

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

APLICAÇÃO DO FORMALISMO HIDRODINÂMICO DA  
MECÂNICA QUÂNTICA A PROBLEMAS COM DISSIP-  
PAÇÃO DE ENERGIA

Tese submetida à Universidade Federal de Santa Catarina para a  
obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Sérgio Eduardo Michelin

FLORIANÓPOLIS  
SANTA CATARINA-BRASIL  
MARÇO-1984

APLICAÇÃO DO FORMALISMO HIDRODINÂMICO DA MECÂNICA  
A PROBLEMAS COM DISSIPAÇÃO DE ENERGIA

Sérgio Eduardo Michelin

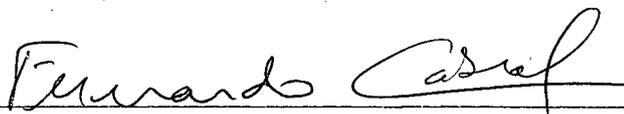
ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE "MESTRE EM CIÊNCIAS", ESPECIALIZAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA, E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO.



---

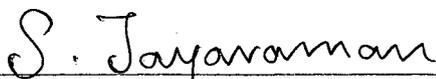
Prof. Rosendo Augusto Yunes, Ph.D.  
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:



---

Prof. Fernando Cabral, Ph.D.  
Orientador



---

Prof. Subramania Jayaraman, Ph.D.



---

Prof. Antonio F.R. de Toledo Piza, Dr.

À minha esposa  
Zenir  
por seu amor e dedicação

### AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Santa Catarina;

Ao Professor Fernando Cabral por sua orientação no decorrer do trabalho.

Ao Professor Antonio Fernando Ribeiro de Toledo Piza por sua colaboração no redirecionamento do trabalho.

Ao Professor Carlos Alberto Kohnen por valiosas discussões.

A todos os Professores que participaram direta e indiretamente em minha formação no decorrer deste período;

Aos Funcionários do Departamento de Física que direta ou indiretamente contribuíram na realização deste trabalho.

## RESUMO

O formalismo hidrodinâmico da Mecânica Quântica é aplicado para solucionar o problema de sistemas quânticos com forças dissipativas.

A partir da equação de Schrödinger obtém-se uma equação do tipo  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$  para descrever sistemas quânticos.

Esta equação é generalizada para incluir forças que dependam da velocidade linear ou da velocidade quadrática do sistema em estudo.

Este método foi aplicado para o caso do oscilador harmônico quântico dissipativo, onde a dissipação é feita via uma força de atrito dependente da velocidade linear, obtivemos assim um Lagrangeano quântico que descreve o sistema.

Do Lagrangeano obtém-se uma equação de movimento, a partir dessas equações chega-se a uma equação conhecida como "equação de Schrödinger - Langevin" encontrada na literatura específica.

A partir das equações de movimento, e das equações para as velocidades real e imaginária, obtemos uma função de onda que é ajustada para ser solução da equação de Schrödinger - Langevin. Esta função de onda também é encontrada na literatura específica.

Em seguida calculamos, analiticamente, os valores para a energia total e para a energia dissipada no sistema.

Aplicamos este método novamente para o oscilador harmônico quântico dissipativo, porém agora a dissipação se dá via uma força de atrito proporcional à velocidade quadrática do sistema.

ABSTRACT

The hydrodynamical formulation of quantum mechanics is used to study the problem of quantic systems with dissipative forces.

Starting with Schrödinger formulation we get to a equation of the  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$  kind, to describe the quantic systems.

This is a generalized equation to include linear or root mean square velocity depending forces.

This method was used to study the case of the dissipative quantic harmonic oscillator, where the dissipation is produced by a linear velocity depending frictional force, to obtain a quantic Lagrangean to describe the system.

From this Lagrangean, through an equation of motion we reach an equation called "Schrödinger-Langevin equation".

Using the equations of motion and the equations for real and imaginary velocity, we obtain a wave function which is adjusted to be the solution to the "Schrödinger-Langevin equation".

Then, we obtain an expression for the values for the total energy and for the dissipative energy in the system.

We use this method again for the quantic dissipative harmonic oscillator for the case of root mean square velocity proportional to the force.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO .....	1
CAPÍTULO I - FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA .....	4
I.1 - Introdução .....	4
I.2 - A Formulação Original da Mecânica Quântica .....	6
I.3 - Equação de Schrödinger .....	13
CAPÍTULO II - SISTEMAS DISSIPATIVOS-OSCILADOR HARMÔNICO DISSIPATIVO I .....	20
II.1 - Introdução .....	20
II.2 - Equação de Schrödinger-Langevin .....	32
II.3 - Equações de Movimento .....	44
II.4 - Energia .....	52
CAPÍTULO III - SISTEMAS DISSIPATIVOS-OSCILADOR HARMÔNICO II .....	60
III.1 - Equação Análoga a de Schrödinger-Langevin .....	60
III.2 - Equações de Movimento .....	71
III.3 - Energia .....	75
CONCLUSÃO .....	79
BIBLIOGRAFIA .....	83

## INTRODUÇÃO

Um problema que vem sendo estudado pelos físicos por aproximadamente três décadas, é o das forças de atrito na Mecânica Quântica.

Particularmente um problema que despertou mais o nosso interesse, é aquele onde a dissipação de energia se faz presente. Exatamente por que este tipo de problema aparece com frequência, por exemplo em física nuclear; colisão de íons pesados<sup>[43]</sup>, espalhamento inelástico de partículas<sup>[37]</sup>, pacote de ondas<sup>[43]</sup>, entre outros.

Também é grande o interesse pelo oscilador harmônico<sup>[50,51,52]</sup> em física molecular, onde temos oscilações nas redes de moléculas implicando conseqüentemente em perda de energia.

Uma lista bastante grande de referências pode ser encontrada no trabalho de J. MESSER<sup>[1]</sup>.

No presente trabalho usamos o formalismo hidrodinâmico da Mecânica Quântica voltado para problemas dessa natureza, mais especificamente para o oscilador harmônico quântico dissipativo, onde a dissipação de energia ocorra via uma força de atrito conhecida.

No primeiro capítulo fazemos uma apresentação da formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica original desenvolvida inicialmente por MADELUNG<sup>[2]</sup> e depois reformulada por outros, como: de BROGLIE<sup>[3]</sup> e HIRSCHFELDER<sup>[4]</sup>, em seguida apresentamos a formulação mais recente desenvolvida por CABRAL<sup>[5]</sup> e KUHNEN<sup>[6]</sup>. Mostramos que a partir da equação de Schrödinger pode-se obter uma equação de continuidade, devido a esta equação o formalismo

recebe a denominação de "formalismo hidrodinâmico", e também a partir da equação de Schrödinger pode-se obter a equação de Hamilton-Jacobi generalizada para fenômenos quânticos, onde esta equação expressa a conservação de energia para processos estacionários, em seguida obtemos um Lagrangeano que represente este sistema. Este Lagrangeano pode ser separado em uma parte real e outra imaginária, da parte real obtemos novamente a equação de movimento para o sistema e da parte imaginária obtemos uma equação que é muito semelhante a equação de continuidade do formalismo hidrodinâmico clássico.

Em seguida, usando as definições de velocidades quânticas, dadas por HIRSCHFELDER<sup>[4]</sup>, nas equações de continuidade e de movimento obtemos a equação de Schrödinger - Langevin que representa o sistema quântico dissipativo. Depois de conhecidas as equações de movimento e a equação de continuidade, a partir delas, podemos formar um sistema de equações envolvendo as velocidades quânticas e obter expressões específicas para essas velocidades. A partir dessas expressões obtidas para as velocidades quânticas, e com o emprego das definições dadas por HIRSCHFELDER, encontramos uma função de onda solução da equação de Schrödinger-Langevin.

Em seguida procuramos uma forma de expressar a energia do sistema, colocando o problema em termos de valores médios e a partir da equação modificada de Ricatti obtemos a taxa de dissipação para a energia.

No terceiro capítulo o procedimento seguido é também semelhante ao adotado no capítulo anterior, onde agora estudamos o oscilador harmônico quântico com uma força dissipativa proporcional à velocidade ao quadrado. Aqui da mesma forma que no capí

tulo anterior, partimos de uma equação de movimento conhecida, do tipo  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$ , e a partir dela obtemos um Lagrangeano que descreve o sistema quântico dissipativo ora em estudo.

Utilizamos novamente as definições de velocidade quântica<sup>[4]</sup> obtendo assim uma equação análoga à de Schrödinger-Langevin e em seguida obtemos as expressões para essas velocidades a partir das equações de movimento. Também usando as expressões aqui obtidas, para as velocidades real ( $\vec{v}$ ) e imaginário ( $\vec{v}_i$ ), e usando as próprias definições dadas por HIRSCHFELDER<sup>[2]</sup>, encontramos uma função de onda solução da equação análoga à de Schrödinger-Langevin, e em seguida buscamos as trajetórias, descritas pelo oscilador harmônico quântico dissipativo.

Com relação a energia do sistema, utilizamos novamente as definições de valores médios e a equação de Ricatti modificada para obter a energia total do sistema.

Por último apresentamos uma conclusão do nosso trabalho sugerindo algumas aplicações do formalismo em outras formas de problemas com dissipação.

## CAPÍTULO I

### FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

#### I.1 - INTRODUÇÃO

Paralelamente ao desenvolvimento da mecânica ondulatória, desenvolveram-se outras interpretações alternativas da teoria quântica.

Dentre estas interpretações podemos destacar os trabalhos de E. NELSON<sup>[7]</sup>, L. de la PEÑA-AUERBACH e colaboradores<sup>[8,9,10,11,12]</sup>, de G.C. GHIRARDI e colaboradores<sup>[14]</sup>, K. YASUE<sup>[13]</sup>, entre outros, que atacaram a Mecânica Quântica através de uma interpretação estocástica para sistemas Markovianos. Na ref. 13 encontramos uma lista bastante grande de trabalhos neste sentido.

D. BOHM<sup>[15,16,17]</sup> considerou a função de onda " $\psi$ " como um campo que atuaria na partícula, assim como um campo eletromagnético, ou um campo gravitacional, ou um campo produzido por mesons, ou outro qualquer campo que ainda não se conheça.

Por analogia com outros campos, como no caso do campo eletromagnético que obedece as leis de Maxwell, o campo " $\psi$ " deve satisfazer a equação de Schrödinger. Nesses casos, uma completa especificação do campo para um determinado instante em qualquer região do espaço determina o valor do campo para qualquer valor do tempo.

Assim, se conhecermos as funções de onda, podemos calcular a força atuante sobre a partícula, bem como, se conhecermos a posição inicial e o momento podemos calcular a sua trajetória.

tória.

D. BOHM impôs também que o momento deve satisfazer a relação " $\vec{P} = \vec{\nabla}S$ " e que a densidade de probabilidade " $\rho = |\psi|^2$ " nos dá a provável localização da partícula em qualquer ponto do espaço.

HIRSCHFELDER e colaboradores<sup>[18,19,20]</sup> que utilizam-se de uma interpretação hidrodinâmica da Mecânica Quântica atacaram problemas, tais como: Reflexão e transmissão de partículas em uma barreira de potencial, entre outros.

BATTEZZATI<sup>[21]</sup> estuda o problema de uma partícula em um meio dissipativo e obtém a variável de ação explicitando a equação de Hamilton-Jacobi em uma parte determinística, resultante da energia cinética que inclui os efeitos da viscosidade, e de outra parte estocástica produzida pela própria força estocástica que obedece as relações de flutuação e dissipação para o sistema.

L. de la PEÑA-AUERBACH e colaboradores<sup>[22,23]</sup> deduziram uma equação de Schrödinger generalizada, válida para casos onde as forças são dependentes da velocidade de deslocamento de uma partícula, baseados na hipótese de que uma descrição quântica mais geral de uma partícula pode ser construída se partirmos de um processo Markoviano descrito pela equação de Fokker-Planck no espaço de fase. Obtiveram também uma descrição quântica para o movimento de uma partícula Browniana, cujo comportamento pode ser descrito pela equação de Smoluchowski. Este movimento pode ser estudado pela equação de Schrödinger se definirmos uma função de onda complexa, cuja norma nos dá a densidade de probabilidade,

e que possua analogia com a densidade de probabilidade para processos Markovianos na mecânica estocástica.

Diante do quadro exposto acima, vimos de maneira mais nítida que podemos tratar os problemas quânticos utilizando diversos formalismos. Dessa forma abordaremos os problemas quânticos dissipativos utilizando a formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

## I.2 - A FORMULAÇÃO HIDRODINÂMICA ORIGINAL DA MECÂNICA QUÂNTICA

Em 1926, Madelung<sup>[2]</sup> mostrou que pelo fracionamento da equação de Schrödinger dependente do tempo, em suas componentes real e imaginária, nos fornecia uma equação de movimento e uma equação de continuidade.

A partir daí com os trabalhos de BOHM<sup>[17,15,16]</sup>, HIRSCHFELDER e colaboradores<sup>[18,19,20,4]</sup>, CASATI & GUARNIERE<sup>[24]</sup>, entre outros, essas equações ganharam um novo enfoque com suas aplicações em diversos problemas.

Utilizando aqui o procedimento sugerido por HIRSCHFELDER e colaboradores obteremos as equações características da formulação hidrodinâmica da Mecânica Quântica.

Escrevendo, sem perda de generalidade, a função de onda na forma:

$$\psi = \rho^{1/2} \exp. [i \frac{S}{\hbar}] \quad (I.2.1)$$

onde tanto "ρ",  $\rho = \psi\psi^*$ , é a densidade de probabilidade, como "S" são reais. A função de onda e suas primeiras derivadas são

obrigatoriamente contínuas e de valor único, exceto para pontos onde a energia potencial, "V", diverge.

Podemos também requerer que  $\rho^{1/2}$ , S e suas derivadas primeiras sejam contínuas (exceto para pontos onde  $\rho^{1/2} = 0$ , nos quais  $\vec{\nabla}S \rightarrow \infty$ ).

A expressão usual para o fluxo é:

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi] \quad (\text{I.2.2})$$

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \vec{\nabla} \psi$$

Fazendo uso da definição de velocidade local usada inicialmente por MADELUNG<sup>[2]</sup>, LANDAU<sup>[25]</sup>, LONDON<sup>[26]</sup>:

$$\vec{v} = \vec{J} / \rho \quad (\text{I.2.3})$$

para definição de " $\vec{v}$ " na formulação hidrodinâmica, onde  $\vec{v}$  é uma função.

Lembrando que em Mecânica Quântica o momento de uma partícula é tratado como um operador dado  $\vec{p} = i\hbar \vec{\nabla}$ , de onde se segue que " $m\vec{v}$ " é a parte real do momento local.

Dessa forma o formalismo hidrodinâmico prevê então uma expressão mais geral para a grandeza denominada velocidade. A qual denominamos por velocidade quântica " $\vec{V}$ ", que no caso de uma partícula de massa "m", é dada por:

$$\vec{p}\psi = m\vec{V}\psi = m(\vec{v} + i \vec{v}_i)\psi \quad (\text{I.2.4})$$

onde " $\vec{p}$ " é o operador momento, " $\psi$ " é a função de onda do sistema, " $\vec{v}$ " é a componente real e " $\vec{v}_i$ " a componente imaginária da velocidade quântica. (No caso clássico,  $\vec{v}_i = 0$  e  $\vec{p} = m\vec{v}$ ).

Utilizando a eq. (I.2.4) e sua complexa conjugada é possível obter a componente real e a imaginária da velocidade em termos da função de onda, assim:

$$\vec{p}^* \Psi^* = m(\vec{v} - i \vec{v}_i) \Psi^* \quad (\text{I.2.5})$$

e reescrevendo (I.2.4) e (I.2.5) como:

$$\vec{v} + i \vec{v}_i = \Psi^{-1} \frac{\vec{p}}{m} \Psi \quad (\text{I.2.6})$$

e:

$$\vec{v} - i \vec{v}_i = \Psi^{*-1} \frac{\vec{p}^*}{m} \Psi^* \quad (\text{I.2.7})$$

e lembrando que  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ , teremos:

$$\vec{v} + i \vec{v}_i = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} \ln \Psi \quad (\text{I.2.8})$$

$$\nabla \ln \Psi = \Psi^{-1} \nabla \Psi$$

e

$$\vec{v} - i \vec{v}_i = +\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \quad (\text{I.2.9})$$

Isolando agora  $\vec{v}$  e  $\vec{v}_i$  das eqs. acima, obtém-se:

$$\vec{v} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad (\text{I.2.10})$$

$$\vec{v}_i = -\frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \Psi \quad (\text{I.2.11})$$

As equações (I.2.10) e (I.2.11) são equações básicas no formalismo hidrodinâmico,  $\vec{v}$  é a velocidade local ou real e  $v_i$  é componente imaginária da velocidade quântica. É através delas e da equação de Schrödinger que podemos obter a equação de conservação de energia e a equação de continuidade.

