} \Psi + i \frac{m_0 \vec{v}_i}{\sqrt{1 - \beta^2 - \beta_i^2}} \Psi \quad (1.88)$$

Ao preservarmos a correspondência usual $\vec{P} \rightarrow i \hbar \vec{\nabla}$, com o auxílio da conjugada de (1.88), obtemos as expressões relativísticas para as componentes da velocidade quântica, que são:

$$\vec{v} = \frac{\frac{i\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \ln \Psi^*/\Psi}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m_0 c} \vec{\nabla} \ln \Psi^*/\Psi\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2m_0 c} \vec{\nabla} \ln \Psi^*\Psi\right)^2}} \quad (1.89)$$

$$v_i = \frac{\frac{\hbar}{2m_0} \vec{\nabla} \ln \Psi^*\Psi}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m_0 c} \vec{\nabla} \ln \Psi^*\Psi\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2m_0 c} \vec{\nabla} \ln \Psi^*/\Psi\right)^2}} \quad (1.90)$$

A equação (1.90) fornece um limite para a componente imaginária da velocidade quântica. De fato, $v_i < c$, pois para os pontos que correspondem aos nós da função de onda, o termo $\frac{\hbar}{2m_0 c} \vec{\nabla} \ln \Psi^*\Psi$ domina completamente em (1.90) e a velocidade v_i tende à velocidade da luz.

O desenvolvimento posterior do formalismo, levado a efeito por Kühnen⁽¹⁸⁾, permitiu obter uma equação de conservação de energia e a equação de continuidade, respectivamente nas

formas:

$$E - e \phi(r) = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2} - \frac{v_i^2}{c^2}}} \left(\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}} - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{v}_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2} - \frac{v_i^2}{c^2}}} \right) \quad (1.91)$$

e

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\mu}) = 0 \quad (1.92)$$

onde $\phi(r)$ é o potencial de interação e

$$\vec{\mu} = \frac{\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2} - \frac{v_i^2}{c^2}}}$$

Um resultado bastante significativo obtido pela aplicação das equações do formalismo hidrodinâmico é o cálculo da energia do elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio. O valor dessa energia obtido pelo formalismo hidrodinâmico é: $E_0 = - 2.662531 \times 10^{-5} m_0 c^2$, o que lhe confere um erro de aproximadamente $2,66 \times 10^{-3} \%$ em relação ao valor fornecido pela Equação de Dirac (este erro é, na verdade, duas vezes menor que o erro correspondente aos cálculos efetuados com a Equação de Klein-Gordon), conforme figura abaixo.

| | |
|-------|---------------|
| _____ | E = 0 |
| _____ | Hidrodinâmico |
| _____ | Dirac |
| _____ | Klein-Gordon |

Este resultado ilustra o fato de que, apesar de esta tentativa de uma formulação hidrodinâmica apresentar-se como uma simples possibilidade e, por outro lado, não ter sido rigorosamente analisada aqui, um tratamento geral é, em princípio, viável e está ainda - quase que em sua totalidade - por ser feito.

CAPÍTULO II

CÁLCULO DOS VALORES MÉDIOS DAS FUNÇÕES \vec{P}_f , P_f^2 , H_f , H_f^2 , NA FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA.

A determinação dos valores médios de variáveis dinâmicas na formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica faz-se de maneira idêntica à formulação usual; mas, enquanto esta associa operadores às variáveis dinâmicas, aquela trabalha com funções.

Para os valores médios $\langle \vec{P}_{0p} \rangle$, $\langle P_{0p}^2 \rangle$, $\langle H_{0p} \rangle$, $\langle H_{0p}^2 \rangle$ da formulação usual, mostraremos sua equivalência na formulação hidrodinâmica e escreveremos expressões que possibilitam um cálculo mais simples desses valores.

Na formulação hidrodinâmica, temos

$$\vec{P}_{0p} \Psi = \vec{P}_f \Psi = m(\vec{v} + i\vec{v}_i) \Psi \quad (2.1)$$

então o valor médio hidrodinâmico (doravante representado pelo símbolo $\overline{(\quad)}$ para ressaltar a diferença com o símbolo usual) de \vec{P}_f é agora determinado por

$$\overline{(\vec{P}_f)} = \int \Psi^* \vec{P}_f \Psi d^3x = \int \Psi^* m(\vec{v} + i\vec{v}_i) \Psi d^3x \quad (2.2)$$

Ao substituirmos as expressões (1.4) em (2.2), fica estabelecida a equivalência entre as duas formulações para o cálculo do valor médio de P_f que é:

$$\overline{(\vec{P}_f)} = \frac{i\hbar}{2} \int \Psi^* \Psi \left[\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} - \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right] d^3x \quad (2.3)$$

ou

$$(\vec{P}_f) = \int \Psi^* (-i\hbar \vec{\nabla} \Psi) d^3X = \langle \vec{P}_0 \rangle_p \quad (2.4)$$

Se desejarmos uma expressão em termos só de funções, escrevemos (2.2) sob a forma

$$(\vec{P}_f) = m \int \Psi^* \vec{v} \Psi d^3X + im \int \Psi^* \vec{v}_i \Psi d^3X = m(\vec{v}) + im(\vec{v}_i) \quad (2.5)$$

Como (\vec{P}_f) deve ser real, precisamos demonstrar que $\overline{(\vec{v}_i)} = 0$. Isto é feito usando (1.5) e, então,

$$\overline{(\vec{v}_i)} = -\frac{\hbar}{2m} \int \frac{\vec{\nabla} \rho}{\rho} \rho d^3X$$

$$\overline{(\vec{v}_i)} = -\frac{\hbar}{2m} \int \vec{\nabla} \rho d^3X = 0 \quad (2.6)$$

pois sobre todo o espaço a densidade de probabilidade se anula, para estados ligados. Assim, (2.5) se torna:

$$\overline{(\vec{P}_f)} = m \overline{(\vec{v})} \quad (2.7)$$

e, sob esta forma, a equivalência mostrada em (2.4) é ainda mantida.

Para o cálculo de (P_f^2) , tomamos (1.10) e multiplicamos os dois lados por $(2m)$ e escrevemos:

$$\begin{aligned} (\overline{P_f^2}) &= \int \Psi^* P_f^2 \Psi d^3X = m^2 (\overline{v^2}) - m^2 (\overline{v_i^2}) + m\hbar \int (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i) \Psi^* \Psi d^3X - \\ &- i\hbar m \int (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \Psi^* \Psi d^3X + 2i m^2 \int (\vec{v} \cdot \vec{v}_i) \Psi^* \Psi d^3X \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde, substituindo " \vec{v} " e " \vec{v}_i " por suas expressões correspondentes (1.4), mas preservando os termos quadráticos, vem:

$$(\overline{P_f^2}) = m^2 (\overline{v^2}) - m^2 (\overline{v_i^2}) - \hbar^2 \int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3X + \frac{\hbar}{2} \int \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 \right] \Psi^* \Psi d^3X \quad (2.9)$$

Considerando separadamente a primeira integral:

$$I_1 = -\hbar^2 \int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3X$$

e pondo $dv = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \psi d^3X$ e $u = \psi^*$, ao resolvermos por partes, vem:

$$I_1 = -h^2 \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* d^3X \right]$$

como o primeiro termo de I_1 se anula nos extremos (sempre se considerando estados ligados, uma vez que para problemas de espalhamento a situação é diferente), a equação (2.9), fica:

$$(\overline{P_f^2}) = m^2 (\overline{v^2}) - m^2 (\overline{v_i^2}) + \frac{h^2}{2} \int \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} + \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right)^2 \psi^* \psi d^3X \right] \quad (2.10)$$

ou, finalmente:

$$(\overline{P_f^2}) = m^2 (\overline{v^2}) + m^2 (\overline{v_i^2}) \quad (2.11)$$

pois,

$$\frac{h^2}{2} \int \left[\frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} + \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right]^2 \psi^* \psi d^3X = 2m^2 (\overline{v_i^2})$$

É de interesse notar que se conhecermos as velocidades " \vec{v} " e " \vec{v}_i ", o cálculo do valor médio é imediato se efetuado com o auxílio da equação (2.11). Além disso, o que se tem em (2.11) são valores médios de funções - marca distintiva da formulação hidrodinâmica - e uma equivalência completa com o valor médio dos operadores na formulação usual. Efetivamente, se em (2.11) usarmos, uma vez mais, a definição (1.4), teremos:

$$m^2 (\overline{v^2 + v_i^2}) = h^2 \int \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* d^3X = -h^2 \int \psi^* \nabla^2 \psi d^3X$$

e conseguiremos, assim, a equivalência desejada. A saber,

$$(\overline{P_f^2}) = \int \psi^* (-h^2 \nabla^2 \psi) d^3X = \langle P_{0p}^2 \rangle \quad (2.12)$$

De maneira diferente escreveremos a dispersão ΔP . Sabemos (da formulação usual) que $\Delta P = \sqrt{\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2}$. Com as equações (2.7) e (2.11), torna-se:

$$\Delta P = m \sqrt{(\overline{v^2}) + (\overline{v_i^2}) - (\overline{v})^2}$$

ou

$$\Delta P = \Delta P_f = m \sqrt{(\Delta v)^2 + (\Delta v_i)^2} \quad (2.13)$$

pois

$$(\Delta v)^2 = (\overline{v^2}) - (\overline{v})^2; (\Delta v_i)^2 = (\overline{v_i^2}) - (\overline{v_i})^2 = (\overline{v_i^2})$$

O produto de incerteza posição-momento é

$$\Delta \hat{x} \Delta \hat{p} = m \Delta x \sqrt{(\Delta v)^2 + (\Delta v_i)^2} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.14)$$

indicando a dependência com a velocidade imaginária \vec{v}_i . Para aqueles casos em que $\langle v \rangle^2 = \langle v^2 \rangle$, $\Delta v = 0$ e, então, temos que o produto de incerteza depende exclusivamente da componente imaginária da velocidade. Aqui mostramos - como de outro modo o fizeram FALCO, MARTINO e SIENA⁽²⁵⁾ para a formulação estocástica da Mecânica Quântica que o produto de incerteza posição-momento é devido à velocidade imaginária \vec{v}_i , e, também por decorrência, devido à componente temporal "t_i" que aparece definida em (1.7).

Prosseguindo, determinaremos os valores médios das funções H_f e $|H_f|^2$ que mostraremos ser iguais aos mesmos valores médios dos operadores \hat{H}_{op} e \hat{H}_{op}^2 da formulação usual.

Para valor médio de H_f , basta tomarmos a média de cada um dos termos que aparecem na função hamiltoniana hidrodinâmica H_f definida em (1.62):

$$(\overline{H_f}) = (1/2)m \overline{(\vec{v} + i\vec{v}_i)^2} - \frac{i\hbar}{2} \overline{(\vec{v} \cdot (\vec{v} + \vec{v}_i))} + (\overline{V}) \quad (2.15)$$

e aí introduzimos os resultados obtidos para o cálculo do valor médio da função P_f^2 dados em (2.11), escrevemos:

$$\overline{(H_f)} = 1/2 m \overline{v^2} + 1/2 m \overline{v_i^2} + (\overline{V}) \quad (2.16)$$

Com (2.16) podemos calcular os valores médios para a energia de cada um dos estados do sistema, bastando o conhecimento das velocidades " \vec{v} " e " \vec{v}_i ". O cálculo desenvolvido em (2.16) é absolutamente equivalente ao cálculo do valor médio do operador \hat{H} , usual. Para se ver a equivalência, basta substituímos em

(2.16) as expressões diferenciais (1.4) para as velocidades.

