



UNIVERSIDADE FEDERAL DA INTEGRAÇÃO LATINO-AMERICANA
INSTITUTO LATINO AMERICANO DE CIÊNCIAS DA VIDA E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

Dissertação de Mestrado

Foz do Iguaçu-Paraná

2019



UNIVERSIDADE FEDERAL DA INTEGRAÇÃO LATINO-AMERICANA
INSTITUTO LATINO AMERICANO DE CIÊNCIAS DA VIDA E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

Mecânica Quântica Via Método de Hamilton-Jacobi Complexo

Hemerson Ribeiro Duarte

Orientador: Prof. Dr. Shahram Jalalzadeh

Coorientador: Prof. Dr. Abraão Jesse Capistrano de Souza

Foz do Iguaçu-Paraná

2019

Mecânica Quântica via Método de Hamilton-Jacobi Complexo

Hemerson Ribeiro Duarte

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada da Universidade Federal da Integração Latino-Americana (PPGFISA-UNILA) como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Shahram Jalalzadeh

Coorientador: Prof. Dr. Abraão Jesse Capistrano de Souza

Banca Examinadora

Prof. Dr. Shahram Jalalzadeh (Orientador)

Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)

Prof. Dra. Dafni Fernanda Zenedin Marchioro

Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA)

Prof. Dr. Raphael Fortes Infante Gomes

Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA)

Foz do Iguaçu-Paraná

2019

Catálogo elaborado pela Biblioteca Latino-Americana
Catálogo de Publicação na Fonte. UNILA - BIBLIOTECA LATINO-AMERICANA

D812m

Duarte, Hemerson Ribeiro.

Mecânica Quântica Via Método de Hamilton-Jacobi Complexo / Hemerson Ribeiro Duarte. - Foz do Iguaçu, 2019.

91 f.: il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal da Integração Latino-Americana. Instituto Latino-Americano de Ciência da Vida da Natureza. Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada.

Orientador: Shahram Jalalzadeh.

Coorientador: Abraão Jesse Capistrano de Souza.

1. Método Hamilton-Jacobi. 2. Mecânica quântica. 3. Hamilton-Jacobi Quântico - aplicação. I. Jalalzadeh, Shahram, Orient. II. Título.

CDU 530.145

Resumo

Neste trabalho, apresenta-se o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico, tanto em sua formulação clássica, para qual muitos problemas podem ser resolvidos com o auxílio de transformação canônica. O formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico é uma interpretação alternativa da Mecânica Quântica. Uma das vantagens desse formalismo, é que segue de perto a Mecânica Clássica pelo fato de não enfrentar problema de estacionariedade de partículas em estados ligados. A principal característica desse formalismo é que os autovalores de energia do estado ligado podem ser determinados pela variável de ação quântica sem que seja necessário resolver explicitamente a equação dinâmica.

Palavras-chave: Hamilton-Jacobi quântica, mecânica quântica, ação quântica.

Abstract

This paper presents the Hamilton-Jacobi Quantum formalism, both in its classical formulation, for which many problems can be solved with the aid of canonical transformation. The Hamilton-Jacobi Quantum Formalism is an alternative interpretation of Quantum Mechanics. One of the advantages of this formalism is that it closely follows Classical Mechanics in that it does not face the problem of particle stationarity in bound states. The main feature of this formalism is that the bound state energy eigenvalues can be determined by the quantum action variable without explicitly solving the dynamic equation.

Key words: quantum Hamilton-Jacobi, quantum mechanics, quantum action.

“Aos amores da minha vida”

*“A percepção do desconhecido é a mais fascinante das experiências.
O homem que não tem os olhos abertos para o mistério passará pela vida sem ver nada”.*

Albert Einstein

Agradecimentos

Gostaria de agradecer:

- Ao meu orientador, Professor Shahram Jalalzadeh, pela paciência e dedicação, assim como pelo empenho em transmitir o máximo de conhecimentos, facilitando, com muita competência, o meu almejado acesso ao mundo da pesquisa em Física;
- Ao meu coorientador, Professor Abraão Jessé Capistrano pelos ensinamentos e direcionamentos na pesquisa;
- Ao meu primeiro orientador, Professor Rafael Martinez Rodriguez por ter me apresentado a pesquisa, por acreditar no meu trabalho, por inúmeras dicas a respeito da Pós-Graduação em Física;
- Aos membros da Banca examinadora, por aceitarem ceder seus valiosos conhecimentos em Física para avaliar este trabalho;
- Aos Professores do PPGFISA pelos grandes esforços na árdua tarefa de manter viva a Física no Brasil, mesmo com todos os obstáculos que lhes são corriqueiramente impostos;
- Aos Servidores Roberta Markellyn Manfrin Nami e Newton Camargo da Silva Cruz, pelo serviços administrativos prestados com qualidade no PPGFISA, que foram essenciais para o bom andamento do mestrado;
- Aos meus pais Marcy e Valdelirio, por me educarem e me mostrarem, de forma exemplar, que as grandes conquistas na vida, para valerem a pena, requerem grandes esforços;
- À minha filha Lohana, por muito me ensinar e por me dar motivos de querer lutar para da-los um mundo melhor que aquele que encontrei,
- À DS-UNILA pelo suporte financeiro, sem o qual este trabalho não seria possível.

Sumário

Introdução	9
1 Teoria de Hamilton-Jacobi Clássico	11
1.1 A Equação de Hamilton-Jacobi	11
1.2 Modelos de Cenários Unidimensionais	14
1.2.1 Partícula Livre	14
1.2.2 Oscilador Harmônico	15
1.2.3 Oscilador Harmônico Amortecido	16
1.3 Separação de Variáveis	18
2 Teoria de de Broglie-Bohm	23
2.1 História da Teoria de de Broglie-Bohm	23
2.2 Dinâmica de de Broglie	24
2.3 Teoria de Bohm	25
2.4 Teoria de de Broglie-Bohm	25
3 Teoria de Hamilton-Jacobi Quântico	31
3.1 Equação da onda de Schrödinger	31
3.2 Comprimento de onda de de Broglie	36
3.3 Formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico	38
3.3.1 Oscilador Harmônico Quântico	41
3.3.2 Potencial Degrau	44
3.3.3 Probabilidade do Campo de Velocidade	46
4 Cosmologia Quântica	50
4.1 A Mecânica Quântica	52

4.2	Quantização de uma teoria clássica	54
4.3	Operadores e extensões autoadjuntos	56
4.4	O problema do tempo	60
4.5	Teoria de K-essência	62
5	Aplicações	66
5.1	Interpretação de Hamilton-Jacobi Quântico do Mini-superespaço	67
5.2	Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi com Fluido Perfeito	69
5.2.1	Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi com Fluido Perfeito de uma Componente	71
5.3	Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi de um Universo Feito de Poeira e Ra- dição	72
	Considerações Finais	75
A	Potencial Quântico de Bohm e a Equação de Hamilton-Jacobi Quântico	77
B	Vínculos na Relatividade Geral	79
C	Aspectos Matemáticos do Operador Momento	80

Introdução

Desde o surgimento da Mecânica Quântica, tem ocorrido considerável interesse em desenvolver uma teoria determinística da variável oculta não local. A Mecânica Bohmiana (desenvolvida por David Bohm em 1952) fornece uma interpretação alternativa à Mecânica Quântica não-relativista. Na formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica, a função de onda é escrita primeiramente em termos da amplitude real e da função ação real como $\Psi = \text{Re}xp(\frac{iS}{\hbar})$. Substituindo esta função de onda na forma polar na equação de Schrödinger dependente do tempo, produz um sistema de duas equações diferenciais parciais acopladas, a equação de continuidade e a Equação de Hamilton-Jacobi Quântica (EHJQ). Na abordagem analítica de Bohm, as trajetórias quânticas de valor real são geradas pela integração das equações de movimento, incluindo a contribuição do potencial quântico determinado a partir de uma função de onda pré-computada.

O formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico, desenvolvido por Leacock e Padgett em 1983, fornece uma formulação alternativa da Mecânica Quântica não-relativista. Neste formalismo, a função de onda é expressa pela função ação complexa, $\Psi = \text{Re}xp(\frac{iS}{\hbar})$. Como na Mecânica Bohmiana, substituir a função de onda dessa forma polar na equação de Schrödinger dependente do tempo produz a EHJQ de valor complexo. (Esta versão não é o mesmo que no formalismo de Bohm.) Separando a variável tempo para estados estacionários, obtemos a versão de estado estacionário da EHJQ. A principal característica deste formalismo é que os autovalores de energia do estado ligado podem ser determinados pela variável de ação quântica sem explicitamente resolver a equação dinâmica. Este método tem sido usado para obter os autovalores de energia para muitos problemas unidimensionais de estado ligado e problemas separáveis em dimensões para potenciais solúveis.

Além da determinação de autovalores de energia, o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico tem sido usado para obter trajetórias quânticas no espaço complexo. No formalismo Bohm, a

partícula em repouso é geralmente para estados estacionários, porque a velocidade da partícula acaba sendo nula em todos os lugares. Ao contrário, a trajetória complexa quântica de uma partícula pode ser obtida no formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico para estados estacionários e não-estacionários através da Função de Momento Quântico (FMQ), que é analiticamente estendida ao espaço complexo. Esse formalismo foi aplicado a vários exemplos analíticos simples para problemas dependentes do tempo e independentes do tempo. Além disso, para estados estacionários, trajetórias quânticas complexas satisfazendo a EHJQ de valor complexo, foram estudadas analiticamente para a partícula livre, barreira de potencial, potencial degrau, oscilador harmônico quântico.

Esta dissertação encontra-se organizada da seguinte forma: No Capítulo 1, discutimos a Teoria de Hamilton-Jacobi Clássico, onde muitos problemas podem ser resolvidos com a ajuda de transformações canônicas. A ideia por trás desta teoria é bastante simples. Sob certas condições, equações diferenciais ordinárias podem ser relacionadas a sistemas de equações diferenciais parciais. No Capítulo 2, apresentamos a Teoria de de Broglie-Bohm, que proporciona uma descrição completa e causal de um fenômeno quântico independente do ato de observação. Desta maneira sem querer alongar os vários questionamentos que permeiam esta discussão, estamos interessados na teoria causal da Mecânica Quântica e suas consequências de acordo com as propostas elaboradas por Louis de Broglie e por David Bohm. No Capítulo 3, apresentamos o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico, que consiste em umas das interpretações da Mecânica Quântica não-relativista. A vantagem deste formalismo é que os autovalores de energia de um problema de estado ligado podem ser obtidos sem resolver o problema da equação de Schrödinger correspondente. No Capítulo 4, apresentamos a Cosmologia Quântica, que é uma teoria de quantização do cosmos. A Cosmologia Quântica parte do pressuposto de que a Física Quântica pode ser aplicada a tudo, incluindo o universo. No Capítulo 5, apresentamos algumas aplicações do formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico.

Capítulo 1

Teoria de Hamilton-Jacobi Clássico

Neste Capítulo serão abordados conceitos básicos da Teoria de Hamilton-Jacobi, onde muitos problemas podem ser resolvidos com a ajuda de transformações canônicas. A teoria de Hamilton-Jacobi é um método construtivo que permite, em muitos casos, produzir uma transformação canônica que simplifica bastante as equações de movimento de um sistema, tornando trivial a integração destas equações.

1.1 A Equação de Hamilton-Jacobi

Dado um sistema mecânico descrito pelas variáveis (q, p) e pela hamiltoniana $H(q, p, t)$, efetuemos uma transformação canônica por meio de uma função geradora $S(q, P, t)$. Suponhamos que S possa ser escolhido de tal modo que a hamiltoniana transformada seja nula, isto é, $K(Q, P, t) = 0$. Nessas circunstâncias, as equações de Hamilton transformadas são trivialmente solúveis:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \implies Q_i = \beta_i, \quad (1.1)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \implies P_i = \alpha_i, \quad (1.2)$$

onde α 's e β 's são constantes.

De acordo com $K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial S}{\partial t}$ temos

$$0 = K = H(q, p, t) + \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (1.3)$$

onde, das equações de transformação

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, \quad (1.4)$$

decorrentes de $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$, $Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i}$, $i = 1, \dots, n$, deduzimos a equação de *Hamilton-Jacobi*

$$H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.5)$$

Esta é uma equação diferencial parcial de primeira ordem nas $n + 1$ variáveis independentes q_1, \dots, q_n, t . Felizmente, não necessitamos de sua solução geral, que envolve uma função arbitrária, que é muito difícil de ser obtida por tratar-se quase sempre de uma equação não-linear. Como veremos por intermédio de numerosos exemplos, pode ser possível encontrar soluções *particulares* da equação de Hamilton-Jacobi contendo $n + 1$ constantes arbitrárias $\alpha_1, \dots, \alpha_{n+1}$. Uma vez que S não está envolvida diretamente na equação, mas apenas suas derivadas, uma das constantes - digamos, α_{n+1} - é diretamente aditiva. Em outras palavras, qualquer solução contendo $n + 1$ parâmetros é da forma $S + \alpha_{n+1}$. A constante aditiva α_{n+1} pode ser descartada, pois não modifica a transformação gerada por S . A discussão no parágrafo anterior sugere que, encontrada uma solução da equação de Hamilton-Jacobi da forma $S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t)$ onde os α 's são constantes de integração não-aditivas, fazendo a identificação $\alpha_i = P_i$ a função $S(q, P, t)$ assim construída executa uma transformação canônica que reduz a zero a nova hamiltoniana. Com essa identificação, o movimento do sistema em termos das variáveis canônicas originais é determinado pelas equações

$$\beta_i = \frac{\partial S}{\partial \alpha_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.6)$$

que resulta da combinação de $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$, $Q_i = \frac{\partial S}{\partial P_i}$, $i = 1, \dots, n$ com a equação (1.1). As n equações (1.6) podem ser resolvidas para q_1, \dots, q_n fornecendo

$$q_i = q_i(\alpha, \beta, t). \quad (1.7)$$

Este resultado, conjuntamente com a equação (1.4), permite escrever

$$p_i = p_i(\alpha, \beta, t). \quad (1.8)$$

Estas duas últimas equações representam a solução geral das equações de Hamilton originais, envolvendo $2n$ constantes de integração cujos valores são determinados pelas condições iniciais [1].

Definição 1.1.1. Uma solução completa ou integral completa da equação de Hamilton-Jacobi é uma solução da forma $S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t)$ contendo n constantes não-aditivas $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ e tal que

$$\det \left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_i} \right) \neq 0. \quad (1.9)$$

A condição da equação (1.9) caracteriza os parâmetros $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ como mutuamente independentes e, ao mesmo tempo, garante que as equações (1.6) podem ser resolvidas para os q 's na forma (1.7). Podemos, agora, sintetizar o resultado central da teoria de Hamilton-Jacobi na proposição que se segue [1].

Teorema de Jacobi. Seja (q, α, t) uma integral completa da equação de Hamilton-Jacobi. Então os q 's p 's determinados pelas equações (1.6) e (1.4) obedecem às equações de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.10)$$

Demonstração. Diferenciando a equação (1.6) relativamente ao tempo, resulta em

$$0 = \dot{\beta}_i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} \dot{q}_j + \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \alpha_i}. \quad (1.11)$$

Por outro lado, lançando mão da equação (1.4), podemos escrever a equação de Hamilton-Jacobi (1.5) na forma

$$H(q, p(q, \alpha, t), t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.12)$$

Diferenciando esta equação em relação a α_i obtemos

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial \alpha_i} + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial t} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial t} = 0, \quad (1.13)$$

onde empregamos novamente a equação (1.4). Levando em conta que a ordem de diferenciação é irrelevante, e substituindo a equação (1.13) na equação (1.11), ficamos com

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} \left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right) = 0. \quad (1.14)$$

Como a matriz cujos elementos são $\frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i}$ é não-singular pela equação (1.9), o sistema homogêneo de equações lineares (1.14) possui somente a solução trivial

$$\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.15)$$

Tomando a derivada total em relação ao tempo da equação (1.14) vem

$$\dot{p}_i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial q_i} \dot{q}_j + \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial t}. \quad (1.16)$$

Mas da equação (1.12) deduz-se, diferenciando relativamente a q_i ,

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial t} = 0. \quad (1.17)$$

A substituição deste último resultado em (1.16) conduz a

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} \left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (1.18)$$

1.2 Modelos de Cenários Unidimensionais

A discussão de alguns exemplos servirá para ilustrar o emprego da técnica de Hamilton-Jacobi, além de motivar certas observações de caráter geral que serão feitas mais adiante.

1.2.1 Partícula Livre

Resolver a equação de movimento de uma partícula livre unidimensional pelo método de Hamilton-Jacobi,

Solução. Visto que $H = p^2/2m$, a equação de Hamilton-Jacobi assume a forma

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.19)$$

Uma integral completa desta equação pode ser obtida por separação de variáveis na forma de soma:

$$S = W(q) + T(t) \quad (1.20)$$

Introduzindo S desta forma em (1.19) resulta

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dq} \right)^2 = -\frac{dT}{dt}. \quad (1.21)$$

Se fixarmos a variável t e variarmos q o primeiro membro da equação (1.21) deveria variar. No entanto, ele não pode variar porque o segundo membro permanece fixo. Logo, ambos os

lados da equação (1.21) são iguais a uma mesma constante positiva, que denotaremos por α . Ficamos, assim, com as duas equações diferenciais ordinárias

$$\frac{dW}{dq} = \sqrt{2m\alpha}, \quad -\frac{dT}{dt} = \alpha \quad (1.22)$$

onde

$$S(q, \alpha, t) = \sqrt{2m\alpha}q - \alpha t, \quad (1.23)$$

tendo sido abandonadas constantes de integração meramente aditivas. A solução da equação de movimento para q obtém-se de

$$\beta = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = \sqrt{\frac{m}{2\alpha}}q - t, \quad (1.24)$$

e de

$$p = \frac{\partial S}{\partial q} = \sqrt{2m\alpha} = \text{constante} = p_0. \quad (1.25)$$

Portanto,

$$q = \sqrt{\frac{2\alpha}{m}}\beta + \sqrt{\frac{2\alpha}{m}}t \equiv q_0 + \frac{p_0}{m}t, \quad (1.26)$$

que é a conhecida solução do problema da partícula livre [1].

1.2.2 Oscilador Harmônico

Resolver a equação de movimento de um oscilador harmônico unidimensional pelo método de Hamilton-Jacobi.

Solução. Agora $H = p^2/2m + m\omega^2 q^2/2$, e a equação de Hamilton-Jacobi se escreve-se

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{m\omega^2}{2} q^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.27)$$

Assim como no caso da partícula livre, a equação (1.27) é separável na forma

$$S = W(q) - t\alpha \quad (1.28)$$

onde W satisfaz

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dq} \right)^2 + \frac{m\omega^2}{2} q^2 = \alpha. \quad (1.29)$$

A constante positiva α coincide com o valor constante da hamiltoniana (igual à energia total, neste caso), pois $dW/dq = \partial S/\partial q = p$. A solução de (1.29) é imediata:

$$W = \int \sqrt{2m\alpha - m^2\omega^2 q^2} dq. \quad (1.30)$$

Em consequência,

$$S(q, \alpha, t) = \int \sqrt{2m\alpha - m^2\omega^2 q^2} dq - \alpha t, \quad (1.31)$$

e a solução da equação de movimento para q obtém-se de

$$\beta = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = m \int \frac{dq}{\sqrt{2m\alpha - m^2\omega^2 q^2}} - t = \frac{1}{\omega} \sin^{-1} \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2\alpha}} q \right) - t. \quad (1.32)$$

Resolvendo esta equação para q encontra-se, com $\delta \equiv \omega\beta$,

$$q(t) = \sqrt{\frac{2\alpha}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \delta), \quad (1.33)$$

que é bem conhecida solução do problema do oscilador.

Nosso ultimo exemplo unidimensional revela que o método de Hamilton-Jacobi pode ser estendido a certas classes de sistemas não-conservativos [1].

1.2.3 Oscilador Harmônico Amortecido

Usar a teoria de Hamilton-Jacobi para resolver a equação de movimento

$$\ddot{q} + \lambda\dot{q} + \omega^2 q = 0, \quad (1.34)$$

que descreve um oscilador harmônico amortecido.

Solução. A equação (1.34) é gerada pela lagrangiana

$$L = e^{\lambda t} \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2} q^2 \right), \quad (1.35)$$

cuja hamiltoniana correspondente é

$$H = e^{-\lambda t} \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 e^{\lambda t}, \quad (1.36)$$

onde λ é o parâmetro de amortecimento. A equação de Hamilton-Jacobi associada a esta hamiltoniana é

$$\frac{e^{-\lambda t}}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{m\omega^2}{2} q^2 e^{\lambda t} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.37)$$

Devido à dependência temporal explícita de H , esta última equação não admite a separação da variável temporal como nos exemplos anteriores. No entanto, a forma de H sugere que a transformação

$$Q = qe^{\frac{\lambda t}{2}}, \quad P = pe^{-\frac{\lambda t}{2}} \quad (1.38)$$

provavelmente simplificará a hamiltoniana. Acontece que esta transformação é canônica com função geradora $F(q, P, t) = e^{\lambda t/2} qP$, e a hamiltoniana transformada

$$K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} Q^2 + \frac{\lambda}{2} QP \quad (1.39)$$

não depende explicitamente do tempo. Assim, o mesmo método dos exemplos anteriores é aplicável ao sistema descrito pelas novas variáveis canônicas (Q, P) e pela hamiltoniana transformada K . A equação de Hamilton-Jacobi associada a K escreve-se

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial Q} \right)^2 + \frac{m\omega^2}{2} Q^2 + \frac{\lambda}{2} Q \frac{\partial S}{\partial Q} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (1.40)$$

a qual possui solução da forma

$$S = W(Q) - \alpha t, \quad (1.41)$$

onde

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dQ} \right)^2 + \frac{m\omega^2}{2} Q^2 + \frac{\lambda}{2} Q \frac{dW}{dQ} = \alpha. \quad (1.42)$$

Note que α é igual ao valor constante da hamiltoniana K . Resolvendo esta equação algébrica do segundo grau para dW/dQ obtém-se

$$\frac{dW}{dx} = -ax \pm [b^2 - (1 - a^2)x^2]^{1/2}, \quad (1.43)$$

com $x = (m\omega)^{1/2} Q$, $a = \lambda/2\omega$, $b = (2\alpha/\omega)^{1/2}$. No tocante a resolução de (1.16), a escolha do sinal em (1.25) é irrelevante (qualquer integral completa serve), de modo que tomaremos

$$W = -\frac{ax^2}{2} + \int [b^2 - (1 - a^2)x^2]^{1/2} dx. \quad (1.44)$$

Consideremos o caso $a < 1$, isto é, $\lambda < 2\omega$. Definindo $\gamma = (1 - a^2)^{1/2}$ resulta

$$S = -\alpha t - \frac{ax^2}{2} + \int \left(\frac{2\alpha}{\omega} - \gamma^2 x^2 \right)^{1/2} dx, \quad (1.45)$$

onde

$$\beta = \frac{\partial S}{\partial \alpha} = -t + \frac{1}{\omega} \int \frac{dx}{(b^2 - \gamma^2 x^2)^{1/2}} = -t + \frac{1}{\omega\gamma} \sin^{-1} \left(\frac{\gamma x}{b} \right). \quad (1.46)$$

Resolvendo para x , retornando à variável Q e, finalmente, à variável q , o resultado é igual a

$$q(t) = Ae^{-\lambda t/2} \text{sen}(\Omega t + \delta) , \quad \Omega = (\omega^2 - \lambda^2/4)^{1/2} \quad (1.47)$$

onde A e δ são constantes determinadas pelas condições iniciais. A equação (1.47) é a solução usual para o oscilador amortecido no caso de amortecimento fraco ou subamortecimento [1].