Com o intuito de separar-se a equação de Schrödinger em uma parte real e outra imaginária, substitui-se a função de onda definida em (I.2.1) na equação:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Psi + V\Psi \quad (\text{I.2.12})$$

obteremos assim:

$$\frac{1}{\Psi} \frac{p^2}{2m} \Psi = - \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho - V \quad (\text{I.2.13})$$

onde "t" é o parâmetro tempo e "V" o potencial de interação.

Expandindo o lado esquerdo da eq. (I.2.13) obtêm-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Psi} \frac{p^2}{2m} \Psi &= \frac{\vec{p}}{2\Psi} \cdot (\vec{v} + i \vec{v}_i) \Psi = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \\ &+ \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + i(m\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \end{aligned} \quad (\text{I.2.14})$$

Levando agora, a expressão para  $\Psi^{-1} \frac{p^2}{2m} \Psi$  dada pela eq. (I.2.14), na eq. (I.2.13) e, separando-se as partes reais e imaginárias obtêm-se:

$$- \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V \quad (\text{I.2.15})$$

e

$$m\vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho \quad (\text{I.2.16})$$

A equação (I.2.15) pode ser escrita ainda, como:

$$- \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{-1/2} \nabla^2 \rho^{1/2} + V \quad (\text{I.2.17})$$

onde a função de onda definida em (I.2.1), forneceu-nos para  $\vec{v}$  e  $\vec{v}_i$ :

$$\vec{v} = \frac{\vec{\nabla}S}{m} \quad (\text{I.2.18})$$

e

$$\vec{v}_i = \frac{\hbar}{2m} \frac{\vec{\nabla}\rho}{\rho} \quad (\text{I.2.19})$$

Usando agora a eq. (I.2.11) podemos escrever a eq. (I.2.16), como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{I.2.20})$$

que é a equação hidrodinâmica de continuidade para um fluido clássico de densidade conhecida " $\rho$ ". Por este motivo, o desenvolvimento aqui adotado é chamado de formulação hidrodinâmica. Mas, para sistemas quânticos, a eq. (I.2.20) é apresentada<sup>[27,28]</sup> como uma equação de continuidade para a densidade de probabilidade, onde  $\rho = |\psi|^2$ .

Para casos estacionários, a eq. (I.2.15) reduz-se a:

$$\frac{1}{2} mv^2 - \frac{1}{2} mv_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{v} \cdot \vec{v}_i + V = E \quad (\text{I.2.21})$$

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

E utilizando-se das definições (I.2.18) e (I.2.19) para  $\vec{v}$  e  $\vec{v}_i$ , a eq. (I.2.21) pode ser escrita como:

$$E = \frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \rho^{1/2}}{\rho^{1/2}} \quad (\text{I.2.22})$$

que é uma generalização da equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica, tomando-se o limite  $\hbar \rightarrow 0$ , " $S$ " é a solução da equa

ção de Hamilton-Jacobi.

$$-\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0 \quad (\text{I.2.23})$$

Isto significa que a partícula descreve uma trajetória clássica, mas existe além do potencial externo, a influência de um potencial quântico dado por:

$$V_{\text{quântico}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \rho^{-1/2} \nabla^2 \rho^{1/2} \quad (\text{I.2.24})$$

que provêm da interação da partícula com seu próprio campo " $\psi$ ". Assim, D. BOHM explica qual o efeito produzido ao medirmos o estado quântico de um sistema, pois ao efetuarmos uma medida de um observável, altera-se o seu campo " $\rho$ " levando a uma consequente alteração em " $V_q$ " e portanto no movimento do sistema. Explica também porque uma partícula não pode alcançar pontos onde a função de onda é nula, pois para estes pontos o potencial quântico torna-se infinito.

Com os trabalhos de NELSON<sup>[7]</sup> e de L. de la PEÑA-AUERBACH<sup>[8,9,11]</sup> temos uma interpretação um pouco diferente do potencial quântico, onde a velocidade complexa ( $\vec{v}_i$ ) é considerada como a componente estocástica e a velocidade real ( $\vec{v}$ ) é a componente sistemática da velocidade total, e a partir daí baseado em princípios clássicos é obtida a equação de Schrödinger. O próprio de la PEÑA-AUERBACH<sup>[11]</sup> interpreta este potencial quântico como um termo decorrente da energia cinética do sistema, mas, ainda associado à velocidade estocástica.

Um limite que para nós teria algum interesse, por descrever o limite clássico, é o caso em que " $\vec{v}_i = 0$ " na eq. (I.2.21), pois:

$$\vec{p} = m \vec{v} \quad (\text{I.2.25})$$

e assim a eq. (I.2.22) assume a forma:

$$E = \frac{1}{m} mv^2 + V \quad (\text{I.2.26})$$

Esta equação clássica de conservação de energia foi obtida sem o limite " $\hbar \rightarrow 0$ "<sup>[5]</sup>, mas a partir da eq. (I.2.25), isto é, a partir da definição clássica de movimento.

Outro limite de particular interesse para nós, é o caso de funções de onda reais, onde a velocidade quântica possui apenas a componente imaginária. Nesse caso a eq. (I.2.22) assume a forma:

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i = (E - V) + \frac{1}{2} mv_i^2 \quad (\text{I.2.27})$$

que é uma equação multidimensional de Ricatti e que tem algumas vantagens em relação a eq. de Schrödinger. Por exemplo, pode ser numericamente integrada, em alguns casos, de maneira mais rápida<sup>[70]</sup>, por se tratar de uma equação de primeira ordem, mas não linear.

Neste ponto, é importante frizarmos, que o procedimento seguido na formulação hidrodinâmica original é sempre no sentido de que a partir da equação de Schrödinger, eq. (I.2.12), podemos obter a equação de continuidade, eq. (I.2.20), e obter, também, a equação de Hamilton-Jacobi, eq. (I.2.22), generalizada para a Mecânica Quântica.

Onde para casos estacionários a eq. (I.2.23) descreve a conservação de energia do sistema.

### I.3 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Como já vimos na seção anterior, utilizando as definições de velocidade real " $\vec{v}$ " e velocidade imaginária " $\vec{v}_i$ ", consegue-se separar a equação de Schrödinger em parte real e outra imaginária [2].

A parte imaginária nos fornece a equação de continuidade para um fluido clássico de densidade " $\rho$ ".

Da parte real, para casos estacionários, obtém-se uma generalização da equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica.

Utilizando-se agora de uma analogia com o formalismo hidrodinâmico usual, mais o formalismo de partículas e as definições de velocidade real " $\vec{v}$ " e velocidade imaginária " $\vec{v}_i$ ", deve ser possível obter-se a equação de Schrödinger com auxílio da equação de continuidade e da equação de movimento do sistema.

Inicialmente suporemos o caso de uma única partícula de massa " $m$ " movendo-se em uma dimensão sob a ação de um potencial externo  $\phi(x,t)$ , nesse caso um Lagrangeano adequado para esse sistema é:

$$L = \frac{1}{2} m \vec{U}^2 - \phi(x,t) \quad (I.3.1)$$

onde " $\vec{U}$ " é a velocidade quântica da partícula e que pode ser escrita como:

$$\vec{U} = \vec{u} + i \vec{u}_i \quad (I.3.2)$$

Esta velocidade " $\vec{U}$ " descreve o caso de uma partícula e difere da velocidade " $\vec{v}$ " que é para descrever campos.

" $\phi(x,t)$ " é um potencial quântico [que mais adiante identificaremos com o potencial quântico descrito na primeira

parte deste capítulo].

O Lagrangeano (I.3.1) pode ser separado em uma parte real e outra imaginária:

$$L = L_R + i L_i \quad (\text{I.3.3})$$

onde a parte real é:

$$L_R = \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 - \text{Re } \phi(x, t) \quad (\text{I.3.4})$$

e a parte imaginária:

$$L_i = m \vec{u} \cdot \vec{u}_i - \text{Im } \phi(x, t) \quad (\text{I.3.5})$$

Através de uma simples inspeção das equações obtidas na primeira parte desse capítulo, podemos notar que existe uma grande semelhança entre estas equações e as equações da mecânica clássica, assim para as equações escritas acima, definimos um parâmetro " $t_i$ " e um parâmetro " $\vec{u}_i$ ", tal que:

$$\vec{u}_i = \left. \frac{d\vec{x}}{dt_i} \right|_{t = \text{cte.}} \quad (\text{I.3.6})$$

e um parâmetro " $t$ " e um parâmetro " $\vec{u}$ ", tal que:

$$\vec{u} = \left. \frac{d\vec{x}}{dt} \right|_{t_i = \text{cte.}} \quad (\text{I.3.7})$$

onde " $\vec{x}$ " é o vetor posição.

Com estas definições pode-se buscar soluções da forma:

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \vec{x}(t, t_i) \\ \vec{u} &= \vec{u}(t, t_i) \\ \vec{u}_i &= \vec{u}_i(t, t_i) \end{aligned} \quad (\text{I.3.8})$$

Cabe agora aqui um comentário sobre os parâmetros "t" e "t<sub>i</sub>". Denominamos esses parâmetros como "tempo real" e "tempo imaginário" respectivamente, não sendo absolutamente necessário atribuímos, no momento, a estes parâmetros um significado físico.

Tendo em vista agora, que para as equações de movimento aqui obtidas o princípio da mínima ação estabelece que:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_{i1}}^{t_{i2}} L dt dt_i = 0 \quad (I.3.9)$$

pode ser obtida uma generalização das equações de Euler-Lagrange<sup>[5]</sup>, na forma:

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial u} \right) - \frac{d}{dt_i} \left( \frac{\partial L}{\partial u_i} \right) = 0 \quad (I.3.10)$$

Aplicando a eq. (I.3.10) na parte real do Lagrangeano, eq. (I.3.4), obtêm-se a seguinte equação de movimento:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i = - \vec{\nabla} [\text{Re } \phi(x,t)] \quad (I.3.11)$$

Aplicando agora a eq. (I.3.10) na parte imaginária do Lagrangeano, eq. (I.3.5), obtêm-se a seguinte equação de movimento:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u}_i + \frac{d}{dt_i} m \vec{u} = - \vec{\nabla} [\text{Im } \phi(x,t)] \quad (I.3.12)$$

Das equações de movimento, eqs. (I.3.11) e (I.3.12), é possível de se obter a equação de Schrödinger desde que façamos a seguinte transposição:

$$\vec{u}(t, t_i) \rightarrow \vec{v}(x, t) \quad (\text{I.3.13})$$

$$\vec{u}_i(t, t_i) \rightarrow \vec{v}_i(x, t) \quad (\text{I.3.14})$$

onde " $\vec{u}(t, t_i)$ " e " $\vec{u}_i(t, t_i)$ " são respectivamente as velocidades real e imaginária para o formalismo de partículas e onde " $\vec{v}(x, t)$ " e " $\vec{v}_i(x, t)$ " são as velocidades real e imaginária para o formalismo hidrodinâmico.

Devemos ainda colocar o potencial " $\phi(x, t)$ " na forma:

$$\phi(x, t) = - \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_T + V(x) \quad (\text{I.3.15})$$

onde " $\vec{v}$ " é a velocidade quântica definida na primeira parte deste capítulo:

$$\vec{v}_T = \vec{v} + i\vec{v}_i \quad (\text{I.3.16})$$

Separando então a eq. (I.3.15) em uma parte real e outra imaginária:

$$\text{Re } \phi(x, t) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(x) \quad (\text{I.3.17})$$

e

$$\text{Im } \phi(x, t) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{I.3.18})$$

Usando agora a derivada hidrodinâmica definida por:

$$\frac{d}{dt} \rightarrow \vec{v} \cdot \vec{\nabla} + \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{I.3.19})$$

$$\frac{d}{dt_i} \rightarrow \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} + \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{I.3.20})$$

mais as modificações dadas pelas eqs. (I.3.17), (I.3.13) e (I.3.14),

a equação (I.3.11) assume a forma:

$$\begin{aligned} m(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) + \frac{\partial}{\partial t} m \vec{v} - m(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i) - \\ - \frac{\partial}{\partial t} m \vec{v}_i = - \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(x) \right) \end{aligned} \quad (\text{I.3.21})$$

que pode ser melhor agrupada como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v^2 - \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} = \\ = - \vec{\nabla} [V(x) + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i] \end{aligned} \quad (\text{I.3.22})$$

Integrando a equação acima, obtêm-se:  $\int \nabla \psi^2 \cdot d\vec{r} = \psi^2$   
onde  $d\vec{r} = dx\hat{i} + dy\hat{j} + dz\hat{k}$   
ou  
 $\nabla \psi^2 \cdot d\vec{r} = d(\psi^2)$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} = \\ = - \vec{\nabla} [V(x) + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i] + f(t) \end{aligned} \quad (\text{I.3.23})$$

onde "f(t)" é uma constante de integração e, para casos estacionários, serve como referência para o nível de energia do sistema. Por comodidade fazemos "f(t) = 0", o que resulta em:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(x) \quad (\text{I.3.24})$$

Substituindo agora as definições para as velocidades real ( $\vec{v}$ ) e imaginária ( $\vec{v}_i$ ) na eq. (I.3.23), obtêm-se:

$$f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} = \frac{\hbar^2}{4m} \left\{ \frac{\nabla^2 \psi^*}{\psi^*} + \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} \right\} + V(x) \quad (\text{I.3.25})$$

Também a eq. (I.3.12) assume a forma:

$$m[\vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{v}_i)] + m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}_i = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (\text{I.3.26})$$

quando usamos as derivadas hidrodinâmicas máis as eqs. (I.3.13), (I.3.14) e (I.3.18).

E que também nos fornece, após alguns cálculos:

$$\vec{\nabla}(\rho \vec{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{I.3.27})$$

A eq. (I.3.27) é a equação hidrodinâmica da continuidade para um fluido clássico, e que já foi obtida anteriormente na eq. (I.2.20) a partir da equação de Schrödinger.

Agora escrevendo a eq. (I.3.27) como:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = m \vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{I.3.28})$$

e substituindo as definições para a velocidade real " $\vec{v}$ " e para a velocidade imaginária " $\vec{v}_i$ ", chega-se a:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{i\hbar^2}{4m} \left\{ \frac{\nabla^2 \psi^*}{\psi^*} - \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} \right\} \quad (\text{I.3.29})$$

Somando, agora as eqs. (I.3.25) e (I.3.29) obtém-se:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi + f(t)\psi \quad (\text{I.3.30})$$

onde a constante " $f(t)$ " é nula, para este caso.

Assim a eq. (I.3.30) se reduz a:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (\text{I.3.31})$$

que nada mais é do que a equação de Schrödinger.

Fica assim evidenciado que quando se conhece a equação de movimento do sistema, eq. (I.3.11) [5], podemos obter a equação de Schrödinger com o auxílio da equação de continuidade e das transposições I.3.13 e I.3.14.

Aqui isto foi feito para um sistema conservativo, nos capítulos seguintes abordaremos de maneira semelhante os problemas que envolvam dissipação de energia.

Como um pequeno comentário, podemos colocar ainda que, ao introduzirmos os parâmetros " $t$ " e " $t_i$ ", estamos tentando tratar o "tempo quântico" como uma grandeza bidimensional, possível de representação em um sistema de coordenadas com componentes  $(t, t_i)$ , tal que ao efetuarmos a transição a mecânica clássica este "tempo quântico" deverá necessariamente tornar-se o parâmetro tempo como o conhecemos usualmente.

## CAPÍTULO II

SISTEMAS DISSIPATIVOS - OSCILADOR HARMÔNICODISSIPATIVO I. (Caso dissipativo linear)II.1 - INTRODUÇÃO

No capítulo I desse trabalho, após um breve resumo sobre a formulação hidrodinâmica da mecânica quântica, ficou demonstrado que a partir de uma equação de movimento conhecida, e a partir da equação de continuidade, obtém-se a equação de Schrödinger que descreve a evolução temporal do sistema.

A seguir abordaremos problemas onde a energia já não é mais uma constante de movimento, isto é, a energia é constantemente dissipada via uma interação com o meio onde se encontra nosso sistema. Evidentemente este não é o único caso de atrito, existe também casos de dissipação devido aos graus internos de liberdade do próprio sistema.

O atrito seria a forma na qual essa interação de um objeto com o meio, cujos componentes básicos tem dimensões bem menores do que o valor da energia envolvida, no processo, é manifestada "macroscopicamente" mas ainda quanticamente.

