

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Instituto de Física Gleb Wataghin

**Introdução de um 'Quantum' de Tempo no
Formalismo da Mecânica Quântica**

Ruy Hanazaki do Amaral Farias

Orientador: Prof. Dr. Erasmo Recami

*Este exemplar corresponde à redação final da tese defendida pelo
aluno Ruy Hanazaki do Amaral Farias e aprovada pela comissão
julgadora.*

Campinas, 10 de Novembro de 1994



Tese apresentada no Instituto de Física Gleb
Wataghin da Universidade Estadual de
Campinas para obtenção do título de Doutor
em Física

Campinas - São Paulo
1994

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Instituto de Física Gleb Wataghin

**Introdução de um 'Quantum' de Tempo no
Formalismo da Mecânica Quântica**

Ruy Hanazaki do Amaral Farias

Orientador: Prof. Dr. Erasmo Recami

Tese apresentada no Instituto de Física Gleb
Wataghin da Universidade Estadual de
Campinas para obtenção do título de Doutor
em Física

Campinas - São Paulo
1994

Of course every theory is true provided that you suitably associate its symbols with observed quantities.

A. Einstein

If we have to go on with these damned quantum jumps, then I'm sorry that I ever got involved.

E. Schrödinger

ÍNDICE

Resumo	vi
Abstract	vii
1 - Introdução	1
2 - Teoria do Elétron com Tempo Discreto	5
2.1 - Teoria do Elétron de Abraham - Lorentz.....	6
2.2 - Teoria de Dirac do Elétron Clássico	8
2.3 - Teoria do Elétron Clássico com Tempo Discreto.....	10
2.4 - Aplicação ao Caso do Movimento Hiperbólico.....	14
3 - As Equações Quânticas a Diferenças Finitas.....	17
3.1 - Equações de Schrödinger a Diferenças Finitas e sua Interpretação Física	18
3.2 - Derivação da Massa do Múon	22
3.3 - Derivação do Espectro de Massa dos Léptons.....	25
3.4 - Os Formalismos de Schrödinger e Heisenberg.....	27
3.5 - Hamiltonianos Dependentes do Tempo.....	29
4 - As Integrais de Trajetória e as Equações de Schrödinger Discretizadas	34
5 - Aplicações das Equações Quânticas Discretizadas.....	39
5.1 - Oscilador Harmônico Simples	39
5.2 - Movimento de uma Partícula Livre	43
5.3 - Equação de Klein-Gordon a Diferenças Finitas.....	48

5.4 - Evolução Temporal dos Operadores de Posição e Momento	52
5.5 - O Átomo de Hidrogênio	57
5.5 - Considerações Finais	63
6 - Os Operadores Densidade e a Hipótese "Coarse Graining"	64
6.1 - A Hipótese "Coarse Graining"	64
6.2 - A Equação de Liouville Discreta e a Relação de Incerteza Tempo-Energia.....	66
6.3 - Aplicação do Formalismo Discreto ao Problema da Medida na Mecânica Quântica.....	68
6.4 - Observação Final	74
7 - Conclusões	75
Apêndice A: Operadores de Evolução Temporal nos Formalismos Discretos de Schrödinger e Liouville-von Neumann.....	79
A.1 - Operadores de Evolução no Formalismo de Schrödinger.....	80
A.2 - Operadores de Evolução no Formalismo dos Operadores de Densidade.....	82
A.3 - A Compatibilidade das Duas Formulações.....	83
Apêndice B: Operadores Não-Hermitianos no Formalismo Discreto.....	87
Referências	90

Agradecimentos

Este trabalho, mesmo centrado em idéias não muito usuais mesmo no âmbito da física do século XX, contou com uma dose razoável de colaboração e apoio. Foram muitos os que me estimularam a seguir em frente muito embora tenham sido poucos aqueles com quem realmente interagi na realização da pesquisa em si.

Neste aspecto, gostaria de agradecer ao meu orientador, prof. Erasmo Recami, pelo tempo a mim dedicado, pelo muito que me auxiliou com sua intuição e conhecimentos, e pela oportunidade que propiciou de passar um mês com seu grupo em Catania, Itália.

Agradeço aos meus companheiros e amigos do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, que me incentivaram e propiciaram as condições para que eu pudesse finalizar o trabalho: ao Daniel Wisnivesky pelo interesse demonstrado no trabalho, ao Cylon e ao Ricardo pelo incentivo, aos meus companheiros do Grupo de Física de Aceleradores — Liu, Lúcia e Pedro — por se esforçarem para que eu me dedicasse exclusivamente à tese.

Um agradecimento especial ao prof. Waldyr A. Rodrigues Jr. pela bibliografia relevante que me forneceu e pelos conselhos nos momentos importantes.

Vai também um agradecimento especial aos amigos de sempre, André, Marcos e Werner pelo incentivo sempre presente.

À FAPESP meus agradecimentos pelo suporte financeiro no período de 1988/90.

Finalmente, como sói acontecer com todos nós que um dia resolvemos escrever e defender um trabalho de tese, gostaria de agradecer aos meus familiares, em particular à Celi e à Layse, pela paciência com que suportaram a minha “ausência”.

Resumo

Um século após a sua descoberta, o elétron continua a ser um estranho dentro do eletromagnetismo clássico. Vários foram os modelos propostos para descrevê-lo. Pode-se dizer que a teoria mais bem sucedida foi formulada por Dirac em 1938, muito embora apresentando problemas tais como as pré-acelerações e soluções auto-acelerantes. Uma alternativa a esta teoria foi proposta na década de 50 pelo físico italiano P. Caldirola, tendo por hipótese básica a existência de um intervalo fundamental de tempo, o *crônion*. Com base nesta hipótese Caldirola propôs uma descrição baseada em equações a diferenças finitas equivalentes à de Dirac mas livre dos problemas por ela apresentados. A extensão da hipótese do crônion à mecânica quântica não-relativística, resultando em formulações discretizadas da equação de Schrödinger, produziu resultados relevantes como a derivação da massa do *múon* e do *tau* à partir da massa do elétron.

Neste trabalho, analisamos as equações discretas com base no formalismo de Feynman e estudamos algumas de suas soluções. Partindo dos operadores de evolução associados às equações discretas, estendemos o procedimento à representação de Heisenberg e encontramos uma representação que, como no caso contínuo, é equivalente à de Schrödinger.

Fazemos uma análise de compatibilidade entre as várias representações: Schrödinger, Heisenberg e operadores de densidade. São estudados alguns exemplos típicos como, por exemplo, o oscilador harmônico simples. O formalismo de operadores de densidade é utilizado para analisar o problema da medida na mecânica quântica.

Finalmente, fazemos uma abordagem da equivalência entre o formalismo discreto e a introdução de operadores não-hermitianos na equação de Schrödinger contínua.

Abstract

Discovered nearly a century ago, the electron is still a stranger in the context of classical electromagnetism. Many models have been proposed in order to describe it. In this sense, the most successful theory is the one proposed by Dirac in 1938, notwithstanding some drawbacks such as the existence of pre-accelerating and self-accelerating solutions. An alternative theory was proposed in the fifties by P. Caldirola, based on the hypothesis of the existence of a fundamental interval of time: the *chronon*. Based on that hypothesis, Caldirola proposed a new framework based on finite difference equations equivalent to Dirac's but without the same inconsistencies. The extension of the chronon to non-relativistic quantum mechanics resulting in finite difference versions of the Schrödinger equation has produced relevant results such as the derivation of the masses of muon and tau starting from the electron mass.

In this monograph we analyze the discrete equations in the scope of Feynman path integral formalism and study some of its solutions. We derive the time evolution operators for the discrete theory and use these operators to get the discrete Heisenberg equations.

We perform a compatibility analysis of the various pictures: Schrödinger, Heisenberg and density operator. As in the continuous representation, the pictures are found to be equivalent. Some typical examples are studied as, for example, the simple harmonic oscillator. The density operator formalism is applied to the measurement problem of quantum mechanics.

Finally, we study the equivalence between the discrete formalism and the introduction of non-hermitian operators in the continuous quantum mechanics.

1 - Introdução

A idéia de evolução temporal discretizada, da continuidade ou não do tempo e do espaço, não é uma consideração nova e, como boa parte das hipóteses físicas, é de tempos em tempos resgatada do esquecimento. Uma das primeiras vezes em que esta questão foi trazida à tona como parte de uma concepção mais global de mundo foi na antiga Grécia, como parte do pensamento atomístico, ainda que dentro de um contexto bastante diverso do que se considera atualmente. Na Idade Média, o caráter descontínuo do movimento físico estava no cerne do "atomismo teísta" proposto pelos pensadores árabes da escola kalamica (Jammer, 1954). Na Europa, as considerações acerca da natureza discreta do espaço e do tempo podem ser encontrada nos escritos, por exemplo, de Isidoro de Sevilha, Nicolaus Boneti e Henry of Harclay, em tratados acerca da natureza do *continuum*. Já nos tempos modernos, a hipótese da existência de um intervalo de tempo fundamental foi rejeitada por Leibniz por ser inadmissível dentro de sua filosofia racionalista. No que tange à física moderna, as considerações acerca da continuidade do espaço e do tempo surgiram como conseqüência do famoso trabalho de Planck sobre a radiação de corpo negro, um dos marcos iniciais da teoria quântica.¹ A introdução do conceito de *quantum* abriu um leque de novas possibilidades no que se refere ao modo como é pensado o mundo físico, inclusive levando a considerações como as que são feitas neste trabalho, acerca da discretização do tempo no formalismo da mecânica quântica.

Nos primórdios do nosso século, Mach considerou a possibilidade de que o *continuum* fosse apenas aparente, fundamentalmente em decorrência de nossas limitações fisiológicas: "... o espaço e o tempo, do ponto de vista fisiológico, representam apenas um contínuo aparente, sendo provavelmente compostos por elementos descontínuos, ainda que não os possamos nitidamente distinguir" (Arzeliès, 1966). Poincaré também traçou comentários acerca da existência do que chamou de "átomo de tempo": o limiar de distinguibilidade entre dois estados distintos de um sistema.

¹ Aspectos históricos relacionados à introdução de um intervalo de tempo fundamental na física podem ser encontrados em Casagrande (1977).

Já na década de 20, J. J. Thomson considerou a possibilidade de que a força elétrica fosse intermitente em sua ação, atuando sobre uma partícula não de forma contínua, mas por impulsos, o que desencadeou o aparecimento de diversos trabalhos em que se considerava a existência de um intervalo fundamental de tempo, a que se denominou *crônon*. Não obstante o interesse que tenha despertado, não foram entretanto obtidos resultados que justificassem qualquer restrição à descrição do tempo como uma variável contínua. Um trabalho de Ambarzumian e Ivanenko (1930), em que se considerava um espaço-tempo discreto, estimulou o aparecimento de um grande número de publicações tomando como base esse tipo de concepção.

Mais recentemente a hipótese de um possível caráter discreto do tempo tem sido reconsiderada. Lee (1983), por exemplo, sugere uma discretização baseada no número finito de medidas experimentais que são permitidas em qualquer intervalo de tempo que se considere. Do mesmo modo, formalizações em bases matemáticas de uma física discreta também tem sido propostas (McGoveran e Noyes, 1989).

De um modo geral, a discretização do tempo tem sido introduzida seguindo dois procedimentos distintos:

- (1) atribuindo-se ao tempo uma estrutura discreta. Deste modo, o tempo não seria contínuo mas sim intrinsecamente discreto ou quantizado (reticulado);
- (2) considerando-se o tempo como um contínuo no qual os eventos se dão de modo descontínuo.

A grande maioria dos trabalhos em que o tempo é tratado, de algum modo, como sendo discreto, seguem a primeira linha de discretização. Geralmente como parte de um procedimento mais geral em que o espaço-tempo como um todo é tomado por discreto.

A segunda linha foi iniciada nos anos 20 (Levi, Pokrowski, ...), influenciada pelo trabalho de Thomson, e resultou no primeiro exemplo real de uma teoria baseada na discretização do tempo, formulada nos anos 50 pelo físico italiano P. Caldirola.

É bem sabido que a teoria clássica do movimento de um elétron em um campo eletromagnético, não obstante os esforços de Abraham, Lorentz, Poincaré e Dirac, entre outros, ainda apresenta graves problemas (exceto no caso em que o campo eletromagnético próprio da partícula é negligenciado). Caldirola desenvolveu sua teoria na tentativa de criar uma formulação que descrevesse classicamente o elétron sem apresentar os inconvenientes da teoria de Dirac: as pré-acelerações e as soluções auto-acelerantes ("*runaway solutions*").

Isso foi conseguido, ao nível clássico relativístico, com a introdução de um intervalo fundamental de tempo na descrição do elétron, o crônion, com a conseqüente substituição da equação diferencial contínua de Dirac por duas equações a diferenças finitas. Caldirola propôs um formalismo relativisticamente invariante em que o crônion tem a função de caracterizar a variação do estado dinâmico do elétron quando este é submetido a uma força externa. Um dos aspectos interessantes da teoria é o fato de que uma dessas equações pode ser relacionada a aspectos estruturais do elétron (de fato, Caldirola chegou a propor uma teoria em que o elétron é descrito como possuindo uma estrutura de um "micro-universo"). No capítulo 2 é apresentado, ainda que bastante brevemente, o cerne da teoria do elétron de Caldirola.

É importante examinar a extensão de tal teoria para o caso quântico. Um dos aspectos interessantes das novas equações de movimento (equações de Schrödinger a diferenças finitas) foi a descoberta de que, nesse formalismo, o *múon* (μ) resulta ser um estado excitado do elétron. Na realidade, consegue-se determinar a massa de todos os léptons, inclusive o *tau* (τ), e propor uma massa também para os neutrinos associados. Uma vez que o problema fundamental da atual física das Partículas Elementares é aquele da natureza dos léptons e dos quarks, tais resultados são, em princípio, dignos de serem estudados.

Considerando-se as equações de Schrödinger discretizadas, alguns sistemas físicos simples são aqui estudados. Na mecânica quântica convencional existe uma perfeita equivalência entre os formalismos de Schrödinger, de Heisenberg e da matriz de densidade. Quando as equações de evolução são discretizadas observa-se que esses formalismos são também equivalentes. Apenas que — como iremos mostrar —, para que haja uma compatibilidade com a descrição de Schrödinger, as equações de Heisenberg não podem, em geral, ser obtidas pela discretização direta da equação contínua. Além disso, considerou-se também a discretização da equação de Klein-Gordon, estudando-se as soluções para o caso simples de uma partícula livre.

No capítulo 2 deste trabalho é apresentada uma breve revisão das teorias clássicas do elétron mais divulgadas — Abraham-Lorentz e Dirac — e da teoria clássica com tempo discreto proposta por Caldirola. No capítulo 3 são apresentadas as equações de Schrödinger em forma discretizada, assim como um estudo das características dessas equações. Em particular, apresenta-se a derivação do espectro de massa dos léptons. No capítulo 4 as equações de Schrödinger discretas são derivadas à partir do formalismo das integrais de trajetória de Feynman. No capítulo 5 fazemos algumas aplicações do

formalismo discretizado na descrição de alguns sistemas quânticos simples. No capítulo 6 é apresentada uma derivação da equação de Liouville-von Neumann discretizada, que descreve a evolução dos operadores de densidade, partindo-se da hipótese "*coarse grained*". Fazemos em seguida uma abordagem do problema da medida utilizando esse formalismo discreto. No capítulo 7 são apresentadas as possíveis interpretações das equações discretizadas. No apêndice A é feita uma discussão acerca da compatibilidade entre os formalismos de Heisenberg, Schrödinger e de operadores de densidade na mecânica quântica discreta. Finalmente, no apêndice B, discutimos a equivalência entre a formulação discreta e a introdução de operadores não-hermitianos na formulação contínua.

Devemos salientar que um dos problemas fundamentais da descrição provida pela teoria quântica — seja ela relativística ou não — para as partículas elementares, está relacionado com o fato destas serem tratadas como sendo pontuais. Isso acarreta problemas de divergência, levando à necessidade de se formular teorias de renormalização. Por sua vez, a introdução de modelos de partícula extensa apresenta problemas com a covariância relativística das equações resultantes. Caldirola propôs um modo simples de contornar esses problemas com a introdução de uma discretização no tempo. O que nos propomos neste trabalho de tese é investigar o significado dessa discretização para o caso quântico não-relativístico, tentando obter uma interpretação para as várias equações obtidas.

Assim, centramos o nosso trabalho em alguns pontos. Primeiramente, determinamos os operadores de evolução temporal associados às equações de Schrödinger discretizadas. Utilizamos esses operadores para introduzir a representação de Heisenberg e derivar as equações de evolução de operadores nesse formalismo. É feita uma análise da compatibilidade entre as várias formulações: Schrödinger, Heisenberg e operadores de densidade. Introduzimos também a representação de interação em forma discretizada como ferramenta para a resolução de problemas com hamiltonianos dependentes do tempo. Em seguida, obtemos as equações de Schrödinger discretizadas utilizando as integrais de trajetória de Feynman. Essas equações são utilizadas para estudar alguns casos simples como o oscilador harmônico e a partícula livre. É utilizada também uma forma discretizada da equação de Klein-Gordon. Finalmente, utilizamos o formalismo de operadores de densidade para abordar o problema da medida na mecânica quântica.

2 - Teoria do Elétron com Tempo Discreto

Apesar de ter sido descoberto ainda no século passado, o elétron continua sendo uma grande incógnita no que tange à sua estrutura. A familiaridade com que lidamos com ele contrasta com o fato de ser ele um corpo estranho dentro do eletromagnetismo clássico. A teoria de Maxwell é uma teoria de campos em que nenhuma referência é feita à existência de corpúsculos materiais. Assim, pode-se dizer que uma das questões mais polêmicas da física do nosso século, o paradoxo onda-partícula, não é exclusivo da teoria quântica. Na teoria clássica do elétron, compatibilizar a descrição dos campos eletromagnéticos, apropriadamente descritos pelas equações de Maxwell, com a existência de portadores de cargas como o elétron, tem sido um grande desafio.

A sugestão de que as correntes elétricas pudessem ser devidas à existência de partículas portadoras de carga parece ter sido primeiramente proposta por Fechner e por Weber, o qual formulou a primeira eletrodinâmica de partícula (1846). No entanto, a idéia da existência de portadores de carga eletromagnética só veio a ser revivida por Helmholtz, em 1881. O grande desenvolvimento da eletrodinâmica até então fora feito tendo como pano de fundo, principalmente, os conceitos de um *continuum* eletromagnético e de *éter*. Naquele mesmo ano, J. J. Thomson escreveu acerca da massa eletromagnética de uma partícula carregada, abrindo caminho para as futuras considerações acerca da natureza puramente eletromagnética da massa do elétron. Como o elétron em movimento produz campos eletromagnéticos, a energia e o momento associados a esses campos responderiam pela energia e momento do próprio elétron, não havendo, portanto, qualquer componente de origem mecânica.

A eletrodinâmica de Lorentz, descrevendo a interação partícula-partícula via campos eletromagnéticos, através da famosa expressão de força

$$\mathbf{f} = \rho \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (2.1)$$

data do início da década de 1890, sendo ρ a densidade de carga da partícula sobre a qual atuam os campos. O elétron foi definitivamente descoberto apenas em 1897 por Thomson e, nos anos seguintes, várias teorias foram propostas para descrevê-lo. As famosas teorias pré-relativísticas de Abraham, Lorentz e Poincaré consideravam-no como uma partícula extensa, com massa de natureza puramente eletromagnética. Abraham sugeriu, em 1903,

que o elétron pudesse ser tratado como uma esfera rígida uniformemente eletrificada em sua superfície. Lorentz (1904) considerou um modelo semelhante que incluía os efeitos da contração de Lorentz-FitzGerald.

2.1 - Teoria do Elétron de Abraham - Lorentz

Uma dificuldade na descrição rigorosa do movimento do elétron é a inclusão do termo de reação radiativa, isto é, do efeito sobre o movimento da partícula dos campos por ela radiados quando sob ação de campos externos. No modelo de Abraham - Lorentz, a estrutura puramente eletromagnética do elétron requer que seu movimento seja tal que

$$\mathbf{F}_p + \mathbf{F}_{\text{Ext}} = 0 \quad (2.2)$$

onde \mathbf{F}_p é a força própria devida aos campos próprios associados à partícula, e \mathbf{F}_{Ext} resulta de campos eletromagnéticos externos. De acordo com a lei de força de Lorentz, a força própria é dada por

$$\mathbf{F}_p = \int \rho \left(\mathbf{E}_p + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}_p \right) d^3r \quad (2.3)$$

onde \mathbf{E}_p e \mathbf{B}_p são os campos produzidos pela própria densidade de carga ρ , de acordo com as equações de Maxwell - Lorentz. Lorentz obteve para a força de reação radiativa a seguinte expressão:

$$\mathbf{F}_p = - \frac{4}{3c^2} W_{\text{el}} \mathbf{a} + \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \dot{\mathbf{a}} - \frac{2e^2}{3c^3} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{c^n} \frac{d^n \mathbf{a}}{dt^n} \mathcal{O}(R^{n-1}) \quad (2.4)$$

onde

$$W_{\text{el}} \equiv \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r d^3r' \quad (2.5)$$

é a auto-energia eletrostática da distribuição de carga e o símbolo $\mathcal{O}(R^{n-1})$ indica uma expressão da ordem de grandeza de R^{n-1} , sendo R o raio do elétron. Os termos na somatória são todos eles dependentes da estrutura da partícula, ou seja, dependem do raio e da

distribuição de cargas. Se identificamos a massa eletromagnética da partícula com a sua auto-energia eletrostática

$$m_{el} = \frac{W_{el}}{c^2} \quad (2.6)$$

podemos reescrever (2.2) como

$$\frac{4}{3} m_{el} \dot{\mathbf{v}} - \Gamma = \mathbf{F}_{ext} \quad (2.7)$$

onde

$$\Gamma = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \dot{\mathbf{a}} (1 + \theta(R)) \quad (2.8)$$

que é a equação de movimento para o modelo de Abraham - Lorentz, sendo Γ a força de reação atuante sobre o próprio elétron ou força de reação radiativa. Um grande problema com essa equação de movimento está no fator $\frac{4}{3}$ que multiplica a massa eletromagnética. Como a massa é de origem puramente eletromagnética, o momento total do elétron, dado por

$$\mathbf{p} = \frac{4}{3} \frac{W_{el}}{c^2} \mathbf{v} \quad (2.9)$$

não é invariante sob as transformações de Lorentz. Além do fato de ser não-relativístico, esse modelo do elétron apresenta uma séria dificuldade decorrente de sua natureza puramente eletromagnética. Uma vez que as únicas forças envolvidas são as forças coulombianas repulsivas, tal elétron seria instável por natureza. Finalmente, podemos observar, da equação (2.4), que os termos estruturais dependem de derivadas de todas as ordens da aceleração e que, mesmo se desconsideramos esses termos, a equação resultante é uma equação de terceira ordem em r , de modo que a posição e a velocidade iniciais não são mais suficientes para determinar o movimento. O problema é que, para eliminarmos os termos estruturais temos que considerar o elétron como sendo pontual ($R \rightarrow 0$) e, nesse caso W_{el} , e conseqüentemente a massa m_{el} , divergem.

Com o advento da teoria da relatividade especial, ou mais precisamente com a publicação por Lorentz de suas famosas relações de transformação em 1904, foram feitas tentativas no sentido de adequar o modelo aos novos requisitos. O próprio Abraham (1905) teve sucesso em obter a generalização relativística do termo de reação radiativa (2.8), que em notação covariante é dado por

$$\Gamma_{\alpha} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c} \left(\frac{d^2 u_{\alpha}}{ds^2} + \frac{u_{\alpha} u_{\beta}}{c^2} \frac{d^2 u^{\beta}}{ds^2} \right) \quad (2.10)$$

onde u é o quadri vetor velocidade e s o tempo próprio.