Na seqüência, estenderemos os resultados anteriores para o valor médio $|H_f|^2$. Afirmamos que:

$$\langle \hat{H}_{op}^2 \rangle = \int \Psi^* H_f^* H_f \Psi d^3X \quad (2.17)$$

cuja demonstração faremos em seguida. Desejamos demonstrar, efetivamente, que:

$$\int \Psi^* \hat{H}_{op} \Psi d^3X = \int \Psi^* H_f^* H_f \Psi d^3X \quad (2.18)$$

onde $\hat{H}_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$ é o operador hamiltoniano usual e $H_f = \frac{1}{2} m(v^2 - v_i^2) + im\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{i\hbar}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} + i\vec{v}_i) + V$ é a função hamiltoniana na hidrodinâmica, escrita em termos das velocidades.

Tomando separadamente o lado esquerdo de (2.18) - que doravante denominaremos "lado usual" - e desenvolvendo-o, vem:

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \right] d^3X &= \int \Psi^* \left\{ \frac{\hbar^4}{4m^2} \nabla^4 \Psi + \right. \\ &\quad \left. I_1 \right. \\ &+ \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 V \right) \Psi - \frac{\hbar^2}{m} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \Psi + \frac{\hbar^2}{m} V \nabla^2 \Psi \right] + V^2 \Psi \left. \right\} d^3X \quad (2.19) \\ &\quad I_2 \qquad I_2 \qquad I_3 \end{aligned}$$

Em (2.19), no integrando, temos três termos distintos. O termo I_1 que corresponde à energia cinética quadrática, o termo I_2 , que é o termo cruzado com o potencial e o termo exclusivo do potencial quadrático I_3 que é equivalente nas duas formulações.

Resolveremos inicialmente a integral I_1 abaixo:

$$I_1 = \frac{\hbar^4}{4m^2} \int \nabla^4 \Psi \Psi^* d^3X \quad (2.20)$$

Na primeira das integrações por partes, escolhemos

$$\mu = \Psi^* \qquad dv = \nabla^4 \Psi d^3X$$

de modo que:

$$I_1 = \frac{\hbar^4}{4m^2} [\Psi^* \nabla^3 \Psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \nabla^3 \Psi \nabla \Psi^* d^3 X] \quad (2.21)$$

e assumiremos que o primeiro termo da integração acima se anule nos extremos (sempre para estados ligados). Então,

$$I_1 = - \frac{\hbar^4}{4m^2} \int \nabla^3 \Psi \nabla \Psi^* d^3 X$$

Escolhendo $u = \nabla \Psi^*$, $dv = \nabla^3 \Psi d^3 X$ e integrando por partes, tomando novamente o primeiro termo da integração como nulo, temos:

$$I_1 = \frac{\hbar^4}{4m^2} \int \nabla^2 \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3 X \quad (2.22)$$

Agora, o termo cruzado com o potencial é:

$$I_2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla^2 V \Psi^* \Psi d^3 X - \frac{\hbar^2}{m} \int \Psi^* \vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} \Psi d^3 X - \frac{\hbar^2}{m} \int V \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3 X \quad (2.23)$$

A primeira das integrações, por partes, mediante a escolha $u = \Psi^* \Psi$, $dv = \nabla^2 V d^3 X$ dá:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \cdot \vec{\nabla} V d^3 X + \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} V d^3 X$$

já que o primeiro termo se anula nos extremos. Portanto, a equação (2.23) se torna:

$$I_2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \cdot \vec{\nabla} V d^3 X + \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} V d^3 X - \frac{\hbar^2}{m} \int V \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3 X \quad (2.24)$$

Nova integração por partes, relativa a primeira das integrais, onde se escolhe $u = \Psi^* \vec{\nabla} \Psi$, $dv = \vec{\nabla} V d^3 X$ e se toma o primeiro termo como nulo, fornece:

$$I_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \int \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} V d^3 X - \frac{\hbar^2}{2m} \int V \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3 X + \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi \vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} \Psi d^3 X \quad (2.25)$$

Finalmente, outra integração por partes, na primeira das integrais acima dá:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi d^3X - \frac{\hbar^2}{m} \int \nabla \Psi \nabla^2 \Psi^* d^3X$$

pois escolhemos $u = \Psi \vec{\nabla} \Psi^*$ e $dv = \vec{\nabla} V d^3X$ e tomamos o primeiro termo nulo nos extremos. Então,

$$I_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \Psi^* \Psi \left[\frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} + \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} \right] d^3X$$

ou

$$I_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \Psi^* \Psi \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} + \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right) \right] d^3X \quad (2.26)$$

se usarmos as identidades:

$$\frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right) + \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2$$

$$\frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right) + \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2$$

Portanto, o "lado usual" com I_1 , I_2 e I_3 está convenientemente desenvolvido e é:

$$\begin{aligned} \text{Lado usual} = & \frac{\hbar^4}{4m^2} \int \nabla^2 \Psi \cdot \nabla^2 \Psi d^3X - \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \Psi^* \Psi \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \right. \\ & \left. + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} + \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right) \right] d^3X + \int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3X \end{aligned} \quad (2.27)$$

Agora, desenvolvendo o "lado hidrodinâmico", temos:

$$\begin{aligned} & \int \left\{ \frac{1}{4} m^2 (v^2 + v_i^2)^2 + \frac{1}{2} \hbar m \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i (v^2 - v_i^2) + \frac{\hbar^2}{4} ((\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i)^2 + (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i)^2 - m \hbar \vec{v} \cdot \vec{v}_i (\vec{\nabla} \cdot \vec{v})) \right\} \\ & + \{ \hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + m(v^2 - v_i^2) \} \nabla + v^2 \} \Psi^* \Psi d^3X \end{aligned} \quad (2.28)$$

e se introduzirmos " \vec{v} " e " \vec{v}_i " como aparecem em (1.4) os termos do primeiro colchete e do segundo, respectivamente são:

$$\frac{1}{4} m^2 (\mathbf{v}^2 + \mathbf{v}_i^2)^2 = \frac{h^4}{4m^2} \left[\left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 \right]$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \hbar m (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) (\mathbf{v}^2 - \mathbf{v}_i^2) &= \frac{h^4}{8m^2} \left[\frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 - \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^4 - 2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 - \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^4 \right] \end{aligned}$$

$$\frac{\hbar^2}{4} [(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})^2 + (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i)^2] = \frac{h^4}{4m^2} \left[\frac{\vec{\nabla}^2 \Psi^*}{\Psi^*} \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi}{\Psi} - \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 - \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} + \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 \right]$$

$$\begin{aligned} - \hbar m \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_i [\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}] &= - \frac{h^4}{8m^2} \left[\frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 - \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^4 + 2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 - \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 - \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^4 \right] \end{aligned}$$

Somados todos eles, os termos do primeiro colchete, que correspondem à energia cinética quadrática, J_1 são:

$$J_1 = \frac{h^4}{4m^2} \int \nabla^2 \Psi \nabla^2 \Psi^* d^3x \quad (2.29)$$

De maneira análoga, na equação (2.28), os termos cruzados com o potencial, J_2 , são:

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

$$m (\mathbf{v}^2 - \mathbf{v}_i^2) = - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 \right]$$

e, então, somando-os, temos:

$$J_2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi \Psi^* \Psi \left[\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right) + \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 \right] d^3x \quad (2.30)$$

De posse destes resultados, escrevemos o "lado hidrodinâmico" como:

$$\begin{aligned} \text{Lado hidrodinâmico} = & \frac{\hbar^4}{4m^2} \int \nabla^2 \Psi \nabla^2 \Psi^* d^3X - \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \Psi^* \Psi \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \right. \\ & \left. + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} + \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right) \right] d^3X + \int \Psi^* \nabla^2 \Psi d^3X \end{aligned} \quad (2.31)$$

Comparando as equações (2.31) e (2.27), observamos que são idênticas, donde concluímos que a equivalência afirmada em (2.18) dá-se; ou se quisermos, que obtivemos uma forma alternativa para o cálculo dos valores médios dos operadores \hat{H}_{op} e \hat{H}_{op}^2 , que é, em essência, mais simples e que deve levar aos mesmos resultados que a forma usual.

DE LA PEÑA⁽¹⁵⁾ desenvolvendo a chamada Eletrodinâmica Estocástica não conseguiu demonstrar a equivalência dos dois caminhos afirmando que $\langle H^2 \rangle_R$ (estocástico) diferia em geral, de $\langle H^2 \rangle_\Psi$ (quântico). Ora, isto não ocorre com a formulação hidrodinâmica. Por isto, atribuímos a discrepância entre as duas formulações, que supúnhamos serem semelhantes nesse particular, ao fato de a assim chamada formulação estocástica da Mecânica Quântica não possuir uma função hamiltoniana geral como nesta formulação hidrodinâmica que aqui desenvolvemos a partir de uma lagrangeana obtida por procedimentos clássicos.

Outro fato digno de nota é que na obtenção destes resultados não se usou uma regra de correspondência específica, como por exemplo, a Regra de Correspondência de Weyl e mesmo assim, a equivalência foi demonstrada.

CAPÍTULO III

AS RELAÇÕES DE INCERTEZA ENERGIA - TEMPO

3.1. O tempo como um observável na Mecânica Quântica.

Ordinariamente, o tempo não é encarado como um operador. Isto é, não se lhe associa um operador hermitiano no Espaço de Hilbert desde que PAULI⁽²⁶⁾ mostrou ser isto impossível. Observamos que a relação:

$$[\hat{H}, \hat{T}] = - i\hbar \quad (3.1)$$

se satisfeita por um operador tempo \hat{T} hermitiano, implica que o operador \hat{H} deva possuir um espectro de valores próprios contínuos de $-\infty$ a $+\infty$. Como isso nem sempre ocorre, não deve existir, no Espaço de Hilbert, um operador hermitiano \hat{T} que satisfaça a relação (3.1).

Entretanto, algumas tentativas têm sido feitas no sentido de construir tal operador mediante um tratamento matemático que, abandonando o espaço de Hilbert da formulação usual, opera com funcionais no Super Espaço de Hilbert, de acordo com sua formulação apresentada por ROSEMBAUM⁽²⁷⁾ e também abordada por outros autores como FUJIWARA^(28,29). Em trabalhos recentes, GOTO *et al*^(30,31), desenvolvendo um formalismo onde o tempo é tratado em pé de igualdade com as coordenadas espaciais, propuseram uma formulação alternativa da Mecânica Quântica, onde o tempo é considerado uma variável dinâmica e não simplesmente uma parâmetro de especificação da ordem de ocorrências dos estados de um sistema, como usualmente é tratado. Dedicaremos a próxima secção ao aprofundamento de uma aplicação simples do operador tempo para

a partícula livre usado por ROSEMBAUM⁽²⁷⁾ e outros.