Embora a concepção do atrito seja essencialmente clássica e macroscópica, existem alguns casos no qual ele pode ser tratado microscopicamente: um exemplo seria a radiação de frenamento, outros exemplos nós teríamos em penetrações de barreiras, espalhamento de íons pesados<sup>[43]</sup>, na interação, de um objeto quântico com o meio<sup>[38]</sup>.

Quando abordamos os problemas enumerados acima, não po

demos tratá-los classicamente, pois os valores de energia, momento, distância, etc., são muito pequenos (da ordem de  $\hbar$ ), nesse caso, a melhor forma de se tratar o problema é através de uma abordagem quântica, se bem que a resolução de problemas com atrito em sistemas quânticos é ainda uma questão em aberto.

Classicamente, alguns problemas que envolvam o atrito tem soluções satisfatórias, sendo necessário conhecer apenas a equação que descreve o fenômeno dissipativo<sup>[34]</sup>. Sabe-se que, para certos sistemas dissipativos, podemos obter equações de movimento que contenham termos representando a força de atrito. Este procedimento tem sido adotado por autores como: DENMAN<sup>[31]</sup>, BATEMAN<sup>[32]</sup>, LEMOS<sup>[33,34]</sup>, etc.

Autores como: BAHAR & KWANTY<sup>[35]</sup>, YAN<sup>[36]</sup>, SONA<sup>[37]</sup>, etc., mostram que, partindo de uma equação de movimento conhecida, é possível construir uma infinidade de Lagrangeanos e Hamiltonianos que descrevam o comportamento desses sistemas dissipativos. Porém as técnicas utilizadas, na obtenção desses Lagrangeanos e Hamiltonianos, são as mais diversas possíveis.

Assim é que NEGRO & TARTAGLIA<sup>[38]</sup> em seu artigo, partindo de uma equação de movimento que descreve a dissipação de energia para uma partícula sujeita a uma força de atrito, se utiliza do formalismo desenvolvido por HAVAS<sup>[39,40]</sup> e obtém um "fator integrante" o qual é incluído ao Lagrangeano convencional do sistema.

Este Lagrangeano modificado obtido, se assemelha muito aos Lagrangeanos utilizados nos sistemas amortecidos.

Em se tratando de sistemas dissipativos quânticos, após a obtenção desse Lagrangeano modificado o próximo passo seria a quantização do sistema, pela substituição dos operadores por va-

riáveis canônicas correspondentes ou por outro método qualquer.

É notável o contraste entre a facilidade com que podemos tratar forças de atrito em mecânica clássica, e a complexidade que envolve o seu tratamento quântico. Uma das razões para esse contraste entre o tratamento clássico e o tratamento quântico da fricção é que a mecânica quântica é baseada conceitualmente na existência de Lagrangeanos e Hamiltonianos. E para um sistema clássico é suficiente medir as forças de atrito e incluí-las nas equações de Newton.

Desde que forças de atrito não podem ser introduzidas de maneira convencional no formalismo Lagrangeano ou Hamiltoniano, apesar de existirem tentativas para isso [37,38,39], é costume abordar os problemas quânticos como um sistema totalmente fechado.

Por exemplo, se considerarmos uma partícula dissipando energia num meio viscoso, considera-se como sistema fechado a partícula mais o meio viscoso.

Outra razão para esse contraste seria a complexidade matemática que envolve as soluções, nem sempre se consegue encontrar soluções analíticas para o problema. Nesses casos utiliza-se do método das tentativas, o que nem sempre dá bons resultados.

Tendo em vista a situação exposta acima diferentes autores tem procurado um caminho mais fácil e mais prático para a resolução de sistemas quânticos dissipativos.

Assim é que autores como STOKER & ALBRECHT<sup>[41]</sup>, M. RAZAVY<sup>[42,43]</sup> e K. YASUE<sup>[67]</sup>, partindo da observação de que a equação clássica de Hamilton-Jacobi pode ser generalizada para acomodar forças de atrito que dependam essencialmente de uma velocidade

de arbitrária, tentam solucionar o problema aqui abordado.

Embora não seja possível obter-se um Hamiltoniano convencional que contenha tais forças<sup>[39,40]</sup>, a generalização da equação de Hamilton-Jacobi ajuda a encontrar uma equação de movimento que descreva o fenômeno observado. Para obter uma descrição quântica do atrito, STOKER & ALBRECHT<sup>[41]</sup> também se utilizaram da interpretação hidro-dinâmica de Madelung generalizada a partir de equação de Schrödinger e de suas relações fechadas com a teoria de Hamilton-Jacobi. Mas o operador resultante para o atrito é sempre não linear devido à sua dependência direta com o estado do sistema. STOKER & ALBRECHT deixam bem claro no final do seu artigo que é necessário muito mais trabalho para justificar a aproximação fenomenológica, utilizada neste procedimento, do que para determinar toda a sua gama de aplicações.

Um Hamiltoniano muito usado nos processos dissipativos quânticos, é o da forma:

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \exp.(-\gamma t) + (V(x) - xA(t)) \exp.(\gamma t) \quad (\text{II.1.1})$$

onde " $\gamma$ " é o coeficiente de atrito e " $A(t)$ " representa uma força estocástica.

O Hamiltoniano dado pela eq. (II.1.1) foi obtido primeiramente por CALDIROLA<sup>[44]</sup> e mais tarde obtido também por KANAI<sup>[45]</sup>, HAVAS<sup>[39]</sup>, DENMAN<sup>[31]</sup>, HASSE<sup>[46]</sup>.

Uma extensão matemática mais geral para toda a gama de aplicabilidade do formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano envolvendo forças dissipativas foi elaborada por HAVAS<sup>[39,47]</sup> e SONA<sup>[37]</sup>.

HAVAS<sup>[47]</sup>, em um de seus artigos, mostra que mesmo se um par de equações " $G_i = 0$ " não é derivável do princípio varia -

cional, poderá existir ainda um par de equações equivalentes " $f_i G_i = 0$ ", obtidas com a ajuda do "fator integrante ( $f_i$ )", que será derivável. Mostrou que para qualquer par de equações " $G_i = \dot{q}_i + g_i(q_j, t) = 0$ " existe sempre um sistema equivalente " $\sum f_{ik}(q_j, t) G_k = 0$ " que são as equações de Euler-Lagrange do princípio variacional. Como qualquer sistema de equações diferencial é equivalente a um sistema de equações de primeira ordem, isto implica que qualquer sistema de equações diferencial ordinária de ordem "M" é derivável de um Lagrangeano. Em particular este é o caso para equações de movimento de Newton com forças dependentes de uma velocidade arbitrária.

SONA<sup>[37]</sup> em seu artigo considera a aplicação do formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano para forças não conservativas. Com um exemplo simples ele deriva a equação de Schrödinger, com vista em uma possível construção de um modelo ótico para o espalhamento inelástico.

A principal dificuldade encontrada na interpretação física é devido ao fato de não existir uma equação de continuidade para o sistema.

Mas existem dificuldades muito grandes na quantização de um Hamiltoniano da forma descrita por (II.1.1), isto foi demonstrado primeiramente por BRITTIN<sup>[48]</sup> e também por J. MESSER<sup>[49]</sup>. Uma tentativa para facilitar essa quantização é eliminar-se o termo " $A(t)$ "<sup>[50]</sup> da eq. (II.1.1), mas isso conduz a contradições nas relações de comutação e viola drasticamente o princípio da incerteza<sup>[42]</sup>. Além disso, desprezando-se a força estocástica " $A(t)$ ", a eq. (II.1.1) não nos conduz a uma equação de movimento que verdadeiramente expresse o problema dissipativo. SENITSKY<sup>[51]</sup>, coloca ainda que, a negligência da força estocástica

ca "A(t)" não permite a aplicação correta das relações de Heisenberg e uma descrição correta do formalismo é impossível.

BRITTIN<sup>[48]</sup>, no final de seu artigo, vai um pouco além dizendo que neste caso não existe representação no formalismo de Schrödinger para sistemas dissipativos.

Já M. RAZAVY<sup>[63]</sup> em seu artigo, trabalha com um Hamiltoniano onde a força estocástica "A(t)" é desprezada e conclui que a primeira integral da energia e o próprio potencial são operadores fundamentais em mecânica quântica para sistemas dissipativos. E que, além do Hamiltoniano (II.1.1), outros Hamiltonianos equivalentes geram a equação de movimento que descreve o fenômeno dissipativo, mesmo que esses Hamiltonianos não satisfaçam as regras de quantização de Heisenberg, e que conduzam à relações de comutação incorretas para os operadores velocidade e posição.

Outra equação não linear bastante utilizada em sistemas dissipativos é a equação de Schrödinger-Langevin, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (V(x) - xA(t))\Psi + V_L(\Psi)\Psi \quad (\text{II.1.2})$$

onde " $V_L(\Psi)$ " é um potencial não linear que inclui o atrito e é da forma:

$$V_L(\Psi) = \frac{\hbar\gamma}{2i} \left\{ \ln \frac{\Psi}{\Psi^*} - \int_R |\Psi|^2 \ln \frac{\Psi}{\Psi^*} dx \right\} \quad (\text{II.1.3})$$

A eq. (II.1.2) foi primeiramente descoberta por KOSTIN<sup>[52]</sup> e foi derivada a partir das equações de Heisenberg.

Posteriormente outros autores rederivaram a equação de Schrödinger-Langevin utilizando-se relações de comutação associadas à própria mecânica estocástica de Nelson, dentre eles desta-

camos YASUE<sup>[44,53,54]</sup>, J. MESSER<sup>[49]</sup> e M. RAZAVY<sup>[42,43]</sup> discutiu a inconveniência de usar a aproximação Hamiltoniana para sistemas dissipativos. E como uma alternativa para o formalismo canônico, propôs uma generalização das equações de Hamilton - Jacobi para incluir forças dissipativas.

Esta generalização foi considerada como uma extensão especial do conceito da função principal clássica, desde que, no limite, ela seja redutível a equação convencional de Hamilton-Jacobi. Em seguida usando o método de quantização de Schrödinger, a equação modificada de Hamilton-Jacobi resume-se à equação de Schrödinger-Langevin.

Também K. YASUE<sup>[53,54]</sup>, K.K. KAN and J.J. GRIFFIN<sup>[55]</sup> e SKAGERSTAM<sup>[56,57]</sup> utilizando da mecânica estocástica de NELSON<sup>[7]</sup> rederivaram a equação de Schrödinger-Langevin. FRONTEAN & TELLES-ARENAS<sup>[58,59]</sup> aplicaram também a mecânica estocástica de NELSON na mecânica quântica tentando incluir sistemas dissipativos.

Outras descrições dos fenômenos dissipativos têm sido proposta também por diferentes autores; como ALBRECHT<sup>[60]</sup>, HASSE<sup>[46]</sup>, entre outros, usando equações de Schrödinger não lineares.

DEKKER<sup>[61,62]</sup> desenvolveu uma versão um pouco diferente da teoria de Hamilton para o oscilador harmônico dissipativo, onde a dissipação é devido à uma força que depende linearmente da velocidade. DEKKER factorizou a equação de movimento para este sistema em duas equações de primeira ordem com coeficientes complexos e dela obteve um Hamiltoniano complexo como gerador da própria equação de movimento. Em resumo, DEKKER introduziu coordenadas complexas e momento adequado, e em seguida usando regras

de quantização de Dirac quantizou o sistema.

Métodos de construção de Hamiltonianos equivalentes ao dado pela eq. (II.1.1) têm sido exposto por diversos autores [63,64,65,66], e com métodos de quantização descrevem quanticamente o sistema em estudo.

Diante do quadro exposto acima, podemos afirmar que a descrição de fenômenos quânticos dissipativos está longe de possuir uma única teoria terminal, ao contrário, uma infinidade de novas teorias tentando explicar o fenômeno surgem a cada momento.

Assim é que autores como F. NEGRO and TARTAGLIA [38] trabalham problemas dissipativos, onde a dissipação é devido a uma força de atrito que depende do quadrado da velocidade ( $v^2$ ), mas isso é feito somente classicamente.

Já P. HAVAS [39] desenvolveu sua teoria para casos mais gerais, onde o atrito pode ser dependente de uma força que possua qualquer expressão. Desde que se possa incluí-la na eq. de movimento, evidentemente.

P.G. SONA [37] e M. RAZAVY [43] trabalham com dissipação em problemas de espalhamento.

J. FRONTEAU and TELLEZ-ARENAS [58] trabalham com a dissipação em casos eletromagnéticos.

Autores como KOSTIN [52,67], DENMAN [31], LEMOS [33,34,65], BATEMAN [32], BRITTIN [48], K. YASUE [53,54,68], SKAGERSTAM [56,57], KOSTIN [52,68], KAN e GRIFFIN [55], TARTAGLIA [66], W. STOKER e K. ALBRECHT [41], K. ALBRECHT [60], KANAI [45], H. DEKKER [61,62], SENITZKY [50,51], M. RAZAVY [42,43,49,63], J. MESSER [1,49], NEMES e PIZA [69] tratam de problemas dissipativos onde a força de atrito é linearmente proporcional à velocidade.

E nesse presente trabalho abordaremos os problemas quan

tico dissipativo utilizando a formulação hidrodinâmica da mecânica quântica. A força de atrito, no nosso caso, em um primeiro momento depende da velocidade ( $v$ ) e posteriormente da velocidade quadrática ( $v^2$ ).

Em geral, quando se estuda um sistema dissipativo clássico, a força de atrito possui uma expressão conhecida e nesse caso pode-se montar uma equação de movimento dada pelas leis de Newton.

Consideremos, por exemplo, um sistema clássico que consista em uma partícula movendo-se em um meio viscoso, sujeita a ação de uma força resistiva proporcional à velocidade linear de deslocamento dessa partícula.

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

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{F} \quad (\text{II.1.4})$$

onde " $m$ " é a massa da partícula, " $r$ " é o vetor posição, " $\gamma$ " o coeficiente de atrito e " $F$ " é uma força externa.

A eq. (II.1.4) não pode ser derivada de um Lagrangeano convencional ( $L = T - V$ ), mas é possível, através de condições adequadas<sup>[43]</sup> encontrar-se um Lagrangeano modificado que nos conduza à eq. (II.1.4). Isto têm sido feito por muitos autores<sup>[39,66,44,63,38]</sup> e mostraremos aqui os passos gerais que fornecem este Lagrangeano.

Para isso coloquemos a eq. (II.1.4) na forma:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + \vec{\nabla} V = 0 \quad (\text{II.1.5})$$

onde  $V$  é o potencial atuante na partícula.

Utilizando-se agora da eq. (II.1.5), procuremos um Lagrangeano modificado que forneça uma equação similar à eq. (II.1.5).

Este tipo de problema foi estudado pela vez primeira por HELMHOLTZ<sup>[70]</sup>, da seguinte maneira:

Dado um par de equações do tipo:

$$G_j = (q, \dot{q}, \ddot{q}, t) = 0 \quad (\text{II.1.6})$$

deve ser possível obter-se uma função do tipo  $L(q, \dot{q}, t)$ , tal que:

$$G_j = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} \quad (\text{II.1.7})$$

isto é, quando  $G_j = 0$  a eq. (II.1.8) seria a equação de Euler-Lagrange obtida a partir do princípio variacional.

Um dos métodos, usado primeiramente por HAVAS<sup>[39]</sup>, consiste em se obter um par de equações semelhantes ao da eq. (II.1.6) pela multiplicação por "fatores integrantes" apropriados, que podem ser dependentes do tempo, das coordenadas generalizadas ( $q_j$ ) e de suas derivadas.

Para a equação particular (II.1.6) HAVAS<sup>[43]</sup> representou-a como:

$$f_j(q, \dot{q}, t) G_j = 0 \quad (\text{II.1.8})$$

excluindo a dependência dos  $f_j$  sobre as acelerações ( $\ddot{q}_j$ ) e derivadas maiores, do contrário as eqs. (II.1.8) e (II.1.6) não seriam equivalentes.