A solução para os problemas da não covariância do momento e da instabilidade do elétron foi proposta por Poincaré (1905). A fim de dotar o elétron de estabilidade, Poincaré introduziu forças coesivas de natureza não-eletromagnética, compensando a repulsão coulombiana e, ao mesmo tempo, alterando o momento total da partícula de um modo tal a torná-lo coerente com as transformações de Lorentz. Desse modo, foi possível adequar o modelo e reformular as equações de modo a torná-los compatíveis com a relatividade especial.

Como assinala Rohrlich (1965), a adição dessas forças coesivas asseguram a estabilidade do elétron não-pontual mas coloca por terra a idéia do elétron puramente eletromagnético. Por outro lado, os elétrons não podem ser considerados pontuais em função de sua massa divergir quando fazemos $R \rightarrow 0$. Ou seja, uma descrição rigorosa do movimento do elétron não poderia desconsiderar os termos estruturais presentes em (2.4). Fermi mostrou posteriormente que uma relação correta para o momento do elétron puramente eletromagnético podia ser obtida sem a necessidade das forças coesivas de Poincaré.

Não obstante os problemas que apresenta, a teoria de Abraham - Lorentz foi a teoria do elétron mais divulgada até o aparecimento da teoria de Dirac em 1938. Durante o período que se estende entre a formulação das duas teorias, várias foram as tentativas de solucionar o problema, tanto considerando-se modelos de partícula extensa (Mie, Page, Schott) quanto de partícula pontual (Fokker, Wentzel).

2.2 - Teoria do Elétron de Dirac

Em um célebre trabalho de 1938, Dirac procurou elaborar um modelo do elétron como partícula pontual que contornasse o problema da divergência de sua energia eletrostática intrínseca. Utilizando as leis de conservação de energia e momento e as equações de Maxwell, calculou o fluxo do quadri vetor energia-momento através de um

tubo de raio $\varepsilon \ll R$ (R sendo o raio do elétron em repouso) envolvendo a linha de mundo da partícula, obtendo a seguinte equação de movimento

$$m \frac{du_\alpha}{ds} = F_\alpha + \Gamma_\alpha \quad (2.11)$$

onde Γ_α é o quadrivetor de Abraham (2.10) e F_α é o quadrivetor que representa o campo exterior atuando sobre a partícula:

$$F_\alpha = \frac{e}{c} F_{\alpha\beta} u^\beta, \quad (2.12)$$

onde $F_{\alpha\beta}$ é o tensor campo eletromagnético. Segundo esse modelo, a massa de repouso do elétron é uma grandeza finita obtida da diferença entre duas grandezas que divergem quando $R \rightarrow 0$:

$$m_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{2} \frac{e^2}{c^2 \varepsilon} - k(\varepsilon) \right) \quad (2.13)$$

Em sua aproximação não-relativística, a equação dinâmica de Dirac recai exatamente na anteriormente obtida com o modelo de Abraham-Lorentz para o elétron puntiforme:

$$m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \frac{d^2\mathbf{v}}{dt^2} = e(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.14)$$

A equação dinâmica de Dirac foi posteriormente obtida tomando-se modelos diferentes², o que certamente reforça a pertinência da teoria. Entretanto, ressalvas podem ser feitas. O primeiro ponto é o inconveniente de ser uma equação dinâmica de terceira ordem, requerendo três condições iniciais para uma completa determinação de suas soluções. Para certos problemas particulares, as equações fornecem soluções em completo desacordo com as evidências. Na descrição de um elétron livre, por exemplo, aparecem soluções auto-acelerantes ("runaway solutions") de modo que, ao invés de um movimento retilíneo e uniforme, tem-se sua velocidade e aceleração aumentando espontânea e indefinidamente (Rohrlich, 1965). Muitos trabalhos foram feitos no sentido de formular regras de seleção em que se pudesse distinguir as soluções físicas daquelas não-físicas (Schönberg, 1946; Bhabha, 1946). No caso de um elétron submetido a um pulso

² Wheeler e Feynman (1945), por exemplo, reobtiveram a equação de Dirac fundamentando o eletromagnetismo sobre um postulado de ação entre partículas (e não sobre uma hipótese de campo) e considerando a hipótese do absorvedor.

eletromagnético as soluções não físicas aparecem sob a forma de pré-acelerações. Se um elétron vem do infinito com velocidade uniforme v_0 e, num determinado instante t_0 é submetido a um pulso eletromagnético, ele começará a se acelerar antes de t_0 , prosseguindo com um velocidade uniforme v_f após cessado o pulso. Ou seja, a partícula experimenta uma aceleração antes da ação da força, como se soubesse de antemão da futura presença desta. Esses inconvenientes da teoria fizeram com que muitos procurassem alternativas a ela, como é o caso da teoria de Caldirola apresentada a seguir.

2.3 - Teoria do Elétron Clássico com Tempo Discreto

Na década de 1950, Caldirola desenvolveu uma teoria para o elétron clássico em que considerava, como ponto fundamental, a não instantaneidade da resposta "macroscópica" da partícula quando submetida à ação de uma força. Na concepção de Caldirola o tempo flui continuamente, como nas teorias convencionais mas, quando se tem uma força atuando sobre um elétron, a reação deste não é mais contínua. Essa descontinuidade se verifica ao longo da linha de universo da partícula, seu estado mudando bruscamente em intervalos correspondentes a um intervalo de tempo fundamental denominado *crônion*.

O crônion seria uma constante determinada pelas propriedades internas da partícula, representadas por sua massa e sua carga elétrica. Este é um ponto importante uma vez que, em princípio, a teoria considera o elétron não como pontual mas como uma partícula extensa dotada de uma estrutura interna. Como tal, pode-se conceber que a partícula não possa reagir instantaneamente à ação de um campo externo uma vez que ela, como um todo, não "sente" o campo instantaneamente. Por outro lado, a introdução do crônion tem na prática o caráter de uma discretização, uma vez que introduz um intervalo mínimo de tempo próprio que limita a possibilidade de se distinguir entre dois estados distintos da partícula.

Postulando pois a existência do crônion, e que uma força atuando sobre um elétron num instante τ de seu tempo próprio induza uma transição repentina do estado de movimento entre os instantes $\tau - \tau_0$ e τ , Caldirola propôs a seguinte lei dinâmica relativística a diferenças finitas:

$$\frac{m_0}{\tau_0} \left\{ u_\alpha(\tau) - u_\alpha(\tau - \tau_0) + \frac{u_\alpha(\tau)u_\beta(\tau)}{c^2} [u_\beta(\tau) - u_\beta(\tau - \tau_0)] \right\} = \frac{e}{c} F_{\alpha\beta}(\tau)u_\beta(\tau), \quad (2.15)$$

com $u_\alpha(\tau)u_\alpha(\tau) = -c^2$, que se reduz à equação de Dirac quando $\tau_0 \rightarrow 0$, com a peculiaridade de não ser derivável daquela equação. Ela não resulta de uma simples discretização das derivadas temporais que aparecem na equação original de Dirac.

Essa equação pressupõe uma estrutura "pulsante" para a partícula extensa e descreve o movimento de um elétron que seja pontual apenas em posições discretas ao longo de sua trajetória. Em sua evolução, o elétron leva um crônion de tempo para passar de um ponto ao sucessivo da trajetória.

No entanto, a lei dinâmica acima não é por si só capaz de especificar inequivocamente as variáveis $u_\alpha(\tau)$ e $x_\alpha(\tau)$ que determinam o movimento da partícula. Para que se possa ter uma descrição completa do movimento, é necessária uma segunda equação conectando os pontos discretos sobre a linha de universo da partícula. Caldirola introduziu assim uma *lei de transmissão* válida no interior de cada intervalo fundamental τ_0 , dada por

$$x_\alpha(n\tau_0) - x_\alpha[(n-1)\tau_0] = \frac{\tau_0}{2} \{ u_\alpha(n\tau_0) + u_\alpha[(n-1)\tau_0] \}, \quad (2.16)$$

e que descreve o movimento interno ou *microscópico* do elétron.

No limite não-relativístico, as equações se reduzem à forma

$$\frac{m_0}{\tau_0} [\bar{v}(t) - \bar{v}(t - \tau_0)] = e \left(\bar{E}(t) + \frac{1}{c} \bar{v}(t) \times \bar{B}(t) \right), \quad (2.17)$$

$$\bar{r}(t) - \bar{r}(t - \tau_0) = \frac{\tau_0}{2} [\bar{v}(t) + \bar{v}(t - \tau_0)], \quad (2.18)$$

onde $t = n\tau_0$. Essas equações não são invariantes sob Lorentz e podem ser obtidas por uma substituição direta das derivadas temporais pelas suas definições usando diferenças finitas. A equação (2.17), particularmente, não é uma equação nova, tendo sido obtida por teorias considerando um modelo estendido para o elétron (Page, 1918; Bohm & Weinstein, 1956).

O intervalo fundamental de tempo, o crônion θ_0 , é introduzido através da grandeza τ_0 definida por

$$\theta_0 = \frac{\tau_0}{2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m_0 c^3} \approx 6.266 \times 10^{-24} \text{ s}. \quad (2.19)$$

Essa definição não é casual, mas escolhida de tal modo a correlacionar a equação dinâmica não-relativística (2.17) com a equivalente equação de Lorentz - Dirac. Esse valor é da mesma ordem de grandeza que o tempo que uma onda eletromagnética leva para percorrer, no vácuo, uma distância da ordem do raio clássico do elétron. É interessante notar que esse valor é também aproximadamente igual ao obtido por Pokrowski em 1928, analisando os comprimentos de onda mais curtos da radiação cósmica detectada até então, como um provável valor para o crônon. Ele é também particularmente interessante quando se considera o movimento de um elétron submetido a potenciais que variam muito rapidamente. Quando o potencial varia significativamente dentro de um intervalo de tempo correspondente ao crônon, então os efeitos de reação radiativa ao campo eletromagnético próprio do elétron podem ser decisivos e devem ser levados em conta (Jackson, 1975).

As equações (2.15) e (2.16) determinam completamente o movimento *macroscópico* do elétron, ou seja, pode-se com elas obter a posição e a velocidade do elétron em cada instante $n\tau_0$. Um aspecto que deve ser ressaltado é o fato do movimento macroscópico não ser alterado se se sobrepõe a ele um movimento interno (*microscópico*) satisfazendo (2.16) num intervalo $(n-1)\tau_0 \leftrightarrow n\tau_0$, com a condição de que tenha uma velocidade média nula sobre o intervalo elementar τ_0 e se anule nos instantes $n\tau_0$. A radiação e o comportamento do elétron sob a ação de campos eletromagnéticos externos são completamente descritos por seu movimento macroscópico. Caldirola relacionou o movimento microscópico à reação da estrutura interna da partícula à ação do campo. A *lei de transmissão* implica na existência de uma estrutura interna, compatível com um modelo do elétron como *partícula extensa*.

Assim como ocorre com a equação de Dirac, as equações acima também são invariantes sob transformações de Lorentz. Como mostrou Snyder (1947), continuidade não é uma condição necessária para que se tenha a invariância de Lorentz. Em concordância com as motivações que levaram à sua elaboração, esta teoria não apresenta os problemas de pré-aceleração e de existência de soluções auto-acelerantes presentes na teoria de Dirac. Caldirola e colaboradores aplicaram a teoria a várias situações mostrando que, embora de manipulação consideravelmente mais complicada, as equações discretizadas fornecem resultados compatíveis com os obtidos utilizando-se a teoria convencional.

As equações (2.15), (2.16) e (2.17-18) descrevem uma partícula intrinsecamente irradiante. Expandindo-se a equação (2.15) em termos de τ_0 obtêm-se o termo de reação

radiativa. Essas equações foram tomadas por Caldirola como sendo a forma "retardada" das equações de movimento do elétron.

Caldirola propôs também uma forma "simétrica" para essas equações:

$$\frac{m_0}{2\theta_0} \left\{ u_\alpha(\tau + \theta_0) - u_\alpha(\tau - \theta_0) + \frac{u_\alpha(\tau)u_\beta(\tau)}{c^2} [u_\beta(\tau + \theta_0) - u_\beta(\tau - \theta_0)] \right\} = \frac{e}{c} F_{\alpha\beta}(\tau) u_\beta(\tau) \quad (2.20)$$

$$x_\alpha[(n+1)\theta_0] - x_\alpha[(n-1)\theta_0] = 2\theta_0 u_\alpha(n\theta_0), \quad (2.21)$$

$$\frac{m_0}{2\theta_0} [\bar{v}(t + \theta_0) - \bar{v}(t - \theta_0)] = e \left(\bar{E}(t) + \frac{1}{c} \bar{v}(t) \times \bar{B}(t) \right), \quad (2.22)$$

$$\bar{r}[(n+1)\theta_0] - \bar{r}[(n-1)\theta_0] = 2\theta_0 \bar{v}(n\theta_0). \quad (2.23)$$

Essas equações descrevem um elétron que não irradia e, portanto, não incluem o termo de reação radiativa.

Encerrando esta apresentação da teoria de Caldirola é interessante citar um resultado muito interessante obtido estudando as "soluções internas" ligadas à lei de transmissão. Seja uma partícula livre. Quando se considera para a equação (2.18) uma solução periódica dada por

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\beta_0 c \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi t}{\tau_0} \right) \\ \dot{y} &= -\beta_0 c \operatorname{cos} \left(\frac{2\pi t}{\tau_0} \right) \\ \dot{z} &= 0 \end{aligned}$$

que descreve um movimento circular uniforme, obtêm-se, uma vez impondo que a energia cinética desse movimento rotacional interno seja igual à energia intrínseca da partícula, $m_0 c^2$, que a amplitude das oscilações é dada por $\beta_0^2 = 3/4$. Isso faz com que o momento magnético correspondente a esse movimento seja exatamente o *momento magnético anômalo* do elétron, obtido de modo inteiramente clássico:

$$\mu_a = \frac{1}{4\pi} \frac{e^3}{m_0 c^2}.$$

Isso mostra que o momento magnético anômalo tem origem clássica, e não quântica, uma vez que se pode observar a ausência do quantum de ação \hbar na expressão.

2.4 - Aplicação ao Caso do Movimento Hiperbólico

Em um artigo de revisão sobre as teorias já formuladas acerca da reação do elétron ao seu próprio campo, Erber (1961) faz uma crítica à teoria formulada por Caldirola com relação às previsões da teoria para o caso do elétron em movimento hiperbólico. Em seu artigo de 1956, Caldirola, em uma rápida menção, avaliza as opiniões de Born, Pauli e von Laue (entre outros) de que uma carga em movimento uniformemente acelerado (e.g., um elétron em queda livre) não poderia emitir radiação. Essa opinião ficou fortalecida quando se descobriu que as equações de Maxwell são covariantes sob o grupo das transformações conformes (do qual as transformações de Lorentz são um subgrupo), que inclui em particular a transformação do repouso para o movimento uniformemente acelerado (Cunningham, 1909; Bateman, 1910; Hill, 1945). Desde o início do século essa questão ficou em aberto, uma vez que trabalhos de Schott e Milner pareciam sugerir a emissão de radiação pela partícula. No entanto, em 1960, Fulton e Rohrlich, utilizando a equação de Dirac para o elétron clássico, confirmaram a *existência de radiação emitida no movimento hiperbólico*. Daí a procedência da crítica de Erber.

A solução do problema, dentro do escopo da teoria de Caldirola foi apresentada por Lanz (1962). Analisando-se a lei de conservação de energia para o caso de um elétron submetido a uma força externa, seguindo-se um procedimento semelhante ao de Fulton e Rohrlich, pode-se obter uma expressão geral dada por (τ é o tempo próprio da partícula)

$$\frac{T(\tau) - T(\tau - \tau_0)}{\tau_0} + R_0(\tau) + S_0(\tau) = \frac{d}{d\tau} W_{\text{ext}} \quad (2.24)$$

onde o primeiro termo é o análogo da derivada da energia cinética com relação ao tempo próprio da partícula; o segundo termo

$$R_0(\tau) = -\frac{m_0}{2\tau c^2} \left\{ u_0(\tau) u_\beta(\tau) \left[u_\beta(\tau + \tau_0) + u_\beta(\tau - \tau_0) - 2u_\beta(\tau) \right] \right\}, \quad (1.25)$$

tem um caráter dissipativo e representa a energia radiada pela partícula na unidade de tempo próprio; o terceiro termo

$$S_0(\tau) = -\frac{m_0}{2\tau c^2} \left\{ u_0(\tau) u_p(\tau) \left[u_p(\tau + \tau_0) - u_p(\tau - \tau_0) \right] \right\} \quad (2.26)$$

é conservativo e representa a taxa de variação da energia própria da partícula, enquanto que $dW_{\text{ext}}/d\tau$ representa a taxa de trabalho realizado pelas forças externas no tempo próprio da partícula.

Expandindo-se a expressão (2.24) em termos de τ e mantendo-se apenas os termos de primeira ordem, obtêm-se uma expressão idêntica à de Fulton e Rohrlich:

$$\frac{d}{d\tau} T - \frac{2}{3} e^2 \frac{d}{d\tau} a_0 + \frac{2}{3} e^2 a_\mu a^\mu = \frac{d}{d\tau} W_{\text{ext}} \quad , \quad (2.27)$$

onde W_{ext} é o trabalho efetuado pelas forças externas, a_μ é o quadrivetor aceleração

$$a^\mu = \frac{du^\mu}{d\tau} = \gamma \frac{du^\mu}{dt}$$

e T a energia cinética da partícula.

O termo $\frac{2}{3} e^2 a_0$ é conhecido como energia de Schott ou energia de aceleração e, na derivação de Fulton e Rohrlich, aparece como sendo uma energia de caráter reversível que aumenta ou decresce em função direta da variação de velocidade. Eles a interpretam como sendo, provavelmente, parte da energia interna da partícula carregada, e a obtêm à partir da expressão de Dirac para a reação radiativa. Para o caso específico do movimento hiperbólico verifica-se que

$$a^\mu a_\mu = \frac{da_0}{d\tau}.$$

No entanto, nem a energia de aceleração, nem a energia irradiada pela carga por unidade de tempo próprio, $\frac{2}{3} e^2 a_\mu a^\mu$, são nulas.

A diferença no caso discreto é que essa energia de aceleração não existe como tal, sendo um termo proveniente da expressão discretizada da variação da energia cinética da carga. Ou seja, o termo de energia de Schott aparece quando expandimos, em potências de τ_0 , a variação da energia cinética durante o intervalo fundamental de tempo próprio:

$$\frac{T(\tau) - T(\tau - \tau_0)}{\tau_0} \cong \frac{d}{d\tau} T - \frac{2}{3} e^2 \frac{d}{d\tau} a_0 \quad (2.28)$$

Este resultado é interessante uma vez que há uma certa dificuldade em se compreender o significado físico dessa energia de aceleração, o que é visível no artigo de

Fulton e Rohrlich. Quando se introduz o intervalo fundamental de tempo e a variação da energia cinética não mais se dá de modo contínuo, o termo correspondente à energia de Schott dá, em primeira aproximação, a variação da energia cinética de um instante a outro. A derivada $dT/d\tau$ é uma função de ponto e descreve a tendência de variação da energia cinética no instante τ . O termo dissipativo $\frac{2}{3} e^2 a_\mu a^\mu$ nada mais é que uma generalização relativística da lei de radiação de Larmor, de modo que, existindo aceleração, há emissão de radiação.

Para o movimento hiperbólico, calha de termos a energia dissipada em função da aceleração igual à energia absorvida no acréscimo da energia cinética, não havendo a necessidade de se recorrer à pré-aceleração para justificar a proveniência dessas energias (ver, e.g., Plass (1961), p.48).

Assim, a teoria de Caldirola não só prevê a emissão de radiação, como permite uma visão de certo modo mais clara da física envolvida no movimento *uniformemente acelerado* da partícula carregada. Aqui, como para o caso contínuo (equação de Dirac), a reação da partícula ao seu campo próprio é nula, não havendo termos de primeira ordem em τ para a expansão de $S_0(\tau)$.

3 - As Equações Quânticas a Diferenças Finitas

Um problema fundamental da física das partículas elementares é a atribuição de uma caráter pontual a essas partículas, o que causa grandes dificuldades como é o caso da divergência de suas auto-energias. Caldirola encontrou uma maneira muito simples de contornar tais dificuldades, propondo a introdução de uma discretização do tempo no formalismo quântico.

As considerações acerca de uma possível natureza discreta do tempo, com base em indícios físicos, não são recentes e remontam às primeiras décadas deste século. Na década de 1920, por exemplo, Pokrowski (1928) sugeriu a introdução de um intervalo de tempo fundamental com base numa análise dos comprimentos de onda mais curtos da radiação cósmica medidos até então. Em sua análise, Pokrowski guiou-se pelo intervalo fundamental introduzido anteriormente por Levi (1926), que propôs para o *átomo de tempo* o valor $\tau = e^2/mc^3 \approx 9.4 \times 10^{-24}$ s. Mais recentemente, Ehrlich (1976), aventou a hipótese de uma possível quantização dos tempos de vida das partículas. Analisando a largura dos estados ressonantes das partículas utilizando o princípio de incerteza de Heisenberg, propôs que os tempos de vida fossem quantizados em unidades de $\frac{1}{2}$ ou $\frac{1}{4}$ do tempo de vida do méson ρ : $\sim 4.40 \times 10^{-24}$ s.

Um outro aspecto que pode sugerir a relevância de uma discretização do tempo relaciona-se com a própria fundamentação da mecânica quântica. Existe um limite físico até onde se pode determinar, na evolução de um sistema quântico, dois estados temporalmente distintos, limitação essa que decorre basicamente das relações de Heisenberg. Do mesmo modo, quando se pensa em termos das relações de Heisenberg, tem-se que a discretização, se incluída, não pode ser absoluta. Ou seja, as limitações impostas dependem de características do sistema que se está considerando. Neste ponto, pode-se então justificar a extensão para a mecânica quântica, da discretização efetuada por Caldirola em sua teoria clássica do elétron. Assim, no formalismo que se apresenta a seguir, o tempo continua sendo um contínuo mas as reações do sistema ao longo de sua linha de universo são descontínuas.

Nas seções que seguem serão apresentadas as equações da mecânica quântica discretizada introduzidas por Caldirola, assim como alguns aspectos a elas relacionadas.

3.1 - Equações de Schrödinger a Diferenças Finitas e sua Interpretação Física

A extensão do procedimento utilizado na descrição do elétron clássico para a mecânica quântica foi iniciada por Caldirola nos anos 70, centrada basicamente na formulação não-relativística de Schrödinger. Como se pode verificar observando a equação não-relativista para o elétron, pode-se obtê-la pela simples substituição da derivada temporal por uma expressão equivalente a diferenças finitas:

$$\frac{df(t)}{dt} \rightarrow \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.1)$$

Assim, de modo a introduzir a discretização no caso quântico não-relativístico, um procedimento equivalente é utilizado. Esse procedimento é particularmente válido porque, no caso não-relativístico, o tempo local t coincide com o tempo próprio τ . No entanto, assim como ocorre para o elétron clássico, tem-se que para se discretizar a equação de Schrödinger contínua

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\bar{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\bar{x}, t) \quad (3.2)$$

depara-se com três possibilidades distintas de fazê-lo. Justamente porque no caso contínuo, uma vez que se considerem funções fisicamente bem comportadas, existem formas equivalentes de se definir uma derivada. Tem-se então as seguintes equações de Schrödinger a diferenças finitas (Caldirola e Montaldi, 1979):

$$i \frac{\hbar}{\tau} [\Psi(\bar{x}, t) - \Psi(\bar{x}, t - \tau)] = \hat{H} \Psi(\bar{x}, t) \quad (3.3)$$

$$i \frac{\hbar}{2\tau} [\Psi(\bar{x}, t + \tau) - \Psi(\bar{x}, t - \tau)] = \hat{H} \Psi(\bar{x}, t) \quad (3.4)$$

$$i \frac{\hbar}{\tau} [\Psi(\bar{x}, t + \tau) - \Psi(\bar{x}, t)] = \hat{H} \Psi(\bar{x}, t) \quad (3.5)$$

onde $t = n\tau$, que são denominadas respectivamente equações de Schrödinger *retardada*, *simétrica* e *avançada*, todas tendendo à equação contínua quando $\tau \rightarrow 0$. Isto se deve ao fato de que, quando não se faz o limite tendendo a zero, as diferenças finitas envolvidas em cada uma das equações são diferentes. Pode-se claramente ver que a equação simétrica é uma equação a diferenças finitas de segunda ordem, enquanto que as demais são de primeira ordem. Quando se tem uma equação a diferenças finitas de ordem n tem-se que, para uma determinação completa e unívoca da solução dessa equação, deve-se ter n condições iniciais, como sói acontecer no caso contínuo. Assim, para que se possa determinar univocamente a solução $\Psi(\bar{x}, t = n\tau)$ da equação simétrica, deve-se ter duas condições iniciais, enquanto que para as demais equações basta uma única condição.