É útil observarmos ainda que a objeção de PAULI acima referida pressupõe um operador \hat{T} contínuo como é contínua a variável temporal da Mecânica Clássica. Aqui, introduziremos uma variável temporal composta de uma componente "real" t e outra componente "imaginária" t_i . Efetivamente, a componente real t é a mesma componente clássica, que é contínua, mas o mesmo não se dá necessariamente com a nova componente introduzida, a saber, " t_i ". Isto nos possibilita uma "abertura" na investigação sobre uma forma possível do operador tempo no formalismo hidrodinâmico. De fato, essa tentativa será discutida.

3.2. O operador tempo e a partícula livre.

A significação clássica da variável temporal para o caso de uma partícula livre é apreensível da razão $t \sim r/v$ de modo que, quanticamente, a idéia intuitiva é a mesma, i.é., o operador tempo é definido por:

$$\hat{T} = \frac{m}{2} \left[\hat{x} \frac{1}{\hat{p}} + \frac{1}{\hat{p}} \hat{x} \right] \quad (3.2)$$

e envolve uma certa simetrização e a utilização da correspondência

$$\hat{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \quad \hat{x} \rightarrow x$$

Para tornar mais simples os cálculos posteriores, escreveremos o operador (3.2) na representação de momento, onde, em uma dimensão

$$\hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad \hat{p}_x \rightarrow p_x$$

e, então,

$$\hat{T} = \frac{m\hbar}{2} \left[\frac{2}{p} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{1}{p^2} \right] \quad (3.3)$$

Para uma função $\phi(p)$ qualquer, o operador (3.3) deve obedecer à condição de hermiticidade definida por:

$$\int [\hat{T}\phi(\underline{p})]^* \phi(\underline{p}) d^3p = \int \phi^*(\underline{p}) \hat{T}\phi(\underline{p}) d^3p \quad (3.4)$$

Ora, reescrevendo o lado esquerdo de (3.4), sempre para o caso unidimensional, temos:

$$\int [\hat{T}\phi(\underline{p})]^* \phi(\underline{p}) d^3p = -\frac{m\hbar}{2} \left[\int \frac{2}{p} \frac{\partial \phi^*(\underline{p})}{\partial p} \phi(\underline{p}) d^3p - \int \frac{1}{p^2} \phi^*(\underline{p}) \phi(\underline{p}) d^3p \right] \quad (3.5)$$

como $\int \frac{2}{p} \frac{\partial \phi^*}{\partial p} d^3p = - \int \phi^*(\underline{p}) \left[\frac{2}{p} \frac{\partial \phi}{\partial p} - \frac{2}{p^2} \phi \right] d^3p$, vem

$$\int [\hat{T}\phi(\underline{p})]^* \phi(\underline{p}) d^3p = \frac{m\hbar}{2} \left[\int \phi^*(\underline{p}) \left(\frac{2}{p} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{1}{p^2} \right) \phi d^3p \right] = \int \phi^*(\underline{p}) \hat{T}\phi(\underline{p}) d^3p \quad (3.6)$$

portanto, o operador \hat{T} na forma (3.3) é hermitiano. Diante disso, para este caso particular em que o espectro do operador hamiltoniano \hat{H} é contínuo, podemos supor que é válida uma equação de autovalores na forma

$$\hat{T} f(\underline{p}) = t f(\underline{p}) \quad (3.7)$$

onde t são autovalores do operador \hat{T} , que suporemos serem reais e $f(\underline{p})$ é uma função a ser determinada. A equação (3.7) pode ser resolvida ao reescrevermos \hat{T} na forma (3.3) obtendo a equação diferencial

$$\frac{2}{p} \frac{\partial f(\underline{p})}{\partial p} - \frac{f(\underline{p})}{p^2} = \frac{2t}{m\hbar} f(\underline{p}) \quad (3.8)$$

cuja solução, não normalizada, é:

$$f(\underline{p}) = A p^{1/2} \exp\left[-\frac{it}{2m\hbar} p^2\right] \quad (3.9)$$

Esta seria a autofunção do operador tempo na representação de momento. Para nos certificarmos de sua veracidade, procuraremos sua transformada de Fourier $g(x)$ e tentaremos verificar relação análoga a (3.7) na representação de posição.

Começamos por introduzir a função $g(x)$ definida pela transformação

$$g(x) = (2h\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} [f(p) \exp(\frac{i}{h} px)] dp \quad (3.10)$$

Ora, na representação de posição devemos buscar uma forma alternativa para o operador (3.2). Essa forma é obtida se introduzirmos uma expressão conhecida para o operador $(1/p)$ desenvolvida por D TER HAAR⁽³²⁾, que, de certo modo, contorna o problema de singularidade que deve surgir para $p = 0$. Temos, então,

$$\frac{1}{p} = \frac{i}{h} \int_{-\infty}^X \dots dx'$$

ou

$$\frac{1}{p} = -\frac{i}{h} \int^{\infty} \dots dx' \quad (3.11)$$

que transforma (3.2) em

$$\hat{T} = \frac{mi}{2h} [\hat{x} \int_{-\infty}^X \dots dx' + \int_{-\infty}^X x' \dots dx'] \quad (3.12)$$

e fornece a equação

$$\hat{T} g(x) = \frac{mi}{2h/2\pi h} [x \int_{-\infty}^{+\infty} f(p) \int_{-\infty}^X e^{i/h px'} dx' dp + \int_{-\infty}^{+\infty} f(p) \int_{-\infty}^X x' e^{i/h px'} dx' dp] \quad (3.13)$$

Depois de um cálculo relativamente delicado, mostra-se valer

$$\hat{T} g(x) = t g(x) \quad (3.14)$$

que, efetivamente, corresponde a uma equação de autovalores do operador tempo na representação de posição. Embora estes autovalores não sejam facilmente determináveis, esses desenvolvimentos podem auxiliar uma posterior inspeção em torno das variáveis temporais até mesmo na formulação hidrodinâmica, na qual procuraremos dar uma interpretação diversa das usuais para o novo parâmetro temporal introduzido.

Como último desenvolvimento, podemos calcular o comutador entre o operador hamiltoniano \hat{H} e o operador tempo \hat{T} , já que, no caso da partícula livre o único problema que surge com os espectros dos operadores é a singularidade em $P = 0$ para o ope-

rador tempo, que pode ser contornada parcialmente mediante a forma (3.11) para o operador $1/P$.

Na representação de momento

$$[\hat{H}, \hat{T}] \phi(p) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \left[\frac{mih}{2} \left(\frac{2}{p} \frac{\partial \phi}{\partial p} - \frac{\phi}{p^2} \right) \right] - \frac{mih}{2} \left[\frac{2}{p} \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{p^2}{2m} \phi(p) \right) - \frac{\phi(p)}{2m} \right] \quad (3.15)$$

ou

$$[\hat{H}, \hat{T}] = -ih$$

que satisfaz a relação (3.1) e como os operadores que aí aparecem são hermitianos, pode-se demonstrar formalmente que

$$\Delta H \Delta T \geq h/2 \quad (3.16)$$

3.3. O tempo de estacionariedade.

O não aparecimento do tempo como um operador na Equação de Schrödinger e sim como um parâmetro, torna particularmente difícil o estabelecimento das relações de incerteza energia-tempo de uma forma direta. O que se faz, usualmente, é derivar a incerteza energia-tempo da correspondente incerteza posição-momento obtida através de cálculo direto, isto é, a partir das dispersões nos operadores associados a essas variáveis e daí obter o valor da dispersão temporal.

Alguns trabalhos tratam mais detidamente do problema do operador tempo em conexão com as relações de incerteza⁽³³⁾. No próximo capítulo nós também o tentaremos a partir da formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

Aqui nos deteremos no procedimento estabelecido por EBERLY e SINGH⁽³⁴⁾ e retomado por BLANCHARD⁽³⁵⁾ que, ao invés de tratar do operador tempo, trabalha com um "operador tempo recíproco" que tem sua existência definida para todos os sistemas quânticos com uma matriz densidade e um hamiltoniano. Na verdade, o tempo recíproco é em algum sentido, a derivada temporal da matriz densidade ρ , i.é., $\dot{\rho}$.

Para os sistemas estacionários $\langle \dot{\rho} \rangle = 0$. Assim, toma-se a dispersão em $\dot{\rho}$ como uma medida do "grau de estacionariedade" do sistema e a partir daí, pode-se definir um "tempo de estacio-

nariedade" T_s , tal que:

$$(1/T_s)^2 = (\Delta\hat{p})^2 \quad (3.17)$$

Pode-se provar, para qualquer sistema, a partir de (3.17) que

$$T_s^2 \Delta H^2 \geq h^2$$

que é justamente, a pretendida relação de incerteza energia-tempo. Como foi notado no trabalho em questão⁽³⁴⁾, o "tempo de estacionariedade" quando aplicado a um pacote de ondas é idêntico ao tempo de espalhamento do pacote; e quando aplicado ao decaimento de estados excitados, identifica-se com o tempo de vida do estado.

Para exemplificar, calcularemos a relação de incerteza energia-tempo a partir da definição (3.17) para os estados coerentes $|\alpha\rangle$ do oscilador harmônico.

Neste problema, que será objeto de análise mais detalhada no próximo capítulo, a matriz densidade é:

$$\hat{\rho} = |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (3.18)$$

Usando a "picture" de Schrödinger onde

$$\dot{\hat{\rho}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (3.19)$$

vem

$$\langle\dot{\hat{\rho}}\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle[\hat{H}, \hat{\rho}]\rangle \quad (3.20)$$

ou

$$\langle\dot{\hat{\rho}}\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle\alpha|(\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H})|\alpha\rangle \quad (3.21)$$

e, assim,

$$\langle\dot{\hat{\rho}}\rangle = \frac{1}{i\hbar} (\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle - \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle)$$

portanto,

$$\langle\dot{\hat{\rho}}\rangle = 0 \quad (3.22)$$

A dispersão em \hat{p} é definida de maneira usual, isto é,

$$(\Delta \dot{\rho})^2 = \langle \dot{\rho}^2 \rangle - \langle \dot{\rho} \rangle^2 \quad (3.23)$$

e, em vista de (3.22) se torna

$$(\Delta \dot{\rho})^2 = \langle \dot{\rho}^2 \rangle \quad (3.24)$$

Então, por (3.19) escrevemos

$$\begin{aligned} \langle \dot{\rho}^2 \rangle &= -\frac{1}{h^2} \langle \alpha | (\hat{H}\rho - \rho\hat{H}) (\hat{H}\rho - \rho\hat{H}) | \alpha \rangle = -\frac{1}{h^2} \langle \alpha | (\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha| - \\ &|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}) (\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha| - |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}) | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

e, lembrando que $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, vem

$$\begin{aligned} \langle \dot{\rho}^2 \rangle &= \frac{1}{h^2} \langle \alpha | (\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle - \hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha|\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle - |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}^2|\alpha\rangle + \\ &|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle) = -\frac{1}{h^2} (\langle \alpha | \hat{H}^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle^2 - \\ &\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{H}^2 | \alpha \rangle + \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle) \end{aligned}$$

donde,

$$\langle \dot{\rho}^2 \rangle = \frac{1}{h^2} [\langle \alpha | \hat{H}^2 | \alpha \rangle - (\langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle)^2] \quad (3.26)$$

Como $\langle \alpha | \hat{H}^2 | \alpha \rangle = \langle \hat{H}^2 \rangle$ e $(\langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle)^2 = \langle \hat{H} \rangle^2$ pode-se usar (3.24) e escrever:

$$(\Delta \dot{\rho})^2 = \frac{1}{h^2} [\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2]$$

ou

$$(\Delta \dot{\rho})^2 = \frac{1}{h^2} (\Delta \hat{H})^2 \quad (3.27)$$

A partir de (3.17), finalmente temos

$$T_S^2 \Delta \hat{H}^2 = h^2 \quad (3.28)$$

que define exatamente a relação de incerteza energia-tempo buscada.