1.3 Separação de Variáveis

Um aspecto simplificador do método de Hamilton-Jacobi é a desnecessidade de se obter a solução geral da equação de Hamilton-Jacobi para resolver o problema dinâmico, bastando encontrar uma solução particular. Soluções particulares de equações diferenciais parciais podem ser comumente obtidas por separação de variáveis. A natureza da equação de Hamilton-Jacobi torna possível, em grande número de casos, a separação de variáveis em forma de soma. Algumas observações de caráter geral, embora extremamente simples, facilitam consideravelmente a tarefa de separar variáveis em boa parte das situações relevantes [1].

1. Variáveis cíclicas. Se uma certa coordenada, digamos q_n é variável cíclica de H , é possível separá-la imediatamente das demais. De fato, suponha que H não dependa de q_n . Então podemos escrever.

$$S = \alpha_n q_n + \bar{S}(q_1, \dots, q_{n-1}, t) \quad (1.48)$$

onde, substituindo na equação (1.5), \bar{S} satisfaz

$$H(q_1, \dots, q_{n-1}, \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_{n-1}}, \alpha_n, t) + \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} = 0, \quad (1.49)$$

onde só envolve as variáveis q_1, \dots, q_{n-1}, t . A motivação para buscar uma solução para a equação de Hamilton-Jacobi na forma da equação (1.48) provém de

$$\frac{\partial S}{\partial q_n} = p_n = \alpha_n \quad (1.50)$$

pois p_n é constante de movimento sempre que q_n é variável cíclica. A solução desta última equação diferencial para S é precisamente na forma da equação (1.48). Uma justificativa adicional é que estamos em busca de uma transformação canônica que torne todos os P 's constantes de movimento. Mas p_n já é uma constante de movimento, de modo que, no que concerne ao par

(q_n, p_n) , basta executar a transformação identidade, cuja função gerada é $F = q_n P_n \equiv q_n \alpha_n$ em virtude da identificação $\alpha_i \equiv P_i$. Se houver mais variáveis cíclicas, é evidente que o primeiro termo à direita de igualdade na equação (1.48) torna-se uma soma sobre todas as variáveis cíclicas, ao passo que \bar{S} envolve somente as variáveis que não são cíclicas. Por exemplo, se q_n e q_{n-1} são cíclicas temos

$$S = \alpha_n q_n + \alpha_{n-1} q_{n-1} + \bar{S}(q_1, \dots, q_{n-2}, t) \quad (1.51)$$

onde

$$H\left(q_1, \dots, q_{n-2}, \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial \bar{S}}{\partial q_{n-2}}, \alpha_{n-1}, \alpha_n, t\right) + \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} = 0. \quad (1.52)$$

2. Variável temporal. Como os exemplos da Seção 1.2 indicam, se H não depende explicitamente do tempo a equação de Hamilton-Jacobi

$$H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (1.53)$$

admite separação da variável t na forma

$$S = W(q_1, \dots, q_n) - \alpha_1 t, \quad (1.54)$$

onde W , que é chamada de *função característica de Hamilton*, a qual satisfaz

$$H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_n}\right) = \alpha_1. \quad (1.55)$$

Esta equação para W não contém o tempo e α_1 é igual ao valor constante da hamiltoniana. Uma solução completa $S(q, \alpha, t)$ da equação (1.53) fica determinada uma vez que se encontre uma integral $W(q, \alpha)$ da *equação de Hamilton-Jacobi independente do tempo* (1.55). A função $W(q, \alpha)$, por si só, produz uma transformação canônica que resolve completamente as equações de movimento para os q 's.

A separabilidade da equação de Hamilton-Jacobi depende do problema físico e do conjunto de coordenadas generalizadas escolhido. Os sistemas para os quais a equação de Hamilton-Jacobi é separável em algum sistema de coordenadas e as equações de movimento são resolvidas por quadraturas pertencentes à classe dos chamados *sistemas integráveis*. O problema de três corpos sob mútua atração gravitacional constitui um dos exemplos mais famosos de sistema não-integrável. Não se conhece nenhum critério completamente geral que indique em que sistemas de coordenadas a equação de Hamilton-Jacobi é solúvel por separação de variáveis. Para sistemas

de coordenadas generalizadas ortogonais, um teorema devido a Stäckel estabelece as condições necessárias e suficientes para a separabilidade. Aqui, no entanto, vamos cingir-nos a tratar alguns exemplos de interesse físico que ilustram as técnicas de separação de variáveis costumeiramente empregadas [1].

Exemplo 1.3.1. Encontrar uma integral completa da equação de Hamilton-Jacobi para a partícula no potencial $V(r, \theta) = a(r) + b(\theta)/r^2$ onde (r, θ, φ) seja expressa em coordenadas esféricas, com $a(r)$ e $b(\theta)$ funções conhecidas.

Solução. A hamiltoniana deste problema é dada por

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + a(r) + \frac{b(\theta)}{r^2}, \quad (1.56)$$

de modo que a equação de Hamilton-Jacobi assume a forma

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)^2 \right] + a(r) + \frac{b(\theta)}{r^2} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.57)$$

Visto que H não depende explicitamente do tempo e φ é coordenada cíclica, podemos escrever

$$S = -\alpha_1 t + \alpha_\varphi \varphi + W(r, \theta), \quad (1.58)$$

onde

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right] + a(r) + \frac{b(\theta)}{r^2} = \alpha_1. \quad (1.59)$$

Tentando uma solução para a equação da forma

$$W(r, \theta) = W_1(r) + W_2(\theta), \quad (1.60)$$

somos conduzidos a

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{dW_1}{dr} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{dW_2}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right] + a(r) + \frac{b(\theta)}{r^2} = \alpha_1. \quad (1.61)$$

Multiplicando esta equação por r^2 verificamos que

$$r^2 \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{dW_1}{dr} \right)^2 + a(r) - \alpha_1 \right] = - \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{dW_2}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{2m \sin^2 \theta} + b(\theta) \right] = - \frac{\alpha_\theta^2}{2m}, \quad (1.62)$$

de modo que as variáveis r e θ foram separadas, a constante de separação tendo sido convenientemente denotada por $-\alpha_\theta^2/2m$. A equação (1.62) equivale às duas equações diferenciais ordinárias

$$\frac{dW_1}{dr} = \sqrt{2m[\alpha_1 - a(r)] - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}}, \quad (1.63)$$

$$\frac{dW_2}{d\theta} = \sqrt{\alpha_\theta^2 - 2mb(\theta) - \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta}}. \quad (1.64)$$

Integrando estas equações e inserindo os resultados nas equações (1.60) e (1.58), resulta numa integral completa de (1.57) na forma

$$S = -\alpha_1 t + \alpha_\varphi \varphi + \int \left[2m[\alpha_1 - a(r)] - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} \right]^{1/2} dr + \int \left[\alpha_\theta^2 - 2mb(\theta) - \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right]^{1/2} d\theta. \quad (1.65)$$

A solução das equações de movimento é dada por

$$\beta_1 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = -t + m \int \frac{dr}{[2m[\alpha_1 - a(r)] - \alpha_\theta^2/r^2]^{1/2}}, \quad (1.66)$$

$$\beta_\theta = \frac{\partial S}{\partial \alpha_\theta} = - \int \frac{\alpha_\theta dr}{r^2 [2m[\alpha_1 - a(r)] - \alpha_\theta^2/r^2]^{1/2}} + \int \frac{\alpha_\theta d\theta}{[\alpha_\theta^2 - 2mb(\theta) - \alpha_\varphi^2/\sin^2 \theta]^{1/2}}, \quad (1.67)$$

$$\beta_\varphi = \frac{\partial S}{\partial \alpha_\varphi} = \varphi - \int \frac{\alpha_\varphi d\theta}{\sin^2 \theta [\alpha_\theta^2 - 2mb(\theta) - \alpha_\varphi^2/\sin^2 \theta]^{1/2}}. \quad (1.68)$$

É impossível não notar a presteza e simplicidade impressionantes com que se reduz a quadraturas a solução deste problema pelo método de Hamilton-Jacobi. A equação (1.66) fornece $r(t)$ que, após substituição na equação (1.67), determina $\theta(t)$. Tendo encontrado $\theta(t)$, mediante a equação (1.68) obtém-se $\varphi(t)$, completando a resolução das equações de movimento. Caso se esteja, interessado apenas na trajetória geométrica descrita pela partícula, basta utilizar as duas últimas equações para exprimir a equação da curva na forma $r = r(\theta)$, $\varphi = \varphi(\theta)$ ou $\theta = \theta(\varphi)$, $r = r(\varphi)$.

Embora os potenciais centrais sejam os mais importantes para as aplicações físicas, o potencial $V(r, \theta) = A/r + B/r^2 \sin^2 \theta$, A e B constantes, foi proposto por (*Hartmann 1972*) para descrever o movimento de um elétron em moléculas na forma de um anel, tais como a molécula de benzeno. O potencial de *Hartmann* é exatamente da forma suposta no exemplo que acabamos de considerar [1].

Exemplo 1.3.2. Resolver as equações de movimento de um projétil em três dimensões pelo método de Hamilton-Jacobi.

Solução. Com o eixo z orientado verticalmente para cima,

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + mgz \quad (1.69)$$

e a equação de Hamilton-Jacobi tem a forma

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + mgz + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.70)$$

Como x e y são variáveis cíclicas e H não depende explicitamente do tempo,

$$S = -\alpha_1 t + \alpha_x x + \alpha_y y + W(z), \quad (1.71)$$

onde

$$\left(\frac{dW}{dz}\right)^2 = 2m(\alpha_1 - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2. \quad (1.72)$$

Integrando esta equação, resulta em

$$S = -\alpha_1 t + \alpha_x x + \alpha_y y - \frac{1}{3m^2 g} [2m(\alpha_1 - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{3/2}. \quad (1.73)$$

O movimento da partícula obtém-se por meio de

$$\beta_1 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = -t - \frac{1}{mg} [2m(\alpha_1 - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} \quad (1.74)$$

$$\beta_2 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_x} = x + \frac{\alpha_x}{m^2 g} [2m(\alpha_1 - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2} \quad (1.75)$$

$$\beta_3 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_y} = y + \frac{\alpha_y}{m^2 g} [2m(\alpha_1 - mgz) - \alpha_x^2 - \alpha_y^2]^{1/2}. \quad (1.76)$$

A resolução destas três últimas equações pra x y z fornece

$$x = A + \frac{\alpha_x}{m} t, \quad (1.77)$$

$$y = B + \frac{\alpha_y}{m} t, \quad (1.78)$$

$$z = C + Dt - \frac{gt^2}{2}, \quad (1.79)$$

onde as constantes A , B , C , D exprimem-se em termos dos α 's e β 's. As equações coincidem com a solução usual deste problema que se obtém por métodos elementares [1].

Capítulo 2

Teoria de de Broglie-Bohm

Historicamente a interpretação de de Broglie-Bohm surgiu para proporcionar uma descrição completa e causal de um fenômeno quântico, independente do ato de observação. O surgimento de interpretações alternativas da Mecânica Quântica se deve ao fato de a construção conhecida como interpretação de Copenhagen provocar uma certa inquietude quanto aos seus pilares básicos. Uma das principais representações históricas que refletem este sentimento foi a célebre frase de Einstein “Deus não joga dados”, mostrando sua contrariedade quanto à perda do determinismo para o mundo quântico. É fato estabelecido que a descrição do muito pequeno é diferente das leis que descrevem o mundo clássico. Desta maneira, sem querer alongar os vários questionamentos que permeiam esta discussão, estaremos interessados neste Capítulo na teoria causal da mecânica quântica e suas consequências, proposta por Louis de Broglie e por David Bohm [2, 3, 4].

2.1 História da Teoria de de Broglie-Bohm

A teoria de de Broglie-Bohm, como é conhecida e usada hoje, foi desenvolvida ao longo de 25 anos predominantemente por Louis de Broglie e David Bohm. Na década de 1920, de Broglie propôs uma dinâmica não-newtoniana para tentar explicar fenômenos quânticos que estavam sendo observados. A ideia cresceu a partir do seu trabalho sobre a unificação da “Física das partículas” com a “Física das ondas” pelo qual ele é provavelmente mais famoso. Em seguida, descobriu-se que uma partícula difratada por uma tela não toca a tela e ainda não continua a mover-se em linha reta. Isso levou de Broglie à ideia de que, no nível quântico, as leis do

movimento de Newton deveriam ser abandonadas e substituídas por nova forma de dinâmica.

Como veremos, de Broglie levou este trabalho até a descoberta da equação de movimento necessário para sua mecânica não-newtoniana. Quando ele apresentou seu trabalho na conferência de Solvay em 1927, no entanto, foram dadas preferências a outras formulações da teoria quântica e eventualmente de Broglie abandonou essa área específica de seu trabalho. O trabalho de de Broglie foi redescoberto em 1952 por Bohm, que considerou ter um grande potencial como interpretação da Mecânica Quântica. Bohm achava que de Broglie simplesmente não havia continuado a trabalhar até a sua conclusão lógica [5]. Bohm então assumiu a tarefa e desenvolveu o trabalho de de Broglie na teoria física completa conhecida hoje.

2.2 Dinâmica de de Broglie

O trabalho de de Broglie incluiu a unificação dos princípios de Maupertuis e Fermat. O princípio de Maupertuis é uma equação integral que determina o caminho seguido por um sistema sem especificar a parametrização do tempo no caminho. O princípio de Fermat afirma que o caminho percorrido entre dois pontos por um raio de luz é o caminho que pode ser percorrido no tempo mínimo. A unificação desses princípios levou de Broglie a uma equação de orientação, o que ele considera a base de sua nova dinâmica. Enquanto isso, Schrödinger também estava trabalhando em sua formulação da Mecânica Quântica e descobriu que sua equação de onda estava correta para as ondas de de Broglie. A dinâmica de de Broglie [6] foi então definida por duas equações: a equação de orientação definida por (2.1) e a equação de Schrödinger definida por (2.2), onde a função S na equação de orientação é a fase das ondas.

$$m_i \frac{dx_i}{dt} = \nabla_i S, \quad (2.1)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \Psi + V\Psi. \quad (2.2)$$

O próximo passo de de Broglie foi sugerir que, para o caso da equação de Schrödinger não-relativista, a função de onda está associada a um conjunto de partículas idênticas. Essas partículas são distribuídas no espaço de acordo com a distribuição quântica usual $|\Psi|^2$. de Broglie reconheceu dois efeitos para a função Ψ : determinar a localização de uma partícula e influenciar a localização da partícula, exercendo uma força em sua órbita. Ele então considerou a função Ψ como uma onda piloto que guia as partículas para regiões de alta intensidade.

Valentini [7] aconselha que, ao analisar a teoria de de Broglie-Bohm, a motivação de de Broglie deve ser lembrada. Ele não estava tentando fornecer uma conclusão da teoria quântica ou tentando resolver o problema de medição, pois neste momento a teoria quântica estava nos estágios iniciais de desenvolvimento e o problema de medição não era conhecido. Pelo contrário, o seu trabalho baseava-se apenas na tentativa de explicar evidências experimentais.

2.3 Teoria de Bohm

Quando, em 1952, Bohm redescobriu o trabalho de de Broglie, ele o considerou incompleto e desenvolveu-se em uma teoria quântica completa [5]. Ele escolheu uma abordagem ligeiramente diferente para a dinâmica de de Broglie. Considerando que o trabalho de de Broglie resultou em dinâmica newtoniana de primeira ordem, Bohm preferiu procurar uma dinâmica mais clássica para a teoria. Ele usou a derivada primeira da equação de orientação e a Equação de Schrödinger dependente do tempo para alcançar uma teoria de segunda ordem análoga à segunda lei de Newton. Essa foi a teoria de segunda ordem que Bohm considerou como a lei do movimento com a equação de orientação de de Broglie atuando como uma restrição no momento inicial. A lei de movimento de segunda ordem de Bohm (2.3) e uma definição do termo potencial quântico (2.4) são dadas abaixo:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\nabla_i (V + Q), \quad (2.3)$$

$$Q = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\nabla_i^2 |\Psi|}{|\Psi|}. \quad (2.4)$$

A introdução do potencial quântico, Q , é um aspecto importante do trabalho de Bohm. Bohm considerou a novidade da Mecânica Quântica a medir não em seus aspectos estatísticos ou discretos, mas sim no estado do sistema. Este estado se mostra no movimento das partículas através do novo potencial quântico. Bohm foi capaz de mostrar que, com a dinâmica de de Broglie e uma suposição sobre as condições iniciais, é possível derivar a fenomenologia plena da teoria quântica.

2.4 Teoria de de Broglie-Bohm

Uma boa introdução à Teoria de de Broglie-Bohm pode ser encontrada nos dois trabalhos de Bohm de 1952 [5, 8]. Eles serão resumidos brevemente para obter uma visão geral da teoria e entender como se compara com a Interpretação de Copenhague da Mecânica Quântica.

Como explicado na Seção 2.2, a Interpretação de Copenhague da Mecânica Quântica (Bohm chama a “interpretação usual”) centra-se no princípio da incerteza de Heisenberg e na suposição de que o estado físico de um sistema pode ser mais completamente especificado por uma função de onda. Apenas as densidades de probabilidade podem ser calculadas e a descrição da probabilidade é inerente à matéria.

Bohm considera que devemos tentar investigar a verdade dessa suposição. Para fazer isso, ele reivindica que uma interpretação alternativa da teoria quântica em termos de variáveis que podem determinar o comportamento preciso de um sistema individual, é necessária. Seria então possível conceber um sistema individual em um estado precisamente definível cujas mudanças com o tempo são determinadas por leis definidas. As variáveis necessárias para tal interpretação são consideradas “ocultas” pela Mecânica Quântica. Por exemplo, na Teoria de de Broglie-Bohm, a posição e o momento de uma partícula são considerados variáveis “ocultas” porque possuem valores definidos mas não é possível saber quais são.

A formulação matemática de Bohr leva a uma equação expressando a conservação de probabilidade. Uma suposição do conjunto estatístico de partículas com densidade de probabilidade $P(\bar{x}) = |\Psi(\bar{x})|^2$ é então consistente se $\Psi(\bar{x})$ satisfizer a equação de Schrödinger e $\bar{v} = \frac{\nabla S(\bar{x})}{m}$. A densidade de probabilidade da interpretação de Bohr é então numericamente igual à densidade de probabilidade da Interpretação de Copenhague. A descrição da probabilidade surge na Teoria de de Broglie-Bohm porque, na prática, não é possível prever ou controlar a localização precisa de uma partícula entre as medições devido a perturbações introduzidas pelo aparelho de medição. As perturbações causadas pelo aparelho no sistema observado são imprevisíveis e incontroláveis. Consequentemente, o princípio da incerteza de Heisenberg se sustenta em uma interpretação de variáveis ocultas. Não é uma característica essencial da interpretação como na interpretação de Copenhague, mas sim uma efetiva limitação prática sobre a possível precisão das medições.

A interpretação de de Broglie-Bohm diferem da interpretação de Copenhague em sua afirmação de que cada partícula tem uma posição e um momento “ocultos” definidos que determinam o resultado de cada medição. Os detalhes precisos dessas variáveis são, no entanto, tão complicados e incontroláveis que o que pode ser conhecido é restrito a uma descrição estatística da conexão

entre os valores das variáveis e os resultados diretamente observáveis das medições. A realidade dos fenômenos quânticos é explicada na Teoria de de Broglie-Bohm pela “onda-piloto” que guia as partículas. Essa realidade consiste em partículas em posições definidas com momentos definidos, como nas teorias clássicas.

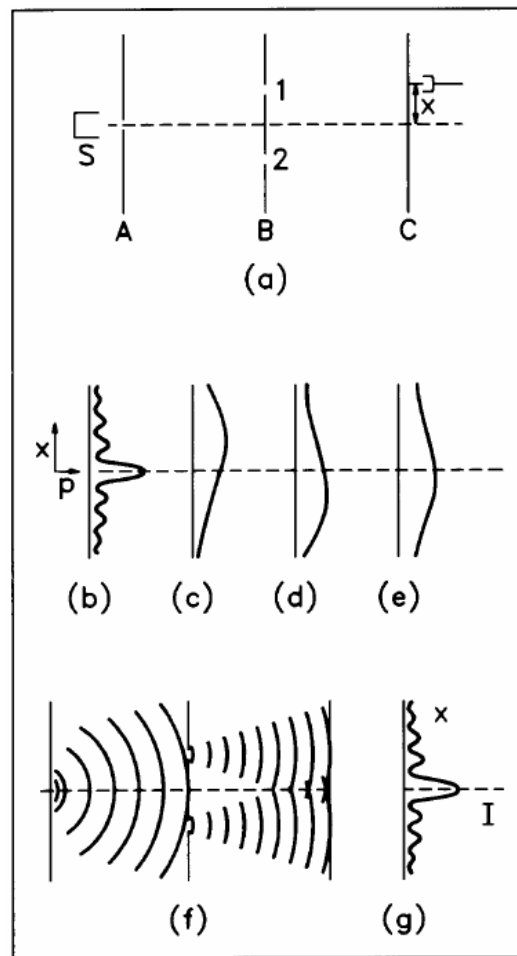


Figura 2.1: Difração de partículas na experiência de dupla fenda. a) Esquema da montagem. b) Resultado do experimento. c) Resultado com a fenda 1 aberta. d) Idem com a fenda 2 aberta. e) Idem com as duas fendas abertas. f) Experimento análogo com interferência de ondas. g) Curva da intensidade I das ondas que interferiram após passarem pelas duas fendas-semelhante à curva b) do número de partículas P . [9]

O caráter da função de onda é comprovado experimentalmente. Por exemplo, ao efetuar uma experiência de partículas que impingem sobre um painel B com duas fendas obtém-se sobre o painel C da figura 2.1 a) uma curva com característica. Esta curva pode ser construída por

uma sequência de eventos aparentemente aleatórios, em que apenas uma partícula é emitida por vez pela fonte S. A função de onda prediz com precisão a posição mais provável em que cada uma delas irá atingir o painel C. A interpretação da função de onda pela Mecânica Quântica convencional, que lhe atribui uma natureza exclusivamente estatística, apenas evidencia que ela contém alguma informação sobre as diversas probabilidades. Nenhum fato experimental exclui a possibilidade de que a função de onda tenha outras propriedades [9].