Devido ao fato de serem diferentes, existem diferenças fundamentais no comportamento das soluções dessas três equações. Para estudar suas propriedades tem-se dois procedimentos nem sempre aplicáveis. Primeiramente, pode-se tentar resolver as equações utilizando uma solução tentativa ou um dos vários métodos de resolução direta existentes. Por outro lado, pode-se tentar encontrar um novo hamiltoniano \tilde{H} de tal modo que uma nova equação contínua

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\bar{x}, t)}{\partial t} = \tilde{H} \Psi(\bar{x}, t) \quad (3.6)$$

reproduza, para os instantes $t = n\tau$, os valores previstos pelas equações discretizadas. Para qualquer equação a diferenças finitas é sempre possível encontrar uma função geradora contínua que permita obter uma equação diferencial equivalente à equação original, de modo que em cada ponto de interesse as soluções sejam idênticas (Casagrande e Montaldi, 1977).

O que deve ser salientado é o fato de que é extremamente difícil, para a grande maioria dos casos, trabalhar qualitativamente com as equações a diferenças finitas, visando perceber a física dos processos envolvidos. Salvo certas classes de casos especiais (equações lineares, e.g.), elas são solucionáveis apenas através de métodos numéricos. Mesmo com relação ao hamiltoniano equivalente, é quase sempre muito difícil encontrá-lo. Um caso simples é o da equação **simétrica** acima, desde que se tenha o hamiltoniano original \hat{H} explicitamente independente do tempo. Para essa equação tem-se, então, a seguinte equação correspondente:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\bar{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{\hbar}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \right) \right] \Psi(\bar{x}, t) , \quad (3.7)$$

sendo

$$\tilde{\mathbf{H}} = \frac{\hbar}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \right) \quad (3.8)$$

Naturalmente, $\tilde{\mathbf{H}} \rightarrow \hat{\mathbf{H}}$ quando $\tau \rightarrow 0$.

Caldirola (1976) utilizou a equação simétrica para descrever um elétron não radiante (elétron ligado) uma vez que essa equação possui, para operadores hamiltonianos $\hat{\mathbf{H}}$ sem dependência temporal explícita, soluções dotadas de caráter oscilatório:

$$\Psi(\bar{x}, t) = \exp \left(-i \frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \right) \right) f(\bar{x}) . \quad (3.9)$$

No caso clássico, como mencionado anteriormente, a equação simétrica também representa um movimento não irradiante. No entanto, o que na teoria clássica é apenas uma aproximação em que não se considera os efeitos de reação radiativa sobre o movimento do elétron, tem na teoria quântica um caráter fundamental. Ou seja, o único meio de se descrever uma partícula ligada não irradiante dentro do formalismo discreto é utilizando-se a equação simétrica.

Por sua vez, as equações **avançada** e **retardada** apresentam soluções bastante diferentes. O próprio hamiltoniano $\tilde{\mathbf{H}}$ assume uma forma bastante diferente daquela que se obtém no caso simétrico. Para a equação retardada, por exemplo, tem-se a seguinte equação de Schrödinger equivalente

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\bar{x}, t)}{\partial t} = -i \frac{\hbar}{\tau} \ln \left(1 + i \frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \right) \Psi(\bar{x}, t) , \quad (3.10)$$

de onde tem-se que o hamiltoniano equivalente é

$$\tilde{\mathbf{H}} = -i \frac{\hbar}{\tau} \ln \left(1 + i \frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \right) . \quad (3.11)$$

O que caracteriza a equação retardada é o fato de suas soluções serem de natureza intrinsecamente dissipativa. Ou seja, se se considera o ansatz $\Psi(\bar{x}, t) = f(\bar{x}) \exp(-\alpha t)$, sendo $\hat{\mathbf{H}}$ independente do tempo, tem-se que

$$\Psi(\bar{x}, t) = \left[1 + i \frac{\tau}{\hbar} \hat{H} \right]^{-i/\tau} f(\bar{x}) \quad (3.12)$$

e, expandindo $f(\bar{x})$ em termos das autofunções de \hat{H} ,

$$\hat{H} u_n(x) = W_n u_n(x) \quad (3.13)$$

$$f(x) = \sum_n c_n u_n(x), \quad \text{com} \quad \sum_n |c_n|^2 = 1,$$

temos

$$\Psi(\bar{x}, t) = \sum_n c_n \left[1 + i \frac{\tau}{\hbar} W_n \right]^{-i/\tau} u_n(\bar{x}). \quad (3.14)$$

Ou seja, diferentemente do que ocorre com a solução estacionária da equação simétrica, a norma associada à solução acima é dada por

$$|\Psi(\bar{x}, t)|^2 = \sum_n |c_n|^2 \exp[-\gamma_n t] \quad (3.15)$$

e tem agora um fator de amortecimento dado por

$$\gamma_n = \frac{1}{\tau} \ln \left(1 + \frac{\tau^2}{\hbar^2} W_n^2 \right), \quad (3.16)$$

que é uma consequência direta do caráter retardado da equação.

Para a equação avançada o termo acima é, ao contrário, um fator de amplificação, e o novo hamiltoniano \tilde{H} é obtido pela troca de i por $(-i)$ na expressão (3.11):

$$\tilde{H} = i \frac{\hbar}{\tau} \ln \left(1 - i \frac{\tau}{\hbar} \hat{H} \right) \quad (3.17)$$

Fisicamente, a equação dissipativa (3.3) representa um sistema **radiante**. A hipótese de um intervalo de tempo fundamental pode decorrer, numa versão fundamentalmente causal, da hipótese de que a reação do sistema à emissão de radiação não é instantânea. Para o elétron, por exemplo, essa grandeza é estimada como sendo da ordem de 10^{-24} s. Desse modo, τ seria o intervalo de tempo decorrido entre o ato de emissão e a reação *macroscópica* do sistema. Naturalmente, um tal ponto de vista, como já se

salientou, subentendendo uma estrutura interna para o sistema. Para a equação avançada (3.5), que é a equação representando um sistema absorvendo radiação, pode-se propor uma interpretação similar.

3.1 - Derivação da Massa do Múon

Um resultado bastante interessante que se obtém utilizando a equação simétrica é um limite no valor máximo permitido aos autovalores do hamiltoniano \hat{H} inicial. Seja a equação simétrica (3.4) em que se considera um hamiltoniano \hat{H} que satisfaça a condição de não depender explicitamente do tempo. Considera-se tal equação como descrevendo um elétron *ligado*, visto o caráter não radiante da equação simétrica. Tem-se então que τ corresponde ao crônon associado ao elétron, sendo dado por

$$\tau = \theta_0 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m_0 c^3}.$$

Procura-se uma solução do tipo

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n u_n(\vec{x}) \exp(-i\alpha_n t) \quad (3.18)$$

em que $\hat{H} u_n(\vec{x}) = E_n u_n(\vec{x})$ fornece o espectro de autovalores do hamiltoniano. Por substituição direta obtêm-se que

$$\alpha_n = \frac{1}{\theta_0} \text{sen}^{-1} \left(\frac{E_n \theta_0}{\hbar} \right). \quad (3.19)$$

Assim sendo, tem-se a condição

$$\left| \frac{E_n \theta_0}{\hbar} \right| \leq 1, \quad (3.20)$$

que, uma vez sendo θ_0 finito, impõe aos autovalores E_n um valor máximo dado por

$$E_{\max} = \frac{\hbar}{\theta_0} = \frac{2}{3} \frac{\hbar m_0 c^3}{e^2} \approx 105.04 \text{ MeV} \quad (3.21)$$

Se se adiciona a essa energia crítica a energia de repouso do elétron, tem-se que

$$E = E_{\max} + E_0^{\text{elétron}} \approx 105.55 \text{ MeV} \quad (3.22)$$

que é muito próximo (erro de 0.1%) do valor medido para a massa do múon: 105.658 MeV. Sendo então a massa de repouso do múon igual à máxima energia correspondente a um estado ligado do elétron (qualquer que seja o hamiltoniano, desde que independente do tempo), pode-se pensar na sua interpretação como um *estado excitado* do elétron.

Pode-se facilmente ver que, para autovalores de energia superiores a esse limite, não se tem mais estados estacionários. Os estados são instáveis e dados por soluções do tipo

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n u_n e^{-i\gamma_n t} e^{-k_n t} \quad (3.23)$$

Termo

Oscilatório

Termo de

Amortecimento

de modo que além da probabilidade de encontrarmos a partícula em um dado autoestado u_n decair no tempo, a própria norma também decai. Uma interpretação física pode ser dada relacionando o decaimento da norma com a medida da instabilidade da partícula, que tenderia rapidamente a "desaparecer de seu espaço de Hilbert original para se transformar em algo diferente": o múon.

As considerações acerca de ser o múon um estado excitado do elétron são já conhecidas. Particularmente, já se observara há muito que a razão das massas das duas partículas é quase exatamente $3/(2\alpha)$, onde α é a constante de estrutura fina (Nambu, 1952). Já fôra também notado que $\frac{2}{3}\alpha$ é justamente o coeficiente do termo de reação radiativa que se tem na equação clássica de Dirac para o elétron (Rosen, 1964). Bohm e Weinstein (1948) levantaram a possibilidade de que vários tipos de "mésons" fossem

estados excitados do elétron. Dirac (1962) chegou a propor um modelo estendido para o elétron com o objetivo final de interpretar o múon como um estado excitado do mesmo.

Caldirola (1978) observou que, utilizando-se as relações de Heisenberg, é possível associar a existência do múon como um estado excitado do elétron com a introdução do crônon na teoria do elétron. A relação

$$\Delta\tau \Delta E \geq \hbar/2 \quad (3.24)$$

impõe uma limitação na determinação, em um dado instante τ , da energia E associada ao movimento interno da um elétron. Se existem estados excitados da partícula correspondentes a valores de massa maiores, tem-se que só é possível falar-se em "elétron com massa de repouso m_0 " quando $\Delta E \leq (\mu_0 - m_0) c^2$, onde μ_0 é a massa de repouso do estado excitado interno. Esses estados internos só poderiam ser excitados na presença de interações suficientemente fortes. Da relação de incerteza tem-se que

$$\Delta\tau \geq \frac{\hbar}{2(\mu_0 - m_0) c^2} \quad (3.25)$$

de modo que, se se supõe que o múon seja um estado excitado do elétron, tem-se que

$$(\mu_0 - m_0) c^2 \equiv \frac{3}{2} \frac{\hbar c}{e^2} m_0 c^2 \quad (3.26)$$

Assim, obtém-se finalmente que

$$\Delta\tau \geq \frac{1}{3} \frac{e^2}{m_0 c^2} = \frac{\tau_0}{2} \quad (3.27)$$

ou seja, que o valor da massa de repouso de um elétron interagente só pode ser tomado dentro de um intervalo de tempo próprio maior que meio crônon. Desse modo, quando se considera dois estados sucessivos, cada um tendo a mesma incerteza $\Delta\tau$, tem-se que eles deverão estar separados um do outro por no mínimo $2 \Delta\tau$, que é exatamente o crônon τ_0 .

3.2 - Derivação do Espectro de Massa dos Léptons

Uma possibilidade que se poderia considerar seria tomar a equação simétrica como descrevendo não o elétron, mas o múon. Segundo essa argumentação *naive* tem-se que a equação também preveria um limite máximo para a energia dos autoestados do múon. Assim, tomando sucessivamente a equação como descrevendo agora as partículas correspondentes a esses limites máximos, poderia-se obter uma expressão para os vários limites dada por

$$E_0^{(n)} = m_0 c^2 \left[\frac{3}{2} \frac{\hbar c}{e^2} + 1 \right]^n = m_0 c^2 \left[\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha} + 1 \right]^n \quad (3.28)$$

de modo que, para

$n = 0$	→	$E^{(0)} = 0.511 \text{ MeV}$	(elétron),
$n = 1$	→	$E^{(1)} = 105.55 \text{ MeV}$	(múon),
$n = 2$	→	$E^{(2)} = 21801.54 \text{ MeV}$	(elétron pesado),

obteriam-se as massas dos primeiros estados excitados, incluindo-se aí um possível lépton pesado que, em função dos resultados experimentais, parece não existir.

Seguindo uma sugestão de Barut (1978), segundo o qual se poderia derivar estados excitados do elétron à partir do acoplamento de seu momento magnético intrínseco com o seu campo próprio, Caldirola (1980) obteve para seu modelo estendido do elétron a massa do tau.

Caldirola considera para o elétron o modelo de um ponto-objeto movendo-se em um microuniverso 4-dimensional de de Sitter caracterizado por

$$c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = c^2 \tau_0^2, \quad (3.29)$$

onde τ_0 é o crônion associado ao elétron, sendo o raio do microuniverso dado por $a = c\tau_0$. Se se considera o espectro de estados excitados obtidos acima, tem-se que cada estado determina um raio característico para o microuniverso. Assim, para cada estado, a trajetória da partícula se restringe a uma casca esférica definida por esses raios. Por exemplo, para o elétron o ponto objeto move-se dentro de uma casca esférica definida pelo raio a ele correspondente e pelo raio de seu estado excitado: o múon. Esses raios são dados por

$$a^{(n)} = \tau_0 c \left[\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha} + 1 \right]^{-n} . \quad (3.30)$$

Segundo o modelo, supondo que a energia intrínseca do lépton $e^{(n)}$ seja dada por $m^{(n)}c^2$, tem-se que o lépton se move no microuniverso associado ao longo de uma trajetória circular com velocidade $v = \beta c$, com $\beta = \sqrt{3}/2$, à qual corresponde um momento magnético intrínseco

$$\mu_a^{(n)} = \frac{1}{4\pi} \frac{e^2}{m^{(n)}c^2} . \quad (3.31)$$

Partindo da sugestão de Barut, Caldirola obtem que para o lépton $e^{(n)}$ uma auto-energia extra dada por

$$E^{(n,p)} = (2p)^4 m^{(n)}c^2 . \quad (3.32)$$

A condição para que a trajetória da partícula se restrinja à casca esférica do microuniverso a ela correspondente é dada por

$$E^{(n,p)} \leq \left[\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha} + 1 \right] m_0 c^2 , \quad (3.33)$$

podendo-se verificar que os valores possíveis para p são: $p = 0$ quando $n = 0$, e $p = 0, 1$ quando $n \neq 0$. Tem-se finalmente que o espectro de massa é agora dado por

$$m^{(n,p)} = \left[1 + (2p)^4 \right] m^{(n)} = m_0 \left[1 + (2p)^4 \right] \left[\frac{3}{2} \frac{1}{\alpha} + 1 \right]^n . \quad (3.34)$$

Assim, tem-se que, para os diferentes valores de n e p :

n	p	$m^{(n)}$	
0	0	0.511 MeV	(elétron)
1	0	105.55 MeV	(múon)
	1	1794.33 MeV	(tau)

Pode-se observar que o tau aparece como um estado excitado interno do múon e sua massa está razoavelmente próxima dos valores que se tem obtido experimentalmente: $m_\tau \approx 1784 \text{ MeV}$ (Hikasa et al, 1992). A diferença entre os valores é de menos de 1%, o que é surpreendente se se considera a simplicidade do modelo. O modelo prevê a existência de outros estados excitados mas tais estados parecem não existir. Isso é de certo modo justificável uma vez que o múon é obtido como um elétron excitado e a descrição do elétron não prevê a presença de outros estados. Para a obtenção do tau, por exemplo, foi

necessário introduzir o acoplamento do momento magnético intrínseco com o campo próprio.

3.4 - Os Formalismos de Schrödinger e Heisenberg

Na mecânica quântica discreta, assim como no caso contínuo, espera-se que existam situações em que os problemas sejam mais facilmente solucionáveis utilizando-se o equivalente discreto das equações de Heisenberg. No capítulo 6 apresentamos a utilização desse formalismo para o oscilador harmônico simples. No caso discreto as formulações de Schrödinger e de Heisenberg também são equivalentes. No entanto, mostramos que as equações de Heisenberg não podem ser obtidas da discretização direta das equações contínuas para todos os casos. Sejam os operadores de evolução temporal (Apêndice A) das equações simétrica

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \operatorname{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right) \right], \quad (3.35)$$

e retardada

$$\hat{U}(t, t_0) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right]^{-(t-t_0)/\tau}. \quad (3.36)$$

A fim de simplificar a notação será utilizada, nas seções que seguem; a seguinte convenção:

$$\Delta f(t) \Leftrightarrow \frac{f(t+\tau) - f(t-\tau)}{2\tau}, \quad (3.37)$$

$$\Delta_R f(t) \Leftrightarrow \frac{f(t) - f(t-\tau)}{\tau}. \quad (3.38)$$

Para ambos os operadores de evolução acima pode-se facilmente mostrar que, uma vez sendo o hamiltoniano \hat{H} hermitiano, as seguintes equações de evolução são satisfeitas:

$$\Delta \hat{U}(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \quad (3.39)$$

$$\Delta \hat{U}'(t, t_0) = -\frac{1}{i\hbar} \hat{U}'(t, t_0) \hat{H} . \quad (3.40)$$

Lembrando que na representação de Heisenberg a evolução temporal é transferida do estado vetor para o operador representando o observável através da definição

$$\hat{A}^{(H)} \equiv \hat{U}'(t, t_0 = 0) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t, t_0 = 0) , \quad (3.41)$$

onde ^(S) indica o elemento na representação de Schrödinger e ^(H) seu correspondente na representação de Heisenberg.

Para o caso **simétrico**, considerando-se um operador $\hat{A}^{(S)}$, tem-se que a evolução temporal do operador $\hat{A}^{(H)}(t)$ é dada por

$$\begin{aligned} \Delta \hat{A}^{(H)}(t) &= \Delta \left(\hat{U}'(t, t_0 = 0) \hat{A}^{(S)} \hat{U}(t, t_0 = 0) \right) , \\ i\hbar \Delta \hat{A}^{(H)}(t) &= \left[\hat{A}^{(H)}(t), \hat{H} \right] + i\hbar \left(\Delta \hat{A} \right)^{(H)} , \end{aligned} \quad (3.42)$$

que tem exatamente a mesma forma da expressão do caso contínuo. Na obtenção dessa expressão uma característica importante do operador evolução que se utiliza é o fato dele ser um operador unitário, o que é verdadeiro para o caso simétrico. No caso **retardado**, tem-se que essa propriedade não é mais obedecida. Ao contrário do que ocorre nos casos simétrico e contínuo, o estado do sistema também varia com o tempo na representação de Heisenberg:

$$\left| \Psi^{(H)}(t) \right\rangle = \left[1 + \frac{\tau^2 \hat{H}^2}{\hbar^2} \right]^{-(t-t_0)/\tau} \left| \Psi^{(S)}(t_0) \right\rangle . \quad (3.43)$$

Ou seja, existe uma diferença sensível com o caso contínuo mas que, no entanto, é consistente com o que se verifica para a formulação de Schrödinger retardada.

Utilizando-se a propriedade $[\hat{A}, f(\hat{A})] = 0$, pode-se mostrar que para o caso retardado vale a expressão

$$\Delta_R \hat{A}^{(H)}(t) = \left\{ \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}^{(S)}(t), \hat{H}^{(S)}(t) \right] + \Delta_R \hat{A}^{(S)}(t) \right\}^{(H)} . \quad (3.44)$$

Dos resultados acima pode-se concluir que existe muita similaridade entre a formulação discreta simétrica e o caso contínuo, podendo-se chegar à equação de

Heisenberg pela discretização direta da equação do caso contínuo. Isso, no entanto, não se aplica aos casos avançado e retardado. No apêndice A faz-se uma abordagem da compatibilidade entre as duas formulações por meio do formalismo de operadores de densidade.

3.5 - Hamiltonianos Dependentes do Tempo

Quando se restringiu a análise das equações discretizadas aos casos em que se considera apenas operadores hamiltonianos independentes do tempo, fez-se por motivo de simplicidade. Quando o hamiltoniano depende explicitamente do tempo, a situação é semelhante à que se tem no caso contínuo. É sempre difícil trabalhar com esse tipo de hamiltoniano mas, como no caso contínuo, pode-se também utilizar uma teoria de pequenas perturbações. Efetuamos alguns cálculos com o intuito de explorar essa situação e, para o caso da equação simétrica, pelo menos no caso simples em que o hamiltoniano tem a forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \tag{3.45}$$

sendo \hat{V} uma pequena perturbação com relação a \hat{H}_0 , o método "discreto" de resolução resulta muito parecido com o que se faz na mecânica quântica usual. Também aqui são obtidas soluções equivalentes ao caso contínuo acompanhadas por um termo de decaimento exponencial. Foi sempre possível resolver os problemas utilizando um *ansatz* conveniente.

Aqui, entretanto, um outro fator deve ser considerado e que está relacionado com o fato de que existe um limite à partir do qual \hat{H} deixa de ter autoestados estáveis. Tomando a equação simétrica tem-se que o hamiltoniano equivalente é dado por

$$\tilde{H} = \frac{\hbar}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau}{\hbar} \hat{H} \right). \tag{3.46}$$

Assim, como já se salientou anteriormente, à partir do valor limite os autoestados deixam de ser reais de modo que o operador \tilde{H} deixa de ser hermitiano. Abaixo do limite, \tilde{H} é um operador densamente definido e auto-adjunto no subspaço $\mathcal{L} \subset L^2$ definido pelas

autofunções de \hat{H} . Como se viu, quando o limite é ultrapassado o sistema passa a um estado excitado de modo que o estado anterior perde significado físico. Assim, achamos conveniente que os observáveis sejam restritos a operadores auto-adjuntos que mantenham invariante o subspaço \mathcal{L} . Assim, qualquer observável que na mecânica quântica convencional é representado por um dado operador, no caso discreto será representado pela projeção ortogonal deste sobre o subspaço \mathcal{L} . Desse modo, uma restrição que se faz à perturbação \hat{V} é que satisfaça esse requisito.