3.4. O papel das componentes "real" e "imaginária" do tempo na formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

3.4.1. Introdução.

No formalismo hidrodinâmico que aqui desenvolvemos, além da componente real "t" usada na descrição temporal dos fenômenos, introduzimos uma nova componente temporal, como um parâmetro "t_i", definido como

$$\vec{v}_i dt_i = d\vec{r}, \quad (3.29)$$

para nos auxiliar na obtenção das trajetórias quânticas, às quais aludimos na seção I do CAPÍTULO I. Desejamos agora, aprofundar as aplicações dos parâmetros "t" e "t_i" com o fito de relevar seu papel na formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

Afirmamos inicialmente que na descrição de problemas quânticos estão envolvidas as duas componentes temporais "t" e "t_i" de modo a formarem entre si um plano (t x t_i). Os problemas clássicos têm sua completa descrição temporal no eixo de tempo "real", isto é, não há necessidade da introdução do parâmetro "t_i" para auxiliar a descrição. Por sua vez, "t_i" deve desempenhar importante papel na descrição de problemas tipicamente quânticos, como mostraremos nos exemplos seguintes.

Porém, a descrição temporal completa do problema deve ser feita com o auxílio dos dois parâmetros, ou seja, no plano definido por "t" e "t_i". Uma das implicações dessa concepção - quiza a mais ousada e importante - é a de que a incerteza energia-tempo esteja relacionada ou seja devida a existência da componente imaginária do tempo, como já mostramos suas implicações nas relações de incerteza posição-momento (equação 2.14). Examinemos agora, quatro exemplos ilustrativos.

3.4.2. Exemplos.

a) Partícula livre.

Consideremos uma partícula livre com o hamiltoniano $\hat{H} = \hat{P}^2/2m$. A autofunção não normalizada do operador hamiltoniano \hat{H} é:

$$\Psi(\vec{R}) = A e^{i \vec{K} \cdot \vec{R}} \quad (3.30)$$

As componentes da velocidade quântica são:

$$\begin{aligned}\vec{v} &= \frac{h k}{m} \hat{r} \\ \vec{v}_i &= 0\end{aligned}\quad (3.31)$$

onde $\vec{k} = K\hat{r}$ é o número de onda e \hat{r} é um vetor unitário. Usando as definições (1.7) podemos integrar o conjunto acima e obtermos uma expressão explícita para \vec{R} tal que

$$\vec{R} = \vec{R}(t, t_i) \quad (3.32)$$

que é uma equação de trajetória. Ora, a primeira das equações da das em (3.31) pode ser integrada diretamente a partir de

$$\frac{\partial \vec{R}(t, t_i)}{\partial t} = \frac{h k}{m} \hat{r}$$

e fornecer,

$$\vec{R} = \left[\frac{hk}{m} t + g(t_i) \right] \hat{r} \quad (3.33)$$

Com o auxílio da segunda equação dada em (3.31), vemos que $\frac{\partial \vec{R}}{\partial t_i} = \frac{dg}{dt_i} \hat{r} = 0$ e, portanto, $g(t_i) = \text{cte.}$ Assim,

$$\vec{R} = \left[\frac{hk}{m} t + \text{cte.} \right] \hat{r} \quad (3.34)$$

Em (3.34) poderíamos expressar "t" ao invés de " \vec{R} " se desejássemos uma expressão explícita. Neste exemplo particular a componente " t_i " introduzida pela formulação hidrodinâmica não fornece maiores informações, bastando o conhecimento da componente usual ("real") para a descrição temporal da situação física. Num outro exemplo, mostraremos que uma situação diversa de ve ocorrer.

b) Partícula na caixa.

Abordaremos agora, em uma dimensão, o problema de uma partícula submetida a um potencial do tipo

$$V(x) = \begin{cases} 00, & x < 0 \quad \text{ou} \quad x > a \\ 0, & 0 < x < a \end{cases}$$

Considerando as condições de continuidade impostas sobre a autofunção e sua primeira derivada nos pontos $x = 0$ e $x = a$, a Equação de Schrödinger tem por soluções já normalizadas as funções:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{a} \operatorname{sen} Kx & 0 < x < a \\ 0 & x < 0 \text{ ou } x > a \end{cases}$$

onde $K = \frac{n\pi}{a}$, para $n = 1, 2, 3, \dots$

As velocidades \vec{v} e \vec{v}_i , em módulo são:

$$\begin{aligned} v &= 0 \\ v_i &= -\frac{hk}{m} \cotg kx \end{aligned} \quad (3.35)$$

O sistema (3.35) pode ser escrito como um sistema de duas equações diferenciais, a saber,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = 0 \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial x}{\partial t_i} = -\frac{h k}{m} \cotg kx$$

Integrando a segunda das equações (3.36),

$$\int \frac{dx}{|\cotg kx|} = -\frac{h k}{m} \int dt_i + g(t)$$

vem:

$$X(t, t_i) = \frac{1}{K} \operatorname{arcos} \left\{ \exp K \left[\frac{h k}{m} t_i - g(t) \right] \right\} \quad (3.37)$$

A determinação da $g(t)$ em (3.37) se faz com o auxílio da primeira das equações (3.36) e fornece:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{dg}{dt} = 0 \quad g = \text{cte.}$$

A forma geral (3.37) se reduz a uma função de " t_i " apenas, já que não há maiores informações acerca da componente " t ". Assim,

$$X(t_i) = 1/k \left[\arcsin \left(\exp k \left[\frac{h k}{m} t_i - g \right] \right) \right] \quad (3.38)$$

onde a variável " t_i " está limitada entre $-\infty$ e $\frac{mg}{hk}$.

Com isto, cremos salientar a importância da utilização das duas componentes temporais, pois ao contrário do que ocorreu no exemplo anterior, a equação de trajetória é aqui obtida em função da componente " t_i ". Vemos então que por não termos maiores informações sobre " t " para casos estacionários, o recurso à nova componente temporal mostra-se útil, pois permite que se fale em "mudança" segundo a componente " t_i " sabendo que não há qualquer mudança no sistema em termos da componente usual " t ".

c) O pacote gaussiano.

Até aqui tratamos de dois problemas estacionários onde uma das velocidades se anulava. Tratemos agora de um problema de grande interesse, em uma dimensão, onde as duas componentes da velocidade quântica são não nulas, que é o pacote gaussiano que tomamos da literatura⁽³⁶⁾, como:

$$\Psi(x,t) = \frac{(2a^2)^{1/4}}{\pi} \frac{e^{i\phi} e^{ik_0 x}}{\left(a^4 + \frac{4h^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \exp \left[- \frac{[x - Vgt]^2}{a^2 + \frac{2iht}{m^2}} \right] \quad (3.39)$$

onde: $\phi = -\theta - h k_0^2 \frac{t}{2m}$; $\text{tg } 2\theta = \frac{2ht}{ma^2}$, $Vg = \frac{hk_0}{m}$ e a é a largura do pacote.

Como,

$$|\Psi|^2 = \frac{\sqrt{2}}{\pi a^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4h^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp \left[\frac{-2a^2 [x - Vgt]^2}{a^4 + \frac{4h^2 t^2}{m^2}} \right], \text{ e } \phi \text{ não depende de } x,$$

as velocidades \vec{v} e \vec{v}_i são dadas por:

$$v_i = \frac{2ha^2}{m^2 \alpha} (X - Vgt) = \frac{\partial X(t, t_i)}{\partial t_i}$$

$$v = \frac{4h^2 t}{m^2 \alpha} (X - Vgt) + Vg = \frac{\partial X}{\partial t} (t, t_i) \quad (3.40)$$

onde, por comodidade, pusemos:

$$\alpha = a^4 + \frac{4h^2 t^2}{m^2}$$

É fácil observar que uma solução satisfatória para as equações (3.40) é:

$$X = V_g t \quad (3.41)$$

onde $V_g = \frac{h k_0}{m}$ é a velocidade de grupo e a equação (3.41) indica que o centro do pacote move-se com essa velocidade.

Neste caso, vimos que (3.41) não depende da componente " t_i ". Uma outra solução, no entanto, pode ser encontrada se nas equações (3.40) considerarmos valores tais que $t \ll 1$. Neste caso, as referidas equações tornam-se:

$$\frac{\partial X}{\partial t_i} = \frac{2h}{ma^2} (X - V_g t) \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{4h^2 t}{ma^4} (X - V_g t) + V_g$$

pois $\alpha \approx a^4$. Propomos uma solução geral de (3.42) uma função do tipo

$$X(t, t_i) = V_g t + h(t)g(t_i) \quad (3.43)$$

onde $h(t)$ e $g(t_i)$ são, respectivamente, funções exclusivas de " t " e " t_i ". Substituindo (3.43) em (3.42) e efetuando as derivações que aí aparecem, vem:

$$\frac{2h}{m^2 a^2} g(t_i) = \frac{dg}{dt_i} (t_i) \quad (3.44)$$

$$\frac{4h^2 t}{m^2 a^4} h(t) = \frac{dh(t)}{dt}$$

cujas soluções são:

$$g(t_i) = C e^{\frac{2h}{m^2 a^2} t_i} \quad (3.45)$$

$$h(t) = D e^{\frac{2h^2}{m^2 a^4} t^2}$$

Então, (3.43) se escreve de maneira geral (para t pequeno) como:

$$X(t, t_i) = V_g t + \epsilon \left(\exp\left[\frac{2ht_i}{m^2 a^2} + \left(\frac{2h^2 t^2}{m^2 a^4}\right)\right] \right) \quad (3.46)$$

onde ϵ é uma constante geral envolvendo C e D e determina o espaçamento das diferentes curvas em (3.46). Embora tendo um âmbito de validade limitado aos pequenos valores de " t ", a equação (3.46) pode ser útil para a compreensão do comportamento do sistema e também na investigação das relações de incerteza energia - tempo neste caso particular, como teremos ocasião de ver adiante.

d) *Os estados coerentes do oscilador harmônico.*

Neste exemplo, aplicaremos a formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica aos estados coerentes do oscilador harmônico com o objetivo de estabelecer a equação de trajetória e posteriormente (Sec. 3.5) investigar as relações de incerteza energia-tempo.