Com base nessas equações, HAVAS<sup>[39]</sup> assume sem perda de generalidade, que a eq. (II.1.6), após algumas modificações, pode ser colocada como:

$$G_j \equiv \ddot{q}_j + g_j(q_j, \dot{q}_j, t) = 0 \quad (\text{II.1.9})$$

nesse caso existe uma função  $f_j(q_j, \dot{q}_j, t)$  e  $L(q_j, \dot{q}_j, t)$  tal que:

$$f_j G_j = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} \quad (\text{II.1.10})$$

e a eq. (II.1.10) será satisfeita se "f<sub>j</sub>" for solução da equação diferencial descrita como:

$$g_j \frac{\partial \ln f_j}{\partial \dot{q}_j} + \frac{\partial g_j}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial \ln f_j}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \ln f_j}{\partial t} \quad (\text{II.1.11})$$

Voltemos agora à eq. (II.1.5), restringindo o movimento da partícula em uma dimensão, assim:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \frac{dV}{dx} \frac{1}{m} = 0 \quad (\text{II.1.12})$$

onde  $g_j(x, \dot{x}, t)$  é:

$$g_j = \gamma \frac{dx}{dt} + \frac{dV}{dx} \frac{1}{m} \quad (\text{II.1.13})$$

derivando a eq. (II.1.13) em relação à  $\dot{x}$ :

$$\frac{\partial g_j}{\partial \dot{x}} = \gamma \quad (\text{II.1.14})$$

Levando a eq. (II.1.14) na eq. (II.1.11) e isolando termos em  $\dot{x}$  e

x, teremos:

$$\frac{d \ln f_j}{dx} = \frac{dt}{dx} \gamma \quad (\text{II.1.15})$$

de onde surge:

$$f_j = \exp.(\gamma t) \quad (\text{II.1.16})$$

A eq. (II.1.16) é o "fator integrante" procurado que, deve ser incluído no Lagrangeano da partícula.

O Lagrangeano procurado será:

$$L = \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] \cdot \exp.(\gamma t) \quad (\text{II.1.17})$$

se aplicarmos as equações de Euler-Lagrange em (II.1.17), veremos que a equação de movimento obtida para o sistema clássico dissipativo, no caso da partícula, é a equação dada por (II.1.5).

Este mesmo Lagrangeano é apresentado por autores como: EDWARDS<sup>[64]</sup>, DENMAN<sup>[32]</sup>, LEMOS<sup>[33]</sup>, HASSE<sup>[46]</sup>, BAHAR & KWANTNY<sup>[35]</sup>, TARTAGLIA<sup>[66]</sup>, NEGRO & TARTAGLIA<sup>[38]</sup>, para descrever sistemas clássicos dissipativos, onde a força de atrito é proporcional à uma velocidade (v) de deslocamento.

## II.2 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER-LANGEVIN

Como frizamos no início deste capítulo, o tratamento quântico das forças de atrito trazem consigo um certo grau de dificuldade inerente ao problema, isto se deve ao fato de que a mecânica quântica é baseada conceitualmente na existência de Lagrangeanos e Hamiltonianos, e forças de atrito não podem ser incluídas de maneira convencional [39,40] nesses Lagrangeanos.

Tentamos aqui solucionar estes sistemas quânticos com forças dissipativas, usando as equações hidrodinâmicas da mecânica quântica.

Abordaremos aqui o problema do oscilador harmônico quântico, que por ser um caso mais simples é bastante encontrado na literatura.

Para uma partícula de massa "m" sob a ação de um potencial externo " $\phi(x,t)$ ", no caso unidimensional um lagrangeano que descreve este movimento é o da forma:

$$L = \frac{1}{2} m (\vec{u} + i \vec{u}_i)^2 + \phi(x,t) \quad (\text{II.2.1})$$

onde neste caso dizemos que o termo " $\phi(x,t)$ " é um potencial quântico complexo qualquer.

Separando assim o Lagrangeano dado pela eq. (II.2.1) em uma parte real e uma imaginária, a parte real:

$$L_R = \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 + \text{Re } \phi(x,t) \quad (\text{II.2.2})$$

e a parte imaginária:

$$L_i = m(\vec{u} \cdot \vec{u}_i) + \text{Im } \phi(x, t) \quad (\text{II.2.3})$$

Aplicando a equação de Euler-Lagrange, eq. (I.3.10), na parte real do Lagrangeano, eq. (II.2.2), obtém-se uma equação do tipo "F = ma" [5] para descrever sistemas quânticos.

A equação obtida é:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i = + \vec{\nabla} [\text{Re } \phi(x, t)] \quad (\text{II.2.4})$$

esta equação de movimento é generalizada para incluir forças dissipativas que dependam linearmente da velocidade.

Assim, a equação de movimento que descreve o caso de uma partícula de massa "m" sob a ação de um potencial externo " $\phi(x, t)$ ", deslocando-se com velocidade "u" num meio viscoso é:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i + m \gamma \vec{u} = \vec{\nabla} [\text{Re } \phi(x, t)] \quad (\text{II.2.5})$$

onde " $m \gamma \vec{u}$ " representa a força dissipativa proporcional à velocidade ( $\vec{u}$ ) de deslocamento:

$$\vec{F}_{at} = m \gamma \vec{u} \quad (\text{II.2.6})$$

A eq. (II.2.5) foi obtida por analogia com o caso clássico, pois a equação de movimento que descreve um sistema dissipativo é da forma:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} + \vec{F}_{at} = - \vec{\nabla} V \quad (\text{II.2.7})$$

onde " $\vec{F}_{at}$ " é dada pela eq. (II.2.6) e "V" é o potencial.

A equação de movimento (II.2.5) fornece um "fator integrante" que deve ser introduzido na parte real do Lagrangeano, eq. (II.2.2), este "fator integrante" é obtido por analogia com

o método utilizado na seção anterior para um caso clássico.

Assim, a eq. (II.2.5) pode ser escrita como:

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \frac{d^2x}{dt_i^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \frac{d \operatorname{Re} \phi}{dx} = 0 \quad (\text{II.2.8})$$

a eq. (II.2.8) é do tipo:

$$G_j = \ddot{x} + g_j(\dot{x}, x', x, t, t_i) \quad (\text{II.2.9})$$

onde:

$$\dot{x} = u = \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_i = \text{cte}} ; x' = u_i = \left. \frac{dx}{dt_i} \right|_{t = \text{cte}}.$$

e:

$$\ddot{x} = \left. \frac{du}{dt} \right|_{t_i = \text{cte}} = \left. \frac{d^2x}{dt^2} \right|_{t_i = \text{cte}}.$$

e nesse caso existe uma função " $f_j(x, \dot{x}, x', t, t_i)$ " e uma função " $L(x, \dot{x}, x', t, t_i)$ ", tal que:

$$f_j G_j = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial u} \right) + \frac{d}{dt_i} \left( \frac{\partial L}{\partial u_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \quad (\text{II.2.10})$$

e a eq. (II.2.10) será satisfeita se " $f_j$ " for solução da seguinte equação diferencial:

$$g_j \frac{\partial \ln f_j}{\partial u} + q_j \frac{\partial \ln f_j}{\partial u_i} + \frac{\partial g_j}{\partial u} + \frac{\partial g_j}{\partial u_i} = \frac{\partial \ln f_j}{\partial x} u - \frac{\partial \ln f_j}{\partial x} u_i + \frac{\partial \ln f_j}{\partial t} + \frac{\partial \ln f_j}{\partial t_i} \quad (\text{II.2.11})$$

Assim, da eq. (II.2.8), " $g_j(\dot{x}, x', x, t, t_i)$ " é:

$$g_j = \gamma \frac{dx}{dt} + \frac{d \operatorname{Re} \phi}{dx} \quad (\text{II.2.12})$$

derivando a eq. (II.2.12) em relação à "u", vem:

$$\frac{\partial g_j}{\partial u} = \gamma \quad (\text{II.2.13})$$

Levando este resultado na eq. (II.2.11) e isolando os termos em "x'" e "x", teremos:

$$\frac{d \ln f_j}{dx} = \frac{dt}{dx} \gamma \quad (\text{II.2.14})$$

de onde vem:

$$f_j = \exp(\gamma t) \quad (\text{II.2.15})$$

A eq. (II.2.15) é o "fator integrante", que incluído na parte real do Lagrangeano, eq. (II.2.2), fornece:

$$L_R = \left[ \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 + \operatorname{Re} \phi(x, t) \right] \exp(\gamma t) \quad (\text{II.2.16})$$

Se aplicarmos a equação de Euler-Lagrange na equação acima, a equação de movimento obtida para este caso coincide com a eq. (II.2.4). Logo, o Lagrangeano pesquisado pode ser o da forma dada pela eq. (II.2.16).

Este fator integrante não é incluído na parte imaginária do Lagrangeano, eq. (II.2.3), pois deste Lagrangeano obtém-se uma equação de movimento que, após algumas trocas de variáveis, fornece a equação de continuidade a qual expressa a conservação da densidade de probabilidade do sistema:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.2.17})$$

e esta densidade de probabilidade não se altera, pois a dissipação ocorre somente na energia.

No presente caso, como o sistema quântico em estudo é dissipativo, a equação obtida por processo semelhante ao do capítulo anterior, para descrever este sistema, não será exatamente a equação de Schrödinger.

O Lagrangeano dado pela eq. (II.2.16) fornece a seguinte equação de movimento:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i + m \gamma \vec{u} = -\vec{\nabla}[\text{Re } \phi(x,t)] \quad (\text{II.2.18})$$

Já obtida anteriormente por analogia o caso clássico através do emprego das eqs. de Newton, aqui o formalismo utilizado é o de Lagrange.

E da parte imaginária do Lagrangeano, eq. (II.2.3), obtém-se:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u}_i + \frac{d}{dt_i} m \vec{u} = -\vec{\nabla}[\text{Im } \phi(x,t)] \quad (\text{II.2.19})$$

Da mesma forma que no capítulo anterior, das eqs. (II.2.18) e (II.2.19) é possível de se obter uma equação semelhante a equação Schrödinger, desde que façamos as seguintes transposições:

$$\vec{u}(t, t_i) \rightarrow \vec{V}(x, t) \quad (\text{II.2.20})$$

$$\vec{u}_i(t, t_i) \rightarrow \vec{V}_i(x, t) \quad (\text{II.2.21})$$

e desde que o potencial  $\phi(x,t)$  seja colocado na forma:

$$\phi(x,t) = \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{V}_T + V(x) \quad (\text{II.2.22})$$

onde:

$$\vec{V}_T = \vec{v} + i \vec{v}_i \quad (\text{II.2.23})$$

as velocidades real " $\vec{v}$ " e imaginária " $\vec{v}_i$ " são as expressões definidas nas eqs. (I.2.10) e (I.2.11). E o potencial " $V(x)$ " é o potencial de interação entre as partículas.

Também com o auxílio das derivadas hidrodinâmicas, eqs. (I.3.19) e (I.3.20), a eq. (II.2.18) fornece:

$$\begin{aligned} m(\vec{v} \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}) + \frac{\partial}{\partial t}(m \vec{v}) - m(\vec{v}_i \cdot \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t}) - \frac{\partial}{\partial t_i}(m \vec{v}_i) + \\ + m \gamma \vec{v} = - \vec{\nabla} \left[ \frac{\hbar}{2} \vec{v} \cdot \vec{v}_i + V(x) \right] \end{aligned} \quad (\text{II.2.24})$$

na expressão acima a derivada parcial em " $t_i$ " é nula, pois a função " $\vec{v}_i$ " não possui uma dependência explícita com o parâmetro " $t_i$ ".

Integrando e agrupando de forma conveniente a expressão (II.2.24), obtêm-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} = \\ = - \vec{\nabla} \left[ \frac{\hbar}{2} \vec{v} \cdot \vec{v}_i + V(x) \right] + f(t) \end{aligned} \quad (\text{II.2.25})$$

onde  $f(t)$  é uma constante de integração.

A eq. (II.2.25) é semelhante a equação de Ricatti para casos não dissipativos, difere apenas devido ao termo que descreve a dissipação, e denominamos de equação de Ricatti modificada.

As velocidades real e imaginárias, definidas nas eqs. (II.2.8) e (II.2.9), são agora substituídas na eq. (II.2.25), o que resulta em:

$$\begin{aligned}
f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} &= \frac{1}{2} m \left( \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right)^2 + \\
- \frac{1}{2} m \left( - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \Psi \right)^2 + \frac{\hbar}{2} \left( - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \Psi \right) + V(x) & \\
& \text{(II.2.26)}
\end{aligned}$$

Desenvolvendo e agrupando de forma conveniente, obtemos:

$$\begin{aligned}
f(t) - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} &= - \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \right. \\
+ \left. \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 - 2 \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \cdot \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right] - \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 + \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 + 2 \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \cdot \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right] - \\
- \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} - \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} \right)^2 - \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right)^2 \right] + V(x) & \text{(II.2.27)}
\end{aligned}$$

Agrupando e eliminando os termos semelhantes, chegamos a:

$$\begin{aligned}
f(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} &= \\
= - \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] + V(x) & \text{(II.2.28)}
\end{aligned}$$

Usando agora as mudanças de variáveis bem como as derivadas hidrodinâmicas na eq. (II.2.18), podemos escrevê-la como:

$$m[\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i + \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}] + m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}_i + m \frac{\partial}{\partial t_i} \vec{v} = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \text{(II.2.29)}$$

novamente aqui a derivada parcial em "t<sub>i</sub>" é nula, assim a equação acima fica:

$$m[\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i + \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}] + m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}_i = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \text{(II.2.30)}$$

ou

$$m \vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{v}_i) + m \frac{\partial}{\partial t_i} \vec{v}_i = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (\text{II.2.31})$$

integrando a equação vem:

$$m(\vec{v} \cdot \vec{v}_i) - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{II.2.32})$$

Substituindo a velocidade imaginária ( $\vec{v}_i$ ) na eq. (II.2.32), resulta em:

$$m(\vec{v} \cdot - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \rho) - \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho = \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{II.2.33})$$

e agora simplificando e agrupando:

$$- \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \ln \rho - \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{II.2.34})$$

A eq. (II.2.34) pode ser escrita como:

$$- \vec{v} \cdot \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} \rho - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{II.2.35})$$

o que nos fornece a seguinte equação:

$$- \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho - \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.2.36})$$

ou de outra forma:

$$\vec{\nabla}(\rho \vec{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.2.37})$$

que é a equação de continuidade, já apresentada na eq. (II.2.17).

Escrevendo a eq. (II.2.37), na forma:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = m \vec{v} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (\text{II.2.38})$$

substituindo as expressões para a velocidade real ( $\vec{v}$ ) e para a velocidade imaginária ( $\vec{v}_i$ ) na equação acima, resulta em:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left( m \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right) \cdot \left( - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right) -$$

$$- \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad (\text{II.2.39})$$

derivando os termos em " $\ln$ " e agrupando, teremos:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{i\hbar^2}{4m} \left[ \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right) \cdot \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right) + \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\vec{\nabla} \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\vec{\nabla} \Psi}{\Psi} \right) \right]$$

(II.2.40)

desenvolvendo, eliminando termos iguais e agrupando os termos restantes, chegamos a:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{i\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right]$$

(II.2.41)

Somando as eqs. (II.2.28) e (II.2.41):

$$f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} =$$

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

(II.2.42)

o que resulta em:

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

(II.2.43)

A constante " $f(t)$ " que aparece na eq. (II.2.43) pode ser avaliada se usarmos a condição de que o valor esperado da energia total,  $\langle E(t) \rangle$ , é igual ao valor esperado da energia cinética,  $(2m)^{-1} \langle P^2(t) \rangle$ , mais o valor esperado do potencial de interação,  $\langle V(x) \rangle$ .

Assim:

$$\langle E(t) \rangle = \langle P^2(t) \rangle / 2m + \langle V(r) \rangle \quad (\text{II.2.44})$$

onde; assumindo o problema em uma dimensão:

$$\langle E(t) \rangle = i\hbar \int \Psi^*(x,t) \left[ \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \right] dx \quad (\text{II.2.45})$$

$$\langle P^2(t) \rangle = -\hbar^2 \int \Psi^*(x,t) \left[ \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} \right] dx \quad (\text{II.2.46})$$

$$\langle V(x) \rangle = \int \Psi^*(x,t) V(x) \Psi(x,t) dx \quad (\text{II.2.47})$$

Multiplicando agora a eq. (II.2.43) por " $\Psi^*(x,t)$ ":

$$i\hbar \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^*(x,t) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x,t) + \Psi^*(x,t) V(x) \Psi(x,t) + \Psi^*(x,t) V_L \Psi(x,t) \quad (\text{II.2.48})$$

onde " $V_L$ " é o potencial não linear da forma:

$$V_L = \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*(x,t)}{\Psi(x,t)} + f(t) \quad (\text{II.2.49})$$

Integrando a eq. (II.2.48), vê-se:

$$i\hbar \int \Psi^* \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx + \int \Psi^* V(x) \Psi dx + \int \Psi^* V_L \Psi dx \quad (\text{II.2.50})$$

Agora comparando a equação acima com as eqs. (II.2.44), (II.2.46) e (II.2.47), tiramos:

$$\frac{i\hbar}{2} \gamma \int \Psi^* \left[ \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right] \Psi dx + \int \Psi^* f(t) \Psi dx = 0 \quad (\text{II.2.51})$$

de onde vem o valor de "f(t)".

$$f(t) = - \frac{i\hbar}{2} \gamma \int \Psi^* \left[ \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right] \Psi dx \quad (\text{II.2.52})$$

a equação final toma a forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \Psi - \\ - \frac{i\hbar}{2} \gamma \left\{ \int \Psi^* \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \Psi dx \right\} \Psi \quad (\text{II.2.53})$$

A eq. (II.2.53) foi obtida primeiramente por KOSTIN<sup>[52]</sup>, que a derivou a partir das equações de movimento de Heisenberg, recebe o nome de equação de Schrödinger - Langevin.