Na mecânica quântica usual é conveniente, ao se tratar com perturbações dependentes do tempo, trabalhar na representação de interação (representação de Dirac). Nessa representação, a evolução do estado vetor é determinada pelo potencial dependente do tempo $\hat{V}(t)$, enquanto que a evolução do observável é determinada pela parte estacionária \hat{H}_0 do hamiltoniano. Na mecânica quântica discreta, encontramos que o operador de evolução temporal para o caso simétrico (vide Apêndice A) definido para \hat{H}_0 seja dado por

$$\hat{U}_0(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}_0}{\hbar} \right) \right]. \quad (3.47)$$

O estado vetor na representação de interação é então definido, à partir do estado na representação de Schrödinger, como

$$|\Psi^{(I)}(t)\rangle = \hat{U}_0^t(t) |\Psi^{(S)}(t)\rangle, \quad (3.48)$$

onde $\hat{U}_0^t(t) \equiv \hat{U}_0^t(t, t_0 = 0)$. Por sua vez, os operadores são definidos como

$$\hat{A}^{(I)} = \hat{U}_0^t(t) \hat{A}^{(S)} \hat{U}_0(t). \quad (3.49)$$

Assim, podemos mostrar que, na representação de interação, a evolução do estado é regida justamente pela equação

$$i \hbar \Delta \Psi^{(I)}(\bar{x}, t) = \frac{i \hbar}{2\tau} [\Psi^{(I)}(\bar{x}, t + \tau) - \Psi^{(I)}(\bar{x}, t - \tau)] = \hat{V}^{(I)} \Psi^{(I)}(\bar{x}, t) \quad (3.50)$$

que equivale a uma discretização *direta* do caso contínuo. Para os operadores, obtém-se que

$$\Delta \hat{A}^{(I)}(t) = \frac{\hat{A}^{(I)}(t + \tau) - \hat{A}^{(I)}(t - \tau)}{2\tau} = \frac{1}{i \hbar} [\hat{A}^{(I)}, \hat{H}_0], \quad (3.51)$$

que também é equivalente ao caso contínuo.

Pode-se então observar que, com a discretização temporal, a representação de interação mantém as características do caso contínuo no que se refere à evolução dos operadores e dos estados. Isso enquanto os autoestados de \hat{H} estiverem **abaixo** do limite de estabilidade. Neste ponto, para o caso discreto, adotamos um procedimento semelhante ao que se utiliza na mecânica quântica usual para tratar pequenas perturbações dependentes do tempo.

Seja, na representação de interação, a mesma base de autoestados associada ao hamiltoniano estacionário \hat{H}_0 na representação de Schrödinger, dada por $|n\rangle$. Desse modo,

$$|\Psi(t)\rangle^{(I)} = \sum_n \langle n | \Psi(t) \rangle^{(I)} |n\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (3.52)$$

é a expansão, nessa base, do estado do sistema num instante t . Pode-se observar que a evolução do estado do sistema estará determinada uma vez conhecidos os coeficientes $c_n(t)$. Utilizando-se a equação de evolução (3.50) tem-se que

$$i \hbar \Delta \langle n | \Psi(t) \rangle^{(I)} = \sum_m \langle n | \hat{V}^{(I)} | m \rangle \langle m | \Psi(t) \rangle^{(I)}. \quad (3.53)$$

Utilizando-se o operador evolução para reescrever a perturbação $\hat{V}(t)$ na representação de Schrödinger tem-se que

$$i \hbar \Delta c_n(t) = \sum_m c_m(t) V_{nm}(t) \exp(i\omega_{nm}t), \quad (3.54)$$

sendo

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\tau} \left[\text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_n}{\hbar} \right) - \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_m}{\hbar} \right) \right], \quad (3.55)$$

obtendo-se assim a equação de evolução dos coeficientes $c_n(t)$, cuja solução fornece a evolução temporal do sistema estudado.

Assim como na mecânica quântica usual, pode-se também trabalhar com o operador evolução na representação de interação, $\hat{U}^{(I)}(t, t_0)$, que é definido como

$$|\Psi(t)\rangle^{(I)} = \hat{U}^{(I)}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle^{(I)}, \quad (3.56)$$

de modo que (3.50) pode ser reescrita como

$$i \hbar \Delta \hat{U}^{(1)}(t, t_0) = \hat{V}^{(1)}(t) \hat{U}^{(1)}(t, t_0) . \quad (3.57)$$

Deve-se então calcular o operador $\hat{U}^{(1)}(t, t_0)$ satisfazendo a condição inicial $\hat{U}^{(1)}(t_0, t_0) = 1$. Dada essa condição inicial, obtem-se da equação a diferenças finitas (3.57) a solução

$$U^{(1)}(t, t_0) = \exp \left[\frac{-i(t-t_0)}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau V^{(1)}(t)}{\hbar} \right) \right] .$$

Ao contrário do que ocorre no caso usual, em que o operador evolução aproximado é obtido na forma de uma série infinita de Dyson, obtivemos aqui uma expressão bem determinada, o que não implica em facilidade de solução. A solução do problema obtem-se relacionando os elementos da matriz do operador assim obtido com os coeficientes de evolução $c_n(t)$.

Como quase sempre ocorre, as equações a diferenças finitas são bem mais difíceis de serem resolvidas analiticamente que as equações diferenciais a elas equivalentes. No caso particular do sistema de equações que se obtem do formalismo acima essa dificuldade é ainda mais realçada.

Lembramos que uma maneira alternativa de se trabalhar com perturbações dependentes do tempo é fazendo uso dos hamiltonianos equivalentes (Caldirola, 1978). Nesse caso, utiliza-se o formalismo contínuo convencional. Supondo-se que o termo de perturbação $\hat{V}(t)$ seja pequeno, o hamiltoniano equivalente pode ser escrito como

$$\tilde{\mathbf{H}} = \frac{\hbar}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}}_0 \right) + \hat{V}(t) = \tilde{\mathbf{H}}_0 + \hat{V}(t) .$$

Utilizando a representação de interação, tem-se que o estado do sistema é agora definido como

$$|\Psi^{(1)}(t)\rangle = \exp(i \tilde{\mathbf{H}}_0 t / \hbar) |\Psi^{(s)}(t)\rangle , \quad (3.58)$$

enquanto que os operadores são dados por

$$\hat{\mathbf{A}}^{(1)} = \exp(i \tilde{\mathbf{H}}_0 t / \hbar) \hat{\mathbf{A}}^{(s)} \exp(-i \tilde{\mathbf{H}}_0 t / \hbar) \quad (3.59)$$

Os estados (3.58) evoluem segundo a equação

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{(1)}(t)\rangle = \hat{V}^{(1)} |\Psi^{(1)}(t)\rangle , \quad (3.60)$$

onde $\hat{V}^{(1)}$ é obtido da definição (3.59).

Um dos procedimentos para se tratar de pequenas perturbações dependentes do tempo é considerando-se o operador de evolução temporal que, na representação de interação, é definido por

$$|\Psi^{(1)}(t)\rangle = \hat{U}^{(1)}(t, t_0) |\Psi^{(1)}(t_0)\rangle, \quad (3.61)$$

de modo que, aplicando-se (3.60), obtem-se

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^{(1)}(t, t_0) = \hat{V}^{(1)}(t) \hat{U}^{(1)}(t, t_0). \quad (3.62)$$

Assim, considerando-se que $\hat{U}^{(1)}(t_0, t_0) = 1$, tem-se que o operador evolução procurado é dado por

$$\hat{U}^{(1)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}^{(1)}(t') \hat{U}^{(1)}(t', t_0) dt' \quad (3.63)$$

ou

$$\hat{U}^{(1)}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt^1 \int_{t_0}^{t^1} dt^2 \dots \int_{t_0}^{t^{n-1}} dt^n \hat{V}^{(1)}(t^1) \hat{V}^{(1)}(t^2) \dots \hat{V}^{(1)}(t^n), \quad (3.64)$$

onde obtemos o operador evolução em termos de uma série de Dyson.

Para se fazer a correlação entre os elementos da matriz do operador de evolução e os coeficientes de evolução $c_n(t)$, obtidos do análogo contínuo da equação (3.54), deve-se tomar a base de autovetores do hamiltoniano \hat{H}_0 . Se o estado inicial do sistema é um autoestado $|m\rangle$ desse operador, tem-se que, num instante posterior,

$$c_n(t) = \langle n | \hat{U}^{(1)}(t, t_0) | m \rangle, \quad (3.65)$$

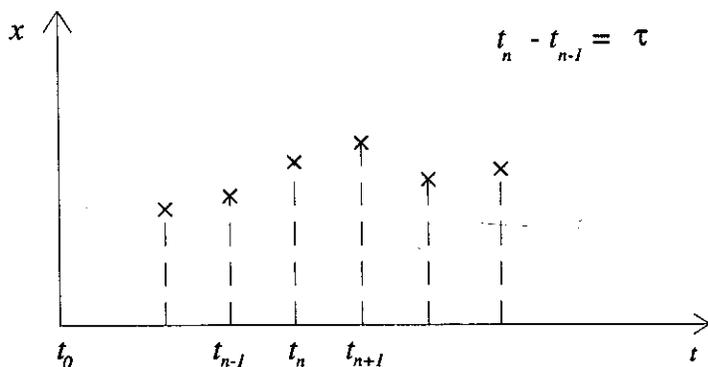
procedimento este que é igualmente aplicável para o caso discreto.

Para fins de cálculo é consideravelmente mais simples trabalhar com o hamiltoniano equivalente, utilizando o formalismo contínuo.

4 - As Integrais de Trajetória e as Equações de Schrödinger Discretizadas

As equações de Schrödinger discretizadas podem ser obtidas, de maneira bastante simples, utilizando-se o formalismo de Feynman das integrais de trajetória. A derivação seguindo-se esse formalismo é particularmente interessante uma vez que permite que se tenha uma idéia mais clara do significado dessas equações. Considerações acerca de uma possível discretização da mecânica quântica utilizando-se o formalismo de Feynman já foram efetuadas, ainda que num âmbito mais geral de discretização do espaço-tempo, por Friedberg e Lee (1983). No entanto, seguindo a hipótese utilizada por Caldirola em sua teoria clássica do elétron, também no caso quântico o que se considera é apenas uma discretização do tempo de resposta de uma partícula. Ou seja, o tempo permanece uma variável intrinsecamente contínua.

É conveniente restringir o problema ao caso unidimensional, em que se tem uma partícula em movimento sob a ação de um potencial $V(x,t)$. Toma-se a coordenada temporal inicialmente contínua e considera-se uma discretização em instantes separados por intervalos de medida τ .



A amplitude de transição para a partícula ir de um ponto inicial (x_1, t_1) do espaço-tempo a um ponto final (x_n, t_n) é dada pelo *propagador*

$$K(x_n, t_n; x_1, t_1) = \langle x_n, t_n | x_1, t_1 \rangle. \quad (4.1)$$

Na formulação de Feynman essa amplitude de transição está associada a uma integral de caminho, na qual a *ação* clássica desempenha um papel fundamental. É conveniente introduzir a notação

$$S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \mathcal{L}(x, \dot{x}), \quad (4.2)$$

onde $\mathcal{L}(x, \dot{x})$ é a lagrangiana clássica e $S(n, n-1)$ a ação clássica. Desse modo, para dois instantes consecutivos, tem-se o seguinte propagador

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \frac{1}{A} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \right\}. \quad (4.3)$$

A integral de trajetória de Feynman tem o significado de um somatório sobre todos os caminhos possíveis para a partícula e pode ser escrita como

$$\langle x_n, t_n | x_1, t_1 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} A^{-N} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \prod_{n=2}^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(n, n-1) \right), \quad (4.4)$$

onde A é um fator de normalização. Para obter-se as equações de Schrödinger discretizadas, toma-se a evolução do estado quântico da partícula entre duas configurações consecutivas (x_{n-1}, t_{n-1}) e (x_n, t_n) . Tem-se assim a seguinte expressão para o estado do sistema no instante t_n :

$$\Psi(x_n, t_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) dx_{n-1}. \quad (4.5)$$

Para a ação clássica, por sua vez, tem-se a seguinte expressão, que decorre diretamente da definição (4.2):

$$S(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \frac{m}{2\tau} (x_n - x_{n-1})^2 - \tau V\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, t_{n-1}\right). \quad (4.6)$$

Assim, o estado em t_n será dado por

$$\Psi(x_n, t_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ \frac{im}{2\hbar\tau} (x_n - x_{n-1})^2 - i\frac{\tau}{\hbar} V\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, t_{n-1}\right) \right\} \Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) dx_{n-1}. \quad (4.7)$$

Para $\tau \approx 0$, quando x_n é apreciavelmente diferente de x_{n-1} , a integral com o termo quadrático fornece um valor muito pequeno. Só se tem contribuições apreciáveis à integral quando $x_n \approx x_{n-1}$. Pode-se então fazer a aproximação

$$x_{n-1} = x_n + \eta \quad \rightarrow \quad dx_{n-1} \equiv d\eta, \quad (4.8)$$

de tal modo que

$$\Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) \equiv \Psi(x_n, t_{n-1}) + \left(\frac{\partial \Psi(x_n, t_{n-1})}{\partial x} \right) \eta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \eta^2. \quad (4.9)$$

Substituindo esta expressão em (4.7), fazendo a aproximação

$$V(x + \eta/2) \approx V(x) \quad \longrightarrow \quad \text{Supõe-se que o potencial varie lentamente com } x$$

resolvendo algumas integrais e tomando apenas os termos até primeira ordem em τ , chega-se à expressão

$$\Psi(x_n, t_n) = \frac{1}{A} \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \tau V(x_n, t_{n-1})\right) \left(\frac{2i\hbar\pi\tau}{m}\right)^{1/2} \left(\Psi(x_n, t_{n-1}) + \frac{i\hbar\tau}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right). \quad (4.10)$$

Não obstante ser $\exp(-i \tau V(x_n, t_n)/\hbar)$ uma função definida apenas para certos valores bem determinados, pode-se expandi-la em potências de τ , numa posição arbitrária (x_n, t_n) . Assim, com tal substituição e escolhendo $A = (2i\hbar\pi\tau/m)^{-1/2}$, de modo que no limite contínuo $\tau \rightarrow 0$ (de modo tal que a integração efetuada permita que se obtenha a igualdade entre os dois lados da equação acima), chega-se a

$$\Psi(x_n, t_{n-1} + \tau) - \Psi(x_n, t_{n-1}) = -\frac{i}{\hbar} \tau V(x_n, t_{n-1}) \Psi(x_n, t_{n-1}) + \frac{i\hbar\tau}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (4.11)$$

que, por um simples reordenamento de termos resulta em

$$i \frac{\Psi(x_n, t_{n-1} + \tau) - \Psi(x_n, t_{n-1})}{\tau} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x_n, t_{n-1}) \right\} \Psi(x_n, t_{n-1}) \quad (4.12)$$

Assim, chega-se à equação de Schrödinger a diferenças finitas **avançada**, descrevendo uma partícula em movimento unidimensional submetida a um potencial $V(x, t)$.

As soluções das equações avançadas apresentam um *fator de amplificação* que pode indicar, aqui, que a partícula absorve energia do campo descrito pelo hamiltoniano em questão para evoluir temporalmente. No caso clássico a equação avançada é utilizada para descrever o pósitron mas aqui, na mecânica quântica não-relativística, parece indicar apenas um sistema que absorve energia do meio (ao invés de ceder-lhe energia).

Deve-se lembrar que, para que esta equação fosse obtida, teve-se que levar em conta apenas termos de primeira ordem em τ . Como o limite $\tau \rightarrow 0$ não foi efetuado, tem-se que a expressão acima é apenas uma aproximação. O significado deste fato pode estar relacionado a um outro com o qual se deparará quando se tratar do problema da teoria da medida.

É interessante notar que a única maneira de se obter a equação retardada é considerando o propagador atuando no sentido inverso do tempo. Seguindo o procedimento convencional do caso contínuo obtem-se sempre a equação avançada. Assim, o potencial descreve um mecanismo de transferência de energia de um campo para o sistema. Quanto à equação retardada, e também à simétrica, só podem ser obtidas com uma inversão da ordem temporal. Isso é, considerando-se a expressão

$$\Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_A \exp \left\{ \int_{t_n}^{t_{n-1}} \mathcal{H} dt \right\} \int_W^U \Psi(x_n, t_n) dx_n, \quad (4.13)$$

que pode ser rigorosamente obtida utilizando-se somente a relação de fechamento obedecida pelos autoestados do operador posição, e em seguida redefinindo-se o propagador no sentido inverso do tempo. Com essa expressão, seguindo um procedimento paralelo ao apresentado acima, pode-se obter a equação de Schrödinger retardada.

A equação simétrica pode ser facilmente obtida como uma média das duas situações. Considerando-se que a equação simétrica possui soluções não-radiantes, têm-se o paralelo quântico da antiga hipótese de Fokker segundo a qual o movimento de uma partícula clássica carregada é não-radiante quando a força atuando sobre ela é meio retardada e meio avançada, referindo-se aos potenciais avançados e retardados da eletrodinâmica clássica.

Um aspecto interessante dessas equações aparentemente opostas é o fato de **não poderem ser obtidas uma da outra por simples inversão temporal**. A ordem temporal nos propagadores deve estar relacionada com a inclusão, nos mesmos, de algo como

potenciais avançados e retardados, de modo que, para se obter as equações retardadas tem-se que levar em conta efeitos que retroagem no tempo.

Não obstante ter sido uma derivação em que se seguiu muito de perto o procedimento usual (Sakurai, 1985), as considerações necessárias para a obtenção das três equações discretas podem ser úteis na compreensão do status dessas equações. Ou seja, podem servir de auxílio no estabelecimento do significado que se pode associar a cada uma delas.

5 - Aplicações das Equações Quânticas Discretizadas

Voltando a questões mais gerais, é interessante a análise das consequências físicas da introdução do intervalo fundamental de tempo na física quântica. Assim, procurou-se aplicar as equações discretizadas a algumas situações físicas bem conhecidas. Dentre as várias aplicações que se fez das equações de Schrödinger discretizadas, especialmente das simétrica e retardada, apresenta-se aqui o tratamento, nessas formalizações, do oscilador harmônico simples.

5.1 - Oscilador Harmônico Simples

Quando se toma o oscilador harmônico simples, em que o hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, o fato de se efetuar a discretização da coordenada temporal não afeta os resultados obtidos no caso contínuo para a parte espacial. Isto sempre ocorre quando o potencial envolvido não tem dependência temporal explícita: as diferenças que se obtêm são sempre formalmente idênticas, mudando apenas os valores numéricos relativos aos autovalores de energia do hamiltoniano em questão, assim como o *crônon* correspondente a cada situação. Assim, tem-se a mesma base de autoestados e o mesmo espectro de autovalores, muito embora a evolução temporal do estado do sistema seja dada por uma expressão diferente.

Seja o Hamiltoniano para o oscilador harmônico simples

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2 , \quad (5.1)$$

cuja equação de autovalores é dada por

$$\hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle , \quad (5.2)$$

onde E_n dá o espectro dos autovalores de energia do oscilador.

Conforme já se mencionou anteriormente, o fato desse hamiltoniano ser explicitamente independente do tempo implica em que, para a equação simétrica, sempre se terá um limite superior para os valores possíveis para os autovalores de energia do hamiltoniano, limite este que, para o elétron, como se viu, corresponde à massa de repouso do múon. Na base de autofunções de \hat{H} , pode-se escrever um estado geral do oscilador como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) |u_n\rangle \exp\left[-i \frac{t}{\tau} \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{E_n \tau}{\hbar}\right)\right], \quad (5.3)$$

sendo $c_n(0) = \langle u_n | \Psi(t=0) \rangle$. Naturalmente, quando $\tau \rightarrow 0$, a solução acima recai na expressão contínua em que a dependência temporal é dada por $\exp(-i E_n t/\hbar)$. Portanto tem-se apenas uma pequena diferença de fase entre ambas as expressões. Quando se calcula o valor médio de um observável A qualquer,

$$\langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \sum_{m=0} \sum_{n=0} c_m^*(0) c_n(0) A_{mn} \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t\right] \exp\left[i(E_m^3 - E_n^3) \frac{t\tau^2}{3! \hbar^3}\right] + \mathcal{O}(\tau^4), \quad (5.4)$$

onde $A_{mn} = \langle u_m | \hat{A} | u_n \rangle$, obtém-se um termo de fase adicional que implica em um pequeno desvio das frequências resultantes com relação às frequências de Bohr do oscilador harmônico. Em primeira aproximação, esse desvio é dado pelo termo em τ^2 que aparece na expressão acima.

Deve-se salientar que a restrição imposta ao espectro de autovalores de \hat{H} provoca um corte na base de autovetores, de modo que passa-se a ter um número finito de autovetores que não mais compõem um conjunto completo e, portanto, não formam uma base. Para autoestados superiores ao valor máximo, os estados são instáveis e decaem exponencialmente com o tempo. Assim, uma vez satisfeitas as soluções adequadas com relação ao fator de decaimento correspondente a esses estados, pode-se considerar para fim de cálculo a base completa de autovetores, já que com o tempo as contribuições a eles correspondentes tendem rapidamente a zero. Uma maneira mais rigorosa de se estender o conjunto de autovetores a fim de se ter uma base do espaço dos estados é substituir o operador \hat{H} por um operador não hermitiano obtido à partir da equação discreta, o mesmo que foi mencionado no capítulo 3.

Também no caso da equação retardada, sempre se tem uma solução amortecida quando o potencial é independente do tempo. Essa equação representa um sistema radiante, de modo que não aparecem soluções estacionárias nem um limite máximo para os autovalores de energia, muito embora quanto maiores os autovalores, maior o fator de amortecimento radiativo, e mais rapidamente as contribuições correspondentes a eles se anulam. Escrevendo-se o estado do oscilador como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) |u_n\rangle \left[1 + \frac{i}{\hbar} \tau E_n \right]^{-i/\tau}, \quad (5.5)$$

cuja norma decai segundo

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \sum_n |c_n(0)|^2 \left[1 + \frac{\tau^2 E_n^2}{\hbar^2} \right]^{-1/\tau}, \quad (5.6)$$

tem-se para um observável qualquer que

$$\langle A \rangle = \sum_{m=0} \sum_{n=0} c_m^*(0) c_n(0) A_{mn} \exp \left[-\frac{t}{\tau} \ln \left[1 + \frac{\tau^2}{\hbar^2} E_n E_m - \frac{i\tau}{\hbar} (E_m - E_n) \right] \right] \quad (5.7)$$

ou, em primeira aproximação em τ ,

$$\langle A \rangle(t) = \sum_m \sum_n c_m^*(0) c_n(0) A_{mn} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) t \right] \exp \left[-\frac{t\tau}{2\hbar^2} (E_m^2 + E_n^2) \right], \quad (5.8)$$

de modo que, ao lado das frequências de Bohr que definem as frequências de emissão e absorção do oscilador, obtem-se um termo de amortecimento que faz com que, com o passar do tempo, o valor médio de um observável (independente explicitamente do tempo) tenda a zero. Uma análise superficial nos revela que mesmo para autovalores de energia muito baixos, menores que 1 eV, o fator de amortecimento é grande, de modo que o decaimento dos valores médios é muito rápido. O fator de decaimento da norma que se verifica na equação (5.6) será reobtido mais adiante e seu comportamento é visto na figura (5.1).