Os estados coerentes representam um tema de grande interesse físico. Originalmente tratado por SCHRODINGER⁽³⁷⁾ é de larga aplicação na Ótica Quântica e encontra-se desenvolvido por muitos livros textos^(38,39,40), tendo sido objeto de trabalhos originais, notadamente os de GLAUBER^(41,42).

Os estados coerentes são os autovetores $|\alpha\rangle$ do operador de aniquilação a e obedecem à equação de autovalores.

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (3.47)$$

cuja solução é:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle, \quad \alpha = \alpha_0 e^{-i\omega t} \quad (3.48)$$

Também, $|\alpha\rangle$ pode ser expandido na forma anterior, em termos dos estados estacionários $|\phi_n\rangle$ e, portanto, podemos obter a autofunção $\Psi_\alpha(x)$ em termos de ϕ_0 , ou seja, o pacote

$$\Psi_\alpha(x) = \left(\frac{M\omega}{h\pi}\right)^{1/4} e^{i\theta_\alpha} \exp.\left\{-\frac{(x-\langle x \rangle_\alpha)^2}{4\Delta x^2} + i\frac{\langle P \rangle_\alpha}{h} x\right\} \quad (3.49)$$

onde,

$$\langle P \rangle_\alpha = -\sqrt{2h m\omega} \alpha_0 \sin\omega t; \quad \langle x \rangle_\alpha = \alpha_0 \sqrt{\frac{2h}{M\omega}} \cos\omega t$$

$$\Delta x = \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}$$

e $\exp(i\theta_\alpha)$ é o fator de fase global que doravante omitiremos por não conter dependência espacial⁽³⁶⁾. Note-se que estamos usando os resultados da formulação usual apenas por fidelidade ao tratamento original. Todavia, os resultados que aqui usamos podem ser facilmente obtidos das equações de movimento da formulação hidrodinâmica.

De posse da função dada em (3.49) calculamos as velocidades " \vec{v} " e " \vec{v}_i " e obtemos, em valor absoluto,

$$v_i = \omega(x - \langle x \rangle_\alpha)$$

$$v = \frac{\langle P \rangle_\alpha}{m} \quad (3.50)$$

que imediatamente reescrevemos em sua forma diferencial, ou seja,

$$\frac{\partial X}{\partial t}(t, t_i) = \langle P \rangle_\alpha / m$$

$$\frac{\partial X}{\partial t_i}(t, t_i) = \omega(X - \langle x \rangle_\alpha) \quad (3.51)$$

A solução do sistema acima (3.51) é a função $X(t, t_i)$ dada por

$$X(t, t_i) = \alpha_0 \sqrt{\frac{2h}{M\omega}} \cos\omega t + C e^{\omega t_i} \quad (3.52)$$

onde C é uma constante que determina o espaçamento das curvas descritas por (3.52).

Para o pacote gaussiano anteriormente tratado, só podemos obter uma equação geral $X(t, t_i)$ mediante restrições sobre os valores de "t". Aqui, diversamente, a solução obtida é genérica e, portanto, permite uma descrição temporal completa da evolução dos estados coerentes. Observamos que para $t = 0$, as velocidades se tornam

$$v = 0, \quad v_i = \omega x \quad \text{e} \quad x = c \exp.(\omega t_i)$$

que são as mesmas obtidas para o estado fundamental do oscilador harmônico unidimensional, isto é, usualmente, para $t = 0$, devemos ter $|\alpha\rangle = \Psi_\alpha(X, 0)$.

A função hamiltoniana hidrodinâmica H_f pode então ser escrita a partir da função momento P_f que é:

$$P_f = m[v + iv_i] = -\alpha_0 \sqrt{2\hbar m \omega} \sin \omega t + im\omega C e^{i\omega t_i} \quad (3.53)$$

Tomando a forma geral da função hamiltoniana hidrodinâmica dada por (1.62) temos:

$$H(x, t) = -\hbar\omega\alpha_0^2 e^{-2i\omega t} + \alpha_0 x \sqrt{2\hbar m \omega^3} e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (3.54)$$

ou, explicitando $X(t, t_i)$ conforme aparece na equação (3.52), uma forma alternativa em termos dos parâmetros "t" e "t_i" pode ser escrita. De fato,

$$H(t, t_i) = \hbar\omega\alpha_0^2 + \alpha_0 \omega C e^{-i\omega(t+it_i)} + \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (3.55)$$

Em concreto, a formulação hidrodinâmica permitiu-nos obter uma equação de trajetória (equação 3.52), estimar os valores médios da energia e na seqüência, facilitar a análise das relações de incerteza energia-tempo.

3.5. As relações de incerteza energia-tempo.

Para o estabelecimento direto da relação de incerteza energia-tempo no formalismo hidrodinâmico, suporemos que um operador tempo adequado - sobre o qual falaremos mais adiante (sec. 3.6) - agindo sobre a função de onda fornece uma equação formalmente análoga à equação (1.3), a saber,

$$\hat{T}\Psi = (t + i t_i) \Psi \quad (3.56)$$

onde identificaremos a variável temporal τ_f com

$$\tau_f = (t + i t_i) \quad (3.57)$$

mantendo no formalismo hidrodinâmico sua característica peculiar de tratar com funções ao invés de operadores, como na formulação usual.

Definiremos, ainda, em analogia com a formulação usual, os valores médios da função τ_f como:

$$\begin{aligned} \overline{\tau_f^2} &= \overline{\tau^* \tau} = \overline{t^2} + \overline{t_i^2} \\ \overline{\tau_f}^2 &= \overline{\tau} \overline{\tau^*} = \overline{t}^2 + \overline{t_i}^2 \end{aligned} \quad (3.58)$$

de modo que a dispersão na variável temporal do formalismo hidrodinâmico, definida como:

$$\Delta\tau_f = \sqrt{\overline{\tau_f^2} - \overline{\tau_f}^2} \quad (3.59)$$

torna-se:

$$\Delta\tau_f = \sqrt{(\Delta t)^2 + (\Delta t_i)^2} \quad (3.60)$$

onde fizemos $(\Delta t)^2 = \overline{t^2} - \overline{t}^2$ e, analogamente, $(\Delta t_i)^2 = \overline{t_i^2} - \overline{t_i}^2$.

Nosso objetivo é, então, estabelecer de maneira direta as relações de incerteza entre a energia e o tempo utilizando a variável temporal hidrodinâmica τ_f aqui introduzida, testando seu comportamento nos casos limites e verificando sua aplicabilidade futura em termos de uma analogia com o operador tempo já existente na literatura.

Passamos à investigação das dispersões nas componentes "t" e "t_i" da variável temporal para dois casos particulares de real interesse: o pacote gaussiano e os estados coerentes do oscilador harmônico.

a) Pacote gaussiano.

Retomemos a equação de trajetória (3.46) obtida para

o pacote gaussiano fazendo-se t muito pequeno. Analisemos agora o comportamento da componente " t_i " da variável temporal sob circunstância de que $t = 0$. Neste caso, a equação (3.46) se reescreve:

$$\begin{aligned} X &= \varepsilon e^{\beta t_i} && \text{para } x \geq 0 \\ X &= -\varepsilon e^{\beta t_i} && \text{para } x < 0 \end{aligned} \quad (3.61)$$

Para $x \geq 0$, fazemos

$$t_i = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{X}{\varepsilon} \right) \quad (3.62)$$

onde $\beta = \frac{2h}{ma^2}$

Como o que nos interessa são as dispersões, devemos usar a relação

$$\Delta t_i = \frac{1}{\beta} \sqrt{\overline{\ln^2 x} - \overline{\ln x}^2} \quad (3.63)$$

pois a dispersão Δt_i independe da escolha da constante ε , que determina o espaçamento entre as curvas descritas por (3.61).

Para obtenção de (3.63) devemos resolver:

$$\overline{\ln^2 x} = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \ln^2 |x| dx \quad (3.64)$$

$$\overline{\ln x} = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \ln |x| dx$$

já que $|\Psi|_{t=0}^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-\frac{2x^2}{a^2}}$ e o termo $|x|$ aparece para permitir uma integração entre $-\infty$ e $+\infty$ que independe da escolha de ε . Assim, podemos reescrever:

$$\overline{\ln^2 x} = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \ln^2 |x| dx \quad (3.65)$$

$$\overline{\ln x} = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \ln |x| dx$$

Recorrendo ao resultados:

$$\int_0^{\infty} e^{-Y^2} (\ln y) dy = \frac{\sqrt{\pi}}{8} [(\mathbb{C} + \ln 4)^2 + \frac{\pi^2}{2}] \quad (3.66)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\mu Y^2} \ln y dy = -\frac{1}{4} [\mathbb{C} + \ln 4\mu] \frac{\sqrt{\pi}}{\mu}$$

obtemos as integrais que aparecem em (3.65) e a dispersão Δt_i da da na equação (3.63) é:

$$\Delta t_i \approx 0.55 \frac{ma^2}{h} \quad (3.67)$$

Procuramos agora a dispersão na energia a partir dos valores médios da função hamiltoniana definida em (2.16) e (2.17) que já mostramos ser equivalentes aos valores esperados da formulação usual. Então,

$$H_f = \frac{1}{2} m V_g^2 - \frac{2h^2}{ma^4} x^2 - \frac{2i h V_g}{a^2} x + \frac{h^2}{ma^2} \quad (3.68)$$

ou, diretamente,

$$\overline{H_f} = \frac{1}{2} m V_g^2 + \frac{1}{2} \frac{h^2}{ma^2} \quad (3.69)$$

pois, $\overline{X} = 0$, $\overline{X^2} = \frac{a^2}{4}$.

Igualmente, como $\overline{H_f^2} = H_f^* H_f$, vem:

$$|\overline{H_f}|^2 = \frac{4h^4}{m^2 a^8} x^4 + \frac{1}{4} m^2 V_g^4 + \frac{2h^2 V_g^2}{a^4} x^2 - \frac{4h^4}{m^2 a^6} x^2 + \frac{h^2}{a^2} V_g^2 + \frac{h^4}{m^2 a^4} \quad (3.70)$$

ou, diretamente,

$$|\overline{H_f}|^2 = \overline{H_f^2} = \frac{1}{4} m^2 V_g^4 + \frac{1}{4} \frac{h^4}{m^2 a^4} + \frac{1}{2} \frac{V_g^2 h^2}{a^2} \quad (3.71)$$

pois, $\overline{X^4} = \frac{3}{16} a^4$. Então a dispersão buscada é:

$$\begin{aligned} (\Delta H_f)^2 &= (\Delta E)^2 = \overline{H_f^2} - \overline{H_f}^2 \\ (\Delta E)^2 &= \frac{1}{2} \frac{h^4}{m^2 a^4} + \frac{h^2 V_g^2}{a^2} \end{aligned} \quad (3.72)$$

As dispersões na variável temporal hidrodinâmica e na energia dadas por (3.59) e (3.72) são, respectivamente,

$$\Delta\tau_f = \sqrt{(\Delta t)^2 + (0.55)^2 \frac{m^2 a^4}{h^2}} \quad (3.73)$$

e

$$\Delta E = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{h^4}{m^2 a^4} + \frac{h^2 V_g^2}{a^2}}$$

onde deixamos Δt apenas indicado para explicitá-lo posteriormente. Todavia, sabemos que Δt deve comportar-se de maneira semelhante a Δt_i (sua dependência com a largura do pacote deve ser semelhante).