Esta equação também foi derivada por outros autores, para descrever sistemas dissipativos com força de atrito linear, dentre estes autores podemos destacar M. RAZAVY<sup>[42,43]</sup> que obteve a equação de Schrödinger-Langevin utilizando-se do método de Schrödinger o qual define um funcional "I(S)" e procura-se o seu extremo associado "S" com a equação clássica de Hamilton-Jacobi.

A eq. (II.2.53) possui uma classe de soluções não triviais e estas soluções tem a notável propriedade de ser assintoticamente estacionária.

Devido a este fato pode ser demonstrado, mas não o faremos aqui, que esta propriedade determina uma única solução para a eq. (II.2.53).

KOSTIN<sup>[52]</sup>, J. MESSER<sup>[49]</sup>, SKAGERSTAM<sup>[56,57]</sup>, M. RAZAVY<sup>[42,43]</sup> e outros propuzeram funções de onda que fossem soluções da eq. (II.2.53) e com isso obtiveram a energia total e a energia dissipada do sistema.

O passo seguinte será o de obtermos uma função de onda

que satisfaça a equação de Schrödinger-Langevin, eq. (II.2.53).

No nosso trabalho deve ser possível, pelo menos teoricamente, encontrar esta função de onda diretamente das definições de velocidade real ( $\vec{v}$ ) e velocidade complexa ( $\vec{v}_i$ ), basta para isso conhecermos suas expressões.

Isto será visto na seção seguinte.

### II.3 - EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

Conhecendo-se as equações de movimento do sistema, mediante uma troca de variáveis, podemos encontrar as expressões para a velocidade real " $\vec{v}$ " e para a velocidade imaginária " $\vec{v}_i$ ".

Assim, as equações de movimento para o oscilador harmônico quântico dissipativo, são em uma dimensão:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i + m \gamma \vec{v} = - \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(x) \right) \quad (\text{II.3.1})$$

e:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u}_i + \frac{d}{dt_i} m \vec{u} = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \quad (\text{II.3.2})$$

mediante as transformações de variáveis, dadas pelas eqs.(II.2.20), (II.2.21) e (II.2.22) com auxílio das derivadas hidrodinâmicas e sabendo que " $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ " para o oscilador harmônico quântico, ficam:

$$\begin{aligned} m(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) + \frac{\partial}{\partial t} (m \vec{v}) - m(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i) - \\ - \frac{\partial}{\partial t_i} (m \vec{v}_i) + m \gamma \vec{v} = \\ = - \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{II.3.3})$$

e:

$$\begin{aligned} m[\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i + \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}] + m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v}_i + m \frac{\partial}{\partial t_i} \vec{v} = \\ = \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.3.4})$$

apresentam como solução:

$$v = \dot{\xi}(t) \quad (\text{II.3.5})$$

e:

$$v_i = \omega(x - \xi(t)) \quad (\text{II.3.6})$$

onde:

$$\xi(t) = A' \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \cdot t\right] \cdot \cos\left[(\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} t + B\right] \quad (\text{II.3.7})$$

é a solução da equação clássica de movimento para o oscilador harmônico clássico dissipativo, "A'" e "B" são constantes.

As eqs. ( II.3.4) e ( II.3.5) são as linhas de fluxo para o sistema, e delas podem ser tiradas algumas informações por simples inspeção.

Agora, conhecendo-se as expressões para a velocidade real ( $\vec{v}$ ) e para velocidade imaginária ( $\vec{v}_i$ ), obteremos a função de onda que satisfaça a equação de Schrödinger-Langevin.

Assim, " $\vec{v}$ " e " $\vec{v}_i$ " são definidas como:

$$\vec{v} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\psi^*}{\psi} \quad (\text{II.3.8})$$

$$\vec{v}_i = \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \psi^* \psi \quad (\text{II.3.9})$$

que podem ser escritas como:

$$-\frac{2im}{\hbar} \vec{v} = \frac{\vec{\nabla}\psi^*}{\psi^*} - \frac{\vec{\nabla}\psi}{\psi} \quad (\text{II.3.10})$$

e

$$-\frac{2m}{\hbar} \vec{v}_i = \frac{\vec{\nabla}\Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \quad (\text{II.3.11})$$

Adicionando de forma conveniente, as duas equações acima, vêm:

$$\frac{m}{\hbar} (i \vec{v} - \vec{v}_i) = \frac{\vec{\nabla}\Psi}{\Psi} \quad (\text{II.3.12})$$

substituindo agora, as eqs. (II.3.6) e (II.3.7) na eq. (II.3.12), em uma dimensão, resulta em:

$$\frac{m}{\hbar} (i \dot{\xi}(t) - \omega x + \omega \xi(t)) = \frac{d}{dx} \ln \Psi \quad (\text{II.3.13})$$

desenvolvendo a expressão acima, obtemos:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) = A \cdot \exp\left[\frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar}\right] \cdot \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right] \cdot \\ \cdot \exp\left[\frac{m\omega x\xi(t)}{\hbar}\right] \cdot \exp[k(t)] \end{aligned} \quad (\text{II.3.14})$$

Escrevendo esta função de onda de forma mais adequada:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) = A \cdot \exp\left[\frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar}\right] \cdot \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - \xi(t))^2\right] \cdot \\ \cdot \exp[ik(t)] \end{aligned} \quad (\text{II.3.15})$$

onde "k(t)" é a constante de integração escrita na forma mais geral possível e a constante "A" é o fator de normalização da função de onda.

Como a função acima é normalizável:

$$\int \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (\text{II.3.16})$$

obtemos para a constante "A":

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \quad (\text{II.3.16})$$

que é o fator de normalização para a função de onda do oscilador harmônico não dissipativo, no estado fundamental, "n = 0", em uma dimensão.

Substituindo a função de onda, dada na eq. ( II.3.15), na equação de Schrödinger-Langevin, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & - m x \ddot{\xi}(t) + i m \omega (x - \xi(t)) \dot{\xi}(t) - \hbar k(t) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) + \\
 & + \frac{i}{2} m \omega (x - \xi(t)) \dot{\xi}(t) + \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{i}{2} m \omega (x - \xi(t)) \dot{\xi}(t) + \\
 & + \frac{1}{2} m \omega^2 (x - \xi(t))^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + m \gamma x \dot{\xi}(t) + \gamma \hbar k(t) - \\
 & - m \gamma \dot{\xi}(t) \xi(t) - \gamma \hbar k(t) \quad ( II.3.17)
 \end{aligned}$$

Desenvolvendo e eliminando termos iguais, resta:

$$\begin{aligned}
 & - m x \ddot{\xi}(t) - \hbar k(t) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) + \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) + \\
 & + m \omega^2 x \xi(t) + m \gamma x \dot{\xi}(t) + m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) \quad ( II.3.18)
 \end{aligned}$$

Da equação acima tiramos:

$$- m x \ddot{\xi}(t) - m \gamma \dot{\xi}(t) - m x \omega^2 \xi(t) = 0 \quad ( II.3.19)$$

que é igual a:

$$\ddot{\xi}(t) + \gamma \dot{\xi}(t) + \omega^2 \xi(t) = 0 \quad ( II.3.20)$$

A eq. (3.20) é a equação clássica de movimento para o oscilador harmônico clássico dissipativo, onde "γ" é o coeficiente de atrito, cuja solução já foi colocada na forma de eq. ( II.3.7):

$$\xi(t) = A' \exp.[-\frac{\gamma}{2} t]. \cos[(\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} \cdot t + B]$$

( II.3.21)

onde "A'" e "B" são constantes. Vê-se então que a equação de Schrödinger-Langevin possui toda uma gama de validade, desde que " $\xi(t)$ " possua a forma da eq. ( II.3.21) para o caso linear.

Da eq. ( II.3.18) podemos ainda isolar a expressão restante:

$$-\hbar \dot{k}(t) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) + E_0$$

( II.3.22)

ou:

$$\hbar \dot{k}(t) = m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) - E_0$$

( II.3.22)

podemos assim colocar "k(t)" como:

$$k(t) = -\frac{E_0}{\hbar} \cdot t + \frac{1}{\hbar} \int (m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t)) dt$$

( II.3.23)

Vemos então que "k" não é uma função somente do tempo (t), mas também da função " $\xi(t)$ " e sua derivada primeira, logo podemos escrever de forma mais geral:

$$k(t) = -\frac{E_0 \cdot t}{\hbar} + g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t)$$

( II.3.24)

onde chamamos de  $g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t)$ , a expressão:

$$g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) = \frac{1}{\hbar} \int (m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t)) dt$$

( II.3.25)

ou:

$$h\dot{g}(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) = \xi m \gamma \dot{\xi}(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) \quad (\text{II.2.26})$$

Logo, levando a expressão (II.3.24) na função de onda, dada na eq. (II.3.15), vêm:

$$\Psi(x, t) = A \cdot \exp \left[ \frac{i m x \dot{\xi}(t)}{h} \right] \cdot \exp \left[ - \frac{m \omega}{2h} (x - \xi(t))^2 \right] \cdot \exp \left[ \frac{i E_0 \cdot t}{h} \right] \cdot \exp [i g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t)] \quad (\text{II.3.27})$$

que é a nossa função de onda procurada.

B.K. SKAGERSTAM<sup>[56,57]</sup>, utilizando-se de uma série de transformações de "gauge" dependentes do tempo foi o primeiro a encontrar este tipo de solução, em seguida vieram outros como M. RAZAVY<sup>[42,43]</sup>, KOSTIN<sup>[52]</sup>.

É importante salientar que a nossa função de onda, pelo método aqui obtido, é em tudo semelhante à função de onda apresentada na literatura específica para sistemas dissipativos.

Conhecendo-se agora a função de onda do oscilador harmônico quântico dissipativo, podemos comprovar sua validade verificando se elas são soluções da equação de continuidade, assim:

$$\vec{\nabla}(\Psi^* \Psi \vec{V}) + \frac{\partial}{\partial t} \Psi \Psi^* = 0 \quad (\text{II.3.28})$$

que é a equação de continuidade, com o valor de " $\vec{V}$ ", em uma dimensão:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\Psi \Psi^* \cdot \dot{\xi}(t)) + \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) = 0 \quad (\text{II.3.29})$$

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

Também com o auxílio das definições de velocidade real ( $\vec{v}$ ) e velocidade complexa ( $\vec{v}_i$ ):

$$\vec{v} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad (\text{II.3.30})$$

$$v_i = - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \Psi^* \Psi \quad (\text{II.3.31})$$

podemos comprovar a validade de nossa função de onda, basta verificarmos se as expressões para " $v$ " e " $v_i$ ", obtidas através da função de onda (III.3.27), concordam com as expressões obtidas para as velocidades real ( $\vec{v}$ ) e imaginária ( $\vec{v}_i$ ) obtidas diretamente das equações de movimento.

Assim, substituindo a eq. (II.3.27) na eq. (II.3.30), para " $n = 0$ ", resulta em:

$$v = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2iE_0 t}{\hbar} - \frac{2imx}{\hbar} \dot{\xi}(t) - 2ig(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) \right] \quad (\text{II.3.32})$$

desenvolvendo vem:

$$v = \dot{\xi}(t) \quad (\text{II.3.33})$$

substituindo, agora a eq. (II.3.27) na eq. (II.3.31), para " $n = 0$ ", vem:

$$v_i = - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ 2 \ln A - \frac{m\omega}{\hbar} (x - \xi(t))^2 \right] \quad (\text{II.3.34})$$

desenvolvendo, vem:

$$v_i = \omega(x - \xi(t)) \quad (\text{II.3.35})$$

As eqs. (II.3.33) e (II.3.35) possuem a mesma forma que as eqs. (II.3.5) e (II.3.6), assim pode-se constatar que esta função de onda é aceitável.

Em seu trabalho SKAGERSTAM<sup>[57]</sup> define as velocidades e real ( $v$ ) e complexa ( $v_i$ ), aqui também obtidas, por velocidade de corrente ( $v$ ) e velocidade estocástica ( $\mu$ ). Ambas guardam a mesma forma das expressões obtidas por SKAGERSTAM.

Convém salientar aqui que todos os resultados obtidos são para o estado fundamental do oscilador harmônico quântico dissipativo, em um trabalho futuro procuraremos estender estes resultados a outros estados do oscilador harmônico.

## II.4 - ENERGIA

Para sistemas quânticos não dissipativos a energia do sistema é um valor conhecido, ou pelo menos de fácil determinação, e possui níveis característicos, isto é, para cada estado possui um valor conhecido.

Porém quando tratamos com um problema quântico dissipativo a energia não possui um operador definido<sup>[46]</sup>, isto é, a energia não é uma constante de movimento. Energia e o Hamiltoniano do sistema diferem justamente devido ao fator que descreve a dissipação, ou mais claramente, a energia total do sistema não pode ser colocada somente como a soma da energia cinética mais potencial.

Mas nada nos impede de uma tentativa, para escrever esta energia total, em termos de valores médios. Utilizando-se do valor médio da energia potencial mais o valor médio da energia cinética para obter a energia total do sistema.

Isto pode ser feito recordando-se da definição dada pela eq. (II.2.44), onde:

$$\langle E(t) \rangle = \langle p^2(t) \rangle / 2m + \langle V(x) \rangle \quad (\text{II.4.1})$$

e da definição dada pela eq. (II.2.50), onde

$$i\hbar \int \Psi^* \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx + \int \Psi^* V(x) \Psi dx + \int \Psi^* V_L(x) \Psi dx \quad (\text{II.4.2})$$

onde o valor médio de " $V_L$ " é necessariamente nulo:

$$V_L(x) = \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + f(t) \quad (\text{II.4.3})$$

Assim, nossa definição de energia será em termos de valores médios, porém, partiremos diretamente da equação de Ricatti modificada obtida na seção anterior.

B.K. SKAGERSTAM<sup>[56,57]</sup>, M.D. KOSTIN<sup>[52,68]</sup> e outros, utilizam-se da definição de energia total em termos de operadores, na forma:

$$E(t) = (\Psi^*, i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}) \quad (\text{II.4.4})$$

Na segunda seção desse capítulo obtivemos a eq.(II.2.24), que é semelhante a equação de Ricatti para sistemas estacionários, e que denominamos de equação de Ricatti modificada.

A equação de Ricatti modificada foi obtida através do Lagrangeano dado pela eq. (II.2.16) e pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V = \\ & = - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} + f(t) \end{aligned} \quad (\text{II.4.5})$$

onde, "f(t)" é dado por:

$$f(t) = - \frac{i\hbar}{2} \gamma \int \Psi^* \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \Psi \, dr \quad (\text{II.4.6})$$

observa-se que o lado esquerdo da eq. (II.4.5) é composto pela soma da energia cinética mais potencial, enquanto que o lado direito contém os termos responsáveis pela dissipação da energia do sistema.

Com base na definição sugerida pela eq. (II.4.1) calculamos o valor médio dos termos encontrados na eq. (II.4.5), assim:

$$\begin{aligned}
& - \left\langle \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right\rangle + \langle V \rangle = \\
& = \left\langle - \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle + \left\langle - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle + \langle f(t) \rangle \quad (\text{II.4.7})
\end{aligned}$$

O lado esquerdo da eq. (II.4.7), representa o valor médio da energia cinética mais o valor médio da energia potencial e, que pela nossa definição, nada mais é do que o valor da energia total do sistema:

$$E(t) = \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right\rangle + \langle V \rangle \quad (\text{II.4.8})$$

E para o oscilador harmônico quântico dissipativo em uma dimensão, os valores para a velocidade real ( $v$ ) e para a velocidade complexa ( $v_i$ ) são fornecidos pelas eqs. (II.3.5) e (II.3.6), assim:

$$\begin{aligned}
E(t) &= \left\langle \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2} m (\omega x - \omega \xi)^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle + \\
&+ \left\langle \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\omega x - \omega \xi) \right\rangle \quad (\text{II.4.9})
\end{aligned}$$

A equação de onda utilizada para o cálculo dos valores médios é dada pela eq. (II.3.27), a qual tomamos para o estado fundamental.