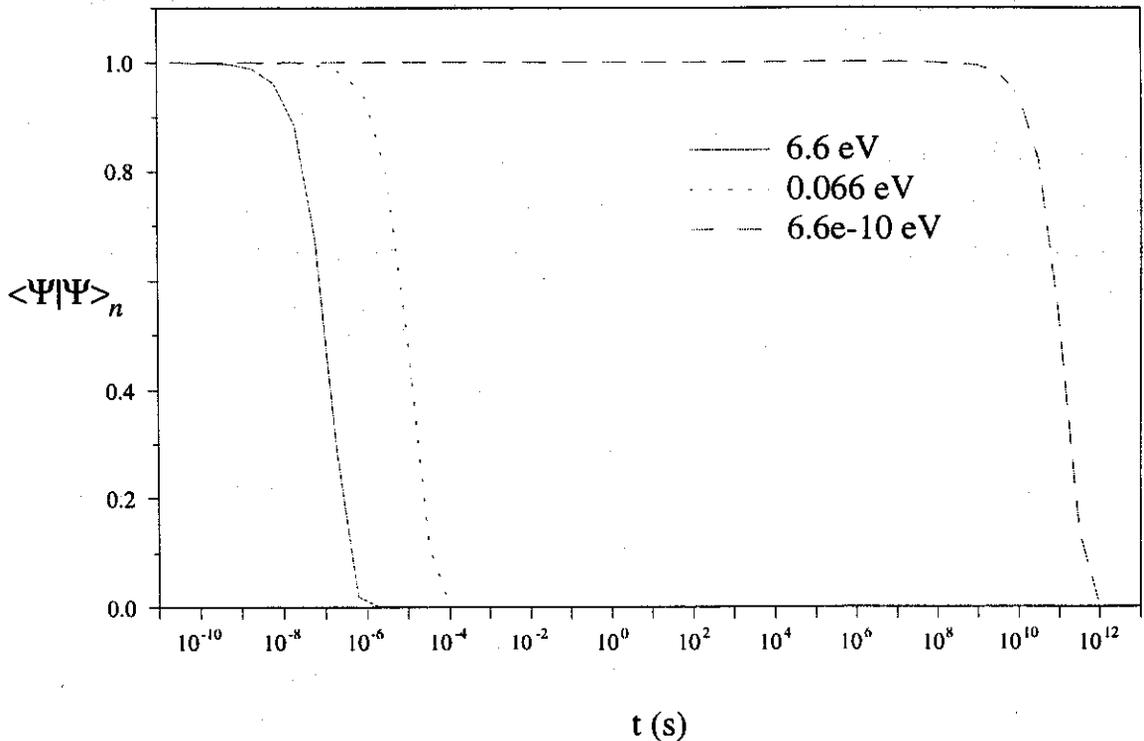


Figura 5.1 - Comportamento típico do fator de decaimento associado a diferentes autovalores de energia do oscilador, para o caso retardado.

Para se chegar a resultados como esses, o procedimento utilizado foi tomar as equações discretizadas e assumir um certo *ansatz* que permitisse, através de simples substituição nas equações, obter o resultado correto. No entanto, tentou-se por algum tempo obter os resultados utilizando também os métodos padrões de resolução de equações a diferenças finitas. As soluções gerais são facilmente determinadas mas, no caso da equação simétrica, tem-se um problema na avaliação das constantes, já que uma equação diferencial de 1ª ordem em τ é transformada numa equação a diferenças finitas de 2ª ordem. Para se obter uma solução do tipo da utilizada no *ansatz*, é necessário fazer considerações acerca dos termos que estariam ligados à existência de antipartículas, ou seja, fazendo restrições sobre as fases da solução.

5.2 - Movimento de uma Partícula Livre

No caso de uma partícula livre, um elétron por exemplo, a solução geral da equação simétrica (3.4) pode ser obtida, na representação de coordenadas, utilizando-se como *ansatz* a solução conhecida para o caso contínuo. Assim, obtem-se um espectro de autofunções (ondas planas) dadas por

$$\Psi_p(\mathbf{x}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(-i\alpha(\mathbf{p})t + i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}\right).$$

Substituindo essa expressão na equação simétrica obtem-se que a frequência $\alpha(\mathbf{p})$ é dada por

$$\alpha(\mathbf{p}) = \frac{1}{\tau} \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{\tau}{\hbar} \frac{p^2}{2m_0}\right). \quad (5.9)$$

Quando se faz $\tau \rightarrow 0$, tem-se que $\alpha(\mathbf{p})\hbar$ coincide com a energia da partícula. Assim como se verificou para o caso da partícula ligada, também aqui aparece um limitante sobre o espectro de autoestados. Pode-se observar que existe um limite máximo nos valores possíveis do momento, dado por

$$p \leq p_M = \sqrt{2m_0\hbar/\tau} \approx 10 \text{ MeV}/c \quad (5.10)$$

para o elétron. Ou seja, existe um limite a partir do qual as frequências $\alpha(\mathbf{p})$ deixam de ser reais.

A partícula, como no caso contínuo, é descrita por uma superposição das autofunções e seu estado pode ser escrito como

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\mathbf{p}) \exp\left\{-i\left[\alpha(\mathbf{p}) - \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}\right]\right\}, \quad (5.11)$$

Os coeficientes $c(\mathbf{p})$ são determinados à partir da condição inicial $\Psi(\mathbf{x}, 0) = \Psi_0(\mathbf{x})$. Da expressão de α , pode-se observar que a partir de um certo valor de p , a expressão perde o significado, de modo que a solução completa estará definida apenas se $c(\mathbf{p}) = 0$ quando $p \geq \sqrt{2m_0\hbar/\tau}$. Pela condição de fase estacionária, encontra-se que

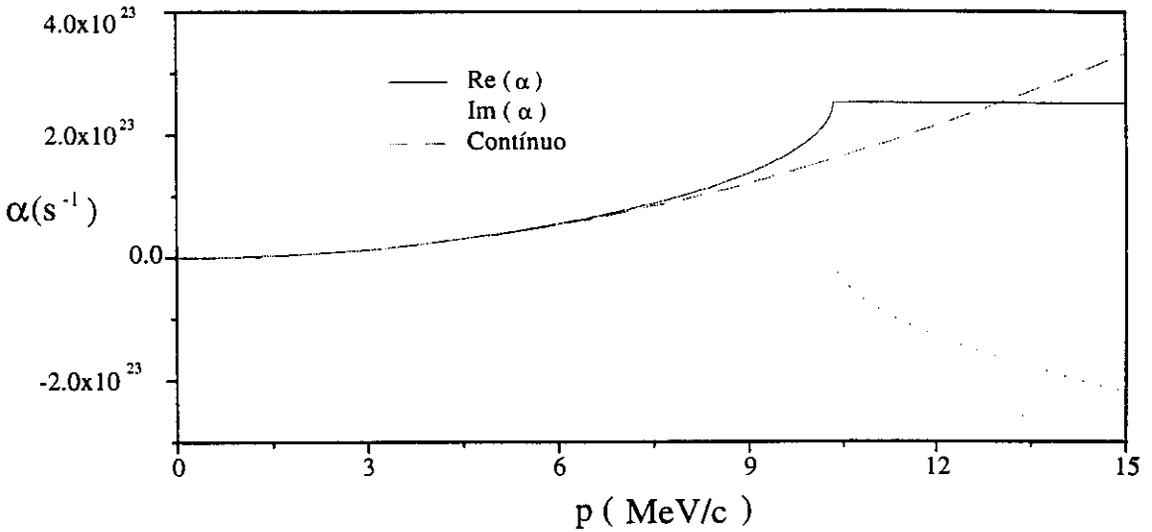


Figura 5.2 - Componentes real e imaginária da função $\alpha(\mathbf{p})$ do caso simétrico comparadas ao resultado obtido para o caso contínuo.

$$x = \frac{p}{m_0} \frac{t}{\sqrt{1 - \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{p^4}{4m_0^2}\right)}} \quad (5.12)$$

de modo que, se se supõe que $c(\mathbf{p})$ corresponda a uma distribuição de probabilidades com um pico em $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$, então o pacote de ondas se moverá na direção de \mathbf{p}_0 com velocidade uniforme

$$v = \frac{p_0}{m_0} \left[1 - \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{p_0^4}{4m_0^2}\right) \right]^{-1/2} \quad (5.13)$$

que coincide com a velocidade de grupo do pacote. Pode-se observar facilmente que, quando p atinge o seu valor máximo permitido, a velocidade diverge: $v \rightarrow \infty$. Ou seja, a introdução do intervalo fundamental de tempo não resulta em nenhuma restrição com relação à velocidade da partícula, muito embora haja um limite sobre o momento canônico das autofunções. À partir da condição de fase estacionária é possível redefinir o momento associado à partícula, de modo que este novo momento também será ilimitado. Assim, pode-se concluir que é possível ter elétrons livres com qualquer energia cinética, diferentemente do que ocorre com elétrons ligados.

Para valores de $p > p_M$ a frequência $\alpha(\mathbf{p})$ deixa de ser real e sua variação com p pode ser vista na figura (5.2). Analisando-se a expressão (5.9) pode-se observar que, em se

considerando $\alpha(\mathbf{p})$ complexo tem-se que, para $p < p_M$, a componente imaginária se anula enquanto que a parte real é dada pela própria expressão (5.9). Quando $p > p_M$, tem-se que

$$\text{Re}(\alpha(p)) = \frac{\pi}{2\tau}, \quad (5.14)$$

$$\text{Im}(\alpha(p)) = -\frac{1}{\tau} \ln \left[\frac{\tau p^2}{2m_0 \hbar} + \sqrt{\left(\frac{\tau p^2}{2m_0 \hbar} \right)^2 - 1} \right], \quad (5.15)$$

onde a parte real é uma constante e a parte imaginária tende logicamente a $-\infty$. Utilizando as expressões acima pode-se observar que, para $p > p_M$, os autoestados passam a ser instáveis, aparecendo um termo de decaimento dependente do tempo. Ao se procurar um hamiltoniano equivalente \tilde{H} que, para a equação de Schrödinger contínua, forneça resultados equivalentes tem-se que isso só será possível se \tilde{H} for um operador não-hermitiano. Pode-se facilmente verificar que isso ocorre para $\tilde{H} = H_1 + i H_2$, sendo H_1 e H_2 hermitianos e tais que $H_1|p\rangle = \hbar \text{Re}(\alpha(p))|p\rangle$ e $H_2|p\rangle = \hbar \text{Im}(\alpha(p))|p\rangle$.

Quando se considera a equação retardada, utilizando o mesmo *ansatz* que no caso simétrico, o fator de amortecimento aparece para qualquer valor de p . Não existe mais a limitação sobre os valores de p mas, quando $p \rightarrow \infty$, a parte real de $\alpha(\mathbf{p})$ tende para o mesmo valor limite observado para o caso simétrico. A figura (5.3) ilustra o comportamento das componentes de $\alpha(\mathbf{p})$. A expressão encontrada para uma autofunção qualquer é dada por

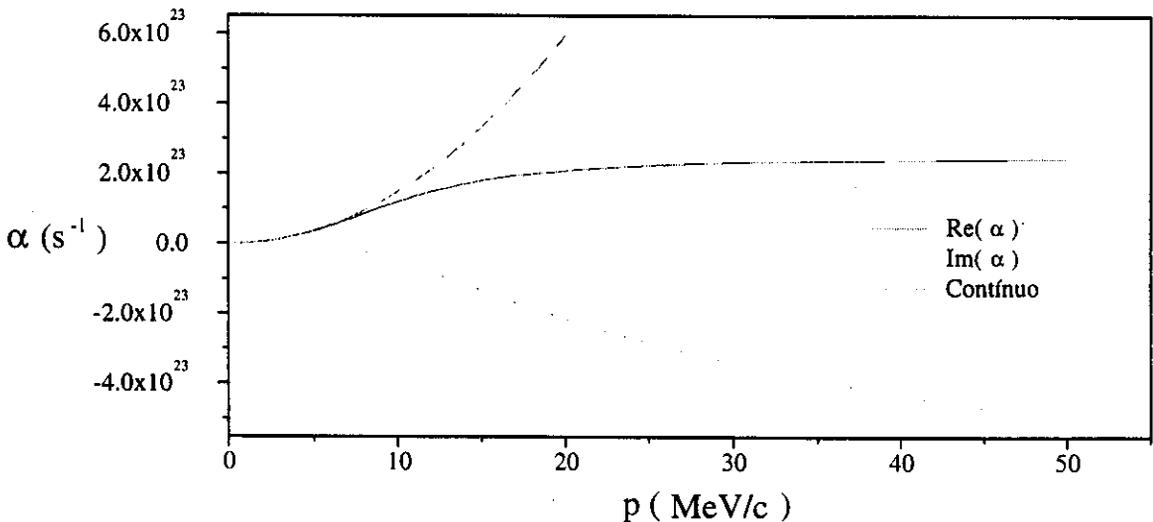


Figura 5.3 - Componentes real e imaginária da função $\alpha(\mathbf{p})$ da equação retardada comparadas ao resultado obtido para o caso contínuo.

$$\Psi_p(x,t) \propto \exp\left[\frac{ipx}{\hbar} - \frac{it}{\tau} \tan^{-1}\left(\frac{p^2\tau}{2m\hbar}\right)\right] \exp\left[-\frac{t}{2\tau} \ln\left[1 + \left(\frac{p^2\tau}{2m\hbar}\right)^2\right]\right]. \quad (5.16)$$

Expandindo essa expressão mantendo-se apenas termos até primeira ordem em τ o que se obtém é a solução contínua multiplicada por um fator de amortecimento:

$$\Psi_p(x,t) \propto \exp\left(\frac{ipx}{\hbar} - i\omega t\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\tau t\right) \quad (5.17)$$

onde $\omega = p^2/2m\hbar$ é a frequência obtida para o caso contínuo.

Como se pode observar, o termo de amortecimento depende apenas do hamiltoniano, através da frequência ω , e do *crônon* associado à partícula. Sendo τ constante para uma determinada partícula, o termo de decaimento indica que para frequências muito elevadas as soluções decaem muito rapidamente e, à medida que o sistema evolui, pode-se perceber o decaimento também para frequências menores.

Na figura (5.4) pode-se observar que o ponto de inflexão, que delimita a região do espectro de frequências para a qual o amortecimento é mais intenso, se move em direção às frequências menores, à medida que o tempo passa.

A consequência desse amortecimento é o estreitamento da banda de frequências relevantes na formação do pacote de ondas que descreve a partícula livre, reflexo de um decréscimo contínuo da energia da mesma. Como já foi salientado, este amortecimento decorre intrinsecamente da equação estudada, que aparentemente representa um sistema em contato "térmico" com o meio que o circunda.

Como no caso simétrico, a obtenção de um hamiltoniano equivalente só é possível se se considera operadores não-hermitianos. Considerando-se um operador como o descrito para o caso simétrico é possível propor um hamiltoniano equivalente.

Vale a pena aqui reconsiderar a questão de qual seja significado físico das três equações discretizadas de Schrödinger. Aparentemente, o que define a escolha da equação a ser utilizada em uma determinada situação são as condições de contorno do problema, os tipos de restrições que se impõe ao sistema. A equação simétrica é utilizada em casos bastante especiais em que o sistema nem emite, nem absorve radiação, ou o faz de maneira perfeitamente equilibrada. Seria o caso dos elétrons em suas órbitas num átomo. Tem-se então a estabilidade da partícula até um determinado limite de energia, a partir do qual o comportamento dos estados é semelhante ao que se verifica no caso retardado (desde que

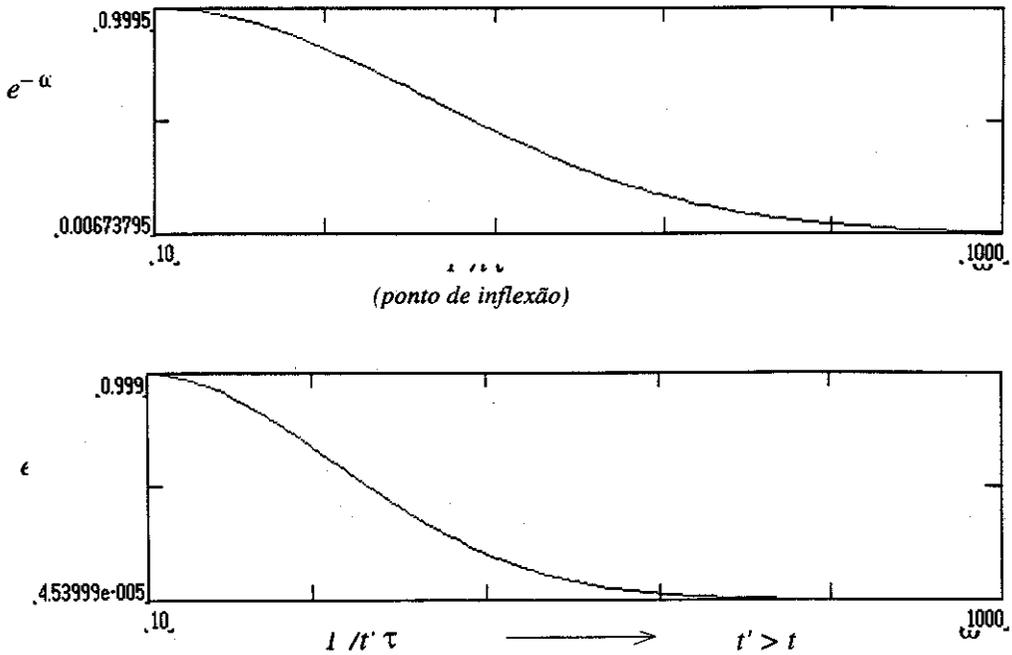


Figura 5.4 - Movimento do ponto de inflexão com a passagem do tempo.

seja coerente tomar-se os autovalores que ultrapassam esse limite, o que não foi o caso da partícula livre). Assim, para energias abaixo daquele limite, a partícula se comporta de maneira quase idêntica à prevista no caso contínuo, apenas que as novas frequências associadas a cada função de onda diferem das frequências contínuas por um fator da ordem de τ^2 . A probabilidade de que seja encontrada uma partícula com energia acima daquele limite decresce exponencialmente com o tempo.

No caso do elétron ligado, esse limite é aquele equivalente à energia de repouso do múon. Se um paralelo com o caso clássico é válido, tal equação representa um sistema isolado, não havendo nem dissipação nem absorção de energia com relação a um "reservatório térmico", que seria o meio circundante, ou então uma situação de perfeito equilíbrio termodinâmico, em que há um perfeito balanceamento entre a energia absorvida e a energia dissipada.

No caso da teoria clássica do elétron, a equação simétrica é apenas uma aproximação em que os efeitos de reação radiativa não estão incluídos. No caso quântico, a situação é mais delicada, já que estados não radiantes estão ligados à própria essência da

teoria. A equação simétrica mostra que, para energias abaixo do limite crítico, os estados obtidos são fisicamente idênticos aos obtidos no caso contínuo: são estados não radiantes.

A equação retardada representa um sistema sobre o qual uma restrição de tal tipo não se impõe, e descreve um sistema que, de algum modo, perde energia para o meio. O mecanismo dessa dissipação de energia está relacionado com o hamiltoniano do sistema, mas também com alguma propriedade do meio circundante (ou do vácuo), como se pode depreender do caso da partícula livre. Neste caso, o meio seria o próprio espaço-tempo plano em que ela está imersa, como se ela sofresse os efeitos da curvatura que ela própria causa (isto é apenas uma especulação, sugerida pelo que se verifica no caso clássico).

Além disso, decorre das soluções obtidas que o tempo tem agora um sentido bem definido de fluxo, e que a composição de frequências do pacote de ondas associado à partícula depende do instante de tempo considerado. É claro que sempre se pode normalizar o estado num determinado instante e considerá-lo como sendo o estado inicial, o que é uma liberdade permitida pelo formalismo, mas, numa descrição estritamente rigorosa, a forma do espectro de frequências responde a um instante específico decorrido desde a emissão. Este é um aspecto que pode ser interessante também do ponto de vista de possíveis verificações experimentais.

Quanto à equação avançada, suas características são sempre inversas às da equação retardada.

5.3 - Equação de Klein-Gordon a Diferenças Finitas

Uma outra aplicação que se fez foi com relação ao tratamento de uma partícula escalar livre ("fóton" escalar, isto é, de *spin* zero), descrita utilizando-se a equação de Klein - Gordon a diferenças finitas para partículas sem massa.

Na forma simétrica, a equação é escrita como

$$\square^2 A_\mu = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\Psi(t+2\tau) - 2\Psi(t) + \Psi(t-2\tau)}{4c^2\tau^2} - \nabla^2\Psi(t) = 0. \quad (5.18)$$

Para tal equação, utilizando-se um ansatz conveniente, obtem-se, na representação de coordenadas, soluções do tipo

$$\Psi_k(x,t) = A \exp\left(-i \frac{t}{2\tau} \cos^{-1}(1 - 2c^2\tau^2 k^2)\right) \exp(ikx), \quad (5.19)$$

que podem ser reescritas como

$$\Psi_p(x,t) = A \exp\left(-i \frac{t}{2\tau} \cos^{-1}(1 - 2\tau^2 E^2/\hbar^2)\right) \exp(ipx/\hbar), \quad (5.20)$$

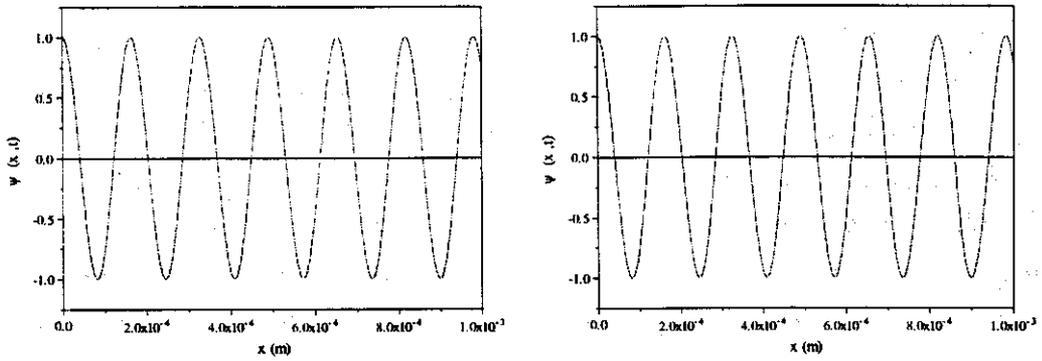
uma vez que $E^2 = p^2 c^2$ e $p = \hbar k$. Expandindo-se a exponencial temporal em potências de τ , chega-se que, em segunda ordem em τ , a solução é muito semelhante à expressão contínua:

$$\Psi_p(x,t) = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right) \quad \text{com} \quad E \approx E \left(1 + \frac{E^2 \tau^2}{6\hbar^2}\right). \quad (5.21)$$

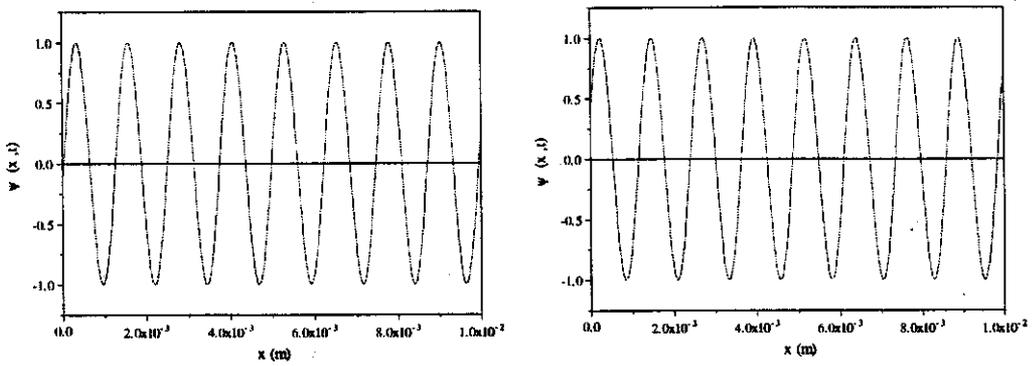
Pode-se observar uma diferença entre os valores da energia do fóton nos casos contínuo e discreto da ordem de τ^2 . A solução geral é dada por uma combinação linear das autofunções encontradas. O valor do *crônon* para a partícula, *a priori*, não é conhecido. Pode-se observar que o termo exponencial temporal das expressões acima leva a uma limitação para a energia máxima permitida, que é dada por $E \leq \hbar/\tau$. Poder-se-ia supor que o *crônon* do "fóton" fosse da ordem do intervalo fundamental das interações eletromagnéticas, aproximadamente 10^{-19} s, o que levaria a um máximo de aproximadamente 6.6 KeV, o que é um limite bastante baixo. Um *crônon* menor elevaria este limite. Se existe alguma generalidade na expressão clássica obtida para o elétron, o que se esperaria seria um *crônon* maior para o fóton.