Concretamente, se no pacote gaussiano dado em (3.39) considerarmos $a \gg 1$, obtemos uma autofunção para a partícula livre normalizada numa caixa, na forma

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{ik_0 x} e^{i\phi} \quad (3.74)$$

o que implicaria num valor bem definido para a energia. De fato, em (3.69) vemos que $\bar{H}_f = 1/2 m V_g^2$ e, portanto,

$$\Delta H_f \rightarrow 0 \quad \text{se} \quad a \rightarrow \infty$$

Por outro lado, esperamos que a dispersão numa variável temporal conveniente introduzida deva tornar-se muito grande para não violar a relação de incerteza energia-tempo. De fato, em (3.73)

$$\Delta\tau_f \rightarrow \infty \quad \text{se} \quad a \rightarrow \infty$$

Desse modo, estabelecemos o produto de incerteza energia-tempo como:

$$\Delta E \Delta\tau_f = h \sqrt{\left[\frac{1}{2} \frac{h^4}{m^2 a^4} + \frac{V_g^2}{a^2} \right] \Delta t^2 + 0.15 + 0.3 \frac{m^2 a^2 V_g^2}{h^2}} \quad (3.75)$$

e, usando o fato ilustrado pela equação (3.41), podemos também escrever:

$$\langle \bar{t} \rangle = \frac{\bar{x}}{V_g} = \frac{a}{2V_g}$$

ou geralmente, $(\Delta t)^2 = \frac{a^2}{4V_g^2}$. Assim, a equação (3.75) torna-se:

$$\Delta E \Delta \tau_f = \frac{h}{2} \sqrt{1.6 + \frac{1}{2} \frac{h^2}{m^2 a^2 V_g^2} + 1.2 \frac{m^2 a^2 V_g^2}{h^2}} \quad (3.75')$$

o que nos permite escrever,

$$\Delta E \Delta \tau_f \geq \frac{h}{2} \quad (3.76)$$

que representa o produto de incerteza mínimo desejado, uma vez que utilizamos uma expressão particular para o cálculo da dispersão em "t".

Vimos, pois, como a variável temporal hidrodinâmica pode auxiliar-nos na obtenção de um valor estimado, porém essencialmente correto, para as relações de incerteza. Este fato marca um resultado bastante importante no desenvolvimento do formalismo.

b) *Os estados coerentes do oscilador harmônico.*

Faremos uso da equação de trajetória para inspecionar o comportamento da dispersão na componente "t" da variável temporal hidrodinâmica $\Delta \tau_f$ anteriormente definida.

Sabemos que para uma função da forma $X = X(t, t_i)$ a diferença Δx é dada por:

$$\Delta x = \frac{\partial x}{\partial t}(t, t_i) \Delta t + \frac{\partial x}{\partial t_i}(t, t_i) \Delta t_i \quad (3.77)$$

Por outro lado, de acordo com as definições (1.7) temos:

$$v = \left. \frac{\partial x}{\partial t}(t, t_i) \right|_{t_i = \text{cte}} ; \quad v_i = \left. \frac{\partial x}{\partial t_i}(t, t_i) \right|_{t = \text{cte}}$$

e, então,

$$\Delta x = v \Delta t + v_i \Delta t_i \quad (3.78)$$

Tomando o valor médio dessa expressão, vem:

$$\overline{\Delta x} = \overline{v} \Delta t + \overline{v_i} \Delta t_i \quad (3.79)$$

Suporemos que (3.79), Δx , Δt e Δt_i sejam constantes e que identificaremos tais termos com as dispersões nas variáveis X , t , t_i respectivamente. Assim sendo, a equação (3.79) tornar-se-á:

$$\Delta x = \overline{v} \Delta t + \overline{v_i} \Delta t_i \quad (3.80)$$

e como sabemos da seção 2.1 (equação 2.6) que $\overline{v_i} = 0$, ficamos diretamente com:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\overline{v}} \quad (3.81)$$

que é uma expressão muito semelhante àquela introduzida por MANDELSTAM e TAMM⁽⁴³⁾, a saber:

$$\Delta t = \frac{\Delta \Omega}{\overline{d \langle \Omega \rangle}} \quad (3.82)$$

onde Ω é algum observável tal que Δt representa o tempo médio que o observável Ω requer para mudar por uma quantidade da ordem de seu desvio padrão.

Retomando a equação (3.81) devemos calcular o valor médio da componente \vec{v} da velocidade. Isto deve ser feito para valores fixos de " t_i ", já que $\vec{v} = \vec{v}(t, t_i)$, em geral.

A velocidade \vec{v} é dada na equação (3.50) e ali explicitando o valor de $\langle P \rangle_\alpha$, temos:

$$v = -\alpha_0 \sqrt{\frac{2h\omega}{m}} \sin \omega t \quad (3.83)$$

Da equação de trajetória temos também:

$$X(t, t_i) - \epsilon(t_i) = a \cos \omega t \quad (3.84)$$

se, em (3.52) fizermos as mudanças abaixo:

$$\epsilon(t_i) = C e^{\omega t_i} = \text{cte.}, \quad a = \alpha_0 \sqrt{\frac{2h}{M\omega}}$$

Introduzimos agora a nova variável $y = x(t, t_i) - \varepsilon(t_i)$ de modo que a equação (3.84) fornece:

$$\frac{y}{a} = \cos \omega t \quad \text{sen} \omega t = \sqrt{1 - \left(\frac{y}{a}\right)^2} \quad (3.85)$$

A velocidade dada em (3.85) é agora reescrita em termos da equação (3.85). Isto é,

$$v = -\alpha_0 \sqrt{\frac{2h\omega}{M}} \sqrt{1 - \left(\frac{y}{a}\right)^2} \quad (3.86)$$

e a função $|\psi_\alpha|^2$ independe de y se nela introduzirmos o resultado fornecido pela equação de trajetória (3.52).

Finalmente,

$$\bar{v} = \frac{-\alpha_0 \sqrt{\frac{2h\omega}{M}} \int_{-a}^{+a} |\psi_\alpha|^2 \sqrt{1 - \left(\frac{y}{a}\right)^2} dy}{\int_{-a}^{+a} |\psi_\alpha|^2 dy} \quad (3.87)$$

onde $dy = dx$ e $|\psi_\alpha|^2 = \left(\frac{M\omega}{h\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{M\omega}{h} \varepsilon^2}$.

Efetuada as integrações que aparecem em (3.87) obtemos:

$$\bar{v} = \alpha_0 \pi \sqrt{\frac{h\omega}{2m}} \quad (3.88)$$

Levando este resultado em (3.81) e explicitando o valor da dispersão espacial, ficamos com:

$$\Delta t = \frac{1}{\pi \alpha_0 \omega} \quad (3.89)$$

observa-se que para estados estacionários ($\alpha_0 = 0$ corresponde ao estado fundamental do oscilador harmônico) $\Delta t \rightarrow \infty$, pois $\Delta H = 0$ e para $\alpha_0 = \infty$ (oscilador macroscópico), $\Delta t \rightarrow 0$, como esperávamos.

Devemos agora encontrar a dispersão na componente " t_i ". De maneira semelhante ao que fizemos para o cálculo da dispersão em " t ", fixaremos o valor de " t ". Da equação de trajetória (3.52) temos:

$$C e^{\omega t_i} = x - \langle x \rangle_\alpha \quad (3.90)$$

donde:

$$t_i = \frac{1}{\omega} \ln \frac{1}{C} (x - \langle x \rangle_\alpha) \quad (3.91)$$

Fixar o valor de "t" significa encarar $\langle X \rangle_\alpha$ como constante e X como independente de "t". Podemos, portanto, promover nova substituição de variáveis, escrevendo:

$$z = X - \langle X \rangle_\alpha \quad e \quad dz = dx \quad (3.92)$$

e a densidade de probabilidade $|\psi|^2$ como:

$$|\psi_\alpha|^2 = \left(\frac{M\omega}{h\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{M\omega}{h} z^2} \quad (3.93)$$

Agora o cálculo da dispersão Δt_i torna-se o mesmo cálculo desenvolvido para o pacote gaussiano do exemplo anterior. A dispersão será:

$$\Delta t_i = \frac{1}{\omega} \sqrt{\overline{\ln^2 z} - \overline{\ln z}^2} \quad (3.94)$$

que também independe do espaçamento entre as curvas em (3.52). Da mesma forma ainda teremos:

$$\overline{\ln^2 z} = 2 \sqrt{\frac{M\omega}{h\pi}} \int_0^\infty e^{-\frac{M\omega}{h} z^2} \ln^2 z \, dz$$

$$\overline{\ln z} = 2 \sqrt{\frac{M\omega}{h\pi}} \int_0^\infty e^{-\frac{M\omega}{h} z^2} \ln z \, dz$$

e uma vez realizadas as integrações que vêm dadas nos resultados gerais (3.66) a dispersão Δt_i vem dada por:

$$\Delta t_i \approx \frac{1.1}{\omega} \quad (3.95)$$

É possível e desejável unir as dispersões particulares de "t" e "t_i" na dispersão da variável temporal hidrodinâmica $\Delta \tau_f$ e assim obter:

$$\Delta\tau_f = \sqrt{\frac{1.21}{\omega^2} + \frac{1}{\alpha_0^2 \omega^2 \pi^2}} \quad (3.96)$$

Usando a hamiltoniana hidrodinâmica H_f escrita para os estados coerentes do oscilador harmônico, pode-se calcular diretamente a dispersão ΔH_f que é:

$$\Delta H_f = h\omega \alpha_0 \quad (3.97)$$

que coincide, como já se demonstrou genericamente, com a dispersão na energia prevista pela formulação usual.

O próximo passo é fazer o produto da equação (3.96) pela equação (3.97) que reconhecemos como o produto de incerteza energia-tempo em sua versão hidrodinâmica. Temos então:

$$\Delta H \Delta\tau_f = h \sqrt{1.21 \alpha_0^2 + \frac{1}{\pi^2}} \quad (3.98)$$

observamos que a equação (3.98) dá-nos o produto de incerteza energia-tempo para os estados coerentes do oscilador harmônico como dependente do valor de α_0 . Todavia, para que (3.98) não violasse as relações de incerteza estabelecidas usualmente, α_0 deveria estar restrito a um conjunto de valores. No entanto, não há restrição sobre os possíveis valores de α_0 , de modo que aparentemente (3.98) viola as referidas relações. Antes disso, porém, assumimos que o resultado representado por (3.98) é apenas aproximadamente correto. Em outros termos, os métodos desenvolvidos até aqui para o cálculo das dispersões nas componentes temporais mostrou-se muito bom no caso do pacote gaussiano, mas não completamente correto para os estados coerentes como ilustra a equação (3.98). Este resultado pode ser explicado, entre outras coisas, a partir de algumas aproximações que fizemos, como a definição de dispersão que introduzimos em (3.81). É inegável, no entanto, que o método pode ser aperfeiçoado para assegurar o estabelecimento correto do produto de incerteza energia-tempo, com o auxílio da componente temporal imaginária.