Na Teoria de de Broglie-Bohm a função de onda passa a ter um significado físico de importância primária. A probabilidade e o significado estatístico apenas entram como uma propriedade secundária. Outro elemento que passa a ter importância primária é o conceito de partícula, concebido no sentido clássico como percorrendo uma trajetória contínua no espaço e no tempo [9].

Com estes conceitos, os postulados básicos da teoria causal, ou melhor, da Teoria de de Broglie-Bohm, são os seguintes:

- i) Um sistema físico individual é formado por uma onda que se propaga no espaço e no tempo juntamente com uma partícula pontual que se move continuamente sob a influência desta onda;
- ii) A onda é descrita matematicamente pela função $\Psi(\vec{x}, t)$ que é uma solução da equação de onda de Schrödinger;
- iii) O movimento da partícula é obtido pela solução $\vec{x}(t)$ da equação

$$\dot{\vec{x}} = \frac{1}{m} \nabla S(\vec{x}, t) |_{\vec{x} = \vec{x}(t)} \quad (2.5)$$

onde S é a fase de Ψ . A posição inicial $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$ é a única informação adicional introduzida na teoria e que não está contida em $\Psi(\vec{x}, t)$ (S determina a velocidade inicial). A variação de \vec{x}_0 é que gera um *ensemble* de movimentos possíveis para a mesma onda;

- iv) A probabilidade de que uma partícula do *ensemble* esteja localizada entre os pontos \vec{x} e $\vec{x} + d\vec{x}$ no instante t é dada por

$$R^2(\vec{x}, t) d^3x, \quad (2.6)$$

onde $R^2 = |\Psi|^2$. Este postulado seleciona entre todos os movimentos possíveis, implícitos pela equação (2.5), todos aqueles compatíveis com a distribuição inicial $R^2(\vec{x}, 0) = R^2(\vec{x})$. Este postulado é introduzido para assegurar que haja compatibilidade com os resultados da Mecânica Quântica.

Para melhor visualizar como o conceito de partícula entra na Mecânica Quântica, escrevemos

a função de onda explicitando a fase e a amplitude:

$$\Psi = R \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \quad (2.7)$$

onde $R = R(\vec{x}, t)$ e $S = S(\vec{x}, t)$ são respectivamente as funções da amplitude e da fase. São funções reais do espaço e do tempo e $\hbar = h/2\pi$. A dimensão de S é de ação é medida em unidades de \hbar e R (tem dimensão $L^{-3/2}$). A função de onda é uma solução da equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{x}) \Psi, \quad (2.8)$$

onde m é a massa inercial e $V = V(\vec{x}, t)$ é a energia potencial devido a um campo potencial clássico.

A introdução da equação de onda (2.8) sob a forma de postulado é equivalente à introdução das leis de Newton na Mecânica Clássica.

Substituindo (2.7) em (2.8) e separando as partes imaginária e real obtemos as seguintes equações para os campos R e S . A parte real fornece

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{x}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}, \quad (2.9)$$

e a parte imaginária pode ser colocada na forma

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{R^2 \nabla S}{m} \right) = 0. \quad (2.10)$$

As equações (2.9) e (2.10) são um par de equações diferenciais a derivadas parciais nas quais os campos R e S determinam um ao outro. A função de onda Ψ é determinada a menos de uma constante. No caso de Ψ normalizada R , é determinado de maneira única mas S é definida a menos de uma constante aditiva. Afim de que a teoria baseada nas equações (2.9) e (2.10) seja matematicamente equivalente à teoria baseada na equação de Schrödinger (2.8), é necessário traduzir as condições impostas sobre, que conferem significado físico a (2.8), em condições para R e S .

Para que (2.8) tenha uma solução única para todos as variáveis t é necessário especificar a função de onda inicial $\Psi_0(\vec{x}) = \Psi(\vec{x}, 0)$ para todos os \vec{x} . De maneira equivalente é portanto necessário especificar as funções reais independentes

$$R_0(\vec{x}) = R(\vec{x}, 0) \quad , \quad S_0(\vec{x}) = S(\vec{x}, 0). \quad (2.11)$$

Estas funções são únicas a menos de uma constante multiplicativa e outra aditiva respectivamente, visto que todos os Ψ_0 , que apenas diferem por estas constantes, são fisicamente equivalentes. Nos pontos em que $\Psi_0 = 0$, S_0 é indefinido, e as exigências de continuidade e de que Ψ e $\nabla\Psi$ sejam finitos, também são estendidas às funções R e S e a suas derivadas. Na prática, o procedimento é mais simples: ao invés de se estabelecer as condições para R e S , resolve-se o problema diretamente para Ψ e assumimos $R \rightarrow 0$ no infinito, como veremos no parágrafo seguinte.

É oportuno destacar neste ponto algumas analogias com a mecânica clássica. Por exemplo, definindo

$$Q(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R}, \quad (2.12)$$

como sendo um potencial de origem quântica podemos reescrever a equação (2.9) como

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\vec{x}) + Q(\vec{x}) \quad (2.13)$$

que é a equação de Hamilton-Jacobi modificada. O potencial quântico apresenta características não locais, pois no caso de um sistema formado por duas partículas localizadas em \vec{x}_1 e \vec{x}_2 , $R^2 = \Psi^*\Psi$, com $\Psi = \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$.

O potencial quântico é análogo ao potencial V no que se refere ao movimento de uma partícula, o que é evidenciado após rearranjarmos a equação (2.9) juntamente com (2.12) que nos fornece

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla S \cdot \nabla \right] \nabla S = -\nabla(Q + V) \quad (2.14)$$

e identificando $\nabla S/m$ com a velocidade da partícula obtemos

$$\frac{d}{dt}(m\vec{x}) = -\nabla(Q + V) |_{\vec{x}=\vec{x}(t)}, \quad (2.15)$$

onde

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{x} \cdot \nabla, \quad (2.16)$$

representa a taxa de variação no tempo em relação a um ponto que se move com a partícula. A equação (2.15) tem a forma da segunda lei de Newton na qual a partícula está sujeita à força quântica $-\nabla Q$ além da força clássica $-\nabla V$. O potencial efetivo que atua sobre a partícula é portanto $(Q+V)$. Na prática podemos usar como lei do movimento indiferentemente as equações (2.5) ou (2.15), sendo que o uso da primeira é mais simples [9].

Capítulo 3

Teoria de Hamilton-Jacobi Quântico

Existem várias formulações da Mecânica Quântica não-relativística [10], incluindo o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico desenvolvido por Leacock e Padgett em 1983 [11, 12]. A vantagem deste formalismo é que os autovalores de energia de um problema de estado ligado podem ser obtidos sem resolver o problema da equação de Schrödinger correspondente explicitamente. Este método tem sido aplicado a muitos problemas unidimensionais de estado ligado e problemas separáveis em dimensões mais altas para obter os autovalores de energia para potenciais solúveis além da energia de estado ligado, o limite da função de onda de estado para uma ampla classe de potenciais unidimensionais exatamente solúveis. Autofunções de borda de banda e autovalores para potenciais periódicos também foram determinado por este formalismo [11-14]. As diferenças significativas na estrutura de singularidade das Funções de Momento Quântico (FMQ) entre potenciais quase solúveis e os potenciais solúveis também têm sido apontadas, e os potenciais simétricos de paridade discreta e inversão de tempo da classe quase e exatamente solucionável têm sido estudados [15].

3.1 Equação da onda de Schrödinger

Se efeitos ondulatórios começam a se tornar importantes, devemos esperar que sejam produzidos em primeira aproximação por fases rapidamente variáveis, uma vez que fases são capazes de produzir efeitos dramáticos na amplitude resultante por conta de interferência (mesmo para amplitudes iniciais aproximadamente constantes). É conveniente supor então que a função principal de Hamilton seja o termo de fase de uma amplitude de onda $\Psi(\vec{x}, t)$ com módulo constante

em primeira aproximação¹,

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{i\frac{S(\vec{x}, t)}{\hbar}}, \quad (3.1)$$

a constante de escala \hbar é necessária para tornar adimensional o argumento da exponencial, e precisa ter a mesma unidade de ação (área no espaço de fase), i.e. energia vezes tempo (ou momento vezes distância ou, ainda, momento angular). Fisicamente, ela fornece a escala típica das estruturas ondulatórias do espaço de fase. A única afirmação que podemos fazer sobre o valor de \hbar é que deve ser pequeníssimo.

Consideremos por simplicidade um sistema formado por uma única partícula. Queremos obter uma equação para a *amplitude de onda* Ψ a partir da equação de Hamilton-Jacobi para a *fase* dessa onda $\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\vec{x}) = E$. O termo de energia cinética dessa equação envolve ∇S , e por isso poderíamos tentar diretamente tomar o gradiente da equação (3.1) para obter

$$\nabla \Psi = \frac{i}{\hbar} e^{i\frac{S}{\hbar}} \nabla S = \frac{i}{\hbar} \Psi \nabla S \quad \implies \quad \nabla S = -i\hbar \frac{\nabla \Psi}{\Psi}. \quad (3.2)$$

Já a derivada temporal de S requer invertermos a equação (3.1),

$$S = -i\hbar \ln \Psi \quad \implies \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Substituindo diretamente esses resultados na equação de Hamilton-Jacobi, obteríamos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = 0 \quad \implies \quad -i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nabla \Psi}{\Psi} \right)^2 + V = 0 \quad (3.4)$$

resultando na equação

$$-i\frac{\hbar}{2} \frac{\partial \Psi^2}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi)^2 + V \Psi^2 = 0. \quad (3.5)$$

Embora seja por construção compatível com a equação de Hamilton-Jacobi para a dinâmica clássica, essa equação para a hipotética amplitude de onda Ψ possui a propriedade indesejável de ser não-linear em Ψ , não admitindo o uso do valioso princípio da superposição de soluções linearmente independentes e por isso não sendo, no final das contas, uma onda.

Vemos aqui uma ilustração de como a extensão de uma teoria conhecida a territórios nunca antes navegados requer a introdução de novas hipóteses pelo simples fato de que existem muitas

¹Essa expressão na verdade ainda permite levar em conta efeitos de módulo variável da amplitude de onda, bastando supor para que S seja complexa. Escrita nessa forma, ela é uma identidade. Vamos supor aqui S real, tornando-a uma aproximação.

extensões matematicamente possíveis compatíveis com o que já é sabido. É preciso considerar o que a física diz sobre o que a equação precisa dizer. Uma das ideias a guiar Schrödinger na escolha da equação para a amplitude de onda Ψ foi obter algo linear, já que se trata de uma onda (note que não há garantia de que isso funcione nem de que seja razoável: apenas o crivo experimental buscado a *posteriori* pôde confirmar ou descartar a equação sugerida).

É preciso alguma manipulação matemática para obter a equação mais simples possível que seja linear. Isso significa que precisamos nos livrar do termo não linear $(\nabla S)^2$, ficando mais simples encontrar formas de relacioná-lo a derivadas lineares (podemos também tomar a equação do eikonal como inspiração). O primeiro passo é notar que, por conta da independência entre as coordenadas canônicas, vale a identidade

$$\frac{\partial}{\partial q_j} \frac{\partial S}{\partial q_j} = \frac{\partial}{\partial q_j} p_j = 0. \quad (3.6)$$

Por seu uso, podemos relacionar os quadrados de derivadas parciais de S a derivadas parciais simples de Ψ . Notamos pela definição de Ψ que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial q_j} = \frac{i}{\hbar} \Psi \frac{\partial S}{\partial q_j}. \quad (3.7)$$

A equação (3.6) nos permite derivar novamente esse termo sem criarmos um termo indesejável, pois

$$\frac{\partial}{\partial q_j} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \frac{\partial S}{\partial q_j} + \underbrace{\frac{i}{\hbar} \Psi \frac{\partial^2 S}{\partial q_j^2}}_{=0} \implies \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q_j^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \frac{\partial S}{\partial q_j}. \quad (3.8)$$

Relacionamos então esse produto de derivadas parciais ao quadrado da derivada de S (o termo a ser eliminado) utilizando a equação (3.7) para $\frac{\partial \Psi}{\partial q_j}$; obtemos

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial q_j^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \Psi \left(\frac{\partial S}{\partial q_j} \right)^2 \implies \left(\frac{\partial S}{\partial q_j} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q_j^2}, \quad (3.9)$$

atingindo com isso o objetivo de relacionar o termo $(\nabla S)^2$ a derivadas lineares de Ψ .

Agora, sim, podemos finalmente substituir as equações (3.3) e (3.9) na equação de Hamilton-Jacobi,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V = 0 \implies -i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \nabla^2 \Psi + V = 0. \quad (3.10)$$

Multiplicando por Ψ , encontramos uma equação diferencial linear em Ψ ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi. \quad (3.11)$$

Essa é nada mais nada menos do que a equação de Schrödinger para a função de onda Ψ da Mecânica Quântica! Como vimos, ela é a equação linear mais simples possível de se obter entendendo a equação de Hamilton-Jacobi como uma equação diferencial para a fase de uma onda.

A equação de Schrödinger pode ser ainda entendida como uma equação para operadores diferenciais,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi, \quad (3.12)$$

o que já nos remete à ideia de que as coordenadas canônicas da mecânica hamiltoniana devem se tornar operadores diferenciais na mecânica quântica, na forma

$$p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} \implies i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi. \quad (3.13)$$

Essa relação nos permite também imaginar que as coordenadas conjugadas da Mecânica Quântica precisam satisfazer relações diferentes dos colchetes de Poisson fundamentais, uma vez que o conceito de espaço de fase perde o sentido². A extensão natural dos colchetes de Poisson é considerar alguma operação com estrutura similar e que mantenha apenas sua “essência simplética”. Eliminando as derivadas parciais, definimos então os comutadores fundamentais como³

$$[q_j, p_{j'}] = q_j p_{j'} - p_{j'} q_j = i\hbar \delta_{jj'}. \quad (3.14)$$

Transformações canônicas passam a ser entendidas como aquelas capazes de manter os comutadores fundamentais. A extensão a outros pares canonicamente conjugados (tal como posição angular e momento angular) faz aparecerem novas estruturas algébricas, indicando ser a própria equação de Schrödinger apenas a representação de uma estrutura matemática mais fundamental. De fato, trocar os colchetes de Poisson pelo comutador nos leva ao formalismo contemporâneo

²Ele pode ser, no entanto, recuperado, pela construção de Weyl em termos de operadores diferenciais num espaço similar. Torna-se necessário abrir mão do conceito de estado como um ponto nesse espaço, colocando-se no lugar uma função (função de Wigner) que no limite clássico produz uma distribuição de probabilidade com dimensões da ordem de (detalhe: para estados sem análogo clássico, essa função pode assumir valores negativos, sendo essa propriedade utilizada hoje em experimentos para atestar a produção de estados eminentemente quânticos, tal como fótons individuais ou “gatinhos de Schrödinger”).

³Essa identidade pode ser facilmente deduzida considerando-se uma função $\psi(q_j)$ de teste na qual aplicar o comutador. Obtemos

$$[q_j, p_j] \psi = -i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} (q_j \psi) = -i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \psi + i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \psi + i\hbar \psi = i\hbar \psi.$$

da Mecânica Quântica em termos de operadores atuando num espaço linear com as propriedades de um espaço de Hilbert.

Em particular, para um sistema hamiltoniano independente do tempo, vale também na Mecânica Quântica a separação de variáveis $S = W + Et$, ou seja

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-i\omega t} e^{i\frac{W(\vec{x})}{\hbar}}, \quad (3.15)$$

e obtemos

$$[q_j, p_j]\Psi = -i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \Psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} (q_j \Psi) = -i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \Psi + i\hbar q_j \frac{\partial}{\partial q_j} \Psi + i\hbar \Psi = i\hbar \Psi. \quad (3.16)$$

Embora Heisenberg tenha utilizado o formalismo de comutadores como ponto de partida para sua própria versão da extensão da Mecânica Clássica, ele também escolheu uma representação específica para essas entidades em termos de matrizes (a qual de fato não foi percebida nem por ele mesmo, mas por Jordan, que reescreveu a teoria de Heisenberg em termos das matrizes como as conhecemos hoje). Foi na verdade Dirac que percebeu a conexão abstrata entre a mecânica algébrica de Heisenberg e a mecânica ondulatória de Schrödinger, mostrando serem apenas duas representações de uma mesma estrutura mais profunda, em que $\omega = E/\hbar$, e a equação de Schrödinger se torna independente do tempo,

$$H\Psi = E\Psi. \quad (3.17)$$

Essa equação de autovalores e autovetores do operador diferencial H possui em geral várias soluções linearmente independentes, requerendo especial atenção nos casos em que E admitir apenas valores *discretos*⁴. As soluções de Ψ com valores de energia mecânica E bem definidos estão naturalmente relacionadas a uma oscilação com frequência dada por $E = \hbar\omega$, relação

⁴A quantização da energia, algo que à época pareceu uma escandalosa ruptura intelectual com relação à maneira “clássica” de pensar (e que levou a rever suas contas para o espectro de corpo negro inúmeras vezes e por vários anos até ter certeza de que não possuía mesmo nenhuma alternativa “sã” e que portanto não pudera ter evitado cometer a loucura de criar o quantum), é hoje encarada de forma muito natural pelas novas gerações, talvez por não ser nem de longe o aspecto mais anti-intuitivo da teoria. A ruptura mais fundamental só seria identificada por Einstein, Podolsky e Rosen em artigo seminal de 1935 (e também por Schrödinger no mesmo ano, com relação ao emaranhamento), no qual a propriedade não-local/não-realista do estado quântico ficaria escancarada. A esperança de solução só viria com a proposta de Bell em 1964 para testes experimentais que, desde a década de 80, apoiam a teoria quântica (embora nenhum deles seja ainda definitivo!).

primeiramente obtida por Planck para descrever o espectro da radiação emitida por um corpo negro [16].

3.2 Comprimento de onda de de Broglie

Agora que conhecemos algumas propriedades das funções Ψ , torna-se interessante retornar ao início de nossa dedução e nos perguntarmos como a equação de Hamilton-Jacobi se modificaria caso Ψ envolvesse também uma função de magnitude, como seria natural para um objeto que representasse a amplitude de uma onda, i.e.

$$\Psi(\vec{x}, t) = A(\vec{x}, t)e^{i\frac{S(\vec{x}, t)}{\hbar}}. \quad (3.18)$$

Usando essa expressão na equação (3.11) e separando-a em partes real e imaginária, obtemos após álgebra bem direta o par respectivo de equações

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}, \\ \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2m}(\nabla A \cdot \nabla S - \frac{1}{2}A\nabla^2 S). \end{cases} \quad (3.19)$$

Multiplicando a segunda equação por $2A$,

$$2A \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{m}(2A\nabla A \cdot \nabla S - A^2\nabla^2 S) \frac{\partial A^2}{\partial t} = -\frac{1}{m}(\nabla A^2 \cdot \nabla S - A^2\nabla^2 S), \quad (3.20)$$

ela se revela uma equação de *continuidade*, pois

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(A^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (3.21)$$

Vemos que o quadrado da amplitude dado por $\rho(\vec{x}, t) = A^2(\vec{x}, t)$ faz o papel de uma densidade de alguma coisa, enquanto o termo de divergência nos remete a uma *corrente* $\vec{j}(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}, t)\vec{v}(\vec{x}, t)$ como campo de velocidades $\vec{v}(\vec{x}, t) = \frac{\nabla S(\vec{x}, t)}{m}$ (notemos a relação entre momento e S compatível com a transformação canônica).

Essas evidências nos remetem à interpretação de $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ como uma *densidade de probabilidade*, já que a equação de continuidade coloca sua integral no Espaço como quantidade conservada pela dinâmica⁵ A probabilidade P de se encontrar a partícula em certa região V do

⁵Em forma integral, a equação (3.21) se escreve $\frac{d}{dt} \int_V \rho dV - \oint_S \vec{j} \cdot \hat{n} dS = 0$.

Se escolhermos uma superfície S no infinito, tal que o volume V englobe todo o Espaço, temos que $\int_V \rho dV = \text{constante}$.

espaço em dado instante de tempo deve ser dada pela integral

$$P = \int_V |\Psi(\vec{x}, t)|^2 dV \quad (3.22)$$

A primeira relação da equação (3.19) nos fornece de volta a equação de Hamilton-Jacobi, embora com a presença de um termo adicional de correção produzido por variações da amplitude A no espaço. No caso do sistema energia bem definida, essa relação se escreve

$$(\nabla S)^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \frac{\nabla^2 A}{A}. \quad (3.23)$$

Como $\nabla S = \vec{p}$, essa equação estabelece a magnitude do momento como devida a duas contribuições,

$$p^2 = p_c^2 + p_\lambda^2. \quad (3.24)$$

O primeiro termo é aquele encontrado classicamente, $p_c = \sqrt{2m(E - V)}$; o segundo, p_λ , obtido por de Broglie como contribuição inerentemente quântica (a correção ondulatória que buscávamos!), vale

$$p_\lambda = \hbar k \quad \text{com} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \sqrt{\frac{\nabla^2 A}{A}}. \quad (3.25)$$

O comprimento de onda de de Broglie fornece a escala de comprimento natural com a qual medir a curvatura da função de onda, pois, definindo as posições adimensionais $q'_j = q_j/\lambda$, temos

$$\lambda^2 \nabla^2 A = \frac{\partial^2 A}{\partial(x/\lambda)^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial(y/\lambda)^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial(z/\lambda)^2} = \frac{\partial^2 A}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z'^2} = \nabla'^2 A. \quad (3.26)$$

Assim, o termo ondulatório de correção quântica se torna importante quando a curvatura da função de onda se torna comparável ao tamanho da região em que se encontra a partícula, entendida como um *pacote de ondas*. Como a escala λ é dada pelo inverso do momento da partícula, equação (3.25), efeitos quânticos devem se tornar relevantes, por exemplo, para velocidades muito baixas, ou seja, temperaturas muito baixas.