Dessa forma a eq. (II.4.9), após os cálculos, se reduz a:

$$E(t) = \frac{\hbar}{2} \omega + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) + m \omega^2 x^2(t) \quad (\text{II.4.10})$$

e a equação final para a energia total é:

$$E(t) = E_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 \quad (\text{II.4.11})$$

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

O lado direito da eq. (II.4.7), por razões óbvias, deve também fornecer o valor médio da energia total do sistema, assim:

$$E(t) = - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \gamma \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle + \langle f(t) \rangle \quad (\text{II.4.12})$$

Substituindo a função de onda dada pela eq. (II.3.27), para o estado estacionário " $n=0$ ", na equação acima, bem como a expressão para a " $f(t)$ ", vem:

$$\begin{aligned} E(t) = & \left\langle - \frac{i\hbar}{2} \gamma \left( \frac{2i}{\hbar} E_0 t - \frac{2i}{\hbar} m x \dot{\xi} - 2ig \right) \right\rangle + \\ & + \left\langle - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{2iE_0 t}{\hbar} - \frac{2i}{\hbar} m x \dot{\xi} - 2ig \right) \right\rangle + \\ & + \left\langle \frac{i\hbar}{2} \int \Psi^* \left( \frac{2iE_0 t}{\hbar} - \frac{2i}{\hbar} m x \dot{\xi} - 2ig \right) \Psi dx \right\rangle \quad (\text{II.4.13}) \end{aligned}$$

o que resulta em:

$$\begin{aligned} E(t) = & \langle \gamma E_0 t \rangle - \langle m \gamma x \dot{\xi} \rangle - \langle \gamma \hbar g \rangle + \langle E_0 \rangle + \\ & - \langle m x \ddot{\xi} \rangle - \langle \hbar \dot{g} \rangle - \langle \gamma E_0 t \rangle + \langle \gamma m \xi \dot{\xi} \rangle + \langle \hbar \gamma g \rangle \quad (\text{II.4.14}) \end{aligned}$$

eliminando termos iguais, obtêm-se

$$E(t) = \langle -m \gamma x \dot{\xi} \rangle + \langle E_0 \rangle - \langle m x \ddot{\xi} \rangle - \langle \hbar \dot{g} \rangle + \langle m \gamma \xi \dot{\xi} \rangle \quad (\text{II.4.15})$$

substituindo o valor de " $\dot{g}(\xi(t), \xi(t), t)$ " na equação acima e

resolvendo:

$$E(t) = E_0 - m\xi\ddot{\xi} - m\gamma\xi\dot{\xi} - \frac{1}{2} m\omega^2\xi^2 + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 \quad (\text{II.4.16})$$

utilizando-se da eq. (II.3.20), na forma:

$$\ddot{\xi} + \gamma\dot{\xi} + \omega^2\xi = 0 \quad (\text{II.4.17})$$

e levando em (II.4.16), a expressão mais geral será:

$$E(t) = E_n + \frac{1}{2} m\omega^2\xi^2 + \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 \quad (\text{II.4.18})$$

o que concorda com a eq. (II.4.11), isto é, os dois lados da eq. (II.4.7) fornecem o valor total da energia para o sistema.

Para obtermos a energia dissipada em função do tempo, basta derivar a eq. (II.4.18), assim:

$$\dot{E}(t) = m\omega^2\xi\dot{\xi} + m\dot{\xi}\ddot{\xi} \quad (\text{II.4.19})$$

e recordando que:

$$\ddot{\xi} = -\gamma\dot{\xi} - \omega^2\xi \quad (\text{II.4.20})$$

obtém-se:

$$\dot{E}(t) = m\omega^2\xi\dot{\xi} - m\gamma\dot{\xi}^2 - m\omega^2\xi\dot{\xi} \quad (\text{II.4.21})$$

ou

$$\dot{E}(t) = -m\gamma\dot{\xi}^2 \quad (\text{II.4.22})$$

A equação acima descreve a taxa de variação da energia total do sistema em função do tempo.

Vamos agora fazer uma análise das expressões para a

energia total do sistema, como a energia depende da função " $\xi(t)$ " e de sua derivada " $\dot{\xi}(t)$ ", tomemos o fator de fase nulo ( $B = 0$ ):

$$\xi(t) = A' \exp \left[ -\frac{\gamma}{2} t \right] \cdot \cos \left[ (\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} t \right] \quad (\text{II.4.23})$$

e

$$\begin{aligned} \dot{\xi}(t) = & -\frac{\gamma}{2} A' \exp \left[ -\frac{\gamma}{2} t \right] \cdot \cos \left[ (\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} t \right] + \\ & - A' \exp \left[ -\frac{\gamma}{2} t \right] \cdot (\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} \cdot \text{sen} \left[ (\omega^2 - \gamma^2/4)^{1/2} t \right] \end{aligned} \quad (\text{II.4.24})$$

Assim, para  $t \gg 1$ , ficamos com:

$$\xi(t) \Big|_{t \gg 1} = 0 \quad (\text{II.4.25})$$

e:

$$\dot{\xi}(t) \Big|_{t \gg 1} = 0 \quad (\text{II.4.26})$$

Logo o valor da energia será:

$$E(t) \Big|_{t \gg 1} = E_0 \quad (\text{II.4.27})$$

ou:

$$E(t) \Big|_{t \rightarrow \infty} = E_n \quad (\text{II.4.28})$$

isto é, o valor final para a energia, no limite ( $t \rightarrow \infty$ ), se reduz a energia total para os casos estacionários.

Assim, para  $t \ll 1$ , ficamos com:

$$\xi(t) \Big|_{t \ll 1} = A' \quad (\text{II.4.29})$$

e:

$$\dot{\xi}(t) \Big|_{t \ll 1} = -\frac{\gamma}{2} A' \quad (\text{II.4.30})$$

Logo o valor da energia, no limite ( $t \rightarrow 0$ ), será

$$E(t) \Big|_{t \rightarrow 0} = E_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(0) + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(0) \quad (\text{II.4.31})$$

Vemos então, que inicialmente ( $t \rightarrow 0$ ), a energia possui um valor máximo conhecido que é especificado pelo valor da constante "A", em consequência da dependência da função " $\xi(t)$ " com esta constante.

Já a energia dissipada em função do tempo, dada pela eq. (I.4.22), para o limite " $t \rightarrow \infty$ " possui um valor nulo, isto é, o sistema já encontra-se no estado estacionário com um nível mínimo de energia e, conseqüentemente, não pode mais sofrer dissipação.

No limite " $t \rightarrow 0$ " a taxa de dissipação tem um valor máximo, dado pelo valor que a constante "A" assumir, assim:

$$\dot{E}(t) \Big|_{t \rightarrow 0} = -\frac{m}{4} \gamma^3 A'^2 \quad (\text{II.4.32})$$

NEMES e PIZA<sup>[69]</sup>, usando operadores, obtêm uma expressão para a energia dissipada que possui a mesma forma que a eq. (II.4.22), ou seja, a energia dissipada pelo sistema é uma função exponencial dependente do tempo.

KOSTIN<sup>[69]</sup>, também usando operadores, obteve uma ex-

pressão um pouco mais geral para a energia dissipada, mais ainda, guardando a forma exponencial na dependência temporal.

SKAGERSTAM<sup>[57]</sup> utilizando uma definição de operador energia da forma:

$$E \stackrel{\text{def.}}{=} \langle E_{op.} \rangle = - \frac{\hbar^2}{2m} \langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rangle + \langle \phi \rangle \quad (\text{II.4.33})$$

obtem para a energia total do sistema, a mesma expressão que obtivemos na eq. (II.4.18), onde a energia total do sistema depende dos valores da função " $\xi(t)$ ", de sua derivada primeira " $\dot{\xi}(t)$ " mais a energia do estado estacionário.

## CAPÍTULO III

SISTEMAS DISSIPATIVOS - OSCILADOR HARMÔNICO II

(caso dissipativo quadrático)

III.1 - EQUAÇÃO ANÁLOGA À DE SCHRODINGER-LANGEVIN

No capítulo anterior abordamos o problema dos oscilador harmônico quântico dissipativo, onde a dissipação de energia é uma consequência da força de atrito linearmente proporcional à velocidade.

No presente capítulo, fundamentalmente o problema é idêntico, a abordagem será feita ainda para o caso do oscilador harmônico quântico dissipativo, mas agora, a dissipação de energia se faz mediante uma força de atrito proporcional à uma velocidade ao quadrado.

F. NEGRO and A. TARTAGLIA<sup>[34]</sup> fazem um tratamento clássico canônico para uma partícula em um campo, onde a força de atrito é proporcional à velocidade ao quadrado, usando quantização canônica.

Para uma partícula quântica de massa "m" e sob a ação de um potencial externo " $\phi(x,t)$ ", a equação que descreve o fenômeno, no formalismo de Lagrange é da forma:

$$L = \frac{1}{2} m \vec{U}^2 + \phi(x,t) \quad (\text{III.1.1})$$

onde:

$$\vec{U} = \vec{u} + i \vec{u}_i \quad (\text{III.1.2})$$

é a soma da parte real mais a parte imaginária de uma velocidade total.

E o potencial " $\phi(x,t)$ " é da forma:

$$\phi(x,t) = \text{Re } \phi(x,t) + \text{Im } \phi(x,t) \quad (\text{III.1.3})$$

Assim podemos separar a eq. (III.1.1) numa parte real e outra imaginária, na forma:

$$L = L_R + i L_i \quad (\text{III.1.4})$$

Logo:

$$L = \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 + \text{Re } \phi(x,t) + \text{Im } \phi(x,t) + i m (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_i) \quad (\text{III.1.4})$$

ou:

$$L_R = \frac{1}{2} m u^2 - \frac{1}{2} m u_i^2 + \text{Re } \phi(x,t) \quad (\text{III.1.6})$$

e:

$$L_i = m(\vec{u} \cdot \vec{u}_i) + \text{Im } \phi(x,t) \quad (\text{III.1.7})$$

Aplicando as equações de Euler-Lagrange na parte real do Lagrangeano, eq. (III.1.6), obtém-se uma equação do tipo  $\vec{F} = m \vec{a}$  [5] para descrever o nosso sistema.

Assim:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i = \vec{\nabla}(\text{Re } \phi(x,t)) \quad (\text{III.1.8})$$

esta equação é generalizada para incluir forças de atrito que dependam da velocidade ao quadrado da partícula. Dessa forma, a equação de movimento que descreve o oscilador harmônico quântico dissipativo, cujo termo de dissipação é descrito acima:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u} - \frac{d}{dt_i} m \vec{u}_i + m \gamma u^2 \hat{u} = \vec{\nabla}(\text{Re } \phi(x,t)) \quad (\text{III.1.9})$$

Na equação acima o termo " $m \gamma u^2 \hat{u}$ ", onde " $\hat{u}$ " é o vetor unitário e " $\gamma$ " o coeficiente de atrito, representa a força dissipativa proporcional à velocidade ao quadrado:

$$\vec{F}_{at} = m \gamma u^2 \hat{u} \quad (\text{III.1.10})$$

Recordando-se do capítulo anterior, aqui também utilizamos da analogia com o caso clássico para obter a equação de movimento, eq. (III.1.9).

Esta equação de movimento fornece um "fator integrante" que deve ser acoplado na parte real do Lagrangeano, eq. (III.1.6).

Este "fator integrante" é obtido por processo semelhante ao utilizado no capítulo anterior para o caso dissipativo linear.

Assim, considerando o problema em uma dimensão, a eq. (III.1.9) pode ser escrita como:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} - \frac{d^2 x}{dt_i^2} + \gamma \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} [\text{Re } \phi(x,t)] = 0 \quad (\text{III.1.11})$$

Lembrando ainda que a equação acima é da forma:

$$G_j = \dot{x} + g_j(\dot{x}, x', x, t, t_i) \quad (\text{III.1.12})$$

onde:

$$\dot{x} = u = \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t_i = \text{cte}} ; x' = u_i = \left. \frac{dx}{dt_i} \right|_{t = \text{cte}}$$

e:

$$\ddot{x} = \left. \frac{du}{dt} \right|_{t_i = \text{cte}} = \left. \frac{d^2x}{dt^2} \right|_{t_i = \text{cte}}$$

E nesse caso existe uma função " $f_j(x, \dot{x}, x', t, t_i)$ " e " $L(x, \dot{x}, x', t, t_i)$ ", tal que:

$$f_j G_j = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial u} \right) + \frac{d}{dt_i} \left( \frac{\partial L}{\partial u_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \quad (\text{III.1.13})$$

onde a eq. (III.1.12) será satisfeita se " $f_j$ " for solução da seguinte equação diferencial:

$$\begin{aligned} g_j \cdot \frac{\partial \ln f_j}{\partial u} + g_j \cdot \frac{\partial \ln f_j}{\partial u_i} + \frac{\partial g_j}{\partial u} + \frac{\partial g_j}{\partial u_i} = \\ = \frac{\partial \ln f_j}{\partial x} \cdot u - \frac{\partial \ln f_j}{\partial x} \cdot u_i + \frac{\partial \ln f_j}{\partial t} + \frac{\partial \ln f_j}{\partial t_i} \end{aligned} \quad (\text{III.1.14})$$

Também da eq. (III.1.11) " $q_j(x, \dot{x}, x', t, t_i)$ " em uma dimensão é:

$$g_j = \gamma \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (\text{Re } \phi(x, t)) = 0 \quad (\text{III.1.15})$$

derivando a equação acima em relação a " $\dot{x}$ ", vem:

$$\frac{\partial g_j}{\partial u} = 2 \gamma \frac{dx}{dt} \quad (\text{III.1.16})$$

Levando o resultado (III.1.16) na eq. (III.1.14) e isolando termos em " $\dot{x}$ " e " $x$ ", obtêm-se:

$$\frac{\ln f_j}{dx} = 2\gamma \quad (\text{III.1.17})$$

de onde:

$$f_j = \exp.(2 \gamma x) \quad (\text{III.1.18})$$

A eq. (III.1.18) é o "fator integrante" procurado, que acoplado na parte real do Lagrangeano, eq. (III.1.6), fornece:

$$L_R = \frac{1}{2} m u^2 e^{2 \gamma x} - \frac{1}{2} m u_i^2 e^{2 \gamma x} + \int \frac{d \operatorname{Re} \phi(x, t)}{dx} e^{2 \gamma x} dx \quad (\text{III.1.19})$$

Aplicando as equações de Euler-Lagrange na eq. (III.1.20), a equação de movimento obtida para o oscilador harmônico quântico dissipativo não coincide exatamente com a eq. (III.1.9).

Pois obtêm-se um termo a mais na expressão da equação de movimento, e esse termo descreve a força dissipativa em função da velocidade complexa " $\vec{u}_i$ ". E isto acreditamos não ser verdade, pois a condição inicial imposta era de que a dissipação de energia ocorresse somente devido a força de atrito proporcional à velocidade " $\vec{u}$ " ao quadrado.

Como uma tentativa para eliminar este termo "dissipativo complexo" na equação de movimento, modificamos o Lagrangeano dado na eq. (III.1.20).

Assim:

$$L_R = \frac{1}{2} m u^2 e^{2 \gamma x} - \frac{1}{2} m u_i^2 e^{2 \gamma x} - \int m \gamma u_i^2 e^{2 \gamma x} dx + \int \frac{d}{dx} \operatorname{Re} \phi(x, t) e^{2 \gamma x} dx \quad (\text{III.1.20})$$

a este termo incluído no Lagrangeano acima, " $\int m \gamma u_i^2 e^{2 \gamma x} dx$ ", como uma tentativa para justificá-lo, classificariamos como um potencial quântico devido ao atrito sofrido pela partícula, e que dependa somente da posição.

Aplicando as equações de Euler-Lagrange neste Lagrangeano, a equação de movimento obtida é da forma dada pela eq. (III.1.9).

Assim, acreditamos que o Lagrangeano dado na eq. (III.1.20) descreve o sistema ora em estudo.

Frizamos aqui, que não é absolutamente necessário encontrar um Lagrangeano para descrever o nosso sistema. O nosso estudo pode ser realizado partindo diretamente do formalismo Newtoniano, ou seja, a nossa equação de movimento (III.1.9).

Novamente aqui o "fator integrante" não é acoplado à parte complexa do Lagrangeano, eq. (III.1.7), pois este Lagrangeano após algumas mudanças de variáveis nos fornece a equação de continuidade, que expressa a conservação da densidade de probabilidade.

Aplicando as equações de Euler-Lagrange na parte imaginária do Lagrangeano, eq. (III.1.7), obtém-se uma equação de movimento da forma:

$$\frac{d}{dt} m \vec{u}_i + \frac{d}{dt_i} m \vec{u} = \vec{V}(\text{Im } \phi(x,t)) \quad (\text{III.1.21})$$

é esta equação de movimento que nos conduz à equação de continuidade, isto após algumas transposições de variáveis.