Se ao invés de um fóton considera-se um "*neutrino*" escalar, tomando-se para valor do *crônon* $\tau \cong 10^{-13}$ s (duração típica dos decaimentos fracos), obtem-se que o limitante para a energia associada às autofunções é aproximadamente 0.007 eV. Ou seja, na composição do pacote de ondas que descreve essa partícula apareceriam apenas as autofunções cujas energias estivessem abaixo desse limite.

As autofunções obtidas para o hamiltoniano considerado são soluções do tipo "ondas planas" e sua dependência com a energia e o tempo é mostrada nas figuras (5.5) e (5.6). Para valores menores de τ o amortecimento dos modos com energia acima do limite máximo é mais rápido.



(a) $E < E_M$: $E = 0.001\text{eV}$; $t = 0$. Soluções discretas e contínuas idênticas.



(b) $E < E_M$: $E = 0.001\text{eV}$; $t = 1 \times 10^{-10}\text{ s}$. Soluções discretas e contínuas diferem em fase.

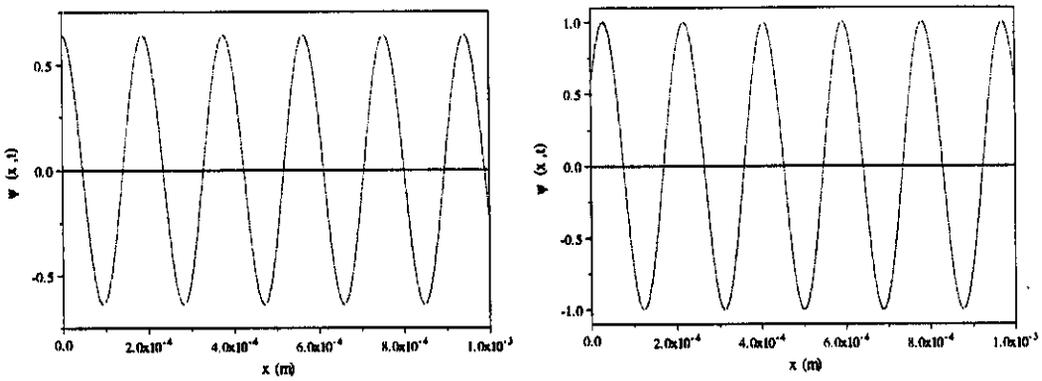
Figura 5.5 - Comportamento de uma solução da equação de Klein-Gordon discretizada para diferentes valores de energia e tempo, para o caso em que a energia é menor que a energia crítica.

Aparentemente, pode ser possível que se possa determinar um limitante para o *crônon* a partir das relações de incerteza de energia-momento, o que poderia ser feito, no caso de partículas, utilizando-se a expressão

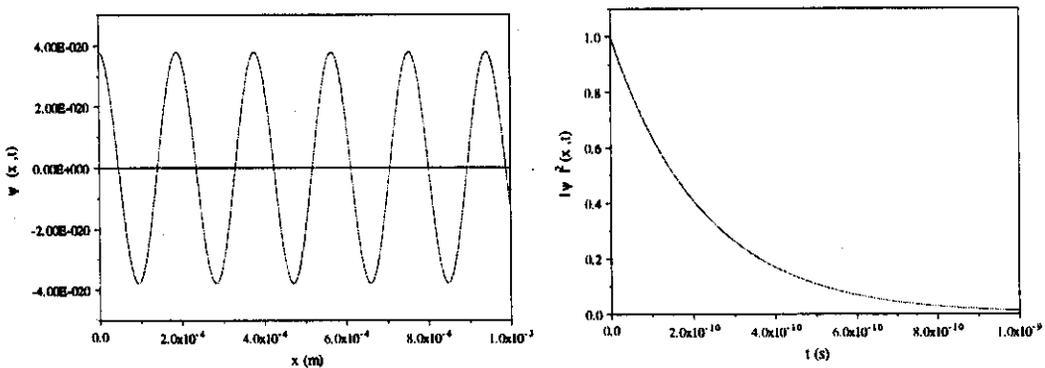
$$\tau < \frac{\hbar}{2m_0c^2} \quad (5.22)$$

o que fornece para o elétron um limite máximo de $6.4 \times 10^{-22}\text{ s}$. No entanto, pode-se observar que este valor é duas ordens de grandeza maior que o valor clássico, o que é uma diferença considerável. Quando se toma um sistema complexo, pode-se utilizar essa relação, no âmbito da descrição *coarse grained*, utilizando a equação de Liouville.

Tem-se que considerar também que condições um fóton deveria satisfazer para ser descrito por uma equação simétrica. No caso do elétron parece ser claro que não irradiar estando ligado, sendo esta uma imposição da teoria quântica, implica na utilização da equação simétrica. No caso do fóton, como no da partícula livre, mas usando uma forma retardada da equação de Klein - Gordon, também se obtém uma solução em que as frequências maiores tendem a decair mais rapidamente que as menores, havendo sempre a tendência de que as frequências mais baixas se sobressaiam. Ou seja, pode-se até mesmo pensar que, quanto mais distante uma fonte de luz, mais deslocado para comprimentos de ondas maiores será o seu espectro, mesmo que a fonte esteja parada com relação ao observador. Desse modo, pode-se obter um efeito de "red shift" como consequência da introdução do crônon. Ou seja, esta característica poderia ser utilizada na formulação de



(a) $E > E_M$: $E = E_M(1+1 \times 10^{-7})$ eV; $t = 1 \times 10^{-10}$ s. Soluções discretas e contínuas diferem em fase e amplitude.



(b) $E > E_M$: $E = E_M(1+1 \times 10^{-7})$ eV. Esquerda: $t = 1 \times 10^{-8}$ s. Direita: Amortecimento da amplitude em função do tempo.

Figura 5.6 - Comportamento de uma solução da equação de Klein-Gordon discretizada para diferentes valores de energia e tempo, para o caso em que a energia está acima da energia crítica. Note-se que neste caso o amortecimento da amplitude é muito rápido.

uma teoria do "cansaço da luz".

Finalmente, deve-se considerar que a discretização considerada para a equação de Klein-Gordon não segue exatamente o mesmo espírito que levou às equações de Schrödinger discretas. Isto porque trata-se de uma equação relativisticamente invariante sobre a qual não se procedeu a discretização do tempo próprio, mas sim da coordenada temporal pura e simplesmente.

5.4 - Evolução Temporal dos Operadores de Posição e Momento: Oscilador Harmônico

Aplicou-se também as equações discretizadas na determinação da evolução temporal dos operadores posição e momento, especificamente no caso da descrição do oscilador harmônico simples. Utilizou-se para isto as formas discretizadas das equações de Heisenberg que, para o caso simétrico, podem ser obtidas pela discretização direta da equação contínua. À partir dessa equação pôde-se determinar as equações de Heisenberg acopladas dos dois operadores:

$$\frac{\hat{p}(t+\tau) - \hat{p}(t-\tau)}{2\tau} = -m\omega^2 \hat{x}(t) \quad (5.23)$$

$$\frac{\hat{x}(t+\tau) - \hat{x}(t-\tau)}{2\tau} = \frac{1}{m} \hat{p}(t) \quad (5.24)$$

ou utilizando as equações de Heisenberg para os operadores de criação e destruição.

As equações acopladas nos fornecem duas equações a diferenças finitas de 2ª ordem, cujas soluções gerais são facilmente obtidas.

A maneira mais imediata de se determinar a evolução desses operadores é utilizando os operadores de criação e destruição. Tomando a equação de Heisenberg, lembrando que para o oscilador harmônico temos $\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$, tem-se para o caso simétrico:

$$\frac{\hat{a}(t+\tau) - \hat{a}(t-\tau)}{2\tau} = -i\omega \hat{a}(t), \quad (5.25)$$

$$\frac{\hat{a}'(t+\tau) - \hat{a}'(t-\tau)}{2\tau} = i\omega \hat{a}'(t), \quad (5.26)$$

de modo que

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) \exp\left(-i\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right), \quad (5.27)$$

$$\hat{a}'(t) = \hat{a}'(0) \exp\left(i\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right), \quad (5.28)$$

onde foi utilizado o fato de que, para $t = 0$, as representações de Heisenberg e Schrödinger são equivalentes (portanto $\hat{a}(t=0) = \hat{a} = \hat{a}(0)$ e $\hat{a}'(t=0) = \hat{a}' = \hat{a}'(0)$, sendo \hat{a} e \hat{a}' independentes do tempo). Para obter essas expressões foi considerado que, por se estar tratando de casos não-relativísticos, não há criação nem destruição de antipartículas, de modo que se pode impor restrições sobre as frequências, no termo de fase dos operadores. Para os operadores de criação, por exemplo, são descartados os termos de frequência negativa, associados a antipartículas.

Pode-se observar que o operador Número, assim como o hamiltoniano, não se modificam:

$$\hat{N} = \hat{a}'(t)\hat{a}(t) = \hat{a}'(0)\hat{a}(0), \quad (5.29)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}'(0)\hat{a}(0) + \frac{1}{2}\right). \quad (5.30)$$

Assim, partindo desses operadores, obtém-se que para o caso simétrico

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) \cos\left[\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right] + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \text{sen}\left[\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right] \quad (5.31)$$

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) \cos\left[\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right] - m\omega \hat{x}(0) \text{sen}\left[\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau)\right] \quad (5.32)$$

que só se diferencia do caso contínuo pelo fato da frequência ω ser agora substituída pela nova frequência $\text{sen}^{-1}(\omega\tau)/\tau$ que, para $\tau \rightarrow 0$, tende para o caso contínuo, e pelo fato de que aparece, agora, um limite superior para as frequências de oscilação possíveis dado por $\omega \leq 1/\tau$. Acima dessa frequência o movimento se torna instável, como se pode observar na figura (5.6).

A presença de um limite máximo para a frequência equivale a um limite máximo para a energia dos autovalores dada por $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \leq \hbar/\tau$, igual ao limite obtido utilizando-se o formalismo de Schrödinger. Uma vez que

$$\frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1}(\omega\tau) \equiv \omega + \frac{1}{3!}\omega^3\tau^2 + \mathcal{O}(\tau^4) \quad , \quad (5.33)$$

a diferença que se espera no comportamento do oscilador com relação à solução para o caso contínuo é muito pequena. Tomando como exemplo a frequência vibracional da molécula de hidrogênio (H_2), tem-se ω da ordem de 10^{14} Hz, enquanto que o termo de ordem τ^2 é menor que 10^{-3} Hz (se for válida a analogia com o caso clássico, o *crônon* deve

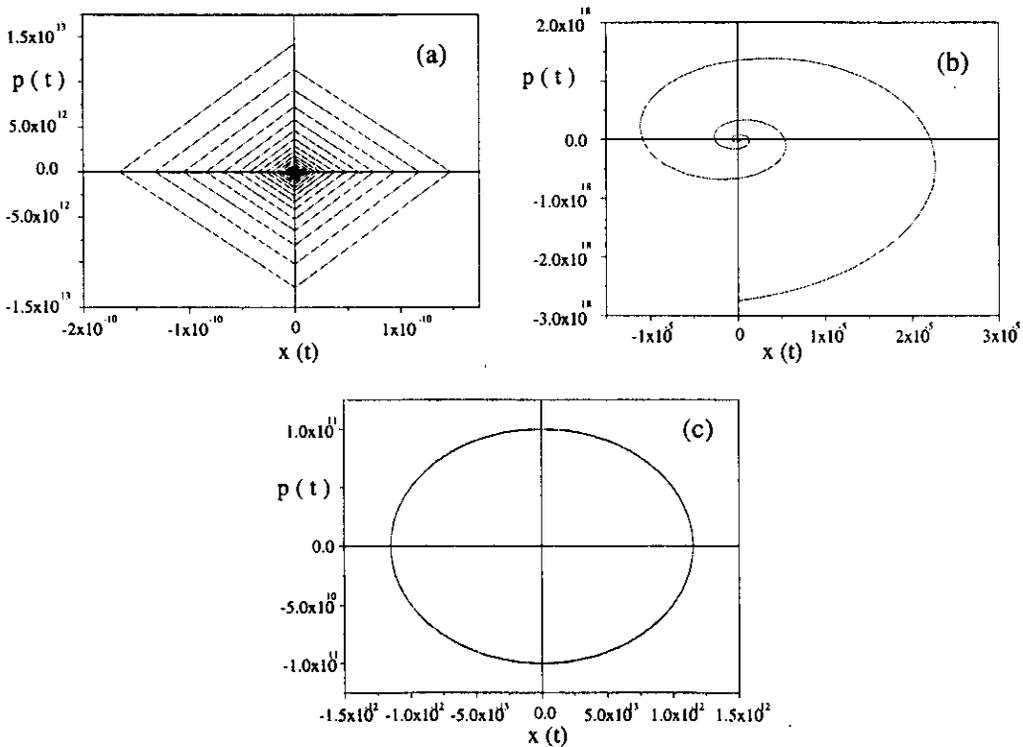


Figura 5.6 - Espaço de fases do oscilador harmônico quando $\omega > 1/\tau$: no caso discreto para intervalos de tempo múltiplos de τ (a), ou seja, tomando-se o tempo como intrinsecamente discreto — no gráfico, portanto, apenas os pontos de contacto entre as linhas tem significado físico —, e para tempo contínuo (b). No caso contínuo não se espera qualquer modificação (c).

ser menor para sistemas mais massivos). Em termos dos valores médios, tem-se para o operador de posição:

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = \langle \hat{x} \rangle_{\text{cont}}(t) + \frac{\omega^2 \tau^2}{3! m} t \langle \hat{p} \rangle(t) , \quad (5.34)$$

em que se espera que o termo de ordem τ^2 seja muito menor que o valor médio para o caso contínuo. Aqui, naturalmente, os valores médios são determinados tomando-se para o sistema um estado dado por uma superposição de estados estacionários. Para os estados estacionários $|\mu_n\rangle$, os valores médios de \hat{x} e \hat{p} se anulam.

Para o caso **retardado**, também aparecem diferenças com relação ao resultado contínuo. A solução neste caso é mais trabalhosa e pode ser obtida utilizando-se os operadores de evolução temporal para a equação de Heisenberg (apêndice A). Como esperado, surgem termos de decaimento nas expressões, sendo os operadores de criação e destruição obtidos para esse caso dados por

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) [1 + i\omega\tau + \tau^2\omega^2\xi]^{-i/t} \approx \hat{a}(0) \exp(-i\omega t) \exp[-(\xi + \frac{1}{2})\omega^2\tau t] , \quad (5.35)$$

$$\hat{a}'(t) = \hat{a}'(0) [1 - i\omega\tau + \tau^2\omega^2\xi]^{-i/t} \approx \hat{a}'(0) \exp(i\omega t) \exp[-(\xi + \frac{1}{2})\omega^2\tau t] , \quad (5.36)$$

sendo ξ um fator real positivo, onde continua a ser válida a relação $(\hat{a}')^t = \hat{a}$ mas o operador Número e, conseqüentemente, o hamiltoniano não são mais constantes no tempo:

$$\hat{N}(t) = \hat{a}'(0) \hat{a}(0) \left[(1 + \omega^2\tau^2\xi)^2 + \omega^2\tau^2 \right]^{-i/t} = \hat{N}(0) \exp[-2(\xi + \frac{1}{2})\omega^2\tau t] \quad (5.37)$$

$$\hat{H}(t) = \hbar\omega \left[\hat{a}'(0) \hat{a}(0) \left[(1 + \omega^2\tau^2\xi)^2 + \omega^2\tau^2 \right]^{-i/t} + \frac{1}{2} \right] \quad (5.38)$$

Se forem considerados termos até segunda ordem em τ , tem-se que a frequência de oscilação também decresce com o tempo. Esses resultados são consistentes com o fato do sistema estar emitindo radiação, com a conseqüente diminuição da energia total do mesmo, mas é interessante notar que a energia dos quanta associados aos operadores de criação e destruição não seja constante, ainda que a taxa de variação seja muito pequena. Do mesmo modo, quando se calcula os operadores de posição e momento, obtem-se um fator de amortecimento. Na figura (5.7a) mostra-se o estranho fator de amortecimento associado ao operador número. Pode-se verificar que esse amortecimento ocorre dentro de uma certa

Levando-se em conta termos de ordem superior em τ , pode-se observar uma pequena variação na frequência de oscilação, como se viu no caso simétrico.

Foram feitos vários cálculos com relação ao operador harmônico simples, e mesmo de alguns casos em que alguma perturbação é incluída. A introdução de perturbações independentes do tempo não acarreta variações adicionais relativas à discretização temporal, mas tão somente aquelas que se verificam mesmo no caso contínuo. Pode-se observar que os resultados obtidos são concordantes com aqueles obtidos utilizando-se o formalismo de Schrödinger.

5.5 - O Átomo de Hidrogênio

O átomo de hidrogênio é basicamente um sistema de duas partículas atraindo-se mutuamente por uma força coulombiana, portanto inversamente proporcional ao quadrado da distância entre elas. O hamiltoniano básico é dado por

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{R} \quad (5.41)$$

composto pela energia cinética do átomo no referencial do centro de massa e pelo potencial coulombiano eletrostático (μ é a massa reduzida do átomo). Uma descrição mais completa é obtida adicionando-se ao hamiltoniano termos de correção (estrutura fina) incluindo efeitos relativísticos como a variação da massa do elétron com a velocidade e o acoplamento do momento magnético intrínseco do elétron com o campo magnético devido à sua órbita (acoplamento spin-órbita). Além disso, tem-se também as correções hiperfinas que aparecem devido à interação do elétron com o momento magnético intrínseco do próton, e o "Lamb shift" que aparece da interação do elétron com as flutuações do campo eletromagnético quantizado. Tem-se então um hamiltoniano que pode ser escrito como (Cohen-Tannoudji, 1977)

$$\hat{H}_1 = m_e c^2 + \hat{H}_0 - \frac{\hat{\mathbf{P}}^4}{8m_e^3 c^2} + \frac{e^2}{m_e^2 c^2 R^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{H}_{\text{hf}} + \hat{H}_{\text{Lamb}} \quad (5.42)$$

A introdução do momento magnético do núcleo através do termo de correção hiperfina faz com que o momento angular total seja agora $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{I}}$.

Esse hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, de modo que, se tomamos a equação de Schrödinger simétrica temos

$$\frac{i\hbar}{2\tau} [\Psi(\mathbf{x}, t + \tau) - \Psi(\mathbf{x}, t - \tau)] = \hat{\mathbf{H}}_1 \Psi(\mathbf{x}, t) . \quad (5.43)$$

Sendo o hamiltoniano independente do tempo e usando o método de separação de variáveis, temos as equações desacopladas

$$\hat{\mathbf{H}}_1 \Phi(\mathbf{x}) = E \Phi(\mathbf{x}) \quad (5.44)$$

$$\frac{i\hbar}{2\tau} [\mathbf{T}(t + \tau) - \mathbf{T}(t - \tau)] = E \mathbf{T}(t) \quad (5.45)$$

de onde a solução geral

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}) \exp \left[-i \frac{t}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E}{\hbar} \right) \right] . \quad (5.46)$$

A diferença com relação ao caso contínuo se manifesta apenas nos aspectos que envolvem a evolução temporal dos estados. Como o hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, os seus autovalores são exatamente os mesmos que se obtêm no caso contínuo (Cohen-Tannoudji, 1977)

$$E_{n,j} \approx m_e c^2 - \frac{1}{2n^2} m_e c^2 \alpha^2 - \frac{m_e c^2}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \alpha^4 + E_{\text{hf}} + E_{\text{Lamb}} . \quad (5.47)$$

Uma situação em que a diferença entre os dois casos deve se manifestar é quando se consideram as probabilidades de transição entre os autoestados para um átomo submetido a um potencial dependente do tempo. No caso discreto, pode-se utilizar o método do hamiltoniano equivalente para obter a probabilidade de transição entre os autoestados. Como assinalamos na seção (3.5), o problema é tratado utilizando-se os métodos aproximativos convencionais para perturbações dependentes do tempo.

Considerando-se, por exemplo, a interação do átomo com um campo eletromagnético descrito pelo potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$, tem-se para o limite de baixa intensidade, no gauge de Coulomb, o hamiltoniano

$$\hat{\mathbf{H}}(t) = \hat{\mathbf{H}}_1 - \hat{\mathbf{V}}(t) = \hat{\mathbf{H}}_1 - \frac{e}{m_e c} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{R}}, t) \cdot \hat{\mathbf{P}} , \quad (5.48)$$

em que o termo do potencial é tomado como sendo a perturbação. Se consideramos que o potencial descreve o campo monocromático de uma onda plana, temos que

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = A_0 \hat{\mathbf{e}} \left[\exp(i\omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}/c - i\omega t) + \exp(-i\omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}/c + i\omega t) \right] , \quad (5.49)$$

em que $\hat{\mathbf{e}}$ é a polarização linear do campo e $\hat{\mathbf{n}}$ é a direção de propagação. O termo em $(-i\omega t)$ responde pela absorção de um quantum $\hbar\omega$ de radiação e o termo em $(+i\omega t)$ pela emissão estimulada. Vamos considerar que o sistema se encontre inicialmente em um autoestado $|\Phi_i\rangle$ do hamiltoniano independente do tempo. Tomando-se apenas a perturbação de primeira ordem em $\hat{\mathbf{V}}(t)$, obtemos que

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \exp(i\omega_n t') V_{ni}(t') dt' , \quad (5.50)$$

onde ω_n é, no caso discreto, dado por

$$\omega_n = \frac{1}{\tau} \left[\text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_n}{\hbar} \right) - \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_i}{\hbar} \right) \right] . \quad (5.51)$$

Trabalhando com o termo de absorção, temos que

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{i e A_0}{m_e c \hbar} \langle \Phi_n | e^{i\omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}/c} (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_i \rangle \int_0^t \exp[i(\omega_n - \omega)t'] dt' . \quad (5.52)$$

Assim, a probabilidade de transição de um estado inicial $|\Phi_i\rangle$ para um estado final $|\Phi_f\rangle$ será dada por

$$P_{if}(t) = |c_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{e^2 |A_0|^2}{m_e^2 c^2 \hbar^2} \left| \langle \Phi_f | e^{i\omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}/c} (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_i \rangle \right|^2 \left| \int_0^t \exp[i(\omega_f - \omega)t'] dt' \right|^2 , \quad (5.53)$$

ou

$$P_{if}(t) = \frac{4 e^2 |A_0|^2}{m_e^2 c^2 \hbar^2} \left| \langle \Phi_f | e^{i\omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}/c} (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}) | \Phi_i \rangle \right|^2 \frac{\text{sen}^2[(\omega_f - \omega)t/2]}{(\omega_f - \omega)^2} , \quad (5.54)$$

em que a determinação dos elementos de matriz do termo espacial, utilizando-se a aproximação de dipolo elétrico, fornece as regras de seleção para as transições. O que

podemos observar nessa expressão é a presença de uma *ressonância* indicando uma maior probabilidade de ocorrência da transição quando

$$\omega = \omega_{\text{fi}} = \frac{1}{\tau} \left[\text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_f}{\hbar} \right) - \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E_i}{\hbar} \right) \right]. \quad (5.55)$$

Essa expressão é formalmente diferente daquela que se obtém para o caso contínuo. Quando a expandimos em termos de τ , obtemos que

$$\omega \approx \frac{E_f - E_i}{\hbar} + \frac{1}{6} \frac{E_f^3 - E_i^3}{\hbar^3} \tau^2, \quad (5.56)$$

em que o primeiro termo fornece as frequências de Bohr do caso contínuo e o segundo o desvio das frequências devido à introdução da discretização temporal:

$$\Delta\omega_{\text{fi}} = \frac{1}{6} \frac{E_f^3 - E_i^3}{\hbar^3} \tau^2. \quad (5.57)$$

Levando em conta o valor clássico do crônon do elétron, $\tau \approx 6.26 \times 10^{-24}$ s, pode-se avaliar o desvio de frequências devido à discretização do tempo. Temos então que

$$\Delta\omega_{\text{fi}} \approx 2.289 \times 10^{-2} (E_f^3 - E_i^3) \quad (5.58)$$

Se consideramos, por exemplo, as transições correspondentes às primeiras linhas das séries de Lyman e Balmer, ou seja, dos estados não perturbados $n = n_i \rightarrow n = n_f$, temos

n_i	n_f	ΔE (eV)	ν (Hz)	$\Delta\nu_d$ (Hz)
1	2	10.2	2.465×10^{15}	~ 10
1	3	12.1	2.922×10^{14}	~ 10
1	4	12.75	3.082×10^{14}	~ 10
2	3	1.89	4.566×10^{14}	< 1

em que ΔE é a diferença de energia entre os estados, ν é a frequência do fóton emitido na transição e $\Delta\nu_d$ é o desvio de frequência devido à discretização. O desvio é sempre muito pequeno. Devemos observar que as correções hiperfinas e devidas ao "Lamb shift" são da ordem de gigahertz. No caso da transição $n = 1 \rightarrow n = 2$, por exemplo, a correção devida ao "Lamb shift" é de aproximadamente 1.06 GHz.