No caso em que a função de onda varia lentamente com relação à escala λ , podemos desprezar esse termo para recuperar a equação de Hamilton-Jacobi, obtida no limite clássico em que $p_c \gg p_\lambda$, i.e.

$$\nabla'^2 \ll A. \quad (3.27)$$

Podemos supor nesse cenário que a amplitude A é aproximadamente constante numa região muito maior do que λ , justificando assim *a posteriori* a consistência da equação (3.1), chamada

de *aproximação semi-clássica de WKB* (as iniciais de Wentzel, Kramers e Brillouin). Temos nesse caso a ideia intuitiva de que a região V do Espaço em que $|\Psi|^2 \approx 1$ (a envoltória do pacote) é muito maior do que as dimensões λ em que $|\Psi|$ oscila no espaço (ondas de fase superpostas para formar o pacote). Além disso, V é por sua vez muito menor do que a resolução com que o espaço pode ser medido, justificando a terminologia “partícula”. Obtemos nesse limite a equação de Hamilton-Jacobi e, por consequência, a analogia ótico-mecânica para as trajetórias de partícula como similares em formato aos raios da ótica geométrica.

Assim, na Mecânica Clássica e na ótica geométrica, a interpretação do movimento em termos de trajetórias típicas de “partículas” é uma abstração decorrente de um comportamento limite de ondas localizadas em dimensões V muito maiores do que suas frequências espaciais típicas λ de oscilação e medidas com resolução tão crua que se assemelhem a linhas unidimensionais no Espaço. A Mecânica Clássica na formulação de Hamilton-Jacobi pode ser entendida de forma simples como o limite da equação ondulatória de Schrödinger no regime de comprimentos de onda muito pequenos [16].

3.3 Formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico

A formulação da Mecânica Quântica de Hamilton-Jacobi foi proposta por Leacock e Padgett em 1983 [17-18]. Nesta Seção, alguns aspectos desse formalismo serão revisados. Para uma partícula não-relativística com massa m movendo-se ao longo do eixo x em um potencial $V(x)$, a equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t). \quad (3.28)$$

A função de onda dependente do tempo, de valor complexo, pode ser expressa em forma polar por

$$\Psi(x, t) = e^{i\frac{S(x, t)}{\hbar}}, \quad (3.29)$$

onde S é a ação complexa ou a função principal de Hamilton. Se esta forma for substituída na equação (3.28), obtemos a Equação de Hamilton-jacobi Quântico (EHJQ) dada por

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) - i\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}. \quad (3.30)$$

Essa equação está descrita no livro de Tanner [19]. O momento conjugado visto no Capítulo 1 na equação (1.4), para o Formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico, o momento conjugado tem a seguinte forma, $p = m\dot{x} \equiv \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$. Uma abordagem para resolver a trajetória para essa equação no espaço de fase de valor complexo foi desenvolvida recentemente por Tanner e colaboradores [20]. Para estados de energia definida E , podemos separar o tempo escrevendo

$$S(x, t) = W(x, E) - Et, \quad (3.31)$$

onde $W(x, E)$, é a função característica quântica. Substituindo a equação (3.31) na (EHJQ), obtemos a versão do estado estacionário da (EHJQ):

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + V(x) - i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} = E. \quad (3.32)$$

Além disso, definimos um função de momento quântico (FMQ) $p(x)$ em termos da função característica quântica $W(x)$ por

$$p(x, E) = \frac{\partial W(x, E)}{\partial x}. \quad (3.33)$$

Usando o $p(x, E)$, para reescrever a (EHJQ) na equação (3.32), temos

$$\frac{1}{2m} p(x, E)^2 + V(x) + \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} = E. \quad (3.34)$$

O primeiro termo do lado esquerdo é a energia cinética e o segundo termo é o potencial clássico. O último termo do lado esquerdo é o *potencial quântico*. Devido à dependência de \hbar , o potencial quântico Q ,

$$Q(x) = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x}, \quad (3.35)$$

traz todos os efeitos quânticos para o formalismo Hamilton-Jacobi Quântico. No entanto, essa quantidade não é igual ao potencial quântico de Bohm, $Q_B(x)$ (ver apêndice A).

Reorganizando a (EHJQ) nos dá

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} + p(x, E)^2 = 2m[E - V(x)] \equiv p_c^2(x, E), \quad (3.36)$$

onde $p_c(x, E)$ é definido como a função momento clássico. Agora, podemos completar a definição de $p(x, E)$ impondo a condição de contorno físico (que também pode ser vista como o princípio da correspondência)

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} p(x, E) = p_c(x, E). \quad (3.37)$$

A (EHJQ), com a condição de contorno físico que o acompanha, substitui a equação de Schrödinger como a equação dinâmica de um formalismo completo de Hamilton-Jacobi da Mecânica Quântica.

Substituindo a equação (3.31) na função de onda dependente do tempo 3.29, temos

$$\Psi(x, t) = e^{i\frac{W(x, E)}{\hbar}} e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \Psi(x, E)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (3.38)$$

e

$$\Psi(x, E) = e^{i\frac{W(x, E)}{\hbar}}, \quad (3.39)$$

onde $\Psi(x, E)$ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo. Além disso, a função característica quântica $W(x, E)$ é expressa em termos de $\Psi(x, E)$ por

$$W(x, E) = \frac{\hbar}{i} \ln \Psi(x, E). \quad (3.40)$$

Portanto, $p(x, E)$ está relacionado com $\Psi(x, E)$ até equação (3.33):

$$p(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \ln \Psi(x, E) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi(x, E)} \frac{\partial \Psi(x, E)}{\partial x}. \quad (3.41)$$

A partir dessa equação, os nós na função de onda correspondem aos polos da (FMQ). Os polos são de primeira ordem e suas posições são dependentes da energia. Esses polos são chamados de *polos em movimento* [21]. A (FMQ) $P(x, E)$ também pode ter outras singularidades no plano complexo de x a partir dos pontos singulares do potencial $V(x)$. Esses *polos fixos* [21] são independentes da energia e suas posições são invariantes.

Sendo definido a (FMQ), definimos a variável de ação quântica como

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx, \quad (3.42)$$

onde C é um contorno no sentido anti-horário no plano complexo x que envolve a linha real entre os pontos clássicos de virada. A (FMQ) possui polos de resíduo $-i\hbar$ entre os pontos clássicos de virada delimitados pelo contorno C e, portanto, obtemos a condição exata de quantização

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx = n\hbar, \quad (3.43)$$

onde n conta o número de polos móveis de $p(x, E)$ e é igual ao número de nós da função de onda. Quando a integral na equação (3.42) é feita explicitamente, podemos inverter a equação (3.43) para obter autovalores de energia. Embora possamos ter muitos polos fixos para potenciais

gerais, suas localizações e resíduos são conhecidos; portanto, a integral na equação (3.42) pode ser feita distorcendo o contorno no plano complexo x e alterando as variáveis. Portanto, a principal característica do formalismo de Hamilton-Jacobi quântico é que a variável de ação quântica determina os autovalores de energia do estado ligado sem resolver explicitamente a equação de Schrödinger [22].

3.3.1 Oscilador Harmônico Quântico

A (EHJQ) para o problema do oscilador harmônico com $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, é

$$p^2 + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial p(x, E)}{\partial x} = 2m \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \equiv p_c^2. \quad (3.44)$$

Os pontos de viradas, determinados a partir de $p_c^2(x, E) = 0$, são $-x_1 = x_2 = +\sqrt{2E/(m\omega^2)}$.

A condição de quantização é dada por

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_C p(x, E) dx = n\hbar. \quad (3.45)$$

Aqui, C é o contorno que envolve os polos móveis entre os dois pontos de virada x_1 e x_2 (Figura 3.1). Percebendo que existe apenas um polo fixo de $p(x, E)$ a $x \rightarrow \infty$, para avaliar $J(E)$ considera-se um integral I_{Γ_R} sobre um contorno circular Γ_R com raio R e orientado no sentido anti-horário. A (FMQ) não possui pontos singulares entre Γ_R e C . Portanto, para este caso, $J(E)$ coincide com I_{Γ_R} :

$$I_{\Gamma_R} = J(E). \quad (3.46)$$

Para a avaliação da integral de contorno I_{Γ_R} , faz-se a mudança de variável $x = 1/y$ para obter

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_R} p(x, E) dx = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_0} \frac{\tilde{p}(y, E)}{y^2} dy. \quad (3.47)$$

Aqui, $\tilde{p}(y, E) = p(1/y, E)$ e o contorno no sentido anti-horário γ_0 encerra apenas um ponto singular no plano- y , isto é, o polo em $y = 0$. A integral de contorno correspondente pode ser prontamente calculada. Note que não há sinal negativo antes da integral; a direção do contorno muda de sentido sob esse mapeamento, que é compensado pelo sinal negativo proveniente da medida de integração. Neste exemplo $J(E)$ e I_{Γ_R} são iguais.

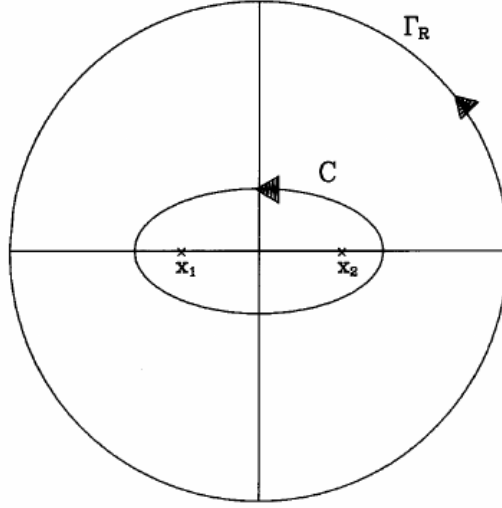


Figura 3.1: Contorno para o problema do oscilador harmônico [23].

A (EHJQ) escrita na variável y torna-se

$$\tilde{p}^2(y, E) + i\hbar y^2 \frac{\partial \tilde{p}(y, E)}{\partial y} = 2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2y^2} \right) = \tilde{p}_c^2. \quad (3.48)$$

Para calcular a contribuição do polo em $y = 0$, $\tilde{p}(y, E)$ é expandido em uma série de Laurent como

$$\tilde{p}(y, E) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n + \sum_{q=1}^k \frac{b_q}{y^q} \quad (3.49)$$

Fazendo uso da expansão acima de $\tilde{p}(y, E)$ na equação (3.47), percebe-se que a única contribuição não-evanescente vem do coeficiente a_1 do termo linear em y .

Na próxima etapa, substituindo $\tilde{p}(y, E)$ na (EHJQ) e comparando os lados esquerdo e direito, e descobriu-se que, $b_q = 0$ para $q > 1$. Ao equacionar os coeficientes das diferentes potências de y , temos

$$b_1^2 = -m^2 \omega^2, \quad (3.50)$$

$$2a_0 b_1 = 0. \quad (3.51)$$

$$-i\hbar b_1 + 2a_1 b_1 + a_0^2 = 2mE. \quad (3.52)$$

Da equação (3.50) encontra-se $b_1 = \pm im\omega$. Essa ambiguidade no sinal de b_1 pode ser removida, se aplicarmos a condição de contorno dada pela equação (3.37). Na convenção aqui seguida, a função momento clássica é definida de tal forma que $p_c(x, E) = +i|p_c|$ no eixo real

positivo. No limite $y \rightarrow 0$, ($x \rightarrow \infty$), $p_c \approx im\omega/y$ e, portanto, da equação (3.49) segue que $b_1 = im\omega$. Da equação (3.51), temos então $a_0 = 0$. Substituindo o valor de b_1 na equação (3.52) obtém-se $a_1 = (2E - \hbar)/(2i\omega)$. Colocando a equação (3.49) na equação (3.47) e levando em conta a equação (3.46),

$$J(E) = I_{\Gamma_R} = ia_1 = \frac{2E - \hbar\omega}{2\omega} \quad (3.53)$$

Assim, a condição de quantização $J(E) = n\hbar$, quando invertida para E , dá

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (3.54)$$

Podemos adotar este procedimento para obter o campo de velocidade também para valores mais altos do número quântico n , a partir da função de onda Ψ para o oscilador harmônico. Para $n = 1$, temos

$$\Psi_1 = N_1 e^{-\alpha^2 x^2/2} 2\alpha x e^{-iE_1 t/\hbar}. \quad (3.55)$$

O campo de velocidade é dado pelo momento conjugado do formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico,

$$m\dot{x} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (3.56)$$

como

$$\dot{x} = -\frac{\hbar}{im} \alpha^2 x, \quad (3.57)$$

cujas solução é;

$$x = A e^{i\hbar\alpha^2 t/m}. \quad (3.58)$$

Agora voltando ao nosso problema, a equação (3.57) fica,

$$\dot{x} = \frac{\hbar}{im} \left(-\alpha^2 x + \frac{1}{x} \right). \quad (3.59)$$

A solução para esta equação pode ser escrita como,

$$(\alpha x - 1)(\alpha x + 1) = A e^{2i\hbar\alpha^2 t/m} \quad (3.60)$$

ou

$$x = \frac{1}{\alpha} \sqrt{1 + A e^{2i\hbar\alpha^2 t/m}} \quad (3.61)$$

Aqui, a solução é um produto de dois círculos centralizados em aproximadamente $\alpha x = \pm 1$, que é plotado na (Figura 3.2). A coordenada física da partícula é novamente dada pela parte real desta expressão [23].

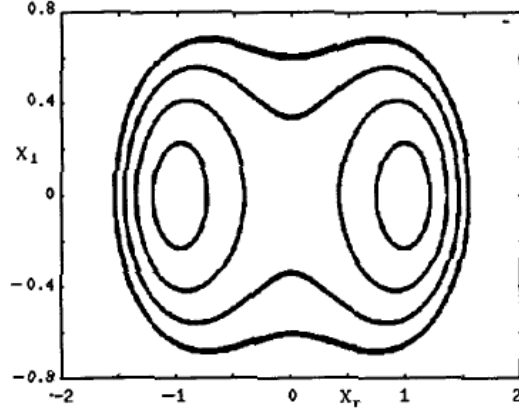


Figura 3.2: Caminhos complexos no plano- X ($X = \alpha x$) para o caso $n = 1$ do oscilador harmônico, onde os contornos são traçados para $X(0)=1.2, 1.35, 1.45$ e 1.55 [23].

3.3.2 Potencial Degrau

Considere uma partícula com energia E aproximando-se de um potencial degrau com V_0 de altura, como mostrado na (Figura 3.3). Na região I , temos

$$\Psi_I = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad , \quad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \quad (3.62)$$

e, na região II

$$\Psi_{II} = Te^{iqx} \quad , \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}. \quad (3.63)$$

Os campos de velocidade nas duas regiões são dados por

$$\dot{x}_I = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{e^{ikx} - Re^{-ikx}}{e^{ikx} + Re^{-ikx}} \right) \quad (3.64)$$

e

$$\dot{x}_{II} = \frac{\hbar q}{m}, \quad (3.65)$$

respectivamente. Os contornos do plano complexo- x na região I , para um valor típico do coeficiente de reflexão $r \equiv R^2 = 1/2$, estão mobiliado por

$$\sqrt{2} \cos(2kx_{Ir}) - e^{-2kx_{Ii}} - \frac{1}{2} e^{2kx_{Ii}} = C. \quad (3.66)$$

(Onde x_{Ir} e x_{Ii} são, respectivamente, as partes reais e imaginárias de x_I), e são plotados na (Figura 3.4)

Por fim, consideramos uma função de onda não estacionária, que é um espalhamento do pacote de ondas. Aqui, deixamos a constante de propagação k ter um espectro Gaussiano com uma largura $\Delta k \sim 1/\sigma$ sobre um valor médio \bar{k} . A função de onda é dada por

$$\Psi(x, t) = N \sqrt{\frac{2\pi\sigma}{\sigma^2 + i\hbar t/m}} \exp\left[-\frac{(x - i\sigma^2\bar{k})^2}{2(\sigma^2 + i\hbar t/m)} - \frac{\sigma^2 + \bar{k}^2}{2}\right] \quad (3.67)$$

O campo de velocidade é obtido da equação (3.56) como

$$\dot{x} = -\frac{\hbar}{im} \left(\frac{x - i\sigma^2\bar{k}}{\sigma^2 + i\hbar t/m} \right). \quad (3.68)$$

Integrando esta expressão, ficamos com

$$x(t) = x(0) + \frac{\hbar\bar{k}}{m}t + i\frac{\hbar}{m}\frac{x(0)}{\sigma^2}t. \quad (3.69)$$

Separando as partes real e imaginária desta equação (assumindo \bar{k} como real), nós achamos

$$x_r(t) = x_r(0) + \frac{\hbar\bar{k}}{m}t + \frac{\hbar}{m}\frac{x_i(0)}{\sigma^2}t \quad (3.70)$$

e

$$x_i(t) = x_i(0) + \frac{\hbar}{m}\frac{x_r(0)}{\sigma^2}. \quad (3.71)$$

Para a partícula com $x(0) = 0$, obtemos $x_r(t) = (\hbar\bar{k}/m)t$ e $x_i(t) = 0$; i.e., esta partícula permanece no centro do pacote de ondas. Outras partículas assumem valores diferentes para $x(t)$ no tempo t , dado pela expressão acima, que indica a propagação do pacote de ondas [24].

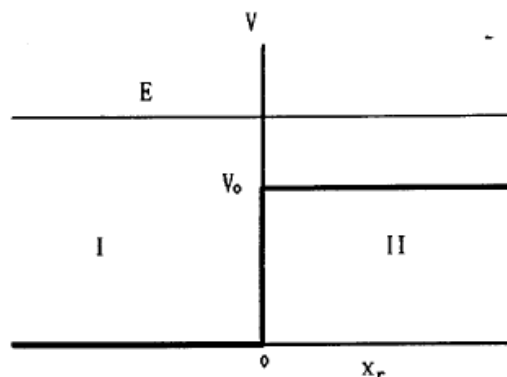


Figura 3.3: Potencial degrau com $V = 0$ para $x_r < 0$, $V = V_0$ para $x_r > 0$ e energia $E > V_0$ [24].

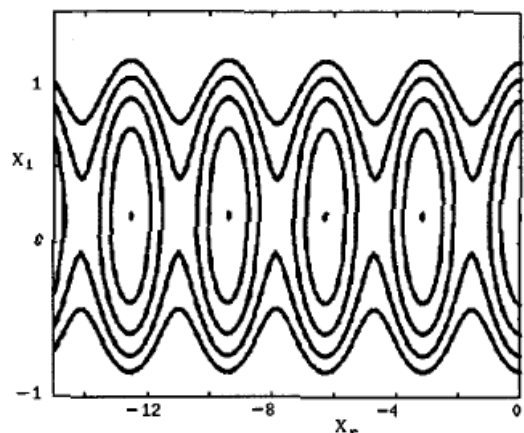


Figura 3.4: Caminhos complexos para partículas que se aproximam do potencial degrau. Os contornos para $c = -4, -3, -2, -1$ e 0 são plotados [24].

3.3.3 Probabilidade do Campo de Velocidade

Sabendo que o campo de velocidade pode ser obtido através da equação (3.56), e lembrando que neste esquema a parte real da velocidade de uma partícula na linha real, denotada como $\dot{x}_r(x_r, 0)$, sempre concorda com a velocidade da partícula na representação de de Broglie-Bohm [25]. Para obter a função de probabilidade quântica a partir das velocidades, que é o nosso primeiro objetivo, observamos ainda que a componente imaginária \dot{x}_i da velocidade da partícula na trajetória complexa pode ser escrita como

$$\dot{x}_i = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_r} + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x_r} \right)^* \Psi \right]}{\Psi^* \Psi}. \quad (3.72)$$

Isso ajuda a escrever a densidade de probabilidade para encontrar a partícula em torno de algum ponto ($x = x_r$) como

$$\Psi^* \Psi(x_r, 0) \equiv P(x_r) = N \exp\left(-\frac{2m}{\hbar} \int_{x_r} \dot{x}_i dx_r\right), \quad (3.73)$$

onde a integral é tomada ao longo do eixo real. Esta possibilidade de recuperar a distribuição de probabilidade quântica do campo de velocidade é uma característica única da formulação de trajetória complexa. Por exemplo, na abordagem de de Broglie-Bohm, os campos de velocidade para todos os auto estados ligados são zero em todo lugar e não é possível obter uma relação entre velocidade e probabilidade. A representação da trajetória desenvolvida por Floyd, Faraggi, Matoneda (FFM), por outro lado, não reivindica nenhuma conexão com a probabilidade.

A seguir, nos limitamos a uma dimensão e a problemas independentes do tempo. A variável x é sempre considerada complexa. Como dito anteriormente, nesta nova representação, que é baseada na existência de trajetórias no plano complexo, até mesmo uma partícula em um estado autógeno pode estar em qualquer uma das infinitas trajetórias possíveis, dependendo de sua posição inicial no plano complexo. Assim, também é desejável procurar a probabilidade de uma partícula estar em uma área $dx_r dx_i$ em torno de algum ponto (x_r, x_i) no plano complexo. Deixe esta quantidade ser denotada como $\rho(x_r, x_i) dx_r dx_i$.

Uma expressão explícita para $\rho(x_r, x_i)$ pode ser obtida da seguinte maneira. Estender a densidade de probabilidade a todo o plano $x_r x_i$ exige uma equação de conservação da forma (para casos independentes do tempo)

$$\frac{\partial(\rho \dot{x}_r)}{\partial x_r} + \frac{\partial(\rho \dot{x}_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (3.74)$$

Para resolver essa equação diferencial parcial, podemos escrever $\rho(x_r, x_i) = h(x_r, x_i) f(p)$, em que $h(x_r, x_i)$ é alguma solução da equação (3.74) e p é uma combinação de x_r e x_i , cujo valor permanece constante ao longo de suas curvas características [26]. Substituindo esta forma de ρ na equação (3.74), vemos que as curvas características são obtidas pela integração da equação

$$\frac{dx_r}{\dot{x}_r} = \frac{dx_i}{\dot{x}_i} \quad \text{ou} \quad \frac{dx_i}{dx_r} = \frac{\dot{x}_i}{\dot{x}_r}. \quad (3.75)$$

Isso demonstra a importante propriedade de que as curvas características da equação de conservação acima são idênticas aos caminhos complexos das partículas na representação atual da trajetória quântica.