Assim das equações de movimento (III.1.9) e (III.1.21) é possível de se obter uma equação semelhante a equação de Schrödinger, desde que sejam feitas as seguintes transposições:

$$\vec{u}(t, t_i) \rightarrow \vec{V}(x,t) \quad (\text{III.1.22})$$

$$\vec{u}_i(t, t_i) \rightarrow \vec{V}_i(x, t) \quad (\text{III.1.23})$$

e desde que o potencial " $\phi(x,t)$ " assuma a forma:

$$\phi(x,t) = \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} + V(x) \quad (\text{III.1.24})$$

onde:

$$\vec{V} = \vec{v} + i \vec{v}_i \quad (\text{III.1.25})$$

são as velocidades real " $\vec{v}$ " e imaginária " $\vec{v}_i$ " definidas nas eqs. (I.2.10) e (I.2.11). E " $V(x)$ " é o potencial de interação.

Também com o auxílio das derivadas hidrodinâmicas, eqs. (I.3.19) e (I.3.20), a eq. (III.1.9) assume a forma:

$$\begin{aligned} m(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) + \frac{\partial}{\partial t} (m \vec{v}) - m(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i) - \\ - \frac{\partial}{\partial t_i} (m \vec{v}_i) + m \gamma v^2 \hat{v} = - \vec{\nabla} (V(x) + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i) \end{aligned} \quad (\text{III.1.26})$$

a derivada parcial em relação ao parâmetro " $t_i$ " é nula, logo agrupando a equação acima vêm:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v^2 - \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v_i^2 + \frac{\partial}{\partial t} m \vec{v} + m \gamma v^2 \hat{v} = \\ = - \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(r) \right) \end{aligned} \quad (\text{III.1.27})$$

substituindo a expressão para a velocidade real ( $\vec{v}$ ) em alguns termos na eq. (III.1.27), resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v^2 - \frac{1}{2} m \vec{\nabla} v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} + m \gamma v^2 \hat{v} = \\ = - \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(r) \right) \end{aligned} \quad (\text{III.1.28})$$

Integrando agora, chega-se a:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} + m \gamma v^2 dx = \\ & = - \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i - V(x) + f(t) \end{aligned} \quad (\text{III.1.29})$$

onde "f(t)" é a constante de integração.

A eq. (III.1.29) também assemelha-se a equação de Riccati, denominamos de equação de Riccati modificada.

Substituindo agora a velocidade real (v) e a velocidade complexa ( $v_i$ ) nos termos restantes da eq. (III.1.29), chega-se a:

$$\begin{aligned} f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} - \frac{\gamma \hbar^2}{4m} \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\psi^*}{\psi})^2 dx = \\ = \frac{1}{2} m \left( \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\psi^*}{\psi} \right)^2 - \frac{1}{2} m \left( - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \psi^* \psi \right)^2 + \\ + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \left( - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \psi^* \psi \right) + V(x) \end{aligned} \quad (\text{III.1.30})$$

Desenvolvendo os termos, vêm:

$$\begin{aligned} f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} - \gamma \frac{\hbar^2}{4m} \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\psi^*}{\psi})^2 dx = \\ = - \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} - \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right]^2 - \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} + \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right]^2 + \\ + \frac{\hbar^2}{4m} \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\vec{\nabla} \psi^*}{\psi^*} + \frac{\vec{\nabla} \psi}{\psi} \right] \end{aligned} \quad (\text{III.1.31})$$

Agrupando, desenvolvendo e eliminando termos comuns, obtém-se:

$$\begin{aligned} f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\psi^*}{\psi} - \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\psi^*}{\psi})^2 dx = \\ = - \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \psi^*}{\psi^*} + \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} \right] + V(x) \end{aligned} \quad (\text{III.1.32})$$

A equação de continuidade é obtida a partir da equação de movimento (III.1.21):

$$\frac{d}{dt} m \vec{u}_i + \frac{d}{dt}_i m \vec{u} = \vec{\nabla}(\text{Im } \phi(x,t)) \quad (\text{III.1.33})$$

desde que se faça aqui também as transposições indicadas. Assim com cálculos semelhantes aos do capítulo anterior, obtemos:

$$\vec{\nabla}(\rho \vec{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{III.1.34})$$

que é a nossa equação de continuidade.

Desenvolvendo a eq. (III.1.34) chega-se à:

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = - \frac{i\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] \quad (\text{III.1.35})$$

Agora somando as eqs. (III.1.32) e (III.1.35):

$$\begin{aligned} f(t) - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi})^2 dx + \\ + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \Psi^* \Psi = - \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} + \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] + \\ + \frac{\hbar^2}{4m} \left[ \frac{\nabla^2 \Psi^*}{\Psi^*} - \frac{\nabla^2 \Psi}{\Psi} \right] + V(x) \end{aligned} \quad (\text{III.1.36})$$

o que resulta em:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = - \frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 \Psi + V(r)\Psi - \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \cdot \\ \cdot \left[ \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi})^2 dx \right] \Psi + f(t)\Psi \end{aligned} \quad (\text{III.1.37})$$

A constante "f(t)" pode ser avaliada se usarmos a condição de que o valor esperado da energia "<E(t)>" é igual ao va-

lor esperado da energia cinética,  $(2m)^{-1} \cdot \langle p^2(t) \rangle$ , mais o valor esperado do potencial de interação,  $\langle V(r) \rangle$ .

Assim:

$$\langle E(t) \rangle = \langle p^2(t) \rangle / 2m + \langle V(r) \rangle \quad (\text{III.1.38})$$

Supondo agora o problema em uma dimensão:

$$\langle E(t) \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left[ \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \right] dx \quad (\text{III.1.39})$$

$$\langle p^2(t) \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left[ \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} \right] dx \quad (\text{III.1.40})$$

$$\langle P(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) V(x) \Psi(x,t) dx \quad (\text{III.1.41})$$

Multiplicando a eq. (III.1.37) por " $\Psi^*(x,t)$ ":

$$i\hbar \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^*(x,t) \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + \Psi^*(x,t) V(x) \Psi(x,t) + \Psi^*(x,t) V_L(x) \Psi(x,t) \quad (\text{III.1.42})$$

onde " $V_L$ " é o potencial não linear da forma:

$$V_L = -\frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \int \left( \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*(x,t)}{\Psi(x,t)} \right)^2 dx + f(t) \quad (\text{III.1.43})$$

Integrando a eq. (III.1.42), chega-se a:

$$i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* V(x) \Psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* V_L(x) \Psi dx \quad (\text{III.1.44})$$

Comparando a eq. (III.1.40) com as eqs. (III.1.38), (III.1.39), (III.1.40) e (III.1.41), chega-se a:

$$-\frac{\hbar^2\gamma}{4m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left[ \int \left( \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right)^2 dx \right] \Psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* f(t) \Psi dx = 0 \quad (\text{III.1.45})$$

de onde obtêm-se a expressão para a constante "f(t)":

$$f(t) = \frac{\hbar^2\gamma}{4m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int \left( \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right)^2 dx \right] \Psi dx \quad (\text{III.1.46})$$

A equação final é da forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi - \frac{\hbar^2\gamma}{4m} \left[ \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi})^2 dr \right] \Psi + \frac{\hbar^2\gamma}{4m} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi})^2 dr \right] \Psi dr \right\} \Psi \quad (\text{III.1.47})$$

A eq. (III.1.47) é diferente da equação de Schrödinger-Langevin obtida para o caso linear, pois agora a dissipação é devido a um termo quadrático na força de atrito.

Denominamos a eq. (III.1.47) de equação modificada de Schrödinger-Langevin e, até agora, não encontramos equação análoga na literatura para descrever o problema estudado neste capítulo.

Na seção seguinte passamos a obter as soluções da eq. (III.1.47).

### III.2 - EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

Para  $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$  as equações de movimento:

$$m(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}) + \frac{\partial}{\partial t} (m \vec{v}) - m(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_i) - \frac{\partial}{\partial t_i} (m \vec{v}_i) +$$

$$+ m \gamma v^2 \vec{v} = - \vec{\nabla} \left[ \frac{\hbar}{2} \vec{v} \cdot \vec{v}_i + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \quad (\text{III.2.1})$$

e

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

$$(\text{III.2.2})$$

apresentam como uma solução particular:

$$v = \dot{\xi}(t) \quad (\text{III.2.3})$$

e

$$v_i = \omega x(t, t_i) - \omega \xi(t) \quad (\text{III.2.4})$$

onde " $\xi(t)$ " é uma função qualquer que depende do tempo, mais adiante veremos que " $\xi(t)$ " é a solução da equação clássica de movimento para o oscilador harmônico clássico dissipativo, cuja dissipação de energia é resultante da ação de uma força de atrito proporcional à velocidade ao quadrado.

Com as definições de velocidade real " $\vec{v}$ " e velocidade complexa " $\vec{v}_i$ ":

$$\vec{v} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad (\text{III.2.5})$$

$$\vec{v}_i = - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \quad (\text{III.2.6})$$

mais as expressões obtidas nas eqs. (III.2.3) e (III.2.4), tere-

mos em uma dimensão:

$$\dot{\xi}(t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\psi^*}{\psi} \quad (\text{III.2.7})$$

e

$$\omega x - \omega \xi(t) = - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi^* \psi \quad (\text{III.2.8})$$

de cujas equações, após alguns cálculos semelhantes aos efetuados no capítulo anterior, obteremos:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) = A \exp. \left[ \frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar} \right] \exp. \left[ - \frac{m\omega}{2\hbar} (x - \xi(t))^2 \right] \\ \cdot \exp. [i k(t)] \end{aligned} \quad (\text{III.2.9})$$

que é a função de onda para o nosso sistema.

Usando a condição de normalização:

$$\int \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (\text{III.2.10})$$

obtemos:

$$A^2 = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \quad (\text{III.2.11})$$

Substituindo agora a função de onda, eq. (III.2.9) na equação modificada de Schrödinger-Langevin vêm:

$$\begin{aligned} - m\ddot{x}\dot{\xi} + im\omega x\dot{\xi} - im\omega \xi\dot{\xi} - \hbar \dot{k}(t) &= \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 + \\ + \frac{1}{2} im\omega x\dot{\xi} - \frac{1}{2} im\omega \xi\dot{\xi} + \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{1}{2} im\omega x\dot{\xi} - \\ - \frac{1}{2} im\omega \xi\dot{\xi} - \frac{1}{2} m\omega x^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 + m\omega^2 x\xi + \\ + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + m\gamma x\dot{\xi}^2 - m\gamma \dot{\xi}^2 \xi \end{aligned} \quad (\text{III.2.12})$$

Eliminando termos semelhantes e agrupando adequadamente, vêm:

$$\begin{aligned}
 - m\dot{x}\ddot{\xi} - \hbar\dot{k}(t) &= \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 - E_0 - \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 + \\
 + m\omega^2 x\xi + m\gamma x\dot{\xi}^2 - m\gamma\dot{\xi}^2 \xi & \quad \text{(III.2.13)}
 \end{aligned}$$

Da eq. (III.1.13) notamos imediatamente uma equação muito conhecida:

$$- m\dot{x}\ddot{\xi} - m\gamma x\dot{\xi}^2 - m\omega^2 x\xi = 0 \quad \text{(III.2.14)}$$

ou

$$\ddot{\xi}(t) + \gamma\dot{\xi}^2(t) + \omega^2 \xi(t) = 0 \quad \text{(III.2.15)}$$

que é a equação clássica de movimento para o oscilador harmônico clássico dissipativo, onde a força de atrito atuante é proporcional à velocidade ao quadrado. Esta equação não possui solução analítica, mas pode ser numericamente integrada.

A equação restante é da forma:

$$- \hbar\dot{k}(t) = \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 - m\gamma\dot{\xi}^2 \xi + E_0 \quad \text{(III.2.16)}$$

ou

$$\hbar\dot{k}(t) = \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 + m\gamma\dot{\xi}^2 \xi - \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 - E_0 \quad \text{(III.2.17)}$$

Colocando "k(t)" como:

$$k(t) = -\frac{E_0}{\hbar} \cdot t + \frac{1}{\hbar} \int (m\gamma\dot{\xi}^2 \xi + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 - \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2) dt \quad \text{(III.2.18)}$$

Como "k" não é só função do parâmetro tempo "t", mas também da função "ξ(t)" e sua derivada primeira "ξ̇(t)", podemos colocar a eq. (III.1.18) como:

$$k(t) = -\frac{E_0 \cdot t}{\hbar} + g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) \quad \text{(III.2.19)}$$

onde:

$$g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) = \frac{1}{\hbar} \int (m\gamma \dot{\xi}^2 \xi + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 - \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2) dt \quad (\text{III.2.20})$$

ou:

$$\hbar g(\xi(t), \dot{\xi}(t), t) = m\dot{\xi}^2 \gamma \xi + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 - \frac{1}{2} m\dot{\xi}^2 \quad (\text{III.2.21})$$

Logo a função de onda, solução da equação modificada de Schrödinger-Langevin, em uma dimensão possui a forma:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = A \exp. \left[ -\frac{iE_0 \cdot t}{\hbar} \right] \cdot \exp. \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar} (x - \xi(t))^2 \right] \\ \cdot \exp. \left[ \frac{imx\dot{\xi}(t)}{\hbar} \right] \cdot \exp. [ig(\xi(t), \dot{\xi}(t), t)] \quad (\text{III.2.22}) \end{aligned}$$

Observar que a função de onda, obtida aqui, possui a mesma forma que a função de onda obtida no capítulo anterior para o caso dissipativo linear, porém a forma da função " $\xi(t)$ " é diferente nos dois casos o que implica em funções de onda diferentes. Pois a função " $\xi(t)$ " nesse caso é a solução da eq. (III.2.15), porém como essa equação é não linear, não temos condições de obter a forma analítica da função " $\xi(t)$ ".

Pode ser tentada uma solução numérica para a eq. (III.2.15), mas deixaremos isso para um outro trabalho futuro.

Substituindo a função de onda e sua complexa conjugada nas eqs. (III.2.5) e (III.2.6), obtemos as expressões para a velocidade real ( $\vec{v}$ ), eq. (III.2.3), e para a velocidade imaginária ( $\vec{v}_i$ ), eq. (III.2.4).

### III.3 - ENERGIA

No capítulo anterior, para o caso do oscilador harmônico quântico dissipativo linear, a energia total do sistema é obtida com a equação de Ricatti modificada e com as definições de valores médios. Como a energia não possui um operador definido, por enquanto, para sistemas dissipativos, faremos aqui uma análise para a energia total, usando a equação de Ricatti modificada obtida para o presente problema.

Assim, a eq. (III.1.29) que é a equação de Ricatti modificada:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i + V(r) = \\ = - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} - m\gamma \int v^2 dr + f(t) \end{aligned} \quad (\text{III.3.1})$$

onde:

$$f(t) = \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left[ \int (\vec{\nabla} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi})^2 dr \right] \Psi dr \quad (\text{III.3.2})$$

escrita em termos de valores médios será:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right\rangle + \langle V(r) \rangle = \\ = - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \langle m\gamma \int v^2 dr \rangle + \langle f(t) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.3.3})$$

Observando que o lado esquerdo da equação acima representa o valor médio da energia cinética mais o valor médio da energia potencial que é a nossa definição de energia total para sistemas dissipativo, vêm:

$$E(t) = \left\langle \frac{1}{2} m \vec{v}^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2} m \vec{v}_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{\hbar}{2} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_i \right\rangle + \langle V(r) \rangle \quad (\text{III.3.4})$$

e que para o nosso problema, em uma dimensão, a velocidade real ( $\vec{v}$ ) e a velocidade complexa ( $\vec{v}_i$ ) são fornecidas pelas eqs. (III.2.3) e (III.2.4); o que resulta em:

$$E(t) = \left\langle \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2} m (\omega x - \omega \xi)^2 \right\rangle + \\ + \left\langle \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\omega x - \omega \xi) \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle \quad (\text{III.3.5})$$

Assim, efetuando os cálculos necessários chega-se a:

$$E(t) = E_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 \quad (\text{III.3.6})$$

A equação acima contém o mesmo tipo de informações que a eq. (III.4.18) encontrada no capítulo anterior para o caso dissipativo linear.

Por sua vez, o lado direito da eq. (III.3.3), também deve fornecer o valor médio da energia do sistema para manter a identidade.