3.6. O operador tempo e a formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

As reflexões tecidas nesta seção devem ser tomadas como conjecturas cuja finalidade manifesta é aclarar algumas coisas e sugerir outras. Sabemos que o operador tempo (ou, mais precisamente, o seu estabelecimento em uma forma rigorosa e definitiva) é um problema de grande interesse na Mecânica Quântica e as dificuldades que o envolvem não são de modo algum desprezíveis, como já tivemos ocasião de sugerir brevemente na seção I deste capítulo. Um trabalho bastante importante neste sentido ainda está por ser feito em conexão com os resultados propostos pela formulação hidrodinâmica que até aqui tem sido desenvolvida. Deve-se, é claro, observar uma característica fundamental da formulação hidrodinâmica que é o fato de ela ocupar-se de funções e não de operadores. Nosso objetivo nesta seção é fazer alguns desenvolvimentos - em termos de funções - que nos possam levar a alguma forma nova de encarar o problema e quiçá, sugerir alguns resultados para uma abordagem futura.

Começemos por reescrever a equação de trajetória obtida para os estados coerentes do oscilador harmônico dada por (3.52), que é:

$$X(t, t_i) = \alpha_0 \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \cos \omega t + C e^{i\omega t} \quad (3.52)$$

Como possuímos as expressões para as componentes da velocidade quântica \vec{v} e \vec{v}_i podemos também utilizar a função momento definida por (3.53) e teremos:

$$P_f = -\alpha_0 \sqrt{2\hbar m\omega} \sin \omega t + i m\omega C e^{i\omega t} \quad (3.53)$$

Ora, multiplicando a equação (3.52) por $(-im\omega)$ e somando-a com a equação (3.53) teremos:

$$\frac{1}{2} (m\omega X + i P_f) = \alpha_0 \sqrt{\hbar m\omega} e^{-i\omega t} \quad (3.99)$$

que pode ser transformada em:

$$\frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} P_f \right] = \alpha_0 e^{-i\omega t} \quad (3.100)$$

Por outro lado, multiplicando (3.52) por $m\omega$ e (3.53) por $-i$ e somando-as, vem:

$$\frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{h}} x - \frac{i P_f}{\sqrt{hm\omega}} \right] = \alpha_0 e^{i\omega t} + C \sqrt{\frac{2m\omega}{h}} e^{\omega t} i \quad (3.101)$$

Desta forma, ficamos com o seguinte conjunto de equações:

$$a_f^+ - C \sqrt{\frac{2m\omega}{h}} e^{\omega t} i = \alpha_0 e^{i\omega t} \quad (3.102)$$

$$a_f = \alpha_0 e^{-i\omega t} \quad (3.103)$$

onde identificamos as funções a_f^+ e a_f respectivamente com:

$$a_f^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{h}} x - i \frac{P_f}{\sqrt{hm\omega}} \right] \quad (3.104)$$

$$a_f = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{h}} x + i \frac{P_f}{\sqrt{hm\omega}} \right] \quad (3.105)$$

Podemos agora manejar as equações (3.102) e (3.103) para explicitar as variáveis temporais. De fato, de (3.103) podemos escrever, diretamente:

$$t = \frac{i}{\omega} (\ln a - \ln \alpha_0) \quad (3.106)$$

e multiplicando (3.102) por (3.103), teremos:

$$a_f^+ a_f - C \sqrt{\frac{2m\omega}{h}} a_f e^{\omega t} i = \alpha_0^2 \quad (3.107)$$

donde:

$$t_i = \frac{1}{\omega} [\ln(a_f^+ a_f - \alpha_0^2) - \ln a_f + \text{ctes}] \quad (3.108)$$

Ora a semelhança de forma que há entre as expressões (3.104) e (3.105) e os operadores de "criação" e "aniquilação", respectivamente, é bastante visível. As equações (3.106) e (3.108) estão estabelecidas por funções. Todavia, raciocinando em termos de valores médios, demonstramos a equivalência no cálculo dos valores médios de momento e da energia entre os operadores da for-

mulação usual e as funções da formulação hidrodinâmica. Identificaremos, portanto, as equações (3.104) e (3.105) com os operadores mencionados e reescreveremos as expressões (3.106) e (3.108) como operadores, a saber:

$$\hat{t}_{op} = \frac{i}{\omega} [\ln a - \ln \alpha_0] \quad (3.106')$$

$$\hat{t}_{iop} = \frac{1}{\omega} [\ln(a^+ a - \alpha_0^2) - \ln a + \text{ctes}] \quad (3.108')$$

Na seção precedente, referimo-nos a um operador tempo adequado que devesse cumprir uma relação do tipo

$$\hat{\tau}_{op} \Psi = (t + i t_i) \Psi$$

onde $\tau_f = (t + i t_i)$. Ora, a partir das equações (3.106') e (3.108') podemos escrever:

$$\hat{\tau}_{op} = \hat{t}_{op} + i \hat{t}_{iop} \quad (3.109)$$

e

$$\hat{\tau}_{op}^* = \hat{t}_{op} - i \hat{t}_{iop} \quad (3.110)$$

Ora, é possível construir o operador:

$$\hat{\tau}_{op}^* = \frac{i}{\omega} [2 \ln a + \ln(a^+ a - \alpha_0^2) + \text{ctes}] \quad (3.110)$$

cujo comutador com o Hamiltoniano dá:

$$[\hat{H}, \hat{\tau}_{op}^*] = -2 i \hbar \quad (3.111)$$

Além disso, num caso particular em que consideramos somente estados estacionários, não deve ter muito sentido uma expressão como (3.106'), já que a componente real da variável temporal não pode oferecer maiores informações sobre o sistema. Assim, usamos a componente imaginária para auxiliar a descrição temporal e, pondo $\alpha_0 = 0$ em (3.108') teremos:

$$\hat{t}_{iop} = \frac{1}{\omega} [\ln a^+] \quad (3.112)$$

que obedece à relação:

$$[\hat{H}, \hat{t}_{iop}] = + i h \quad (3.113)$$

Como os operadores definidos em (3.106') e (3.108') não são hermitianos, as relações (3.111) e (3.112) não nos podem definir formalmente uma relação de incerteza entre o operador Hamiltoniano e o "operador" tempo aqui tentado.

No entanto, se introduzirmos uma expressão para o operador tempo para o Oscilador Harmônico definida por FUJIWARA (29) que é:

$$\hat{T}_{op} = \frac{i}{2\omega} [\ln a - \ln a^+] \quad (3.113)$$

observamos uma certa semelhança com os operadores por nós introduzidos, sobretudo em (3.110). Esta semelhança externa nos permite conjecturar acerca da possibilidade de um desenvolvimento adequado da formulação hidrodinâmica servir de base às tentativas de estabelecimento do operador tempo na formulação usual. É possível que, conhecendo a forma da variável temporal hidrodinâmica, encontre-se uma maneira genérica de construir o operador tempo para um dado problema.

Fica portanto registrada uma possibilidade contida na formulação hidrodinâmica que, em termos de futuro, cremos dever explorar-se.

CAPÍTULO IV

CONCLUSÕES

No presente estágio de nosso trabalho - que não deve dar-se por concluído, uma vez que muitas outras coisas ainda podem ser tentadas - algumas considerações de caráter conclusivo se fazem necessárias.

Observamos que já na primeira parte do trabalho, a formulação hidrodinâmica original mostrou ser possível a separação da Equação de Schrödinger em duas outras equações de conservação clássicas. Este já era um resultado conhecido. Todavia, a correta aplicação dos resultados fornecidos por um tal formalismo sugere que, pelo menos para alguns problemas particulares, esta versão original da formulação hidrodinâmica se apresenta mais acessível matematicamente. Demos disso um exemplo resolvido anteriormente, que é o potencial de Barbanis, cuja solução via Equação de Schrödinger é relativamente difícil. Aqui também se introduziram os parâmetros temporais, cujas consequências no desenvolvimento posterior do formalismo serão discutidas adiante.

Contudo, o passo seguinte foi generalizar uma abordagem clássica para a Mecânica Quântica. Como dissemos, a idéia não é nova. Ainda há pouco tempo, GILSON⁽⁴⁴⁾ mostrou que a versão de Schrödinger da Mecânica Quântica pode ser derivada de um princípio variacional clássico. Esta abordagem clássica aqui desenvolvida parte de uma função lagrangeana de estrutura semelhante às lagrangeanas habituais, só que como uma função complexa. Apesar de aparentemente estranho, este fator permitiu a generalização do Princípio de Mínima Ação, que gerou da parte real, uma equação de movimento (que conduz diretamente a uma equação de conserva -

ção de energia) e da parte imaginária, uma equação que conduz à equação de continuidade para um fluido clássico. Neste ponto, esta nova abordagem clássica mostrou-se alternativa até mesmo em relação à própria versão original da formulação hidrodinâmica, pois resgatamos, com a generalização do Princípio de Hamilton, as duas equações que se obtêm por separação da Equação de Schrödinger.

Entretanto, a analogia clássica foi mantida e, prosseguindo na mesma direção, foi feito o desenvolvimento de uma formulação hidrodinâmica hamiltoniana, pois a função lagrangeana obtida permitiu encontrar uma função hamiltoniana hidrodinâmica cujo valor médio é o valor médio da energia dos diversos sistemas a que se aplica. Da função hamiltoniana obtêm-se equações quânticas análogas às equações de Hamilton. Com esses resultados forma-se a base para uma abordagem alternativa com profundas analogias clássicas.

Um dos problemas que acreditamos deva ser abordado com as equações obtidas, sobretudo com a função hamiltoniana hidrodinâmica, é o efeito BOHM-AHARONOV, que já foi estudado por CASATI e GUARNIERI⁽⁴⁵⁾ desde o ponto de vista hidrodinâmico, mas que agora poderia ser revisto e, possivelmente, fornecer resultados mais decisivos.

Também nessa abordagem mais geral desenvolvida, foi possível escrever uma forma ligeiramente diferente para o potencial quântico que nos parece mais simétrica que a anterior (comum ao formalismo hidrodinâmico original) por envolver agora as duas componentes da velocidade quântica. Também YUSSOUFF⁽⁴⁶⁾ encontrou forma semelhante para o potencial quântico. Todavia, essa forma nova, parece-nos mais apta a sugerir que o potencial quântico além da interpretação sugerida por BOHM⁽²¹⁾ possa ser responsável pela interação da partícula com um "campo de fundo" conforme proposto por DE LA PEÑA⁽¹⁵⁾.