Podemos agora encontrar a forma exata de $f(p)$, exigindo que $\rho(x_r, 0)$ concorde com a probabilidade $P(x_r)$, que é a condição de contorno neste caso. Deixe a integração constante na equação (3.75) ser a coordenada (real) de qualquer ponto de cruzamento da trajetória no eixo real, denotado como x_{r_0} . Como as curvas características são idênticas aos caminhos complexos, pode-se considerar x_{r_0} como a constante p ao longo da curva característica e seja expressa em termos de x_r e x_i . A forma assumida para a distribuição de probabilidade estendida ρ pode então ser escrita como

$$\rho(x_r, x_i) = h(x_r, x_i) f(x_{r_0}). \quad (3.76)$$

Agora podemos escolher $f(x_{r_0})$ assunto para a condição de limite. No ponto $x = x_0$ no qual a curva C cruza a linha real, nós exigimos (a condição de contorno)

$$\rho(x_{r_0}, 0) = h(x_{r_0}, 0) f(x_{r_0}) = P(x_{r_0}) \quad (3.77)$$

e obter $f(x_{r_0})$. Expressando x_{r_0} em termos de x_r e x_i em $f(x_{r_0})$, a equação (3.76) dá $\rho(x_r, x_i)$.

Uma palavra de cautela é apropriada aqui. Pode haver casos, como veremos abaixo, quando a condição de contorno sobre determinar o problema e não formos capazes de encontrar uma solução. Observa-se que isso acontece em certas regiões do espaço complexo onde as trajetórias eram suspeitas anteriormente de serem inviáveis.

Podemos também notar que a diferencial na equação (3.75), dada por

$$\dot{x}_i dx_r - \dot{x}_r dx_i = 0 \quad (3.78)$$

é inexata porque

$$\frac{\partial \dot{x}_r}{\partial x_r} \neq -\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i}, \quad (3.79)$$

a menos que ambas as derivadas parciais sejam nulas. Isto é devido às condições de Cauchy-Riemann, satisfeitas a função analítica \dot{x}_i no plano- x complexo (exceto em seus pontos singulares). No entanto, essa diferencial inexata sempre pode ser exata multiplicando-se por um fator integrador $\mu(x_r, x_i)$ que obedece

$$\frac{\partial \mu \dot{x}_r}{\partial x_r} = -\frac{\partial \mu \dot{x}_i}{\partial x_i}. \quad (3.80)$$

Assim, vemos que o fator de integração μ pode servir como $h(x_r, x_i)$ na equação (3.76).

A seguinte observação pode ser útil para encontrar $h(x_r, x_i)$, ou mesmo $\rho(x_r, x_i)$, no caso de alguns potenciais especiais. Vamos denotar $d\Psi/dx = X(x)$. Então, usando a equação de Schrodinger independente do tempo, pode-se reescrever a equação de movimento (3.56) como

$$\dot{x} = \frac{2i(E - V)}{\hbar} \frac{X}{X'}, \quad (3.81)$$

onde $X' \equiv dX/dx$. Para $V = V_0$, uma constante real, pode-se integrar isso para obter

$$X(x) = A \exp\left[\frac{2i(E - V_0)}{\hbar} t\right], \quad (3.82)$$

a partir da qual obtemos a trajetória da partícula no plano- x complexo como $X^*(x)X(x) = |A|^2$.

Além disso, pode-se ver que

$$(X')^* X' = \frac{4(E - V_0)^2}{\hbar^2} \frac{X^* X}{\dot{x}^* \dot{x}}. \quad (3.83)$$

Mas para potenciais constantes, $(X')^* X' \propto \Psi^* \Psi$ no plano complexo. Pode ser visto que a equação (3.83) satisfaz a equação de conservação e concorda com a condição de contorno. Em

outras palavras, a probabilidade estendida e conservada $\rho(x_r, x_i)$ neste caso pode ser escrita como

$$\rho(x_r, x_i) = \Psi^* \Psi = \frac{\hbar^2 |A|^2}{m^2 \dot{x}^* \dot{x}}, \quad (3.84)$$

e portanto, ρ varia inversamente como $|\dot{x}|^2$, à medida que a partícula se move ao longo de uma trajetória particular com A fixo. Esse resultado não é contraditório ao resultado do WKB que $\Psi^* \Psi \propto 1/v_{clássico}$ para potenciais constantes [27], pois $|\dot{x}|$ ao longo de uma trajetória em nosso caso não é igual a $v_{clássico}$.

Capítulo 4

Cosmologia Quântica

Num sentido amplo, a cosmologia é a busca por entender as origens e a evolução do universo. Numa perspectiva humanista, é uma das características exclusivas dos seres humanos, o que faz com que o interesse pela cosmologia seja considerado como um dos aspectos que nos diferenciam dos outros animais. Essas investigações foram conduzidas desde a antiguidade tanto do ponto de vista científico, quanto a partir de uma perspectiva filosófica, religiosa e artística. A cosmologia antiga, que era mais próxima das religiões e dos mitos, sofreu grandes transformações conforme foram surgindo novas formas de abordagem às “questões fundamentais” [28].

Com o surgimento de novas teorias físicas e com o aperfeiçoamento dos aparatos tecnológicos que são utilizados nas observações astronômicas, a cosmologia se transformou bastante, passando gradualmente a ser considerada uma ciência. Nas teorias cosmológicas, o universo é modelado como uma entidade única, cujas variáveis estudadas são grandezas físicas, como, por exemplo, pressão, densidade e energia. A cosmologia estuda os fenômenos em grandes escalas, o estudo do universo como um todo. Os avanços da cosmologia nos últimos anos permitiram a consolidação do chamado *modelo padrão da cosmologia*, que leva em conta aspectos de diversas áreas da física, como a relatividade geral, a física atômica, quântica, nuclear, de partículas elementares e da gravitação; e da astronomia, como os estudos sobre a origem e formação de estrelas e galáxias [29, 30]. Neste Capítulo, utilizaremos o termo cosmologia com o sentido mais restrito de cosmologia científica, como uma das partes da astronomia que utiliza modelos físicos e matemáticos para estudar o universo em larga escala.

O início do século XX foi muito especial para a física; paralelamente ao surgimento da Teoria da Relatividade Geral, houve o desenvolvimento de uma outra teoria revolucionária: a Mecânica

Quântica. Em 1900, na tentativa de explicar o fenômeno da radiação de corpo negro, Max Planck (1858-1947) postulou que a energia deveria ser quantizada em pacotes discretos que ele chamou de *quanta*. Ele propôs que a energia das ondas eletromagnéticas de frequência ν é dada por múltiplos inteiros da quantidade $h\nu$, onde h é conhecida como *constante de Planck*. Em 1905, seguindo as ideias de Planck, Einstein propôs uma explicação para o efeito fotoelétrico, sugerindo que a luz também devesse ser discretizada em pequenos pacotes de energia, ou pequenas partículas, aos quais ele deu o nome de *fóton*. A partir daí, a ideia de quantização se popularizou e várias outras contribuições importantes foram feitas por nomes como Niels Bohr (1885-1962), Arthur Holly Compton (1892-1962), Paul Dirac (1902-1984), Erwin Schrödinger (1887-1961), Werner Heisenberg (1901-1976), etc.

A Mecânica Quântica é bastante contraintuitiva se comparada à Mecânica Clássica. Por causa disto, muitos físicos renomados demoraram até aceitá-la, fato bem representado pela famosa frase de Einstein “*Deus não joga dados*”, em alusão à natureza probabilística dada aos sistemas quânticos. A incompatibilidade entre física de micro e macro estruturas é uma questão ainda em aberto e se tornou um dos mais famosos e interessantes problemas da física: a busca pela teoria que vai unificar os desconexos campos da Relatividade Geral e da Mecânica Quântica. Algumas teorias ganharam força com o passar do tempo, tais como a Teoria das Cordas e a Teoria Quântica de Laços (LQG-sigla em inglês), mas nenhuma pôde ainda ser confirmada. Enquanto a Teoria das Cordas se baseia em técnicas de Teoria Quântica de Campos, LQG é baseada na descrição Hamiltoniana da Relatividade Geral. A Cosmologia Quântica é uma teoria de quantização do cosmos que também é baseada no formalismo ADM¹ [50]. A Cosmologia Quântica parte do pressuposto de que a física quântica pode ser aplicada a tudo, incluindo o universo [51]. Neste caso, a função de onda Ψ representa o universo e, portanto, a quantização é feita quando este está dentro da escala de Planck, estimadamente 5.4×10^{-44} s o tempo de Planck; na Cosmologia Clássica, esse seria o período anterior ao da inflação, no universo primordial [52]. E, assim como é feito na Cosmologia Clássica, assumiremos algumas propriedades fundamentais, tais como homogeneidade e isotropia, e reduziremos as variáveis livres para um número finito, gerenciável. Este espaço com graus de liberdade reduzidos, isto é, de dimensão finita, é chamado de *mini-superespaço*. Assim, o modelo se torna uma aproximação

¹(Arnowitt-Deser-Misner) consiste em um ferramental matemático onde desacoplamos a componente temporal das demais componentes espaciais na variedade matemática que define o espaço-tempo de um determinado sistema físico gravitacional.

da teoria total. Os sistemas considerados no mini-superespaço são comumente chamados de modelos teste; eles abordam aspectos importantes para a teoria, enquanto evitam outros, nos permitindo assim estudar certos comportamentos de forma isolada.

4.1 A Mecânica Quântica

A interpretação dos resultados de medições quânticas ainda hoje é motivo de debate, em especial com o advento das teorias de unificação. Ao medirmos, por exemplo, a posição de uma partícula, a questão que surge naturalmente é “onde esta se encontrava anteriormente?”. Extrapolando este tipo de questionamento para a Cosmologia Quântica, faz sentido quantizar o universo como um todo? Esta é uma questão bastante delicada e controversa dentro da teoria quântica: os problemas de medida de um observável quantizado e a fronteira entre o clássico e o quântico. Em suma, um sistema quântico é descrito por uma função que descreve um comportamento ondulatório de probabilidade. No caso de uma partícula, pode-se considerar que esta é uma onda no espaço, fato conhecido como *dualidade onda-partícula*. O comportamento de onda e de partícula da luz, por exemplo, também representado pelo famoso experimento da fenda dupla, feito originalmente por Thomas Young (1773-1829), num contexto da ótica ondulatória, no início do século XIX e depois reproduzido num contexto da Mecânica Quântica por Clinton Davisson (1881-1958) e Lester Germer (1896-1971) em meados da década de XX.

A Mecânica Quântica usual é baseada na interpretação de Copenhague, onde podemos prever apenas a probabilidade da ocorrência de certas medidas e a observação de um evento interfere no resultado final, como mencionado. Os princípios da Mecânica Quântica podem ser resumidos em quatro [53]:

1. Os estados quânticos são descritos por funções de onda $\Psi(\vec{r}, t)$, que contêm toda a informação do sistema.
2. A função de onda tem uma interpretação probabilística. A densidade de probabilidade de posição da partícula é dada pelo módulo quadrado de $\Psi(\vec{r}, t)$, isto é,

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = C|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x, \quad (4.1)$$

onde C é uma constante de normalização.

3. Os observáveis clássicos são descritos quanticamente por operadores (autoadjuntos), que

são aplicados na função de onda Ψ . A medida é sempre dada por um autovalor (real) do operador correspondente ao observável a ser medido.

4. A equação que descreve a evolução de $\Psi(\vec{r}, t)$ é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t). \quad (4.2)$$

A função $V(\vec{r}, t)$ é o potencial do sistema e $\hbar = h/2\pi$, onde h é a constante de Planck. A equação (4.2) é conhecida como *Equação de Schrödinger*.

Para um estudo mais detalhado sobre Mecânica Quântica, sugerimos [31-33].

No caso da Cosmologia Quântica, a função de onda Ψ representa o universo em que vivemos e toda a informação nele contida. Assumimos um mini-superespaço gerado pela homogeneidade e isotropia, onde a “posição” \vec{r} é dada pelo fator de escala \mathbf{a} , que representa o volume do universo, $V = a^3$. Assim, a evolução do universo ainda deve ser dada por uma equação do tipo Schrödinger, segundo o postulado (4) acima, que será obtida a partir da Equação de Wheeler-DeWitt, como veremos nas próximas Seções.

Porém, a interpretação de Copenhague em si não pode ser aplicada à Cosmologia Quântica, pois esta necessita de um observador externo para explicar o colapso da função de onda. Porém, existem abordagens da Mecânica Quântica que buscam um melhoramento desta interpretação neste aspecto e que nos permite entender a Cosmologia Quântica ainda considerando estes postulados, que são a base da Mecânica Quântica atual. Podemos utilizar, por exemplo, a teoria de Histórias Consistentes [34-36], que é uma tentativa de dar um caráter universal a Mecânica Quântica mantendo os fundamentos da interpretação de Copenhague [37]. Existem ainda outras interpretações, criadas a fim de resolver essa questão do observador e da medida. Alguns exemplos são a *Interpretação de Vários Mundos*, no qual presume-se que todas as possibilidades de medidas acontecem ao mesmo tempo, criando mundos paralelos e realidades alternativas [38], e a *Interpretação de Bohm-de Broglie*, cuja premissa é que as partículas seguem trajetórias bem definidas, e o comportamento ondulatório é obtido a partir de outras equações que exploram a dinâmica da função de onda. Esta interpretação tem sido aplicada a muitos modelos de mini-superespaços [39-41], obtidos pela imposição de homogeneidade das hipersuperfícies espaciais.

4.2 Quantização de uma teoria clássica

A ideia por trás da Mecânica Quântica, resumida nos postulados apresentados anteriormente, é que um sistema quântico não seria representado pelos observáveis clássicos, como posição, momento e energia; ao invés disso, o estado é descrito por uma função de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ num espaço de Hilbert e estes observáveis clássicos são representados por operadores que, aplicados sobre a função de onda, nos fornecem um valor para a medida destes, esta sendo um autovalor do operador em questão. Tais operadores devem ser autoadjuntos e seus autovalores são sempre números reais. Outra forma de representar os estados quânticos é através da *notação de Dirac*, ou *notação bra-ket*; com ela, o estado é representado pelo vetor $|\Psi\rangle$, sendo o seu conjugado representado por $\langle\Psi|$, tal que

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \|\Psi\|^2. \quad (4.3)$$

Os vetores $\langle\Psi|$ e $|\Psi\rangle$ são chamados de *bra* e *ket* da função Ψ , respectivamente. Os operadores mais usuais são o operador posição \hat{Q}_i , momento \hat{P}_i e energia \hat{H} , referentes aos observáveis clássicos x_i , p_i e $\mathcal{H}(x_i, p_i, t)$. Os operadores \hat{Q}_i e \hat{P}_i são tais que

$$\hat{Q}_i\Psi(x_i, t) = x_i\Psi(x_i, t) \quad ; \quad \hat{P}_i = -i\frac{\partial}{\partial x_i}\Psi(x_i, t). \quad (4.4)$$

E o operador de energia \hat{H} é tal que

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_i, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\Psi(x_i, t). \quad (4.5)$$

Essa é a Equação de Schrödinger dada na equação (4.2).

A função de onda tem uma interpretação probabilística: a probabilidade de encontrar a partícula numa certa região \mathcal{U} é dada por

$$P(\mathcal{U}, t) = \int_{\mathcal{U}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV, \quad (4.6)$$

onde dV é o elemento de volume. A probabilidade de encontrar a partícula em todo o espaço deve ser 1, por isso exigimos que as funções de onda sejam normalizadas e, portanto, elas devem ser quadrado integráveis: as funções de onda que descrevem sistemas físicos devem tender a zero nas bordas do domínio. O *valor esperado* de um observável \hat{O} em relação a uma partícula no estado Ψ é definido como

$$\langle\hat{O}\rangle = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle = \int_{\mathcal{D}} \Psi^*\hat{O}\Psi dV, \quad (4.7)$$

onde \mathcal{D} é o domínio da função Ψ . O valor esperado nos diz que a medida média resultante da observação de várias partículas no estado Ψ será $\langle \Psi \rangle$. As autofunções de energia formam uma base para o espaço de Hilbert e, então, os estados quânticos podem ser escritos como combinações lineares de autoestados de energia. Assim, considerando uma função unidimensional, para simplificar

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (4.8)$$

sendo $c_n \in \mathbb{C}$ e E_n os autovalores de energia, ou seja,

$$\hat{H}\psi(x) = E_n\psi(x). \quad (4.9)$$

O módulo quadrado dos coeficientes c_n nos fornece a probabilidade da medição da energia do estado Ψ resultar no valor E_n , em particular temos

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (4.10)$$

A Cosmologia Quântica engloba estes conceitos básicos da Mecânica Quântica na tentativa de quantizar o universo. Os operadores da Mecânica Quântica são, como já dito, representações de observáveis clássicos e, classicamente, a energia do sistema é dada pela hamiltoniana. A Quantização Canônica de um sistema é feita quantizando-se a hamiltoniana $\mathcal{H}(x, p_x)$, que é uma função da posição e do momento, através dos operadores. Assim, encontramos o operador hamiltoniano $\hat{O}(\hat{Q}, \hat{P})$, que é escrito em função dos operadores \hat{O} e \hat{P} . No entanto, na Relatividade Geral, a hamiltoniana possui o vínculo (ver apêndice B). A quantização deste é chamada *Equação de Wheeler-DeWitt*:

$$\hat{H} = 0. \quad (4.11)$$

Se comparado com a equação de Schrödinger, onde o hamiltoniano da função de onda fornece a evolução temporal desta, há uma discrepância óbvia. Este fato é parte de uma aparente incompatibilidade entre Mecânica Quântica e Relatividade Geral chamado de *problema do tempo*. A questão surge por causa do diferente tratamento do tempo nas duas teorias. Na Mecânica Quântica, o tempo não é considerado um observável [42], é apenas um parâmetro externo; enquanto que na Relatividade Geral, o tempo é considerado uma coordenada do espaço-tempo, estando em pé de igualdade com as outras variáveis espaciais. Essa diferença é evidenciada nesta comparação entre a equação de Schrödinger e a equação de Wheeler-DeWitt, em que o tempo

parece sumir durante a quantização da teoria clássica. Uma forma de encarar este problema seria considerar que a hamiltoniana da teoria clássica carrega uma componente que faz o papel do tempo. Sendo assim, ao quantizarmos o vínculo, obtemos uma equação do tipo-Schrödinger, considerando a evolução da função de onda em relação a este parâmetro. Voltaremos neste problema mais para frente.

Em todo caso, a Cosmologia Quântica se baseia na quantização do vínculo de energia, considerando que a hamiltoniana carrega um parâmetro T , de forma que

$$\mathcal{H}(x_i, p_i, p_T) = 0. \quad (4.12)$$

O momento deste parâmetro deve aparecer linearmente, tal que a quantização deste vínculo resulte numa equação do tipo e então definimos o operador hamiltoniano \hat{H} de acordo com a equação. Porém, ao tomarmos esta abordagem, não há garantia nenhuma de que o operador \hat{H} será autoadjunto. Se o operador não for autoadjunto, a teoria não será coerente na Interpretação de Copenhague, então é preciso verificar esta condição e, caso não seja, se é possível estender o operador de forma que esta extensão seja autoadjunta. Nas próximas Seções vamos abordar esta questão e também o problema do tempo [43].

4.3 Operadores e extensões autoadjuntos

Operadores autoadjuntos têm um papel fundamental na Mecânica Quântica usual, como vimos. Frequentemente confunde-se as noções de operador autoadjunto e simétrico (Hermitiano). De fato, nos domínios mais recorrentes na Mecânica Quântica, estas definições são sinônimas, porém há operadores simétricos que não são autoadjuntos e, então, precisamos distinguir estas duas noções. Em todo caso, para operadores que são apenas simétricos, há a possibilidade deles poderem ser estendidos para um operador autoadjunto; estas são chamadas sugestivamente de extensões autoadjuntas. Nesta Seção, vamos definir a diferença entre os operadores simétrico e autoadjuntos e como saber se existem extensões. Para um estudo completo sobre o assunto, recomendamos [44, 45].

Dados uma métrica $\langle \cdot, \cdot \rangle$ no espaço de Hilbert \mathcal{H}^2 e um operador $T : D(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, o

²Usamos a notação usual para o espaço de Hilbert \mathcal{H} , que também usamos para representar a hamiltoniana clássica de um sistema. Entendemos que não haverá confusão por estarem em contextos diferentes.

seu adjunto T^* é tal que:

$$\langle T^*\psi, \phi \rangle = \langle \psi, T\phi \rangle, \quad \psi, \phi \in D(T). \quad (4.13)$$

O domínio de T^* é dado pelas funções ψ que satisfazem a relação (4.13) acima, isto é, $D(T^*) = \{\psi \mid \langle T^*\psi, \phi \rangle = \langle \psi, T\phi \rangle; \forall \phi \in D(T)\}$. Dizemos que T é um *operador simétrico* ou *Hermitiano*, se

$$\langle T\psi, \phi \rangle = \langle \psi, T\phi \rangle, \quad \forall \psi, \phi \in D(T), \quad (4.14)$$

isto é, se o operador é igual a seu adjunto restrito ao domínio $D(T)$. Observe que, para um operador simétrico, $D(T) \subset D(T^*)$. Se T é simétrico e

$$D(T) = D(T^*), \quad (4.15)$$

então dizemos que T é um *operador autoadjunto*. Se um operador é apenas simétrico, há casos em que seu domínio pode ser estendido de forma que ele se torne autoadjunto, ou seja, o operador com o novo domínio tem um adjunto com o mesmo domínio. Este operador com o domínio estendido é chamado de *extensão autoadjunta*. Assim, se \tilde{T} é uma extensão do operador simétrico T , temos que

$$D(T) \subset D(\tilde{T}) = D(\tilde{T}^*) \subset D(T^*). \quad (4.16)$$

É importante comentar que nem todo operador simétrico pode ser estendido para um operador autoadjunto, mas, quando puder, este pode ter até infinitas diferentes extensões. Essa questão de operadores e extensões autoadjuntos foi minuciosamente estudada por John von Neumann (1903-1957) logo após o advento da Mecânica Quântica. Um critério útil para determinar a existência de extensões é dado pelo Teorema de von Neumann [45]:

Seja T um operador simétrico com domínio $D(T)$ denso no espaço de Hilbert \mathcal{H} e suponha que existe uma aplicação antilinear $C : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, chamada conjugação, tal que

$$C(D(T)) \subset D(T), \quad C^2 Id \text{ e } CT = TC. \quad (4.17)$$

Então T admite extensão autoadjunta. Observe que, usando este teorema, podemos deduzir que todo operador T com coeficientes reais é autoadjunto ou admite extensões autoadjuntas ao considerarmos a aplicação antilinear $C : \phi \rightarrow \phi^*$, que é simplesmente tomar o complexo conjugado da função no espaço de Hilbert \mathcal{H} , se considerarmos o domínio tal que $C(D(T)) \subset D(T)$.