Logo:

$$E(t) = - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \langle m \gamma \int v^2 dr \rangle + \langle f(t) \rangle \quad (\text{III.3.7})$$

escrevendo a equação acima em uma dimensão, já com a expressão para "f(t)", resulta em:

$$E(t) = - \left\langle \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right\rangle - \left\langle \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \int \left( \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right)^2 dx \right\rangle + \\ + \left\langle \frac{\hbar^2 \gamma}{4m} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left[ \int \left( \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\Psi^*}{\Psi} \right)^2 dx \right] \Psi dx \right\} \right\rangle \quad (\text{III.3.8})$$

Substituindo a função de onda correspondente na equação acima, após alguns cálculos obtemos:

$$E(t) = \langle E_0 \rangle - \langle m x \ddot{\xi}(t) \rangle - \langle h \dot{g} \rangle - \\ - \langle m \gamma x \dot{\xi}^2(t) \rangle + \langle m \gamma \xi(t) \dot{\xi}^2(t) \rangle \quad (\text{III.3.9})$$

Desenvolvendo e substituindo a expressão para " $\dot{g}(\xi(t), \xi(t), t)$ " na equação acima, vêm:

$$E(t) = E_0 - m \gamma \xi(t) \ddot{\xi}(t) - m \gamma \xi(t) \dot{\xi}^2(t) + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) + \\ - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) - m \gamma \xi(t) \dot{\xi}^2(t) + m \gamma \xi(t) \dot{\xi}(t) \quad (\text{III.3.10})$$

eliminando termos comuns:

$$E(t) = E_0 - m \xi(t) \ddot{\xi}(t) - m \gamma \xi(t) \dot{\xi}^2(t) - \\ - \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) \quad (\text{III.3.11})$$

lembrando que:

$$- \omega^2 \xi(t) = \ddot{\xi}(t) + \gamma \dot{\xi}^2(t) \quad (\text{III.3.12})$$

vem de forma mais geral:

$$E(t) = E_n + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2(t) + \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) \quad (\text{III.3.13})$$

Esta equação é idêntica à eq. (III.3.6) obtida com o lado esquerdo da equação de Ricatti modificada.

A eq. (III.3.13) assemelha-se também com a eq. (III.4.18) obtida para o caso dissipativo linear no capítulo anterior, porém guardadas as devidas diferenças, pois a função " $\xi(t)$ " é dife

Esta equação é idêntica à eq. (III.3.6) obtida com o lado esquerdo da equação de Ricatti modificada.

A eq. (III.3.13) assemelha-se também com a eq. (III.4.18) obtida para o caso dissipativo linear no capítulo anterior, porém guardadas as devidas diferenças, pois a função " $\xi(t)$ " é diferente nos dois casos.

Para obtermos a energia dissipada em função do tempo, basta derivar a eq. (III.3.13), assim:

$$\dot{E}(t) = m\omega^2 \dot{\xi}(t) \xi(t) + m\gamma \dot{\xi}(t) \ddot{\xi}(t) \quad (\text{III.3.14})$$

e lembrando que:

$$\ddot{\xi}(t) = -\gamma \dot{\xi}^2(t) - \omega^2 \xi(t) \quad (\text{III.3.15})$$

chega-se à:

$$\dot{E}(t) = -m\gamma \dot{\xi}^3(t) \quad (\text{III.3.16})$$

A equação acima expressa a taxa de variação da energia do sistema em função do tempo, para o oscilador harmônico quântico dissipativo caso quadrático.

A função " $\xi(t)$ " é solução da equação clássica de movimento para o oscilador harmônico clássico amortecido, eq. (III.2.15).

Como esta equação é não linear, a solução é não analítica e sim numérica.

Frizamos aqui, que este tipo de problema não é abordado pela literatura, pelo menos até o presente momento. Portanto não temos como confrontar nossos resultados aqui obtidos.

## CONCLUSÃO

A formulação hidrodinâmica da mecânica quântica vem sendo utilizada com sucesso em todos os problemas, que até agora estudamos, sem uma necessidade muito grande de cálculos matemáticos sofisticados.

Não temos a pretensão de colocá-la como uma nova teoria que pode solucionar todo e qualquer problema na mecânica quântica, mas tentamos colocá-la como uma ferramenta de trabalho que facilite um pouco o formalismo matemático, bem como as interpretações físicas, que envolvem a mecânica quântica.

Com o pensamento nesse sentido, foi que abordamos os problemas dissipativos em mecânica quântica.

No capítulo I fazemos uma apresentação da formulação hidrodinâmica usual da mecânica quântica onde, pela separação da equação de Schrödinger dependente do tempo em uma parte real e outra complexa, obtemos duas equações diferentes.

Da parte complexa obtemos a equação de continuidade, semelhante a equação de continuidade para o formalismo hidrodinâmico clássico, onde aqui esta equação expressa a conservação da probabilidade.

Da parte real obtemos uma equação que expressa a conservação de energia, a equação multidimensional de Ricatti. E para casos estacionários obtemos uma generalização da equação de Hamilto-Jacobi da mecânica clássica.

Ainda da parte real, pela derivação da equação que expressa a conservação de energia, obtemos uma equação de movimento.

Nesse método por nós proposto, pela adição da equação de continuidade e da equação de movimento, após as transposições de variáveis, obtemos novamente a equação de Schrödinger para descrever sistemas quânticos.

Observa-se, já aqui neste primeiro capítulo, que por meio de um tratamento conveniente da formulação hidrodinâmica da mecânica quântica, conseguimos obter resultados apresentados na literatura, além de nossa formulação conter em si mesma os limites clássicos ou quânticos.

No capítulo II fazemos uma aplicação do nosso formalismo para o oscilador harmônico quântico dissipativo, onde a dissipação de energia ocorre devido à uma força de atrito linearmente proporcional à velocidade ao quadrado.

Por analogia com o caso clássico, partimos de uma equação de movimento do tipo " $\vec{F} = m\vec{a}$ ", que é generalizada para incluir forças dissipativas, e desta equação de movimento obtemos um Lagrangeano quântico que descreve o nosso sistema. Separando este Lagrangeano em uma parte real e outra complexa obtemos duas equações de movimento.

A equação de movimento, obtida da parte real, depois de efetuadas as mudanças nas variáveis, é integrada convenientemente e fornece a equação que expressa a conservação de energia ou como a conhecemos, equação modificada de Ricatti.

A equação de movimento, obtida da parte complexa, é também integrada para fornecer a equação de continuidade.

Frisamos aqui que o caminho inverso pode ser seguido, isto é, obter o Lagrangeano das equações de movimento.

Da equação de movimento generalizada mais a equação de continuidade, usando as definições<sup>[2]</sup> de velocidade real ( $\vec{v}$ ) e imaginária ( $\vec{v}_i$ ), obtemos a equação de Schrödinger-Langevin para descrever o sistema ora em estudo.

A equação de Schrödinger-Langevin também foi obtida por outros autores<sup>[52,57,67]</sup> usando procedimentos já descritos no decorrer deste trabalho. O nosso formalismo conduz a esta equação sem complicações matemáticas maiores, além de fornecer exatamente os mesmos resultados apresentados na literatura.

Em seguida obtemos diretamente das equações de movimento as expressões para a velocidade real ( $v$ ) e a velocidade complexa ( $v_i$ ), também encontradas por SKAGERSTAM<sup>[57]</sup> usando as definições de velocidade estocástica e velocidade corrente da mecânica estocástica.

Usando as expressões obtidas para a velocidade complexa ( $v_i$ ) e para a velocidade real ( $v$ ), com as respectivas definições, obtemos uma função de onda que é solução da equação de Schrödinger-Langevin para o oscilador harmônico quântico dissipativo caso linear.

SKAGERSTAM<sup>[56,57]</sup> obtém a mesma função de onda usando uma série de transformações de gauge dependentes do tempo.

Por último, com o emprego da equação de Ricatti modificada, calculamos a energia total para o sistema e esta equação obtida concorda com dados apresentados na literatura<sup>[57]</sup>.

Também a energia dissipada, aqui obtida, encontra expressão análoga na literatura<sup>[52,69]</sup>.

No capítulo II abordamos também o oscilador harmônico quântico dissipativo, porém, a dissipação agora se faz devido a uma força de atrito proporcional à velocidade ao quadrado.

Também aqui usamos o nosso formalismo, e obtemos uma equação modificada de Schrödinger-Langevin para descrever o sistema quântico ora em estudo.

A função de onda, solução da equação modificada de Schrödinger-Langevin, é obtida das velocidades real ( $v$ ) e imaginária ( $v_i$ ) e guarda uma forma semelhante à função de onda obtida para o caso linear.

Obtemos aqui também a energia total do sistema, pelo uso direto da equação modificada de Ricatti, e obtemos também a energia dissipada pelo sistema.

Como não encontramos na literatura problemas análogos ao aqui abordado, oscilador harmônico quântico dissipativo caso quadrático, não possuímos meios de confrontar os nossos resultados aqui obtidos.

Pelo que vimos até aqui, a simplicidade do tratamento matemático no formalismo hidrodinâmico da mecânica quântica, é um forte estímulo para a sua utilização em problemas que envolvam dissipação de energia, ou outra forma qualquer de dissipação.

Ademais os resultados obtidos concordam plenamente com resultados apresentados na literatura, pelo menos para o caso dissipativo linear, levando-nos a ser tentados a aplicar o nosso formalismo em outros problemas que envolvam dissipação de energia, quais sejam; colisão de íons pesados, penetração de barreiras, espalhamentos inelásticos de partículas quânticas, etc., isto será feito em outros trabalhos.

Lembramos que no presente trabalho não foram considerados os efeitos de flutuações no sistema.

BIBLIOGRAFIA

1. MESSER, J., Acta Phys. Austriaca 50, 75 (1979).
2. MADELUNG, E., Z. Phys., 40, 322 (1926).
3. de BROGLIE, L., Física y Microfísica, trad. espanhola de Cortes Plá, Espasa-Calpe, Buenos Aires, 159 (1951).
4. HIRSCHFELDER, J.O. and CRISTOPH, A.C., Quantum Mechanics Stream Lines, (University of Wisconsin-Madison), 1974.
5. CABRAL, F., a ser publicada.
6. KHUNEN, C.A., Aplicações da Formulação Hidrodinâmica a Sistemas Moleculares. Tese de Mestrado, UFSC, 1981.
7. NELSON, E., Phys. Rev., vol. 150/4, 1079 (1966).
8. de la PEÑA - AUERBACH, L., Phys. Lett., 24A, 603 (1967).
9. de la PEÑA - AUERBACH, L. and COLIN, L.S. & GARCIA, J., Math. Phys., 9, 916 (1968).
10. de la PEÑA - AUERBACH, L., Phys. Lett., 31A, 403 (1970).
11. de la PEÑA - AUERBACH, L.; VELASCO, R.M. & CETTO, A.M., Revista Mexicana de Física, 19, 195 (1970).
12. de la PEÑA - AUERBACH, L.; COLIN, L.S. & GARCIA, J., Math. Phys., vol. 9/6, 922 (1968).
13. YASUE, K., Int. J. of Theor. Phys., vol. 18/12, 861 (1979).
14. GHIRARD, G.C.; OMER, C; RIMINI, A. & WEBER, T., Nuovo Cimento, vol. 1/13, 1 (1970).
15. BOHM, D., Phys. Rev., vol. 89/2, 458 (1953).
16. BOHM, D., Phys. Rev., vol. 85/2, 166 (1952).
17. BOHM, D., Phys. Rev., vol. 85/2, 180 (1952).
18. HIRSCHFELDER, J.O., J. Chem. Phys., vol. 68/11, 5151 (1978).
19. HIRSCHFELDER, J.O. & TANG, K.T., J. Chem. Phys., vol. 65/1, 470 (1976).
20. HIRSCHFELDER, J.O.; GOEBEL, C.J. & BRUCH, L.W., J. Chem. Phys., vol. 61/12, 5456 (1974).

21. BATTEZZATI, M., Nuovo Cimento, vol. 70B/1, 13 (1982).
22. de la PEÑA - AUERBACH, L. and COLIN, L.S. & GARCIA, J., Revista Mexicana de Física, vol. 16/14, 221 (1967).
23. de la PEÑA - AUERBACH, L.; BRAUN, E.; COLIN, L.S. & GARCIA, J., Math. Phys., vol. 9/5, 668 (1968).
24. CASATI, G. & GUARNIERE, I., Phys. Rev. Lett., vol. 42/24, 1579 (1979).
25. LANDAU, L., J. Phys., 5(71), 1941.
26. LONDON, F., Rev. of Modern Physics, 17(310), 1945.
27. MERZBACHER, E., Quantum Mechanics, New York, John Wiley & Sons Inc., 1970.
28. SCHIFF, L.I., Quantum Mechanics, New York, McGraw-Hill Book Company, 1968.
29. CABRAL, F., Validade da equação " $\vec{F} = m\vec{a}$ " na Mecânica Quântica, UFSC, 1980.
30. ENVANGELISTA, L., Formalismo Hidrodinâmico da Mecânica Quântica, Tese de Mestrado, UFSC, 1982.
31. DENMAN, H.H., Am. J. Phys., 34, 1147 (1966).
32. BATEMAN, H., Phys. Rev., 38, 815 (1931).
33. LEMOS, N.A., Am. J. Phys., 49(12), 1981.
34. LEMOS, N.A., Phys. Rev. D, vol. 24/4, 1036 (1981).
35. BAHAR, L.Y. & KWANTY, H.G., Am. J. Phys., 49(11), 1981.
36. YAN, C.C., Am. J. Phys., 46(6), 671, 1978.
37. SONA, P.G., Energia Nucleare, vol. 13/6, 318 (1966).
38. NEGRO, F. and TARTAGLIA, A., Phys. Rev. A, vol. 23/4, 1591 (1981).
39. HAVAS, P., Nuovo Cimento, vol. 5/10, 363 (1957).
40. HAVAS, P., Acta Phys. Austriaca 38, 145 (1973).
41. STOKER, W. & ALBRECHT, K., Annals of Physics 117, 436 (1979).
42. RAZAVY, M., Z. Physik B 26, 201 (1977).
43. RAZAVY, M., Can. J. Phys., vol. 56/3, 311 (1978).

44. CALDIROLA, P., *Nuovo Cimento*, 18, 393 (1941).
45. KANAI, E., *Progr. Teor. Phys.*, 3, 440 (1948).
46. HASSE, R.W., *J. Math. Phys.*, 16, 2005 (1975).
47. HAVAS, P., *Phys. Rev.* 83, 224 (1951).
48. BRITTIN, W.E., *Phys. Rev.*, vol. 77/3, 396 (1950).
49. MESSER, J., *Lett. Math. Phys.*, vol. 2/4, 281 (1978).
50. SENITZKY, I.R., *Phys. Rev.*, 119, 670 (1960).
51. SENITZKY, I.R., *Phys. Rev.*, 124, 642 (1961).
52. KOSTIN, M.D., *J. Chem. Phys.*, vol. 57/9, 3589 (1972).
53. YASUE, K., *J. Stat. Phys.*, vol. 16/1, 113 (1977).
54. YASUE, K., *Phys. Lett.*, vol. 64B/3, 239 (1976).
55. KAN, K.K. & GRIFFIN, J.J., *Phys. Lett.*, vol. 150B/2, 241 (1974).
56. SKAGERSTAM, B.K., *Phys. Lett.*, vol. 58B/1, 21 (1975).
57. SKAGERSTAM, B.K., *J. Math. Phys.*, vol. 18/2, 308 (1977).
58. FRONTEAU, J. & TELLEZ-ARENAS, A., *Nuovo Cimento*, vol. 36B/1, 80 (1976).
59. FRONTEAU, J. & TELLEZ-ARENAS, A., *Nuovo Cimento*, vol. 44B/1, 39 (1978).
60. ALBRECHT, K., *Phys. Lett.*, vol. 56B/2, 127 (1975).
61. DEKKER, H., *Z. Physik B21*, 295 (1975).
62. DEKKER, H., *Z. Physik B26*, 273 (1977).
63. RAZAVY, M., *Can. J. Phys.*, 50, 2037 (1972).
64. EDWARDS, I.K., *Am. J. Phys.*, 47(2), 153 (1979).
65. LEMOS, N.A., *Phys. Lett.*, vol. 78A/3, 239 (1980).
66. TARTAGLIA, A., *Nuovo Cimento*, vol. 57B/1, 130 (1980).
67. YASUE, K., *Ann. of Phys.*, 114, 479 (1978).
68. KOSTIN, M.D., *J. Stat. Phys.*, vol. 12/2, 145 (1975).
69. NEMES, M.C. & PIZA, A.F.R. de Toledo, *Phys. Rev. A*, vol. 27/2, 1199 (1983).
70. NEWMAN, W. & THORSON, W., *Phys. Rev. Lett.*, 29, 1350 (1972).