Desvios maiores devido à discretização ocorrem para átomos monoelétrônicos com números atômicos maiores. Para a primeira transição, o desvio é de aproximadamente 90 Hz para o ^2He , 1.1 kHz para o ^3Li e 420 kHz para o ^6C . Mesmo assim, o desvio que se obtém ainda é bem menor que o devido ao deslocamento de Lamb.

Também para o caso de átomos muônicos isto se verifica. Para um átomo muônico tendo como núcleo um próton, utilizando-se para o crônon um valor derivado da expressão clássica para o elétron ($\tau_\mu = 3.03 \times 10^{-26}$ s), temos um desvio da ordem de 1.4 kHz para a transição $n = 1 \rightarrow n = 2$, em que a frequência da radiação emitida é de aproximadamente 4.58×10^{17} Hz.

Para a equação **retardada**, a diferença com relação ao caso simétrico ocorre na evolução temporal dos estados. O procedimento é idêntico ao utilizado acima com a diferença de que agora a solução geral é dada por

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}) \left[1 + i \frac{\tau E}{\hbar} \right]^{-i/\tau}, \quad (5.59)$$

de modo que as transições agora ocorrem em frequências dadas por

$$\omega = \omega_{fi} = \frac{-i\hbar}{\tau} \left[\ln \left(1 + \frac{i\tau E_f}{\hbar} \right) - \ln \left(1 + \frac{i\tau E_i}{\hbar} \right) \right]. \quad (5.60)$$

Como decorre das características da equação retardada, esta é uma frequência complexa em que a parte real pode ser aproximada por

$$\text{Re}(\omega_{fi}) \approx \frac{E_f - E_i}{\hbar} + \frac{1}{3} \frac{E_i^3 - E_f^3}{\hbar^3} \tau^2, \quad (5.61)$$

em que o primeiro termo é a expressão para o caso contínuo. Para o caso específico da transição $n = 1 \rightarrow n = 2$, obtemos que o desvio devido à discretização é de aproximadamente 18 Hz.

A componente imaginária, por sua vez, é aproximada por

$$\text{Im}(\omega_{fi}) \approx -\frac{i}{2} \frac{E_f^2 - E_i^2}{\hbar^2} \tau. \quad (5.62)$$

Na expressão da probabilidade de transição temos o módulo de uma integral envolvendo a componente temporal da solução geral. Para o caso retardado, o

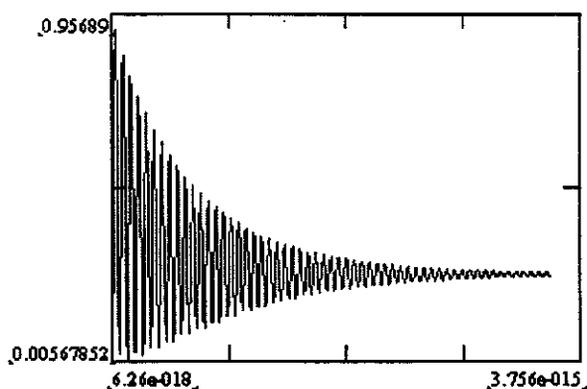


Figura 5.8 - Comportamento da componente temporal da probabilidade de transição.

amortecimento característico manifesta-se fazendo com que, com o tempo, a probabilidade tenda a um determinado valor fixo não-nulo. Esse comportamento pode ser observado na figura (5.8), que mostra a variação do termo temporal entre um instante inicial $t_0 = 0$ e algumas centenas de crônons após. Para podermos observar a envoltória do "decaimento" tivemos que utilizar um valor maior para o crônon, da ordem de 10^{-18} s. Quando o crônon é da ordem do que temos considerado para o elétron, o decaimento é mais lento.

Como pudemos observar, o efeito da discretização temporal sobre o espectro de emissão do hidrogênio é extremamente pequeno. Utilizando-se as expressões obtidas pode-se estimar que, para que o efeito da discretização seja da ordem, por exemplo, do deslocamento de Lamb, o crônon associado ao elétron deveria ser da ordem de 10^{-18} s, muito acima do valor "clássico" (mas próximo do valor típico das interações eletromagnéticas).

Concluindo, mesmo que a influência da discretização sobre os valores energéticos da radiação fotônica seja muito pequena, pode-se esperar que outros efeitos — como aquele mostrado na fig. 5.8 — possam ter conseqüências reveláveis experimentalmente no futuro.

5.6 - Considerações Finais

Encerrando este capítulo, seria interessante salientar que, quando se tem hamiltonianos independentes do tempo, os resultados que se obtêm no formalismo discreto utilizando-se a equação simétrica são bastante parecidos com o que se obtêm no caso contínuo. Para tais hamiltonianos, o efeito da discretização se manifesta basicamente nas frequências associadas ao termo evolutivo da função de onda. Como já se observou, a diferença na dependência temporal é do tipo

$$\exp[-iE_n(t-t_0)/\hbar] \quad \rightarrow \quad \exp\left[-i \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{\tau E_n}{\hbar}\right)(t-t_0)/\tau\right]. \quad (5.63)$$

A discretização acarreta um desvio na fase do autoestado que pode ser bastante grande. As autofunções individualmente descrevem estados estacionários, de modo que a evolução temporal aparece quando se tem uma combinação linear dessas funções, descrevendo deste modo o estado do sistema. Esse estado evolui no tempo segundo

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) \exp\left[-i \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{\tau E_n}{\hbar}\right)(t-t_0)/\tau\right] |\varphi_n\rangle, \quad (5.64)$$

levando-se em conta que $\mathbf{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ é a equação de autovalores associada ao hamiltoniano.

Quando se estudam os estados estacionários de uma partícula em potenciais unidimensionais quadrados, por exemplo, obtêm-se os mesmos coeficientes de reflexão e transmissão e o mesmo efeito túnel, uma vez que essas grandezas são obtidas à partir de estados estacionários. Quando se considera uma superposição linear desses autoestados, criando-se um pacote de ondas, o termo temporal tem que ser considerado, o que resulta em diferenças com relação ao caso contínuo.

Avaliações diversas efetuadas tentando encontrar diferenças significativas mensuráveis entre os dois formalismos tem sido efetuadas (Wolf, 1987a, 1987b, 1989) mas os resultados não são muito animadores.

6 - Os Operadores Densidade e a Hipótese "Coarse Graining"

6.1 - A Hipótese "Coarse Graining"

Inicialmente, é conveniente fazer uma pequena revisão de alguns tópicos de física estatística, visando compreender as motivações para a descrição *coarse grained* de um sistema físico. A hipótese *coarse grained* será em seguida utilizada para se obter uma forma discretizada da equação de Liouville, que representa a lei de evolução dos operadores de densidade na mecânica quântica convencional.

Um aspecto importante que deve ser salientado é o fato de que a introdução de um intervalo fundamental de tempo é perfeitamente compatível com uma descrição *coarse grained*. A premissa básica de tal descrição, na física estatística, é a impossibilidade de se determinar precisamente a posição e o momento de cada partícula que compõe o sistema, num determinado instante. Tome-se, por simplicidade, um sistema de N partículas similares (e pontuais), cada uma delas com três graus de liberdade descritos pelas coordenadas (q_1, q_2, q_3) . Pode-se associar a estas partículas um espaço de fases individual (espaço μ) definido pelas seis coordenadas $(q_1, q_2, q_3; p_1, p_2, p_3)$ de modo que o sistema como um todo será representado por um aglomerado de N pontos nesse espaço.

Uma vez que a observação macroscópica é incapaz de determinar precisamente as seis coordenadas de cada partícula, considera-se que é possível saber apenas se cada partícula tem suas coordenadas dentro de intervalos $(q_i, q_i + dq_i)$ e $(p_i, p_i + dp_i)$, com $i = 1, 2, 3$. Para se descrever o estado do sistema no espaço μ , o que se faz é dividi-lo em celas correspondentes às imprecisões macroscópicas $\delta q_i, \delta p_i$, cada uma delas ocupando no espaço μ um volume

$$w_i = \delta q_1 \delta q_2 \delta q_3 \delta p_1 \delta p_2 \delta p_3 . \quad (6.1)$$

Essas celas devem ser suficientemente pequenas com relação às dimensões macroscópicas mensuráveis, mas grandes o suficiente de modo a conter um grande número de partículas.

Quando se toma o sistema como um todo, tem-se que o seu estado macroscópico será dado por um conjunto de números $\{n_i\}$ correspondentes ao número de partículas em cada cela. Agora, se se considera o espaço de fases Γ $6N$ -dimensional em que cada estado assumido pelo sistema é representado por um ponto, a cada configuração $\{n_i\}$ deve corresponder em Γ uma cela com volume

$$(\delta V)_\Gamma = \prod_{i=1}^N (w_i)^{n_i}. \quad (6.2)$$

Levando-se em conta que a permutação das partículas nas celas do espaço Γ não mudam o estado macroscópico do sistema, então a cada conjunto de números $\{n_i\}$ corresponderá no espaço Γ um volume Ω_n (Jancel, 1969, o denomina *estrela*) com medida

$$W(\Omega_n) = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \prod_i (w_i)^{n_i} \quad \left(\sum_i n_i = N \right), \quad (6.3)$$

de tal modo que, agora, o estado do sistema é determinado pela estrela ocupada pelo ponto representativo do sistema no espaço Γ . Assim, macroscopicamente, só é possível distinguir em qual estrela está localizado o sistema, de modo que a qualquer ponto nesta estrela corresponde um mesmo estado macroscópico.

Quando se considera um sistema cujo estado evolui no tempo, um sistema que não está em equilíbrio, então as mudanças no seu estado macroscópico só se verificarão quando o ponto representativo do sistema mudar de estrela, sendo o tempo de passagem pequeno, mas finito. Durante esse intervalo de tempo, o estado macroscópico do sistema não muda, enquanto que o mesmo não se verifica com o seu estado microscópico.

Desse modo, em se considerando a descrição acima, do ponto de vista da física estatística a inclusão de um intervalo fundamental de tempo de modo a discretizar as equações aparece de maneira bastante natural, o que é tanto mais significativo na medida em que as previsões da mecânica quântica são obtidas através de valores médios de observáveis. As relações de incerteza são, na interpretação corrente (Copenhague) da mecânica quântica, independentes da argumentação acima e, se se considera que representam um aspecto fundamental do mundo microscópico (e é o que se postula na

interpretação de Copenhagen), então o conceito de crônon, como um intervalo de tempo fundamental, deve estar a elas relacionado.

6.2 - A Equação de Liouville Discreta e a Relação de Incerteza Tempo-Energia

Uma tentativa de estabelecer uma relação entre o crônon e a relação de incerteza de tempo-energia foi realizada por Bonifacio (1983), estendendo o *coarse graining* à variável tempo. Na teoria quântica convencional, o operador densidade obedece à equação de Liouville-von Neumann

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -i \mathcal{L} \hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\rho}] , \quad (6.4)$$

sendo \mathcal{L} o operador de Liouville. É imediato observar que, se \mathbf{H} for independente do tempo, a solução é dada por

$$\hat{\rho}(T) = \exp\left(-i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} T\right) \hat{\rho}_0 \exp\left(i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} T\right) , \quad (6.5)$$

que fornece a evolução temporal do operador densidade à partir de um instante inicial t_0 , sendo $T = t - t_0$ o tempo de evolução.

Quando se constrói uma descrição *coarse grained* da evolução temporal introduzindo uma granulação τ de modo tal que o tempo de evolução seja agora dado por $T = k \tau$ ($k = 1, 2, \dots, \infty$), tem-se que o operador densidade ρ resultante não mais satisfaz à equação (6.4), mas a uma forma discretizada da mesma dada por

$$\frac{\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t - \tau)}{\tau} = -i \mathcal{L} \hat{\rho}(t) , \quad (6.6)$$

com $t = k \tau$, a qual se reduz à equação de Liouville-von Neumann quando $\tau \rightarrow 0$, obtêm-se, na representação de energia $\{|n\rangle\}$ (satisfeitas certas condições que garantam ser $\rho(k)$ um operador densidade), que (6.8) prescreve para ρ uma evolução que preserva o traço,

obedece a lei dos semigrupos e, o que é mais interessante, é uma evolução irreversível em direção a uma forma estacionária diagonal para ρ .

Ou seja, chega-se a uma *redução de estados*, no sentido em que aparece no problema da medida na mecânica quântica, mas que não é instantânea e depende do valor característico τ :

$$\rho(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \sum_n \rho_{nn}(0) |n\rangle\langle n| . \quad (6.7)$$

É importante observar que os termos não diagonais tendem exponencialmente a zero segundo um fator que, em primeira aproximação, é dado por

$$\exp\left| \frac{-\omega_{nm}^2 \tau t}{2} \right| . \quad (6.8)$$

Assim, a redução à forma diagonal se verifica desde que τ seja finito, não importando o quão pequeno, e desde que não se tenha $\omega_{nm}\tau \ll 1$ para todo n, m , sendo $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ as frequências de transição entre os diferentes autoestados de energia. Essa condição, $\omega_{nm}\tau \ll 1$, é sempre obedecida para sistemas com espectro não ligado.

Estes resultados, juntamente com uma análise da equação de Heisenberg a diferenças finitas definida para valores médios de observáveis

$$\bar{A}(t) = \text{Tr}(\rho(t)A) \quad (6.9)$$

na descrição *coarse grained*, sugerem uma interpretação de τ em termos da relação de incerteza $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ em que τ é um intervalo de tempo característico satisfazendo à desigualdade

$$\tau \geq \tau_E = \frac{\hbar}{2 \Delta E} \quad \text{com} \quad \Delta E = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} , \quad (6.10)$$

de modo que o significado matemático da relação de incerteza de tempo-energia é o de fixar um limite mínimo para o intervalo de tempo no qual a evolução temporal pode ser descrita. Assim, "a irreversibilidade *coarse grained* seria uma consequência necessária de uma impossibilidade intrínseca de se dar uma descrição instantânea da evolução temporal, em função da relação de incerteza de tempo-energia" (Bonifacio, 1983).

O fato do operador densidade, na representação de energia, tender a uma forma diagonal, faz com que seja interessante aplica-lo à Teoria Quântica da Medida. Pode-se observar também que, mesmo sem se assumir o *coarse graining* do tempo, sem usar o formalismo estatístico empregado por Bonifacio, a redução à forma diagonal do operador densidade decorre diretamente da equação de Liouville a diferenças finitas e de algumas condições assintóticas acerca do comportamento da solução, desde que seja obedecida a relação $\omega_{nm}\tau \ll 1$ (Caldirola e Bonifacio, 1983).

O ponto crucial, do qual decorrem tanto o decaimento dos termos não-diagonais do operador densidade quanto a própria equação de Liouville discretizada, é o fato do operador de evolução temporal obtido da descrição *coarse grained* **não ser um operador unitário**. Deste modo, o operador

$$\hat{V}(t = k\tau, t = 0) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\tau\hat{\mathcal{L}}}{\hbar}\right)^k}, \quad (6.11)$$

como todo operador não-unitário, não preserva as probabilidades associadas a cada um dos autoestados de energia que compõem a expansão do estado inicial nessa base de autoestados. Pode-se desde já observar que o aparecimento de operadores de evolução temporal não-unitários não é decorrência exclusiva da formalização *coarse grained*, visto decorrerem também das equações de Schrödinger discretizadas.

Tendo em vista as características da evolução dos operadores de densidade, procurou-se aplicar os resultados obtidos ao problema da medida na mecânica quântica.

6.3 - Aplicação do Formalismo Discreto ao Problema da Medida na Mecânica Quântica

Utilizando uma formalização bastante geral, pode-se fazer uma descrição do processo de medida, aproveitando o que se conhece acerca da evolução do operador densidade de estados, determinada pela equação de Liouville discretizada. Para tal, propõe-se adotar uma descrição similar àquela utilizada por Ballentine (1986).

Quando se fala em medição, tem-se sempre em mente que, no processo, estão envolvidos um objeto \mathcal{O} , do qual quer-se medir alguma variável dinâmica R , e um aparelho A , que é utilizado para efetuar tal medida. Suponha-se que R é um operador associado ao observável R , com uma equação de autovalores $R|r\rangle = r|r\rangle$ que define uma base completa de autovetores. Assim, tomado isoladamente, qualquer estado do objeto pode ser expandido em termos dos autoestados de R :

$$|\Psi\rangle_0 = \sum_r c_r |r\rangle_0 . \quad (6.12)$$

Quanto ao aparelho, é conveniente restringir o contato com ele à possibilidade que se tem de conhecer os autovalores de um observável A , do qual um dos autovalores representa o valor indicado no mostrador do aparelho. Além disso, sejam os seus muitos números quânticos internos rotulados por um índice m . Esses números quânticos internos servem para que se especifique uma base completa de autovetores, associada ao aparelho. Assim, tem-se que

$$\hat{A}|\alpha, m\rangle_A = \alpha|\alpha, m\rangle_A . \quad (6.13)$$

Suponha-se agora que o aparelho seja preparado de tal modo que o seu estado inicial seja $|0, m\rangle_A$, isto é, no estado inicial o mostrador do aparelho indica o valor zero. A interação entre os dois sistemas é introduzida utilizando-se o operador de evolução temporal, sendo tal que haja uma correlação entre o valor de r e a medida α_r .

Para tratar do processo de medição propriamente dito, considera-se então uma situação bem geral. Primeiramente, considere-se o seguinte estado puro do sistema *objeto + aparelho* ($\mathcal{O} + A$):

$$|\Psi_m^i\rangle = |\Psi\rangle_0 |0, m\rangle_A . \quad (6.14)$$

A evolução deste estado, na descrição contínua, utilizando-se o operador de evolução, será dada por

$$\hat{U}(t, t_0) |\Psi\rangle_0 |0, m\rangle_A = \sum_r c_r |\alpha_r; r, m\rangle = |\Psi_m^f\rangle \quad (6.15)$$

que é uma superposição coerente de autovetores macroscopicamente distintos (cada um deles corresponde a uma medida α_r diferente). A grande dificuldade, para a interpretação de Copenhague da mecânica quântica, se deve ao fato desta considerar o estado $|\Psi_m^i\rangle$ como

associado a um único sistema: um estado puro fornece uma descrição completa e exaustiva de um sistema individual. Assim, a superposição coerente acima representa um único sistema, de modo que, ao final da interação que determina a medição, o mostrador do aparelho não deveria mostrar um resultado bem definido, já que o que se tem da expressão (6.15) é o sistema em uma superposição de seus estados possíveis.

Entretanto, sabe-se que, na realidade, o aparelho sempre mostra um único valor como medida. É este descompasso entre a observação e a descrição provida pelo formalismo, quando interpretado à maneira de Copenhagen, que resulta na necessidade de se introduzir o postulado da redução do estado vetor

$$|\Psi_m^f\rangle \quad \rightarrow \quad |\alpha_{r_0}; r_0, m\rangle$$

onde r_0 é o valor observado no mostrador do aparelho.

Esse fato tem sido considerado por muitos como sendo um problema para a interpretação usual da mecânica quântica (Wigner, 1963; Ballentine, 1970). As tentativas de se solucionar o problema dentro do contexto da interpretação foram muitas, indo da famosa *Many-Worlds Interpretation* proposta por Everett e Wheeler (1957) até a teoria da medida de Daneri, Loinger e Prosperi (DLP, 1962; Rosenfeld, 1965), bastante complexa, em que a redução dos estados quânticos superpostos é descrito como um processo desencadeado pela introdução de fases aleatórias nos estados do aparelho devido à sua interação com o objeto. A formalização apresentada aqui é bastante simplificada, especialmente quando comparada a teorias do tipo DLP.

Como estado inicial no processo de medição, considere-se o estado misto para o sistema composto $\mathcal{O} + A$

$$\rho^i = \sum_m C_m |\Psi_m^i\rangle\langle\Psi_m^i| , \quad (6.16)$$

onde C_m é a probabilidade associada a cada um dos estados $|\Psi_m^i\rangle$. Essa probabilidade é, como no caso clássico, uma probabilidade de ignorância, ou seja, não é intrínseca ao sistema. No caso contínuo, o operador evolução, quando aplicado a esse operador densidade, fornece um estado final

$$\begin{aligned} \rho^f &= \hat{U} \rho^i \hat{U}^\dagger = \sum_m C_m |\Psi_m^f\rangle \langle \Psi_m^f| = \\ &= \sum_{r_1, r_2} c_{r_1}^* c_{r_2} \sum_m C_m \left\{ |\alpha_{r_1}; r_1, m\rangle \langle \alpha_{r_2}; r_2, m| \right\}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

onde a presença de termos não diagonais corresponde à superposição coerente dos autovetores correspondentes. Aqui, o postulado da redução do estado se aplica aos elementos não diagonais do operador densidade. Quando se efetua uma medida sobre o sistema, os termos não diagonais tendem instantaneamente a zero (Scully et al, 1978). Uma vez que no caso contínuo a evolução temporal do estado do sistema decorre da aplicação de um operador unitário, preservando a condição de estado puro $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, é impossível que esse colapso decorra da ação desse operador. Na forma diagonal, o operador densidade representa uma mistura incoerente de autovetores de \mathbf{A} , sendo que a indeterminação com relação ao resultado da medida é reflexo único e exclusivo da ignorância que se tem com relação ao estado inicial do sistema.

No caso discreto, em que o operador evolução temporal é dado por (6.11), estando a interação entre aparelho e objeto embutida no hamiltoniano \mathbf{H} , a situação é bastante diferente. O motivo principal dessa diferença se deve ao fato do operador evolução não ser mais um operador unitário. Para facilidade de manuseio deste operador, serão utilizados os autoestados do operador hamiltoniano na representação de energia: $\mathbf{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, sendo então os estados $|n\rangle$ estados de energia definida.

Sabe-se do formalismo dos operadores densidade que, quando o operador \mathbf{R} é diagonal na representação de energia, não aparecem os termos de interferência quando se calcula o valor esperado de um certo observável. Ou seja, o fenômeno das "oscilações quânticas" (*quantum beats*), típicas da superposição coerente dos estados $|n\rangle$, não ocorrerá.

Como o operador evolução é uma função do hamiltoniano e, portanto, comuta com o mesmo, a base de autoestados de energia é também uma base de autoestados do operador evolução. Pode-se agora utilizar um procedimento idêntico ao utilizado por Bonifacio, e considerar a evolução do sistema nessa representação.