O teorema de von Neumann fornece um método para saber se o operador admite ou não extensões, porém não obtemos nenhuma informação sobre a quantidade de extensões ou sobre como encontrá-las. Para solucionar este problema, usaremos um outro método que envolve o cálculo de soluções de uma equação de autovalores imaginários, conhecido como *método de von Neumann ou método dos índices de deficiência*. Dado um operador simétrico T com domínio $D(T)$ denso no espaço de Hilbert \mathcal{H} , vamos denotar por $K_{\pm}(T)$ os espaços gerados pelas soluções ϕ das equações

$$T^*(\phi) = \pm i\phi, \quad \phi \in D(T^*), \quad (4.18)$$

respectivamente. Os subespaços $K_{\pm}(T)$ são chamados *espaços de deficiência* e suas dimensões $n_{\pm} = \dim K_{\pm}(T)$ são chamadas *índices de deficiência*. Através dos índices de deficiência, von Neumann mostrou que

1. Se $n_+ = n_- = 0$, então o operador possui uma única extensão autoadjunta, ou seja, ele é essencialmente autoadjunto;
2. se $n_+ = n_- = n$, as extensões autoadjuntas são correspondentes um-a-um com os operadores unitários entre K_+ e K_- ;
3. se $n_+ \neq n_-$ o operador não possui extensões.

Um operador *essencialmente autoadjunto*, como dito anteriormente, é aquele que é autoadjunto ou possui uma única extensão autoadjunta. Por praticidade, escolhemos daqui em diante ignorar a diferença entre estes e operadores autoadjuntos. A essência deste teorema reside no fato dos autovalores dos operadores autoadjuntos sempre serem reais. Assim, se $n_+ = n_- = 0$, a equação não tem solução e isto indica que o operador é autoadjunto. No caso do item (2), as autofunções que têm autovalores imaginários formam um subespaço que pode ser “excluído” do domínio do operador adjunto, de forma que, restrito ao novo subconjunto, o operador recupera o caráter autoadjunto.

É possível calcular as extensões, se estas existirem, a partir dos operadores unitários entre os espaços K_+ e K_- , porém este é um trabalho longo e, dependendo do operador, pode haver um número infinito destes operadores unitários, o que torna o cálculo analítico impraticável. Apresentamos no (Apêndice C) o cálculo para obter as extensões do operador momento. Por enquanto, vamos apresentar uma extensão para operadores limitados, chamada extensão de Friedrich, cujas características são fisicamente (e matematicamente) convenientes. Dado um

operador T , se este for limitado inferiormente e os índices de von Neumann forem iguais, existe uma única extensão, chamada *Extensão de Friedrich*, que é obtida a partir da forma quadrática associada ao operador T .

Considere um operador simétrico T e seja $q(\phi, \psi) = \langle \phi, T\psi \rangle$ para $\phi, \psi \in D(T)$. Então q é uma forma quadrática fechável e seu fecho \tilde{q} é a forma quadrática de um operador autoadjunto único \tilde{T} . \tilde{T} é uma extensão positiva de T o limite inferior de seu espectro é o mesmo do que de q . Além disso, \tilde{T} é a única extensão autoadjunta de T cujo domínio está contido no domínio da forma \tilde{q} .

Uma forma quadrática é uma aplicação $q : Q(q) \times Q(q) \rightarrow \mathbb{C}$ que é linear na primeira entrada e antilinear na segunda. O conjunto $Q(q)$ é chamado *domínio da forma* e é um subespaço denso do espaço de Hilbert. Uma forma quadrática positiva, isto é, $q(\psi, \psi) \geq 0$, para $\psi \in D(T)$, é dita fechada se $Q(q)$ é completo sob a norma

$$\|\psi\|_{+1}^2 \equiv \|\psi\|^2 + q(\psi, \psi), \quad (4.19)$$

que é chamada de *norma da forma*. Para um operador simétrico e positivo T , podemos definir uma forma quadrática positiva da seguinte maneira

$$q(\phi, \psi) = \langle \phi, T\psi \rangle, \quad (4.20)$$

com $D(q) = D(T)$. O fecho \tilde{q} de q é construído usando-se a norma da forma $\|\cdot\|_{+1}^2$, de acordo com o teorema acima, e ele é associado a uma única extensão autoadjunta \tilde{T} , tal que $D(\tilde{T}) \subset D(\tilde{q})$. Esse teorema é consequência de outro conhecido como Teorema B.L.T [44], que diz que uma transformação linear limitada,³ sempre possui uma extensão linear e limitada. Neste caso, apresenta-se uma forma linear que gera uma transformação do tipo, sendo escolhida pertinentemente (4.20) tal que a simetria seja preservada.

Matematicamente, todas as extensões são viáveis e, fisicamente, cada uma gera uma dinâmica diferente. No entanto, a extensão de Friedrich é compatível com o esperado fisicamente, já que esta tem o mesmo limite inferior que o operador e, além disso, é a única cujo domínio está contido no domínio da forma quadrática definida pelo operador. Em outras palavras, ela preserva o estado fundamental de energia e as condições de contorno são encontradas de forma mais evidente do que usando-se o método de Von Neumann, uma vez que pode ser obtida através da norma da forma quadrática associada.

³Bounded linear transformation, no inglês - de onde vem a sigla B.L.T.

4.4 O problema do tempo

A incompatibilidade entre a interpretação do tempo na Mecânica Quântica e na Relatividade Geral é um dos grandes motivos pelo qual ainda não temos uma teoria de unificação definitiva. Para as teorias como a Cosmologia Quântica, que são baseadas no formalismo hamiltoniano da Relatividade Geral, o problema do tempo se concretiza no fato da Relatividade Geral ser constituída por um sistema vinculado e, por isso, não possuir uma hamiltoniana efetiva que gere evolução em relação a um parâmetro temporal generalizado. Várias hipóteses sobre a natureza do tempo foram formuladas, dentre elas a de que o próprio tempo pode ser quantizado [46, 47]. Nosso interesse é quantizar o vínculo, então vamos identificar o tempo com um parâmetro interno do sistema, de forma que a hamiltoniana em questão gere evolução em relação a este. Porém, no mini-superespaço, usando a métrica, a única variável dinâmica do universo é o fator de escala, graças ao vínculo, que nos diz que a função lapso N é um multiplicador de Lagrange. A Lagrangiana gravitacional, depois de descartado termos de derivadas totais, se escreve como

$$\mathcal{L}_G = \frac{6}{N} a \dot{a}^2 \quad (4.21)$$

. Pelo (Apêndice B) encontramos

$$\pi_a = \frac{\partial \mathcal{L}_G}{\partial \dot{a}} = \frac{12}{N} a \dot{a}. \quad (4.22)$$

Então, ainda de acordo com o (Apêndice B), temos

$$\mathcal{H}_G = \frac{N}{24} \frac{\pi_a^2}{a}. \quad (4.23)$$

Observe que, se tivermos apenas a parte gravitacional da Relatividade Geral, a hamiltoniana clássica é função apenas do fator de escala \mathbf{a} e seu momento π_a e, neste caso, a equação de Wheeler-DeWitt, $\hat{H}_G = 0$, implicaria num operador de energia que não evolui, ou seja, não há um parâmetro temporal na teoria. Portanto, é necessário introduzir algo a mais além da parte gravitacional da Relatividade Geral, que fará o papel do tempo.

Das opções mais comuns para a escolha do tempo, estão a introdução de um campo escalar na teoria [48, 49], que pode fazer o papel de tempo como um parâmetro externo, assim como ele é na Mecânica Quântica; ou utilizar o conteúdo material do universo para gerar a evolução temporal desejada [50, 51]. Esta última se baseia na termodinâmica, na ideia de que a entropia dá sentido à seta do tempo. Usar um campo escalar como escolha de tempo é interessante, pois na própria Mecânica Quântica o tempo é um parâmetro externo ao sistema, o mesmo ocorre neste caso. A

ideia é considerar uma teoria escalar e linearizar o campo de forma que o seu momento apareça linear na equação. Vamos abordar um exemplo desta situação na próxima Seção. Por enquanto, vamos considerar um fluido perfeito como componente material do universo e mostrar como este pode ser usado como parâmetro temporal, através do Formalismo de Schutz. Em 1970, Bernard Schutz (1946 -) desenvolveu um formalismo para descrever a quadri-velocidade de um fluido bariônico perfeito através de seis potenciais [52]:

$$U_\nu = \frac{1}{\mu}(\epsilon_{;\nu} + \zeta\xi_{;\nu} + \theta s_{;\nu}). \quad (4.24)$$

Os potenciais μ e s são a massa inercial e a entropia do sistema, ζ e ξ estão relacionados com a rotação do fluido e não estão presentes em modelos do tipo FLRW. Já ϵ e θ não têm um claro significado físico [50]. A quadri-velocidade deve obedecer à condição de normalização

$$U^\nu U_\nu = 1. \quad (4.25)$$

Cada potencial possui sua própria “equação de movimento”, que fornece uma descrição hidrodinâmica equivalente às equações usuais baseadas na divergência do tensor de tensão. Schutz mostrou que essa formulação pode ser resultado do princípio variacional de uma Lagrangiana de matéria dada por $\mathcal{L}_M = \sqrt{-g}p$, onde p é a pressão do fluido.

Assim, para obtermos a hamiltoniana de matéria \mathcal{H}_M , introduzimos a componente de matéria, definida pela equação de estado $p = \alpha\rho$, usando o formalismo de Schutz, onde a constante α representa o tipo de matéria da qual o fluido é constituído. Como dissemos, para um universo FLRW, a quadri-velocidade do fluido é dada por

$$U_\nu = \frac{1}{\mu}(\epsilon_{;\nu} + \theta s_{;\nu}). \quad (4.26)$$

Depois de algumas considerações termodinâmicas [53], a Lagrangiana de matéria toma a forma

$$\mathcal{L}_M = -\frac{a^3}{N^{\frac{1}{\alpha}}} \frac{\alpha}{(\alpha+1)^{\frac{1}{\alpha+1}}} (\dot{\epsilon} + \theta\dot{s})^{\frac{1}{\alpha+1}} e^{-\frac{s}{a}}, \quad (4.27)$$

onde já descartamos os termos de superfície. Usando os métodos canônicos descritos no (Apêndice B), a partir desta Lagrangiana obtemos a super-hamiltoniana de matéria

$$\mathcal{H}_M = -\pi_\epsilon^{\alpha+1} a^{-3\alpha} e^s, \quad (4.28)$$

onde $\pi_\epsilon = -N\rho_0 U^0 a^3$, sendo ρ_0 a densidade de repouso do fluido. O próximo passo é linearizar o momento, de forma que a nova coordenada possa assumir o papel de tempo durante a quantização. Vamos usar as transformações canônicas

$$T = -\pi_s e^{-s} \pi_\epsilon^{-(\alpha+1)} \quad ; \quad \pi_T = \pi_\epsilon^{\alpha+1} e^s \quad (4.29)$$

$$\bar{\epsilon} = \epsilon - (\alpha + 1) \frac{\pi_s}{\pi_\epsilon} ; \quad \bar{\pi}_\epsilon = \pi_\epsilon. \quad (4.30)$$

Neste caso, a super-hamiltoniana da componente de matéria se torna

$$\mathcal{H}_M = -\frac{N}{a^{3\alpha}} \pi_T. \quad (4.31)$$

Com isto, a quantização do vínculo da hamiltoniana total $\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_G + \mathcal{H}_M = 0$, sendo \mathcal{H}_G a hamiltoniana da parte gravitacional e \mathcal{H}_M dado pela equação (4.31), pode ser interpretado como uma equação de Schrödinger cujo parâmetro T dado na equação (4.29) é tomado como tempo. Observe que o parâmetro temporal está totalmente ligado ao tipo de matéria escolhido e à entropia s do fluido.

4.5 Teoria de K-essência

Uma teoria escalar é caracterizada pela introdução de um campo escalar externo à geometria do espaço-tempo, podendo estar acoplado ou não à gravidade, que visam explicar alguns problemas em aberto da cosmologia. Vamos abordar nesta Seção a Teoria de K-essência e investigar a possibilidade de obter uma variável temporal de uma forma similar ao emprego das variáveis de Schutz, usando uma lei de potência no termo cinético não-canônico [48]. Dentre várias outras propostas de teorias escalares encontradas na literatura, as *Teorias de K-essência* têm uma posição bastante particular. Criadas inicialmente para descrever a fase inflacionária do universo, estas também têm sido usadas para explicar a fase atual de expansão acelerada. Essa classe de teorias considera termos cinéticos não-canônicos ao invés de um campo escalar autointeragente, como é o caso do caso do campo escalar com um potencial. Em alguns casos, o comportamento de K-essência pode ser recuperado de uma ação de cordas efetiva, como acontece com a ação DBI⁴ [54, 55]. Em um contexto cosmológico, uma das características destas teorias é que, sob algumas hipóteses, elas podem produzir uma dinâmica de fluidos a níveis de fundo e perturbativos. Isso é particularmente verdade para a expressão de lei de potência da energia cinética, que pode reproduzir uma relação linear entre pressão e densidade $p = \alpha\rho$ e a velocidade do som para perturbações adiabáticas do fluido.

A ação da teoria geral de K-essência pode ser escrita como

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} (R - f(X) + V(\phi)), \quad (4.32)$$

⁴Dirac-Born-Infeld.

com $g = \det[g_{\mu\nu}]$, $f(X)$ uma função arbitrária do termo cinético $X = \phi_{;\rho}\phi^{;\rho}$ e $V(\phi)$ um termo potencial. Se $f(X) = X$, a teoria de um sistema minimamente acoplado com um campo escalar autointeragente é recuperada. No que se segue, vamos nos concentrar em leis de potência do modelo de K-essência, para os quais temos $f(X) = \epsilon X^n$, onde n é um número real e $\epsilon = \pm 1$. Com a introdução da constante ϵ , a possibilidade de uma configuração fantasma é levada em conta; o sistema usual de um campo escalar gravitacional corresponde a $n = 1$ e $\epsilon = 1$. Além disso, vamos considerar $V(\phi) = 0$. Neste caso o cenário de fluido cosmológico com $p = \alpha\rho$ e $\alpha = \text{constante}$ é reproduzido pelo modelo de K-essência, observando-se que

$$\alpha = \frac{1}{2n-1}. \quad (4.33)$$

Considerando a métrica FLRW,⁵ depois de integrações por partes e descarte das derivadas totais, a ação (4.32) se reduz a

$$S = \int \left(\frac{6}{N} \dot{a}^2 a - \epsilon a^3 N^{1-2n} \dot{\phi}^{2n} \right) dt. \quad (4.34)$$

Observe que, como o n pode ser um número real arbitrário, $(\dot{\phi})^{2n}$ pode não ser sempre positivo. Para garantirmos analicidade do cálculo do momento, vamos considerar $\dot{\phi}$ positivo, mas podemos estender o resultado para toda a reta real.

Os momentos conjugados correspondentes para o fator de escala \mathbf{a} e o campo escalar ϕ são

$$\pi_a = \frac{12}{N} a \dot{a} \quad ; \quad \pi_\phi = -2n\epsilon a^3 N^{1-2n} \dot{\phi}^{2n-1}. \quad (4.35)$$

Para expressarmos $\dot{\phi}$ em termos de π_ϕ devemos inverter a relação acima. Para $n = 2k$, onde k é um número natural diferente de zero, o radicando deve ser positivo ($\epsilon = -1$); para $n = 2k + 1$, o radicando não precisa ser positivo, mas a analicidade é perdida na origem $\pi = 0$. Apesar disso, vamos prosseguir de forma mais geral, já que a configuração que nos interessa implica condições diferentes para n . A hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = N \left[\frac{1}{24} \frac{\pi_a^2}{a} + (2n-1)(-\epsilon a^3)^{-\frac{1}{2n-1}} \left(\frac{\pi_\phi}{2n} \right)^{\frac{2n}{2n-1}} \right]. \quad (4.36)$$

No limite $n \rightarrow \infty$ o momento conjugado associado a ϕ aparece linear na hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = N \left[\frac{1}{24} \frac{\pi_a^2}{a} + \pi_\phi \right], \quad (4.37)$$

então o campo ϕ pode assumir o papel do tempo na quantização desta teoria. Algumas observações importantes: observe que tal limite, $n \rightarrow \infty$, deve ser tratado com cautela no caso

⁵Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker, que é dada por $ds^2 = N^2(t)dt^2 - a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2)$.

de permitirmos valores negativos para $\dot{\phi}$ uma vez que as sequências $(\dot{\phi})^{2k}$ e $(\dot{\phi})^{2k+1}$ divergem para valores opostos, no caso de $\dot{\phi} < 0$. Porém, este problema pode ser facilmente contornado fazendo a análise separadamente para π_ϕ positivo e negativo e considerando-se o sinal correto ao escrevermos $\dot{\phi}$ em relação ao momento π_ϕ . É possível mostrar que a colagem desta separação é suave. Além disso, note que, mesmo que a hamiltoniana seja bem definida no limite $n \rightarrow \infty$, a lagrangiana não é, divergindo para o caso limite, o que parece ser uma particularidade para um fluido de pressão nula ($\alpha \rightarrow 0$), como o obtido neste caso.

A quantização é feita canonicamente de acordo com a equação (4.4). Depois de fazermos a redefinição $\phi/24 \rightarrow \phi$, a equação de Schrödinger correspondente⁶ se escreve como

$$-\partial_a^2 \Psi - \frac{q}{a} \partial_a \Psi = ai \partial_\phi \Psi, \quad (4.38)$$

onde introduzimos um fator de ordenamento q . Esta é essencialmente a mesma equação encontrada com o formalismo de Schutz em [51]. No que segue, vamos considerar $q = 1$. Neste caso é possível mostrar que o operador hamiltoniano efetivo é autoadjunto [56]. Outras escolhas para q podem ser adotadas sem alteração significativa dos resultados finais. O operador hamiltoniano obtido da equação do tipo Schrödinger (4.38) é simétrico, ou hermitiano, se introduzirmos uma medida não trivial na computação do produto escalar no espaço de Hilbert:

$$(\phi, \psi) = \int_0^\infty \phi^* \psi a^2 da. \quad (4.39)$$

Vamos considerar os estados estacionários Φ tais que $\Psi(a, \phi) = \Phi(a) e^{-iE\phi}$. Então a equação (4.38) toma a forma

$$\partial_a^2 \Phi + \frac{1}{a} \partial_a \Phi + aE\Phi = 0. \quad (4.40)$$

Esta equação é limitada inferiormente e é sempre possível escolher a energia como sendo estritamente positiva, isto é, $E > 0$, o que é importante para a estabilidade do sistema. Fazendo $4E/9 \rightarrow E$, a equação (4.40) é uma equação de Bessel cuja solução é dada por

$$\Phi(a) = A(E) J_0 \left(E a^{\frac{3}{2}} \right), \quad (4.41)$$

onde $A(E)$ é um fator de normalização. Descartamos a segunda solução da equação de Bessel, que é uma função de Neumann, pois esta diverge na origem.

⁶Lembrando que $\hbar = 1$

A solução da equação (4.41) pode levar a um cenário cosmológico não-singular, como mostrado em [51]. De fato, vamos considerar um pacote de ondas construído com a seguinte superposição

$$\Psi_\phi(a) = \int_0^\infty y e^{-\alpha y^2} J_0\left(y a^{\frac{3}{2}}\right) dy = \frac{1}{2(\gamma + i\phi)} e^{-\frac{a^3}{4(\gamma + i\phi)}}, \quad (4.42)$$

com $y = \sqrt{E}$ e $\alpha = \gamma + i\phi$, sendo $\gamma > 0$. Agora, calculamos o valor esperado para o fator de escala, considerando ϕ a variável temporal correspondente. O valor esperado é

$$\langle a \rangle_\phi = \int_0^\infty \Psi^* a \Psi a^2 da = C(\gamma^2 + \phi^2)^{\frac{1}{3}}, \quad (4.43)$$

sendo C uma constante. Isto implica num possível universo com ricochete, sem singularidade, pois $\langle a \rangle \geq C\gamma^{2/3}$. Além disso, assintoticamente, ou seja, quando $\phi \rightarrow \infty$, temos $\langle a \rangle \propto \phi^{2/3}$.

Podemos facilmente verificar que a correspondência com o cenário cosmológico clássico é recuperado assintoticamente. Usando FLRW, encontramos as equações diferenciais (Equações de Friedmann⁷), fixando o tempo cósmico tal que $N = 1$:

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{2n-1}{6} \epsilon \dot{\phi}^{2n} \quad ; \quad \dot{\phi}^{2n-1} = K a^{-3}, \quad (4.44)$$

onde K é uma constante de integração. Portanto, temos a seguinte equação para o fator de escala:

$$3\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \bar{K} a^{-\frac{6n}{2n-1}} =: \rho_\phi, \quad (4.45)$$

sendo \bar{K} uma combinação das constantes anteriores. A solução geral é dada por

$$a \propto t^{\frac{2n-1}{3n}} \quad ; \quad \phi \propto t^{\frac{n-1}{n}}. \quad (4.46)$$

No limite $n \rightarrow \infty$, a solução se torna:

$$a \propto t^{\frac{2}{3}} \quad ; \quad \phi \propto t. \quad (4.47)$$

Esta última relação confirma a afirmação anterior que ϕ pode essencialmente fazer o papel do tempo no limite $n \rightarrow \infty$. Além disso, neste limite o fator de escala se comporta como em um universo dominado por poeira. Classicamente temos a relação $a \propto t^{\frac{2}{3}}$, que suporta o resultado encontrado assintoticamente para o modelo quântico. Vale ressaltar que estes resultados são os mesmos encontrados em [51] para um fluido perfeito utilizando o formalismo de Schutz. Assim, do ponto de vista dos resultados, não há originalidade. A novidade está no formalismo utilizado nesta seção.