O desenvolvimento de uma formulação hidrodinâmica relativística, apesar de ser apenas uma tentativa, envolve a introdução de uma segunda componente temporal, a componente imaginária " t_i ". Um estudo bidimensional já foi tratado por LEWIS⁽⁴⁷⁾ e não é de modo algum estranha a idéia de um tempo multidimensional em relatividade, como atestam os trabalhos de ZIINO⁽⁴⁸⁾ e

PAPAS⁽⁴⁹⁾ por exemplo. A idéia de uma formulação hidrodinâmica relativística mostrou-se bastante alentadora, sobretudo levando-se em conta o resultado obtido para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, cuja precisão é mais significativa que aquela correspondente à Equação de Klein-Gordon.

Na seqüência, no CAPÍTULO II demonstrou-se a equivalência no cálculo dos valores médios das funções hidrodinâmicas e dos operadores da formulação usual da Mecânica Quântica de uma maneira genérica, contradizendo uma importante previsão para o cálculo do valor médio do Hamiltoniano quadrático do oscilador harmônico, feito por DE LA PEÑA⁽¹⁵⁾ que se asseverava serem diferentes os cálculos desenvolvidos pela formulação estocástica e pela formulação usual. Ora, a generalidade da demonstração não deixa margem de dúvida quanto à completa equivalência. Todavia, este é um resultado novo, que atribuímos à função hamiltoniana hidrodinâmica, e ao método mais conhecido de calcular valores médios com o uso de funções. Neste, sentido, também, as previsões de ROBINSON⁽⁵⁰⁾ devem ser reconsiderados.

Como sugestão para desenvolvimentos posteriores, registramos a possibilidade de que os cálculos dos valores médios venham a ser desenvolvidos em integrações sobre as componentes temporais. Em outras palavras, talvez se possa encontrar uma maneira genérica para o cálculo dos valores médios que esteja definida de modo a explorar as informações contidas nos parâmetros temporais ou, alternativamente, nas componentes da velocidade quântica.

A sugestão anterior deve-se ao fato de que inicialmente a introdução dos parâmetros temporais, sobretudo " t_i " tinha por finalidade a obtenção das equações de trajetória. De fato, na primeira parte do CAPÍTULO III isto é feito de uma maneira bastante satisfatória, para alguns problemas em particular.

Entretanto, na seqüência foi possível mostrar que as informações contidas nessa componente imaginária do tempo permite tratar das relações de incerteza energia-tempo de maneira direta.

Já no CAPÍTULO II registrou-se de passagem que a incerteza posição-momento pudesse ser devida à existência da velo-

cidade imaginária ou, em termos mais claros, devida à existência da componente imaginária do tempo. Ora, essa componente "imaginária" permitiu estimar o produto de incerteza energia-tempo e forneceu resultados que concordam com os resultados previstos pela formulação usual, que os previu de maneira indireta por não dispor de um operador tempo bem definido e genérico para o cálculo das dispersões.

A introdução da variável temporal hidrodinâmica, permitiu o cálculo das dispersões no tempo (em termos de funções) e da energia (também em termos de funções, graças à equivalência obtida no CAPÍTULO II) e a conseqüente relação de incerteza para o pacote gaussiano e para os estados coerentes do oscilador harmônico, dois casos gerais de grande interesse.

É bem verdade que no caminho, encontramos algumas dificuldades, como o cálculo da dispersão na componente real do tempo. Entretanto, foi possível, mediante considerações adequadas, estimar a dispersão total e estabelecer as relações de incerteza desejadas.

Em caráter conjectural, a observação cuidadosa da variável temporal hidrodinâmica pode sugerir uma forma para o operador tempo, ou seja, conhecendo-se a variável temporal hidrodinâmica, é possível, em princípio, estabelecer uma expressão correspondente a um operador tempo adequado. É claro que o processo não é assim tão simples. Numa situação do tipo

$$\hat{T} \Psi = g \Psi$$

é mais fácil, em geral, conhecendo-se \hat{T} descobrir a função g , do realizar o caminho inverso. Contudo, quando nada se conhece em princípio, na relação acima, o conhecimento da função g , obviamente, aliado a uma boa intuição, pode ser um bom primeiro passo. A esta conclusão nos permitimos chegar observando um operador tempo desenvolvido por FUJIWARA⁽²⁸⁾ para o oscilador harmônico, cuja forma geral é bastante sugestiva em termos de analogia com a função temporal hidrodinâmica, também para o oscilador harmônico (como um caso particular nos estados coerentes) que aqui encontramos.

BIBLIOGRAFIA

- |01|. MADELUNG, E., Z. Phys., 40, 322-326, 1926.
- |02|. DE BROGLIE, L., Compt. Rend., 183,447 - 1926; 185, 380 - 1927.
- |03|. DE BROGLIE, L., *Física y Microfísica*, trad. espanhola de Cortes Plá, Espasa-Calpe, Buenos Aires, 1951, p.159.
- |04|. BOHM, D., Phys. Rev. 85,166 - 1952; 85,180 - 1952.
- |05|. TAKABAYASI, T., Prog. Theor. Phys. Vol. 8/2,143 - 1952 ; Vol. 09/3, 1953.
- |06|. VIGIER, J.P., ver ref. 12, nota nº 09, p. 129.
- |07|. NELSON, E., Phys. Rev. 150,1079 - 1966.
- |08|. HIRSCHFELDER, J., J. Chem. Phys., 67,5477 - 1977; HIRSCHFELDER, J.; PALKE, A.C.W. *Quantum Mechanical Stream Lines*, (University of Wisconsin), 1974.
- |09|. DE LA PEÑA, L. and COLIN, L.G., J. Math. Phys., 9,916 - 1968.
- |10|. BUNGE, M., Am. J. Phys., 24,272 - 1956.
- |11|. JAMMER, M. *The Philosophy of Quantum Mechanics*, Wiley, New York, 1974.

- |12|. BOHM, D. *Causality and Chance in Modern Physics*. Routledge & Kegan Paul Ltdª, London, 1967.
- |13|. JAMMER, M. op. cit., p. 33
- |14|. GHIRARDI, G.C.; OMERO, C.; RIMINI, A. and WEBER, T. *Nuovo Cim.* Vol. 1/3, 1 - 1978.
- |15|. DE LA PEÑA, L. *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Compañía Editorial Continental S.A., México, 1980.
- |16|. BUONOMANO, V., *Nuovo Cimento*, 57B/1, 1980.
- |17|. NEWMAN, W.I. and TORSON, W.R., *Phys. Rev. Lett.*, Vol 29/19, 1972.
- |18|. KUHNEN, C.A., *Aplicações da Formulação Hidrodinâmica a Sistemas Moleculares*. Tese de Mestrado, UFSC, 1981.
- |19|. LANDAU, L. e LIFCHITZ, E., *Mecânica*, Hemus Liv. e Editora Ltda, São Paulo, pp.12-18.
- |20|. CABRAL, F., a ser publicado.
- |21|. BOHM, D., *Phys. Rev.* 85,166 - 1952.
- |22|. PHILIPPIDIS, C.; DEWDNEY, C. and HILEY, B.J., *Nuovo Cimento*. 52B/1 15 - 1979.
- |23|. BUTKOV., E. *Física Matemática*. Ed. Guanabara Koogan S.A., Rio de Janeiro, 1978, pp. 576-578.
- |24|. GOLDSTEIN, H. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, Read., Mass., 1974, p. 215.
- |25|. FALCO, D.; MARTINO, S.; SIENA, S., *Phys. Rev. Lett.* Vol. 49/3 183 - 1982.

- [26]. PAULI, W. *Handbuch der Physik*. Vol. v/1, S. Verlag, 1958, p. 60.
- [27]. ROSEMBAUM, D.M., *J. Math. Phys.*, Vol. 10/7, 1127 - 1969.
- [28]. FUJIWARA, I., *Progr. Theor. Phys.*, Vol. 62 , 1179 - 1979.
- [29]. FUJIWARA, I., *Progr. Theor. Phys.*, Vol. 64/1, 1980.
- [30]. GOTŌ, T.; NAKA, S. and YAMAGUCHI, K., *Progr. Theor. Phys.* Vol. 64/1 - 1980; *Progr. Theor. Phys.*, Vol. 66/6, 1915, 1981.
- [31]. GOTŌ, T.; YAMAGUCHI, K. and SUDŌ, N., *Progr. Theor. Phys.* Vol. 66, 5 - 1981.
- [32]. D TEER HAAR *Problems in Quantum Mechanics*. Pion Limited , 207, London, 1975.
- [33]. FOCK, V.A., *Sov. Phys. JETP* 15. 784 - 1962.
- [34]. EBERLY, J. and SINGH, L.P.S., *Phys. Rev. D*, Vol. 7/2 359 - 362, 1973.
- [35]. BLANCHARD, C.H., *Am. J. Phys.*, 50(7), 642-645, 1982.
- [36]. TANNOUDJI, C.C.; DIU, B. and LALOË, F. *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, 1977, p.64.
- [37]. SCHRÖDINGER, E., *Naturwiss.*, 14,664 - 1926.
- [38]. KLAUDER, J.R. and SUDARSHAN, E.G.G. *Fundamentals of Quantum Optics*. W.A. Benjamin, Inc., 1968, pp. 105-146.
- [39]. SARGENT., M; SCULLY, M.O. and LAMB Jr., W., *Laser Physics* , Addison-Wesley, 1974, pp. 242-256 e pp. 410-418.
- [40]. LOUISELL, W.H. *Quantum Statistical Properties of Radiation*. Wiley, New York, 1973, pp. 104-109

- [41]. GLAUBER, R.J. *Quantum Theory of Coherence*, in *Quantum Optics*. ed. by KAY, S.M., MAITLAND, A., Academic Press, 1970, pp. 53-125; *Coherence and Quantum Detection* in *Proced. of the Int. School of Physics "Enrico Fermi" - Quantum Optics*. Academic Press, New York, 1966, pp.15-56.
- [42]. GLAUBER, R.J., *Phys. Rev.* 131, 2766 - 1963.
- [43]. MANDELSTAM, L. and TAMM, I., *J. Phys. U.S.S.R.* 9, 249, 1945.
- [44]. GILSON, J.G., *Ann. Int. Henri Poincaré*, sec. A., Vol. XXXII, n° 4, 1980, p. 319-325.
- [45]. CASATI, G. and GUARNIERI, I., *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 42/24, 1579, 1979.
- [46]. YUSSOUFF, M. *Axiomatic Electrodynamics and Microscopic Physics*. Kernforschungsanlage, Jül-Spez-III, April, 1981.
- [47]. LEWIS, B.L., *Spec. in Science and Technology*, Vol 2/5, 1979.
- [48]. ZIINO, G., *Lett. Nuovo Cimento* 24,171 - 1979; *Lett. Nuovo Cimento* 29, 263 - 1980.
- [49]. PAPAS, P.T., *Lett. Nuovo Cimento* 22, 601 - 1978.
- [50]. ROBINSON, M.C., *J. Phys. A, Math. Gen.*, 15 - 1982.