⁷ $\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi}{3}\rho - \frac{K}{a^2}$ e $\frac{\ddot{a}}{a} = \frac{4\pi}{3}(\rho + 3p)$, onde ρ e p são a densidade de energia própria e a pressão do fluido, respectivamente.

Capítulo 5

Aplicações

Na Cosmologia Quântica, a função de onda do universo é obtida a partir da equação (4.11) de Wheeler-DeWitt (WDW), que é independente do tempo e, conseqüentemente não temos dinâmica quântica. Nesse sentido, a interpretação de Copenhague da Cosmologia Quântica tem alguns problemas conceituais sérios: A impossibilidade de uma divisão clara de todo o universo no observador e no observado dificulta uma interpretação física nítida para a função de onda. Conseqüentemente não pode haver qualquer “função de onda” lapso como na Mecânica Quântica padrão. Além disso, assumindo a existência de apenas um universo observável, a interpretação do quadrado absoluto da função de onda como uma densidade de probabilidade é impossível. Para encontrar uma solução para os problemas acima mencionados, o caminho direto poderia ser a interpretação de de Broglie-Bohm (dBB). A interpretação de dBB é favorável, especialmente para uma teoria quântica da cosmologia, porque essa interpretação é capaz de resolver os problemas conceituais da Cosmologia Quântica [58-60]. No entanto, temos um problema no uso dessa interpretação na Cosmologia Quântica: ela não pode descrever as trajetórias e as velocidades não nulas para as funções de onda reais da Cosmologia Quântica.

Nos últimos anos, a formulação de Hamilton-Jacobi Quântica (HJQ) foi desenvolvida como uma nova interpretação alternativa da Mecânica Quântica [59-61] que foi desenvolvida por Leacock e Padgett [62-64]. Uma das vantagens desse formalismo, que segue a Mecânica Clássica de perto, é que ele não enfrenta o problema da estacionariedade (velocidade zero) de partículas em estados ligados, encontradas na representação de de Broglie [65, 66]. A formulação HJQ pode ser introduzida da seguinte forma. Nós empregamos $\Psi = e^{iS(q^\mu)}$, onde S e $q^\mu \in \mathbb{C}$, na equação de onda correspondente do sistema quântico para obter uma única equação de HJQ [59-61].

Como a função ação S é um valor complexo, a posição e o momento conjugado das partículas também são complexos. Esse formalismo tem sido usado para obter os autovalores de energia para muitos problemas unidimensionais de estado ligado e problemas separáveis em dimensões mais altas para potenciais solúveis [67, 68]. Além da determinação de autovalores de energia, esse formalismo tem sido usado para obter trajetórias quânticas no espaço complexo. Ao contrário do formalismo dBB, a trajetória quântica complexa de uma partícula pode ser obtida no formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico para estados estacionários e não-estacionários através da equação HJQ e da função momento, que é analiticamente estendida ao espaço complexo [69-74].

5.1 Interpretação de Hamilton-Jacobi Quântico do Mini-superespaço

Revisaremos brevemente os modelos cosmológicos quânticos de mini-superespaço no contexto de HJQ desenvolvidos por Fathi, Jalalzadeh e Moniz em [79]. Vamos começar com o elemento de linha do espaço-tempo que é dado por

$$ds^2 = -N^2(t)dt^2 + h_{ij}dx^i dx^j, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (5.1)$$

onde a métrica-3 h_{ij} é restrita a ser homogênea. Então a suposição de homogeneidade de campos de matéria nos leva a seguinte lagrangiana de Einstein-Hilbert mais os campos de matéria

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2N} f_{\alpha\beta}(q^\mu) \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta - NU(q^\mu) \quad (5.2)$$

onde $\alpha, \beta = 0, 1, \dots, n-1$, $f_{\alpha\beta}$ é a métrica n-dimensional do mini-superespaço com a assinatura $(-, +, \dots, +)$, q^α denota as coordenadas locais do mini-superespaço e $U(q^\mu)$ é a particularidade de $-\sqrt{\hbar}R^{(3)}(h_{ij}) + V(\text{campos de matéria})$. O momento canônico conjugado à coordenada q^α é

$$\Pi_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}^\alpha} = \frac{1}{N} f_{\alpha\beta} \dot{q}^\beta. \quad (5.3)$$

Assim, a hamiltoniana canônica será

$$H_c = \Pi_\alpha \dot{q}^\alpha - \mathcal{L} = N \left[\frac{1}{2} f^{\alpha\beta} \Pi_\alpha \Pi_\beta + U(q^\mu) \right]. \quad (5.4)$$

A escolha da função de lapso, N , nos leva à restrição da super-hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} f^{\alpha\beta} \Pi_\alpha \Pi_\beta + U(q^\mu) \approx 0. \quad (5.5)$$

A quantização canônica da super-hamiltoniana (5.5) é realizada em representação de coordenadas, $q^\alpha = q^\alpha, \Pi_\alpha = -i\partial_\alpha$, e exigindo a aniquilação da função de onda independente do tempo por super-hamiltoniano hermitiano.

$$\mathcal{H}(q^\alpha, -i\partial_\beta)\Psi(q^\mu) = 0. \quad (5.6)$$

A equação de WDW (5.6) é independente de um parâmetro de tempo externo e, consequentemente, não há parâmetro de evolução preferido.

Vamos agora rever a Cosmologia Quântica do mini-superespaço no contexto do formalismo de HJQ desenvolvido em [79]. A equação de HJQ de valor complexo é prontamente obtida substituindo-se a forma polar da função de onda de valor complexo [59-61]

$$\Psi(q^\mu) = e^{iS(q^\mu)}, \quad q^\mu \quad e \quad S(q^\mu) \in \mathbb{C}, \quad (5.7)$$

na equação de WDW (5.6). Observe que a função ação, S , e as coordenadas do mini-superespaço, q^μ , são analiticamente estendidas para os valores complexos. Substituindo (5.7) na equação de WDW (5.6) nos dá uma equação de HJQ

$$\frac{1}{2}f^{\alpha\beta}\nabla_\alpha S\nabla_\beta S + U(q^\mu) + Q(q^\mu) = 0. \quad (5.8)$$

Na equação anterior Q denota o potencial quântico complexo definido por

$$Q = \frac{1}{2i}\square S = -\frac{1}{2}\left(\frac{\square\Psi}{\Psi} - f^{\alpha\beta}\frac{\nabla_\alpha\Psi\nabla_\beta\Psi}{\Psi^2}\right), \quad (5.9)$$

onde $\square = f^{\alpha\beta}\nabla_\alpha\nabla_\beta$ é o operador D'Alembert. Note que não há expansão em potências na derivação e (5.8) é exato. O formalismo de HJQ aplicado à Cosmologia Quântica afirma que as trajetórias quânticas são complexas onde essas trajetórias são independentes dos observáveis dadas pela equação de HJQ (5.8). A equação de orientação, em analogia à Mecânica Bohmiana padrão, é dada por [79, 63-67]

$$\Pi_\alpha = \Pi_\alpha S, \quad \Pi_\alpha \in \mathbb{C}, \quad (5.10)$$

onde o momento quântico complexo, Π_α , está relacionado com o campo de velocidade por [79]

$$\Pi_\alpha = \frac{1}{N}f_{\alpha\beta}\dot{q}^\beta, \quad N \in \mathbb{C}. \quad (5.11)$$

Além disso, as equações (5.8) e (5.10) nos dão a restrição complexa da super-hamiltoniana quântica

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}f^{\alpha\beta}\Pi_\alpha\Pi_\beta + \frac{1}{2i}f^{\alpha\beta}\nabla_\alpha\Pi_\beta + U = 0, \quad (5.12)$$

que é uma equação diferencial parcial do tipo Riccati. Para obter trajetórias quânticas complexas, precisamos resolver a equação diferencial parcial anterior. Além disso, a invariância da função de onda (5.7) em relação à adição à função ação por um múltiplo inteiro de 2π e a definição de momento em (5.10) fornece

$$\oint_C \Pi_\alpha dq^\alpha = 2n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.13)$$

onde C é um contorno no sentido anti-horário no espaço de configuração complexo, envolvendo a linha real entre os pontos de virada clássicos. A última equação representa a compatibilidade da HJQ (5.12) e a equação de WDW (5.6). Embora esta abordagem pareça semelhante ao esquema familiar de WKB, vale a pena ressaltar que a equação (5.13) reproduz os autovalores exatos de energia quantizada [80].

Vamos agora aplicar esse formalismo da Cosmologia Quântica, como um exemplo, ao modelo plano de mini-espaço aberto FLRW com fluido perfeito como campo de matéria. Em princípio, devido à natureza quântica do modelo, o conteúdo da matéria deve ser descrito por alguns tipos de campos fundamentais, como feito em [81]. No entanto, soluções exatas gerais são difíceis de encontrar na presença de campos fundamentais e a estrutura espacial de Hilbert é obscura e é uma questão sutil para recuperar a noção de um tempo semiclássico [80, 81]. É claro que usar fluidos perfeitos é essencialmente semiclássico desde o início, por outro lado, há a vantagem de introduzir uma variável conectada com os graus de liberdade da matéria que podem naturalmente ser identificados com o tempo, levando a uma estrutura espacial de Hilbert bem definida [83-88]. Outra característica atraente da descrição fenomenológica do grau de liberdade da matéria é que ela nos permite tratar a equação barotrópica do estado.

5.2 Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi com Fluido Perfeito

Vamos considerar agora a métrica espacialmente plana de Robertson-Walker

$$ds^2 = -N^2(t)dt^2 + a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2). \quad (5.14)$$

A ação funcional correspondente ao modelo consiste de uma parte gravitacional e uma parte da matéria (que é considerada como um fluido perfeito) é dada por [89].

$$\mathcal{A} = \frac{1}{16\pi G} \int R\sqrt{-g}d^4x - \int \rho\sqrt{-g}d^4x, \quad (5.15)$$

onde $\rho = \sum \rho_i$ é a densidade total de energia do fluido com componentes ρ_i . Para obter as equações dinâmicas corretas a partir de uma variação da ação funcional acima, é necessário exigir que o vetor atual do fluido seja conservado covariantemente. Para componentes fluidos perfeitos não-interativos, com a equação barotrópica de estado $p_i = \omega_i \rho_i$, a conservação covariante do campo vetorial atual fornece $\rho_i = \rho_{0i} \left(\frac{a}{a_0}\right)^{-3(1+\omega_i)}$, onde ω_i denota a equação do parâmetro de estado do i -ésimo componente do fluido e o subscrito zero representa os valores na época do tempo de medição. Para simplificar a ação funcional definimos uma nova coordenada de tempo adimensional por $\eta = H_0 t$, onde H_0 é o parâmetro Hubble. Além disso, definimos um fator de escala adimensional como $x = \frac{a}{a_0}$ e reescrevermos as densidades de energia em função dos parâmetros de densidade cosmológica $\Omega_i = \frac{8\pi G}{3H_0^2} \rho_{0i}$ na época da medição. Um cálculo direto mostra que a lagrangiana do modelo, até uma constante multiplicativa $\frac{3V_3 H_0 a_0^3}{4\pi G}$ onde V_3 é o volume espacial de métricas-3, será dada por

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\dot{x}^2}{\tilde{N}} + \sum_i \Omega_i x^{1-3\omega_i} \right), \quad (5.16)$$

onde definimos a função lapso conforme $\tilde{N} = \frac{N}{x}$ e sobre a diferenciação em relação a η . O momento conjugado para o fator de escala adimensional, x , e a função lapso, \tilde{N} , são dados por

$$\Pi_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = -\frac{\dot{x}}{\tilde{N}}, \quad \Pi_{\tilde{N}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\tilde{N}}} = 0. \quad (5.17)$$

O hamiltoniano canônico acaba por ser

$$H_c = \tilde{N} \left(-\frac{\Pi_x^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_i \Omega_i x^{1-3\omega_i} \right). \quad (5.18)$$

A liberdade do medidor na escolha da função lapso nos dá a restrição do super hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{\Pi_x^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_i \Omega_i x^{1-3\omega_i} \approx 0. \quad (5.19)$$

Além disso, a equação de campo clássica é

$$\frac{d}{d\eta} \left(\frac{\dot{x}}{\tilde{N}} \right) - \frac{\tilde{N}}{2} \sum_i (1 - 3\omega_i) \Omega_i x^{-3\omega_i} = 0. \quad (5.20)$$

Na alavanca quântica, o super-hamiltoniano (5.20), promovendo as variáveis canônicas aos operadores, dá a equação de WDW correspondente

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \sum_i \Omega_i x^{1-3\omega_i} \Psi(x) = 0. \quad (5.21)$$

5.2.1 Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi com Fluido Perfeito de uma Componente

Vamos primeiro considerar um modelo muito simples, onde o fluido tem apenas um componente. Neste caso, a solução clássica de campo equações (5.19) e (5.20) na medida $\tilde{N} = 1$ é dada por

$$x = \left(\frac{\sqrt{\Omega}}{2} (3\omega + 1)\eta \right)^{\frac{2}{3\omega+1}}. \quad (5.22)$$

A equação (5.21) neste caso será reduzida para

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \Omega x^{1-3\omega} \Psi(x) = 0. \quad (5.23)$$

Note que o domínio da definição do fator de escala adimensional é, $x \in (0, \infty)$, portanto, o operador super-hamiltoniano, \mathcal{H} , é definido em um domínio denso $D(\mathcal{H}) = C_0^\infty(0, \infty)$. Então, o super-hamiltoniano é hermitiano (ou simétrico) se a função de onda satisfizer a condição de contorno de DeWitt [90]

$$\Psi(0) = 0. \quad (5.24)$$

A solução de WDW equação (5.23) com a condição de contorno (5.24) é a função de Bessel do tipo um

$$\Psi(x) = \mathcal{N} \sqrt{x} J_{\frac{1}{3(1-\omega)}} \left(\frac{2\sqrt{\Omega}}{3(1-3\omega)} x^{\frac{3(1-\omega)}{2}} \right). \quad (5.25)$$

A função de onda (5.25) é real e, conseqüentemente, na cosmologia Bohmiana [58-60], o fator de escala não tem dinâmica.

Vamos investigar o formalismo de HJQ do modelo de exemplo. Na primeira etapa, precisamos estender a coordenada x , para o domínio complexo, $x = x_R + ix_I \in \mathbb{C}$. Inserindo (5.7) na equação de WDW (5.23) dá a equação de HJQ com valor complexo

$$-\Pi_x^2 + i \frac{d\Pi_x}{dx} + \Omega x^{1-3\omega} = 0, \quad (5.26)$$

com condição de contorno (equivalente à condição de contorno DeWitt (5.24)) $\Pi_x(0) = \infty$. Agora, em vez de WDW equação (4.23) lidamos com a complexa restrição super-hamiltoniana quântica (5.26). A solução de (5.26) é

$$\Pi_x = i \left(\frac{J_{\frac{4-3\omega}{3(1-\omega)}} \left(\frac{2\sqrt{\Omega}}{3(1-\omega)} x^{\frac{3(1-\omega)}{2}} \right)}{J_{\frac{1}{3(1-\omega)}} \left(\frac{2\sqrt{\Omega}}{3(1-\omega)} x^{\frac{3(1-\omega)}{2}} \right)} \sqrt{\Omega} x^{\frac{1-3\omega}{2}} - \frac{1}{x} \right), \quad (5.27)$$

onde o momento complexo quântico, Π_x , está relacionado com a velocidade pela equação (5.17) ou equivalentemente

$$\Pi_x = -\frac{1}{\tilde{N}} \frac{dx}{d\eta}. \quad (5.28)$$

No entanto, um tratamento analítico de (5.27) e (5.28) não parece viável. Portanto, usamos as seguintes formas assintóticas da função de Bessel do tipo um para um argumento complexo

$$J_\nu(z) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu & , \quad 0 < |z| \ll \sqrt{1+\nu}, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} \exp\left(i\left(z - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right) & , \quad |z| \gg 1. \end{cases} \quad (5.29)$$

A solução aproximada das Equações. (5.27) e (5.28) na medida $\tilde{N} = 1$ então será

$$\begin{cases} x_R = -x_I = \sqrt{\eta} & , \quad 0 < |x| \ll \sqrt{\frac{4-3\omega}{3(1-\omega)}}, \\ x_I = 0, \quad x_R = \left(\frac{(3\omega+1)\sqrt{\Omega}}{2}\eta\right)^{\frac{2}{3\omega+1}} & , \quad |x| \gg 1 \end{cases} \quad (5.30)$$

Essas soluções mostram que, no universo primitivo, o fator de escala complexo cresce com a raiz quadrada do tempo conformado (como uma matéria rígida ou um campo escalar sem massa) quando os efeitos quânticos são dominados. Esse comportamento é independente do tipo de fluido perfeito e a origem da matéria dura é a quantização. Por outro lado, para grandes valores de fator de escala, $|x| \gg 1$, a parte imaginária do fator de escala desaparece e temos um universo clássico emergente.

5.3 Cosmologia Quântica de Hamilton-Jacobi de um Universo Feito de Poeira e Radiação

Como segundo exemplo, consideremos um fluido de poeira não interativa, $\omega_d = 0$ e radiação, $\omega_r = \frac{1}{3}$. A solução clássica das equações de campo. (5.19) e (5.20) é dada por

$$x = \frac{\Omega_d}{4}\eta^2 + \sqrt{\Omega_r}\eta, \quad (5.31)$$

onde ω_d e ω_r são os parâmetros de densidade de poeira e radiação, respectivamente. A equação de WDW (5.21) para este caso é

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + (\Omega_d x + \Omega_r)\Psi(x) = 0. \quad (5.32)$$

A solução da equação (5.32) com condição de contorno (5.24) é

$$\Psi(x) = \mathcal{N} Ai\left(-(\Omega_d x + \Omega_r)\Omega_d^{-\frac{3}{2}}\right), \quad (5.33)$$

onde $Ai(x)$ é a função Imaginário do tipo um e \mathcal{N} denota a constante de normalização. Semelhante ao primeiro exemplo, a função de onda de valor real (5.33) implica que a Bohmiana momentânea se desvanece e, conseqüentemente, as trajetórias Bohmianas simplesmente ficam em um lugar.

Vamos investigar o HJQ do modelo. Semelhante ao exemplo anterior, estendemos a coordenada x para o domínio complexo, $x = x_R + ix_I \in \mathbb{C}$. Agora, ao invés de utilizar a equação de WDW (5.32) lidamos com a complexa restrição super-hamiltoniana quântica (5.12), que é dada pela seguinte equação:

$$-\Pi_x^2 + i \frac{d\Pi_x}{dx} + \Omega_d x + \Omega_r = 0, \quad (5.34)$$

onde a condição de contorno, equivalente à condição de contorno DeWitt (5.24), é $\Pi_x(0) = \infty$. A solução desta equação é do tipo Riccati

$$\Pi_x(0) = i\Omega_d^{\frac{1}{3}} \frac{Ai'(u)}{Ai(u)}, \quad (5.35)$$

onde $u = -(\omega_d x + \Omega_r)\omega_d^{-\frac{2}{3}}$, $Ai'(u) = \frac{dAi(u)}{du}$ e o momento quântico complexo está relacionado com a velocidade pela equação (5.28). Usando a condição de contorno DeWitt na função de onda (5.33), ou equivalentemente $\Pi(0) = \infty$ em (5.35) obtemos, $-\omega_r \Omega_r^{-\frac{2}{3}} = a_n$ onde a_n são as raízes imaginária da função. Para grandes valores de n , as raízes são dadas por $a_n = -\left(\frac{3\pi}{2}(n - \frac{1}{4})\right)^{\frac{2}{3}}$ onde n é um inteiro. Isso nos dá a condição de quantização para a razão dos parâmetros de densidade

$$\Omega_r \Omega_d^{-\frac{2}{3}} = \left(\frac{3\pi}{2}(n - \frac{1}{4})\right)^{\frac{2}{3}}. \quad (5.36)$$

Um tratamento analítico das equações (5.28) e (5.35) não parece viável e usamos a seguinte forma assintótica da função imaginária do tipo um

$$Ai(u) = \begin{cases} \frac{dAi(\zeta)}{d\zeta}|_{\zeta=a_n} \Omega_d^{\frac{1}{3}} x & , |x| \ll 1, \\ u^{-\frac{1}{4}} \exp(-\frac{2i}{3}u^{\frac{3}{2}}) & , |x| \gg 1, \end{cases} \quad (5.37)$$

onde $u = -(\Omega_d x + \omega_r)\Omega_d^{-\frac{2}{3}}$. Assim, a solução aproximada das equações (5.28) e (5.35) na medida $\tilde{N} = 1$ será

$$\begin{cases} x_R = x_I = \sqrt{\eta} & , |x| \ll 1, \\ x_I = 0, x_R = \frac{\Omega_d}{4}\eta^2 + \sqrt{\Omega_r}\eta & , |x| \gg 1. \end{cases} \quad (5.38)$$

A solução acima mostra que no universo primordial, onde os efeitos quânticos são dominados, o fator de escala é complexo e cresce como o fator de escala de um universo preenchido com

um campo escalar sem massa. Por outro lado, para grandes valores de fator de escala, a parte imaginária do fator de escala desaparece e o movimento é inteiramente clássico. A solução para $|x| \gg 1$ no tempo de medição η_0 dá $\Omega_d + \Omega_r = 1$. Portanto, usando esta condição e a equação (5.36) podemos obter os parâmetros de densidade de radiação e poeira em termos de número quântico n . Para valores muito grandes de n , temos

$$\begin{cases} \Omega_d \simeq \frac{2}{3\pi n} & , \quad \Omega_r \simeq 1, \\ x_R = \eta & , \quad x_I = 0 \end{cases} \quad (5.39)$$

Assim, o universo emergente torna-se completamente clássico, com espaço real do mini-esuperespaço, radiação dominada e a densidade de poeira é menor em muitas ordens de grandeza.

Considerações Finais

Durante esta dissertação foi analisado o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico que fornece uma formulação alternativa da Mecânica Quântica não-relativista. Neste formalismo, a função de onda é expressa pela função ação complexo $\Psi = \text{Re}xp(\frac{iS}{\hbar})$. A principal característica deste formalismo é que os autovalores de energia do estado ligado podem ser determinados pela variável de ação quântica sem explicitamente resolver a equação dinâmica. Este método tem sido usado para obter os autovalores de energia para muitos problemas unidimensionais de estado ligado e problemas separáveis em dimensões para potenciais solúveis. Além da determinação de autovalores de energia, o formalismo Hamilton-Jacobi Quântico tem sido usado para obter trajetórias quânticas no espaço complexo.

Primeiramente o formalismo de Hamilton-Jacobi foi analisado para resolver problemas clássicos unidimensional como partícula livre, oscilador harmônico e oscilador harmônico amortecido. Notou-se que esse formalismo é um método construtivo que permite em muitos casos produzir uma transformação canônica que simplifica de forma considerável resolver as equações de movimento de um sistema mecânico.

Por fim usamos o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico para resolver alguns problemas da Mecânica Quântica como o oscilador harmônico quântico, potencial degrau e a probabilidade do campo de velocidade. Com isso verificamos que o formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico de fato é uma forma alternativa da Mecânica Quântica, com a uma característica primordial onde os autovalores de energia do estado ligado podem ser determinados pela variável de ação quântica sem explicitamente resolver a equação dinâmica. O formalismo de Hamilton-Jacobi Quântico com aplicação na Cosmologia Quântica onde a função de onda do universo é obtida a partir da equação de Wheeler-DeWitt, a principal vantagem desse formalismo é que ele segue a Mecânica Clássica de perto, sendo assim não enfrenta problemas de estacionariedade (velocidade zero) de partículas em estados ligados.

A partir deste trabalho pretendemos escrever um artigo relacionando a Cosmologia Quântica para uma classe de problemas em aberto como a interpretação do Mini-superespaço e o universo feito de poeira e radiação.

Apêndice A

Potencial Quântico de Bohm e a Equação de Hamilton-Jacobi Quântico

Para relacionar o potencial quântico $Q(x)$ definido na equação (3.35) para o potencial quântico de Bohm $Q_B(x)$, vamos primeiro expressar a ação na equação (3.29) em termos de duas funções de valor real, $S = s - i\hbar c$. Em termos dessas funções, a função de onda é dada por $\Psi = e^{(c + \frac{iS}{\hbar})}$ e a função de momento quântico é

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial s}{\partial x}. \quad (\text{A.1})$$

Esta expressão será então substituída na EHJQ dada na equação (3.34), e a equação resultante será então separada em partes reais e imaginárias.

A parte imaginária dá a equação

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial s}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Esta equação também pode ser obtida a partir da equação de continuidade para estados estacionários,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0. \quad (\text{A.3})$$

Essa conexão é feita substituindo as expressões para a densidade de probabilidade, $\rho = e^{2c}$, e a velocidade de fluxo, $v = (1/m)\partial s/\partial x$, na equação (A.3).

A parte real da equação mencionada anteriormente é

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial s}{\partial x} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \right] = E - V. \quad (\text{A.4})$$

O segundo termo entre colchetes é o potencial quântico de Bohm,

$$Q_B(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{A.5})$$

Nesta equação, o primeiro termo surge do termo p^2 na EHJQ, equação (3.34), e o segundo termo surge do potencial quântico, $Q = [\hbar/(2m)]\partial p/\partial x$. O potencial de Bohm na equação (A.5) pode ser expresso de uma forma mais familiar, usando a relação $R = e^c$, para que possamos obter

$$Q_B(x) = -\frac{\hbar^2}{2mR} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \right). \quad (\text{A.6})$$

Esta análise mostra que o potencial quântico de Bohm Q_B surge de dois termos na EHJQ dado na equação (3.34) o qual não é idêntico ao potencial quântico Q definido na equação (3.35).

Apêndice B

Vínculos na Relatividade Geral

As equações de campo são obtidas variando-se a ação

$$S = \int_{\mathcal{D}} \mathcal{L} d^4x, \quad (\text{B.1})$$

onde \mathcal{D} , \mathcal{L} e d^4x são respectivamente o domínio da função, a Lagrangiana e a medida do espaço-tempo. O *princípio da mínima ação* diz que a variação da ação é nula, ou seja, $\delta S = 0$. Desta equação, considerando que a Lagrangiana só depende das derivadas primeiras dos campos, obtemos as *equações de Euler-Lagrange*

$$\frac{\delta S}{\delta \Phi_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} - \nabla_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla_\mu \Phi^i)} \right) = 0, \quad (\text{B.2})$$

válidas para todo i , isto é, para todo campo expresso na Lagrangiana.

Das *Equações de Hamilton* (1.10), o equivalente a Equação de Euler-Lagrange, obtemos os seguintes vínculos

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial N} = -\mathcal{H}_0 = -\dot{\pi}^N = 0; \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial N^i} = \mathcal{H}_i = -\dot{\pi}_i = 0. \quad (\text{B.4})$$

Apêndice C

Aspectos Matemáticos do Operador Momento

Os problemas de caráter autoadjuntos apresentados na seção 3 do Capítulo 4 aparecem por um motivo em especial: o domínio considerado para as variáveis do mini-superespaço é a semirreta real, isto é, as variáveis são estritamente positivas. Neste domínio, o operador momento \hat{P} , no caso, o operador de derivação, não é autoadjunto. Este problema é herdado pelo operador Hamiltoniano, que é, como visto, escrito em função dos operadores posição. Neste apêndice, vamos fazer uma análise matemática sobre este operador e sobre \hat{P}^2 , seguindo as referências [44, 45]. No mini-superespaço que consideramos para uma teoria escalar tensorial, temos $a > 0$ e $\phi > 0$, sendo a o fator de escala e ϕ o campo escalar da teoria. Porém, para apresentar um melhor exemplo de como as ferramentas matemática apresentadas na Seção 4.3, vamos considerar neste apêndice o operador momento no segmento $[0, 1]$.

Seja $\hat{P} = id/dx$ o operador momento, com o domínio sendo os conjuntos de todas as funções ϕ absolutamente contínuas que se anulam na fronteira. Isto é:

$$D(T) = \{\phi | \phi \in AC[0, 1], \phi(0) = 0 = \phi(1)\} : \quad (C.1)$$

sendo $AC[0, 1]$ é o conjunto das funções absolutamente contínuas, em outras palavras, contínua a menos de um número enumerável de pontos, de forma que seu fecho é contínuo. O operador \hat{P} é simétrico neste domínio. De fato:

$$\langle \psi, \hat{P}\phi \rangle = i \int_0^1 \psi^* \left(\frac{d}{dx} \phi \right) dx = i[\psi^* \phi]_0^1 - i \int_0^1 \left(\frac{d}{dx} \psi^* \right) \phi dx = \int_0^1 (\hat{P}\psi)^* \phi dx = \langle \hat{P}\psi, \phi \rangle. \quad (C.2)$$

Assim, temos que $\hat{P}^* = \hat{P}$. Aplicando o método de von Neumann, vamos encontrar as soluções linearmente independentes da equação de autovalor

$$\hat{P}^* \phi = i \frac{d}{dx} \phi = \pm i \phi. \quad (\text{C.3})$$

Essa equação tem duas soluções linearmente independentes para o segmento $[0,1]$:

$$\phi_+ = e^x \quad ; \quad \phi_- = e^{-x}. \quad (\text{C.4})$$

Portanto, os índices de deficiência deste operador são $n_+ = n_- = 1$ e então este operador possui extensões autoadjuntas.

As extensões \hat{P}_α são dadas pelo conjunto das funções ψ que satisfazem

$$\langle \phi, \hat{P}\psi \rangle = \langle \hat{P}\phi, \psi \rangle, \quad (\text{C.5})$$

com $\phi = \phi_+ + \lambda \phi_-$, sendo λ um número real qualquer. Assim,

$$\langle \phi, \hat{P}\psi \rangle = i \int_0^1 (e^x + \lambda e^{-x}) \left(\frac{d}{dx} \psi \right) dx = i [(e^x + \lambda e^{-x})\psi]_0^1 - i \int_0^1 (e^x - \lambda e^{-x}) \psi dx = \quad (\text{C.6})$$

$$i \left[\left(e + \frac{\lambda}{e} \right) \psi(1) - (1 + \lambda) \psi(0) \right] + \langle \hat{P}\phi, \psi \rangle, \quad (\text{C.7})$$

ou seja, devemos ter

$$\left(e + \frac{\lambda}{e} \right) (1 + \lambda)^{-1} \lambda(1) - \lambda(0) = 0 \quad \implies \quad \lambda(0) = \lambda \lambda(1), \quad (\text{C.8})$$

com $\lambda = (e + \lambda e^{-1})(1 + \lambda)^{-1}$. Portanto, as extensões \hat{P}_α são tais que seus domínios são dados pela condição acima. Como α é arbitrário, temos que o operador momento possui infinitas extensões.

Lembrando que a extensão é construída a partir da forma quadrática (4.20), $q(\phi, \psi) = \langle \phi, T\psi \rangle$, e seu domínio $Q(q)$ deve ser fechado sob a norma (4.19). Relembrando:

$$\|\psi\|_{+1}^2 = \|\psi\|^2 + q(\psi, \psi). \quad (\text{C.9})$$

Isso significa que, dada uma sequência de funções $\{\psi_n\} \subset Q(q)$ convergentes tais que $\psi_n \rightarrow \psi$ na norma $\|\cdot\|_{+1}$, então $\psi \in Q(q)$. Em outras palavras,

$$\|\psi - \psi_n\|_{+1}^2 \rightarrow 0. \quad (\text{C.10})$$

Neste caso, a norma da forma é dada por

$$\|\psi\|^2 = - \int_0^1 \psi^* \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi \right) dx + \|\psi\|^2 = \int_0^1 \left(\frac{d}{dx} \psi \right)^2 dx + \|\psi\|^2 = \|\psi'\|^2 + \|\psi\|^2. \quad (\text{C.11})$$

Assim, tomando funções $\psi_n \in Q(q)$, a condição $\|\psi - \psi_n\|_{+1}^2 \rightarrow 0$ nos diz que precisamos ter

$$|\psi_n(a) - \psi(a)| \rightarrow 0, \quad (\text{C.12})$$

para todo $a \in (0, 1)$ já que função e derivada, neste caso, devem convergir. Em particular, devemos ter $\psi(0) = 0 = \psi(1)$, já que as derivadas tem que convergir suavemente também. Assim, a extensão de Friedrich do operador $-d^2/dx^2$ é a extensão autoadjunta que possui condições de fronteira $\psi(0) = 0 = \psi(1)$. O espectro desta extensão é $\{(n\pi)^2; n \in \mathbb{N}\}$, que correspondem aos autofunções $\{\sin(n\pi x)\}$. Como o operador é limitado inferiormente por π , a extensão também o é [57].

Referências Bibliográficas

- [1] LEMOS, Nivaldo A. *Mecânica Analítica*: 2. ed. São Paulo: Editora livraria da Física, 2007. cap. 9, p. 281-292.
- [2] Bohm D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, (1951).
- [3] Bohm D., *Phys. Rev.* **85**, 166 (1952).
- [4] de Broglie L., *J. de Phys.* **8**, 225 (1927).
- [5] D. Bohm (1952) 'A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I' *Physical Review*, **85**, 2, 166-179.
- [6] L. de Broglie (1924) 'Recherches sur la theorie des quanta' Thesis.
- [7] A. Valentini (2008) 'De Broglie-Bohm Pilot-Wave Theory: Many Worlds in Denial' *arXiv: 0811.0810 v2*.
- [8] D. Bohm (1952) 'A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. II' *Physical Review*, **85**, 2, 180-193
- [9] B. J. Mokross. Não-Localidade na Mecânica Quântica *Revista Brasileira de Ensino de Física.*, São Paulo, vol. 19, nº. 1, p 145-156, março, 1997.
- [10] D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker, M. R. Burns, C. E. Dudley, S. T. Forth, J. S. Gaumer, M. A. Kramer, D. C. Oertel, L. H. Park, M. T. Rinkoski, C. T. Smith, and T. D. Wotherspoon, *Am. J. Phys.* **70**, 288 (2002).
- [11] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 3 (1983).
- [12] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. D* **28**, 2491 (1983).
- [13] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Am. J. Phys.* **65**, 1187 (1997).

- [14] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Mod. Phys. Lett. A.* **12**, 295 (1997). 0217-7323
- [15] S. S. Ranjani and A. K. Kapoor, *Int. J. Mod. Phys. A.* **20**, 4067 (2005). 0217-751X
- [16] VILLAR, A. S. *Mecânica Clássica*, Notas de Aula, Departamento de Física, Universidade federal de Pernambuco-UFPE, Recife 2014-2015.
- [17] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 3 (1983).
- [18] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. D.* **28**, 2491 (1983).
- [19] D. J. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective* (University Science Books, Sausalito, 2006).
- [20] Y. Goldfarb, I. Degani, and D. J. Tannor (unpublished).
- [21] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Am. J. Phys.* **65**, 1187 (1997).
- [22] C. C. Chou and WYATT Robert. E, Computational method for the quantum Hamilton-Jacobi equation: Bound states in one dimension. *J. Chem. Phys.* **125**, 174103 (2006)
- [23] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi. Quantum Hamilton-Jacobi formalism and the bound state spectra. *Am. J. Phys.* **65**, 1188-1189 (1997).
- [24] JOHN. Money V. MODIFIED DE BROGLIE-BOHM APPROACH TO QUANTUM MECHANICS. *Foundations of Physics Letters*, Vol. 15, 338-339 (2002).
- [25] M.V. John, *Found. Phys. Lett.* **15** 329 (2002).
- [26] K.F. Riley, M.P. Hobson, S.J. Bence, *Mathematical Methods for Physics and Engineering*, Cambridge University Press, Cambridge, p. 526. 1997.
- [27] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley-Longman, Singapore, p. 104. 1994.
- [28] J.J. Halliwell; *Introductory Lectures on Quantum Cosmology*, Center for Theoretical Physics, Laboratory for Nuclear Science, Massachusetts Institute of Technology (1990) *arXiv:0909.2566v1*.

- [29] M. Bojowald; *Quantum Cosmology: a review*, Reports on Progress in Physics, Volume 78, Number 2 (2015) *arXiv:1501.04899v1*.
- [30] D.L. Wiltshire; *An Introduction to Quantum Cosmology*, “Cosmology: The Physics of the Universe”, Proceedings of the 8th Physics Summer School, Australian National University, Canberra (2003) *arXiv:gr-qc/0101003v2*.
- [31] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe; *Quantum Mechanics*, Vol.1, John Wiley e Sons, New York (1977).
- [32] D.J. Griffiths; *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, New Jersey (1994).
- [33] N. Zettili; *Quantum Mechanics-Concepts and Applications*, John Wiley e Sons, United Kingdom (2009).
- [34] R.B. Griffiths, *Consistent histories and the interpretation of quantum mechanics*, Journal of Statistical Physics 36, 219 (1984).
- [35] R. Omnés; *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, New Jersey (1994).
- [36] M. Gell-Mann, J.B. Hartle; *Complexity, Entropy and the Physics of Information*, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, Califórnia (1990).
- [37] N. Pinto Neto; *Teoria e Intepretação da Mecânica Quântica*, Livraria da Física, Rio de Janeiro (2010).
- [38] B. DeWitt and N. Graham; *Many Worlds Intepretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, (1973).
- [39] D. Bohm; *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of “Hidden” Variables*, Physical Review 85, 166 (1952).
- [40] P.R. Holland; *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [41] N. Pinto Neto, J.C. Fabris; *Quantum Cosmology from the de Broglie-Bohm Perspective*, Classical and Quantum Gravity, Volume 30, Number 14 (2013).

- [42] C. J. Isham; *Canonical Quantum Gravity and the Problem of Time*, Proceedings of the 19th International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics. Salamanca, Spain (1992).
- [43] ALMEIDA. A. R. *Cosmologia quântica em teorias escalares-tensoriais: aspectos físicos e matemáticos*. 2017. Tese. (Doutorado em Física)-Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Espírito Santos, Espírito Santos.
- [44] M. Reed and B. Simon; *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*, Academic Press, San Diego (1980).
- [45] M. Reed and B. Simon; *Methods of Modern Mathematical Physics II: Fourier Analysis, Self-adjointness*, Academic Press, San Diego (1975).
- [46] C. N. Yang; *On Quantized Space-Time*, Physical Review, vol. 72, Issue 9 (1947).
- [47] R. H. A. Farias, E. Recami; *Introduction of a Quantum Time (chronon) and its Consequences for the Electron in Quantum and Classical Physics*, Advances in Imaging and Electron Physics, Volume 163, Pages 33-115, Elsevier (2010).
- [48] C. R. Almeida, J.C. Fabris, F. Sbisá; *Quantum cosmology with K-Essence theory*, accepted for publication in the proceedings of the 31st International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics. Rio de Janeiro, Brazil (2016) <https://arxiv.org/abs/1604.00624>.
- [49] B. Valiki; *Scalar Field Quantum Cosmology: A Schrödinger Picture*, Physics Letter B **718** (2012).
- [50] P. Pedram, S. Jalalzadeh, S.S. Gousheh; *Stephani-Schutz Quantum Cosmology*, Physics Letter B **655** (2007).
- [51] F. G. Alvarenga, J. C. Fabris, N. A. Lemos and G. A. Monerat; *Quantum Cosmological Perfect Fluid Models*, General Relativity and Gravitation 34, **651** (2002).
- [52] B. F. Schutz; *Perfect Fluids in General Relativity: Velocity Potentials and a Variational Principle*, Physical Review D, Volume 2, Number 12 (1970).
- [53] V. G. Lapchinskii and V. A. Rubakov; *Quantum Gravitation: Quantization of Friedmann Model*, Theoretical and Mathematical Physics, Volume 33, Issue 3 (1977).

- [54] R. G. Leigh; *Dirac-Born-Infeld Action from Dirichlet Sigma Model*, Modern Physics Letters A 4, **2767** (1989).
- [55] J. Polchinski; *Dirichlet Branes and Ramond-Ramond Charges*, Physical Review Letters 75, **4724** (1995).
- [56] C. R. Almeida, A.B. Batista, J.C. Fabris, P.R.L.V. Moniz; *Quantum Cosmology with Scalar Fields: Self-Adjointness and Cosmological Scenarios*, Gravitation and Cosmology, vol.1, no.3 (2015).
- [57] A.M. Essin, D.J. Griffiths; *Quantum Mechanics of the Potential*, American Journal of Physics **74** (2006).
- [58] Alvarenga, F.G., Fabris, J.C., Lemos, N.A., Monerat, G.A.: Gen. Rel. Grav. **34**, 651 (2002). arXiv:gr-qc/0106051.
- [59] Shojai, F., Shirinifard, A.: Int. J. Mod. Phys. D **14**, 1333 (2005). arXiv:gr-qc/0504138.
- [60] Pinto-Neto, N., Fabris, J.C.: Class. Quantum Grav. **30**, 143001 (2013). arXiv:1306.0820.
- [61] Pedram, P., Jalalzadeh, S.: Phys. Lett. B **660**, 1 (2008). arXiv:0712.2593.
- [62] Peter, P., Pinto-Neto, N.: Phys. Rev. D **78**, 063506 (2008). arXiv:0809.2022.
- [63] Chou, C.C., Wyatt, R.E.: Phys. Rev. A **76**, 012115 (2007).
- [64] Gozzi, E.: Phys. Lett. B **165**, 351 (1985).
- [65] Bhalla, R.S., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K.: Am. J. Phys. **65**, 1187 (1997).
- [66] Leacock, R.A., Padgett, M.J.: Phys. Rev. Lett. **50**, 3 (1983).
- [67] Leacock, R.A., Padgett, M.J.: Phys. Rev. D **28**, 2491 (1983).
- [68] Leacock, R.A., Padgett, M.J.: Am. J. Phys. **55**, 261 (1986).
- [69] John, M.V.: Found. Phys. Lett. **15**, 329 (2002). arXiv:quant-ph/0109093.
- [70] John, M.V.: Gravitation and Cosmology **21**, 208 (2015). arXiv:1405.7957.
- [71] Bhalla, R.S., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K.: Am. J. Phys. **14**, 1187 (1997).
- [72] Bhalla, R.S., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K.: Mod. Phys. Lett. A **12**, 295 (1997).

- [73] Yang, C.-D.: *Ann. Phys. (N.Y.)* **319**, 399 (2005).
- [74] Yang, C.-D.: *Ann. Phys. (N.Y.)* **319**, 444 (2005).
- [75] Yang, C.-D.: *Int. J. Quantum Chem.* **106**, 1620 (2006).
- [76] Yang, C.-D.: *Ann. Phys. (N.Y.)* **321**, 2876 (2006).
- [77] Yang, C.-D.: *Phys. Lett. A* **372**, 6253 (2008).
- [78] Yang, C.-D.: *Chaos, Soliton Fract.* **30**, 342 (2006).
- [79] Fathi, M., Jalalzadeh, S., Moniz, P.V.: *Eur. Phys. J. C* **76**, 527 (2016). arXiv:1609.04488.
- [80] Sree Ranjani, S., Geojo, K.G., Kapoor, A.K., Panigrahi, P.K.: *Mod. Phys. Lett. A* **19**, 1457 (2004).
- [81] Kiefer, C.: *Phys. Rev. D* **38**, 1761 (1988).
- [82] Isham, C.J. arXiv:gr-qc/9210011.
- [83] Gotay, M.J., Demaret, J.: *Phys. Rev. D* **28**, 2402 (1983).
- [84] Alvarenga, F.G., Fabris, J.C., Lemos, N.A., Monerat, G.A.: *Gen. Relativ. Gravit.* **34**, 651 (2002). arXiv:gr-qc/0106051.
- [85] Pedram, P., Mirzaei, M., Jalalzadeh, S., Gousheh, S.S.: *Gen. Relativ. Gravit.* **40**, 1663 (2008). arXiv:0711.3833.
- [86] Vakili, B.: *Class. Quantum. Grav.* **27**, 025008 (2010). arXiv:0908.0998.
- [87] Pedram, P., Jalalzadeh, S., Gousheh, S.S.: *Phys. Lett. B* **655**, 91 (2007). arXiv:0708.4143.
- [88] Pedram, P., Jalalzadeh, S., Gousheh, S.S.: *Class. Quantum. Grav.* **24**, 5515 (2007). arXiv:0709.1620.
- [89] Hawking, S.W., Ellis, G.F.R.: *The Large Scale Structure of Space-Time*. Cambridge University Press, Cambridge (1973).
- [90] DeWitt, B.S.: *Phys. Rev.* **160**, 1113 (1967).