Assim, tem-se que o operador $\hat{V}(t = k\tau, t = 0)$ leva o operador densidade ρ^i inicial a um estado final em que os termos não diagonais decaem exponencialmente com o tempo:

$$\rho_{rs}^f = \langle r|V(t = k\tau, t = 0)|s \rangle = \frac{\rho_{rs}^i}{(1 + i\omega_{rs}\tau)^{1/\tau}}, \quad (6.18)$$

onde

$$\omega_{rs} = \frac{1}{\hbar}(E_r - E_s) = \frac{1}{\hbar} \Delta E_{rs}. \quad (6.19)$$

A expressão (6.18) pode ser reescrita como

$$\rho_{rs}(t) = \rho_{rs}(0) e^{-\gamma_{rs}t} e^{-i\nu_{rs}t} \quad (6.20)$$

sendo

$$\gamma_{rs} = \frac{1}{2\tau} \ln\{1 + \omega_{rs}^2 \tau^2\} \quad (6.21)$$

$$\nu_{rs} = \frac{1}{\tau} \tan^{-1}(\omega_{rs}\tau) \quad (6.22)$$

Pode-se observar de imediato que os termos não-diagonais tenderão a zero à medida que o tempo passa, tanto mais rapidamente quanto maior for τ , que aqui é um intervalo relacionado ao sistema **objeto + aparelho** como um todo. Quando se tem em mente que, na descrição *coarse grained*, o intervalo de tempo τ decorre da impossibilidade de se distinguir entre dois estados distintos do sistema descrito, deve-se lembrar que o sistema **objeto + aparelho** não é mais um sistema puramente quântico. Ou seja, τ *pode vir a ser razoavelmente grande, o que implicaria num amortecimento extremamente rápido dos termos não-diagonais do operador densidade* (figura 6.1). O que se tem, então, é um processo tipo redução do estado do sistema, ainda que formalizado de uma maneira bastante rudimentar. Tal resultado parece bastante relevante por servir de alento para trabalhos futuros sobre esse tema tão importante e polêmico.

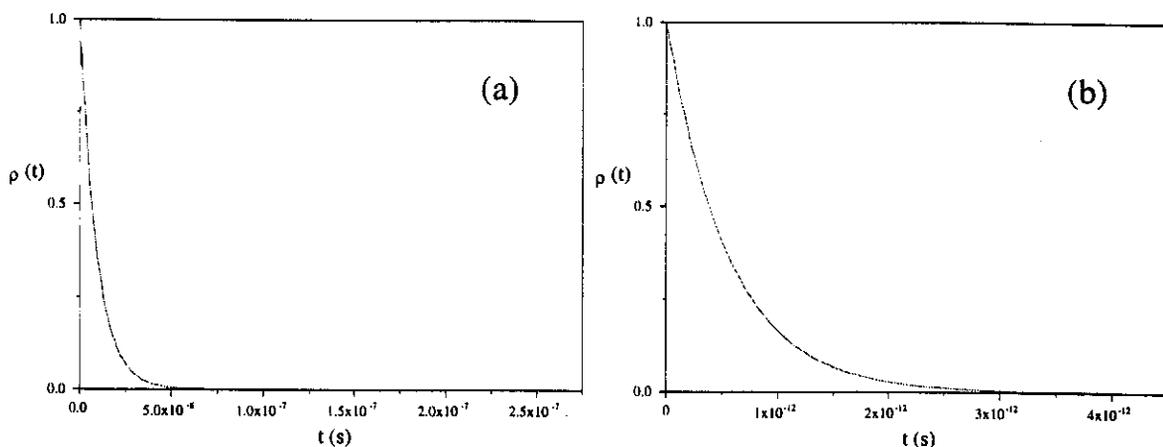


Figura 6.1 - Fator de decaimento dos termos não-diagonais do operador de densidade de estados para dois valores diferentes para τ . Para ambos os casos utilizou-se para $\Delta E = 4$ eV. (a) Amortecimento mais lento para $\tau = 6.26 \times 10^{-24}$ s; (b) $\tau = 1 \times 10^{-19}$ s.

Alguns pontos devem ser enfatizados acerca dessa breve abordagem que foi efetuada. Primeiramente, deve-se salientar que o resultado obtido **não** se verifica para o caso em que se utiliza operadores evolução obtidos diretamente da equação de Schrödinger retardada. O caráter dissipativo da equação de Schrödinger retardada faz com que a **norma** dos estados vetores decaia com o tempo, levando a um operador de evolução não unitário. Na definição do operador densidade aparece também o adjunto do operador de evolução, o que resulta no aparecimento de um termo de decaimento extra que não desaparece para os elementos não diagonais. Esse efeito, assim como a questão da compatibilidade entre o formalismo dos operadores de densidade e o de Schrödinger serão analisados mais adiante no Apêndice A. Sendo o sistema composto $\hat{\theta} + A$ um sistema complexo, ele é adequadamente descrito pela formulação *coarse grained*, de modo que a compreensão da relação entre as duas formulações seria necessária para que se tenha uma idéia mais clara dos processos envolvidos.

Não obstante ter sido uma abordagem bastante ingênua, pode-se observar o relacionamento intrínseco entre processo de medida e irreversibilidade. O operador evolução \hat{V} obedece às propriedades de um semigrupo, de modo que não é necessariamente inversível, e operadores não-inversíveis estão relacionados a processos irreversíveis. Certamente, não se pretende que todo processo irreversível seja determinado por um tal tipo de operador. No entanto, num processo de medida, em que o objeto é perdido após a detecção, tem-se um processo irreversível que poderia muito bem ser descrito por um operador como \hat{V} .

Finalmente, vale lembrar que, com relação ao problema da medida, existem controvérsias até mesmo na maneira como abordar matematicamente o problema. Neste trabalho utilizou-se uma formalização bastante simplificada, sem incluir nenhuma consideração extra além das que se tem no formalismo quântico, permitindo que se pudesse individualizar o mais claramente possível os efeitos da discretização do tempo na abordagem do problema.

6.4 - Observação Final

A introdução de um intervalo fundamental de tempo na descrição do problema da medida, portanto, possibilita uma formalização simples de um processo de "redução de um estado". Entretanto, esse comportamento só se verifica para o caso retardado. No caso simétrico, em se considerando a forma simétrica da equação de Liouville-von Neumann discretizada, o que obtemos é uma solução do tipo

$$\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0) \exp\left\{-\frac{it}{\tau} \operatorname{sen}^{-1}\left[\frac{\tau}{\hbar}(E_n - E_m)\right]\right\},$$

em que os elementos diagonais não evoluem no tempo e os não-diagonais têm um comportamento cossenoidal, cada termo com sua freqüência característica.

Isso significa que a equação simétrica não é adequada para descrever o processo de medida. Essa é uma diferença importante entre as duas descrições.

É extremamente importante ressaltar que a discretização direta da equação de Liouville-von Neumann para a evolução do operador densidade ρ leva à **mesma** equação discreta obtida aplicando-se o procedimento "*coarse grained*" a essa equação. Por este motivo, consideramos ser essa equação a equação básica para se trabalhar com sistemas complexos, o que vem ao caso quando se procura descrever um processo de medida. Deve-se lembrar que, num processo de medida, o aparelho é sempre um objeto macroscópico. Enquanto isso, a equação de Schrödinger parece referir-se a um sistema quântico simples evoluindo em "equilíbrio" (i. e., sem mudanças bruscas de estado quântico) com o meio.

7 - Conclusões

Como se pôde verificar ao longo deste trabalho, a introdução de um intervalo fundamental de tempo, tanto na teoria clássica do elétron quanto na mecânica quântica, tem várias implicações interessantes. A possibilidade de se derivar, à partir de um tratamento semiclássico do elétron, utilizando-se um modelo bastante simples para a partícula, a massa aproximada de todos os componentes massivos da família dos léptons é um fato relevante o bastante para que se dê uma maior atenção à hipótese do crônon.

O que se procurou fazer neste trabalho de tese foi tentar compreender a aplicabilidade das várias equações distintas que se obtêm ao se proceder a discretização. Ou seja, que tipo de descrição física fornecem as equações de Schrödinger simétrica, retardada e avançada. Isso pode ser feito observando-se o comportamento típico das soluções que se obtêm em cada uma das situações e, particularmente, atentando para o processo de obtenção dessas equações utilizando-se o formalismo das integrais de trajetória de Feynman. Tem-se então que a equação avançada descreve um sistema que, de algum modo, recebe energia do meio. Pode-se supor que, para evoluir de um instante a outro o sistema tenha que absorver energia do meio, o que justificaria o fato de que, utilizando-se o formalismo de Feynman tomando o sentido usual do tempo, só se obtenha a equação avançada. O propagador depende apenas do hamiltoniano, sendo independente da função de onda que descreve o estado inicial do sistema sobre o qual ele atua. Desse modo, ele descreve uma transferência de energia para o sistema. A equação retardada é obtida por uma inversão temporal, invertendo-se o sentido do propagador, ou seja, invertendo-se o sentido do fluxo de energia. O fator de amortecimento característico das soluções obtidas no caso retardado indicam um sistema perdendo energia de modo contínuo. Desse modo, tem-se que tanto a equação retardada quanto a avançada descrevem sistemas abertos (*dissipativos e absorvedores*). Finalmente, a equação simétrica descreve um sistema em equilíbrio energético com o meio. Isto significa que só é possível obter soluções estacionárias utilizando-se a equação simétrica. Quanto à natureza dessa energia, ela pode estar relacionada com a própria evolução do sistema. Pode-se argumentar que só existe evolução temporal macroscópica se existe algum fluxo de energia entre o sistema e o meio. Assim, estados descritos pela equação simétrica são basicamente estados de equilíbrio, não havendo nem dissipação nem absorção líquida de energia no sistema como um todo. Pode-

se dizer também que essa equação descreve um sistema fechado, que não troca energia com o meio exterior.

Por outro lado, se se faz um paralelo com o caso clássico, pode-se dizer que a equação simétrica deixa de ser válida quando as interações com o meio variam intensamente em intervalos de tempo da ordem do crônon. Assim, fenômenos como a colisão de partículas altamente energéticas implicariam na utilização das equações avançada e retardada em sua descrição. O decaimento da norma associada aos estados vetores descritos pela equação retardada indicaria o próprio decaimento do sistema, ou seja, descreveria um sistema saindo de seu "estado de equilíbrio" inicial. O comportamento da solução avançada, por sua vez, indicaria a transição do sistema para seu futuro estado. Essa especulação sugere uma outra interpretação, mais próxima do espírito da mecânica quântica. Pode-se considerar que o sistema seja descrito simultaneamente pelas três equações. No entanto, a mecânica quântica trabalha com médias sobre *ensembles*, o que é uma descrição de uma realidade puramente matemática. A questão é que, tomando-se como válida a hipótese ergódica, tem-se que essas médias sobre *ensembles* são equivalentes a médias sobre o tempo. Ou seja, o formalismo quântico fornece apenas valores médios. Quando os potenciais envolvidos variam lentamente quando comparados ao crônon do sistema, de modo que o tempo de interação seja longo, tem-se que a contribuição dos fatores transientes provenientes das equações retardada e avançada se contrabalanceiam. Então, na média, o sistema se comporta de acordo com as previsões da equação simétrica. Quando, pelo contrário, os potenciais variam muito fortemente em intervalos da ordem do crônon não se tem uma solução estacionária. O formalismo discreto descreveria esse evento utilizando, para o intervalo de tempo da interação, as soluções transientes, que forneceriam o estado do sistema após o término da interação. À partir de então o sistema seria novamente descrito por uma solução da equação simétrica.

A interpretação mais "quântica" das três equações é considerar que apenas a equação simétrica descreve um sistema quântico. Durante o processo de interação a teoria não fornece qualquer descrição do sistema, apenas mostrando os possíveis estados do sistema após o período transiente. A descrição da interação exigiria um dado a mais: o conhecimento do processo de interação, o que envolve um desenvolvimento teórico adicional como, por exemplo, a criação de um modelo de interação.

Ao lado do significado físico das equações discretizadas, ou seja, do tipo de descrição física nelas embutida, há também a questão da evolução temporal dos estados

quânticos. As equações de Schrödinger descrevem a evolução de uma função de onda à qual se associa uma amplitude de probabilidade. Se se faz um paralelo com a teoria clássica discreta do elétron, tem-se que essa função de onda reage à ação do hamiltoniano não instantaneamente, mas após um intervalo de tempo característico do sistema descrito. Dentro da mecânica quântica discretizada, a justificativa para a reação não imediata se deve ao fato de que um princípio fundamental de incerteza impede uma resposta arbitrariamente próxima ao instante de aplicação do hamiltoniano (Wolf, 1991). Essa incerteza poderia estar relacionada com a própria perturbação causada pelo hamiltoniano sobre o estado do sistema, manifestando-se através de uma relação de incerteza do tipo da relação de incerteza de tempo-energia de Mandelstam e Tamm (Fock, 1962). O que se tem então é uma evolução temporal em que o estado "macroscópico" do sistema salta descontinuamente de um instante a outro. Os saltos quânticos ("*quantum jumps*") portanto não aparecem apenas nos processos de medida mas são aqui um aspecto intrínseco da evolução temporal do sistema quântico. A diferença está no fato de que o salto, aqui, não tira o sistema do estado quântico em que ele se encontra mas apenas determina a evolução desse estado.

Um outro aspecto característico da descrição discreta provida pela equação simétrica é a existência de um limite superior permitido aos autovalores do hamiltoniano de sistemas ligados. Do mesmo modo, na descrição da partícula livre, observou-se a existência de um limite superior para a energia das autofunções que compõem o pacote de ondas que descreve a partícula, ainda que esse limite não implique em uma energia máxima possível para a mesma. A existência desse valor limite estabelece um espectro para os autovalores do hamiltoniano dentro do qual as condições de normalização são mantidas. Uma vez ultrapassado esse limite, há uma transição para estados excitados internos do sistema. Isso permitiu, por exemplo, que se obtivesse o múon como um estado excitado do elétron.

Finalmente, seria interessante destacar o caráter não linear da relação entre a energia e a frequência de oscilação de um estado, e o fato da teoria ser intrinsecamente não-local, como se pode verificar observando as equações discretizadas.

Deve-se salientar novamente que a teoria tratada aqui é não-relativística. No entanto, os resultados produzidos são bastante interessantes. Deve-se salientar também que

o formalismo discreto em sua forma simétrica reproduz os resultados do formalismo contínuo. Os efeitos da discretização se manifestam na evolução temporal dos sistemas mas, infelizmente, esses efeitos são sempre extremamente pequenos. Seria portanto interessante tentar encontrar situações em que se pudesse ter uma diferença mensurável entre os dois formalismos. Isso talvez pudesse ser conseguido explorando-se os desvios de fase causados pela discretização, como se viu nas seções (5.2) e (5.3). Quanto à justificativa de se introduzir um intervalo de tempo fundamental, talvez possamos encontrá-la em Bohr em sua réplica à famosa argumentação de Einstein - Podolski - Rosen: "Até onde um significado não-ambíguo pode ser atribuído a uma expressão como 'realidade física' não pode naturalmente ser deduzido à partir de concepções filosóficas *a priori* ... mas deve ser fundamentado numa recorrência direta a experimentos e medidas". Considerar o tempo, ou o espaço, como contínuo é uma posição filosófica criticável visto que, ao nível das medidas experimentais, a natureza é discreta.

Potencialmente mais importante é o fato de que o novo formalismo quântico discreto permite não somente a descrição de estados estacionários, mas também a descrição espaço-temporal de estados transientes, como os estados de interação. Isto se consegue utilizando as equações não-simétricas, a retardada e a avançada, as quais descrevem sistemas dissipativos e absorvedores (longe do equilíbrio), e não somente sistemas em equilíbrio com o meio.

De qualquer forma, os resultados teóricos mais importantes do formalismo quântico discreto são provavelmente aqueles que nos permitiram (capítulo 6) apontar um caminho para a resolução dos problemas de medida e de irreversibilidade. Note-se que esses problemas se resolvem não com o formalismo de Schrödinger discreto, mas utilizando o formalismo *coarse grained*. Ou seja, com o formalismo resultante da discretização direta da equação de Liouville-von Neumann, que descreve a evolução temporal dos operadores de densidade no caso contínuo.

Apêndice A: Operadores de Evolução Temporal nos Formalismos Discretos de Schrödinger e Liouville-von Neumann

Quando se tenta aplicar o formalismo descrito anteriormente ao problema da medida, surge a necessidade de se ter um operador de evolução bem definido, nos moldes do que se tem no caso contínuo: um operador unitário, satisfazendo as propriedades de grupo.

No caso contínuo, quando se tem um hamiltoniano independente do tempo, o operador evolução tem a forma

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp(-i(t - t_0) \hat{H}/\hbar) \quad (\text{A.1})$$

e será unitário desde que \hat{H} seja hermitiano. No caso contínuo, *por definição*, todo observável é representado por um operador hermitiano. Um operador é definido unitário quando seu conjugado hermitiano for igual ao seu inverso, de modo que

$$\hat{A}^t \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^t = 1 . \quad (\text{A.2})$$

Um outro aspecto importante relacionado com um operador unitário refere-se à conservação de probabilidade. Em outras palavras, se o estado inicial está normalizado em 1 ele assim permanecerá para todos os instantes posteriores. Ou seja, o operador evolução não altera a norma dos estados sobre o qual ele atua. Assim, sabe-se de antemão que os operadores de evolução das equações de Schrödinger retardada e avançada que, como se viu, fornecem soluções em que a norma sempre varia com o tempo, não serão operadores unitários.

A seguir, serão determinados os operadores de evolução temporal associados aos formalismos de Schrödinger e dos operadores de densidade e, por meio deles, tentar-se-á estabelecer a equivalência das duas descrições.

A.1 - Operadores de Evolução no Formalismo de Schrödinger

Para as equações de Schrödinger discretizadas pode-se facilmente obter os análogos discretos dos operadores de evolução temporal. Seja, inicialmente, a equação simétrica que, como já se pôde observar, é a que mais se aproxima da descrição contínua. Após alguma manipulação algébrica da equação obtém-se que o operador pode ser escrito como

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \operatorname{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right) \right], \quad (\text{A.3})$$

de tal modo que

$$|\Psi(x, t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(x, t_0)\rangle = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \operatorname{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right) \right] |\Psi(x, t_0)\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Assim, se a equação de autovalores do hamiltoniano é dada por

$$\hat{H} |\Psi(x, t_0)\rangle = E |\Psi(x, t_0)\rangle$$

tem-se que

$$|\Psi(x, t)\rangle = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \operatorname{sen}^{-1} \left(\frac{\tau E}{\hbar} \right) \right] |\Psi(x, t_0)\rangle.$$

Sendo \hat{H} um operador hermitiano, o operador evolução para a equação simétrica também é hermitiano. No entanto, a existência de um limitante para o valor máximo possível aos autovalores de \hat{H} faz com que, à partir desse limite, **o operador evolução deixe de ser hermitiano**. Na realidade, se se considera que, na situação instável, o operador \hat{H} tenha a forma

$$\hat{H} = \hat{v} + i \hat{\kappa}$$

onde \hat{v} e $\hat{\kappa}$ são operadores hermitianos, obtém-se — no caso contínuo — os mesmos resultados do caso hermitiano discreto. Isso porque uma característica dos operadores não-hermitianos é justamente o fato de não conservarem a norma do estado sobre o qual atuam.

Para a equação retardada pode-se determinar que o operador evolução seja dado por

$$\hat{U}(t, t_0) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right]^{-(t-t_0)/\tau}, \quad (\text{A.5})$$

sendo que, no limite $\tau \rightarrow 0$,

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right)^{-(t-t_0)/\tau} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}, \quad (\text{A.6})$$

que é uma expressão conhecida por igualdade de Trotter. Pode-se, tomando o hermitiano conjugado \hat{U}^\dagger , verificar que esse operador não é unitário. Na base de autoestados de \hat{H} , pode-se verificar que

$$\langle n | \hat{U}^\dagger \hat{U} | n \rangle = \left(1 + \frac{\tau^2}{\hbar^2} E_n^2 \right)^{-(t-t_0)/\tau} \quad (\text{A.7})$$

e não igual a 1, como ocorre no caso contínuo. Desse modo, tem-se a razão de não se verificar conservação de probabilidade nas soluções da equação retardada. Além disso, sendo o operador evolução da equação avançada dado por

$$\hat{U}(t, t_0 = 0) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \tau \hat{H} \right)^{(t-t_0)/\tau}, \quad (\text{A.8})$$

pode-se verificar que a equivalência formal entre ambas se dá pela inversão do sentido do tempo e do sinal da energia. No caso relativístico, isto é compreensível se se leva em consideração que, se uma transformação inverte o sinal da componente temporal de um quadrivetor posição, então ela inverte também o sinal da energia, que é o elemento correspondente do quadrivetor energia-momento. Assim, a equação retardada descreveria uma partícula com energia positiva se propagando adiante no tempo, enquanto que a equação avançada descreveria um objeto com energia negativa viajando retroativamente no tempo, ou seja, uma **antipartícula**, agora com energia positiva e viajando adiante no tempo (Recami, 1978; Recami e Rodrigues, 1982, 1983; Pavsic e Recami, 1982).

A.2 - Operadores de Evolução no Formalismo dos Operadores de Densidade

Por simplicidade, seja $|\psi(t)\rangle$ um estado puro. O operador densidade de estados é definido como

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| . \quad (\text{A.9})$$

Pode-se mostrar que esse operador evolui temporalmente segundo as leis de evolução

$$\Delta_R \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{H}}(t), \hat{\rho}(t)] - \frac{\tau}{\hbar^2} \hat{\mathbf{H}}(t) \hat{\rho}(t) \hat{\mathbf{H}}(t) \quad (\text{A.10})$$

para o caso **retardado**,

$$\Delta_A \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{H}}(t), \hat{\rho}(t)] + \frac{\tau}{\hbar^2} \hat{\mathbf{H}}(t) \hat{\rho}(t) \hat{\mathbf{H}}(t) \quad (\text{A.11})$$

para o **avanzado** e, para o **simétrico**,

$$\Delta \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{H}}(t), \hat{\rho}(t)] . \quad (\text{A.12})$$

Pode-se observar, então, que tanto a equação retardada quanto a avançada não são possíveis de serem obtidas à partir de uma discretização direta da equação de Liouville-von Neumann do caso contínuo. Tal equivalência formal só se verifica para o caso simétrico.

Considerando-se o caso **retardado**, pode-se obter o operador de evolução temporal equivalente como sendo

$$\hat{\mathbf{V}}(t, t_0) = \frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{L}} + \frac{\tau^2}{\hbar^2} \hat{\mathbf{H}} \dots \hat{\mathbf{H}} \right]^{(t-t_0)/\tau}} . \quad (\text{A.13})$$

Pode-se observar que esse operador é diferente daquele obtido na formalização *coarse grained*:

$$\hat{V}_{CG}(t, t_0) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathcal{L}}\right)^{(t+t_0)/\tau}}, \quad (\text{A.14})$$

e que ele também **não** é um operador unitário. \hat{V}_{CG} é definido de modo a ter as propriedades de um semigrupo, não tendo necessariamente um inverso, mas possuindo as demais propriedades como comutatividade, existência de um elemento identidade, além da propriedade de invariância translacional da condição inicial.

O que se pode concluir dessa desigualdade entre os dois operadores de evolução é que aparentemente há um conflito entre as duas descrições. Na descrição "coarse grained" partiu-se da equação contínua de Liouville-von Neumann e introduziu-se a granulação da evolução temporal chegando-se a um operador de evolução temporal que se mostrou satisfazer a equação retardada

$$\Delta_R \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)].$$

O outro caminho foi partir da definição do operador de densidade, determinar a equação dinâmica discretizada e, à partir dela, calcular o operador de evolução temporal.

Para o caso simétrico, o operador de evolução é dado por

$$\hat{V}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{\mathcal{L}}}{\hbar} \right) \right],$$

que é uma expressão bastante semelhante à que se obtém para o caso contínuo.

A.3 - A Compatibilidade das Duas Formulações

Tem-se então dois operadores evolução distintos para as equações retardadas de Schrödinger e Liouville de modo que, caso seja possível estabelecer uma ligação entre ambos, chega-se à compatibilidade das duas descrições. O que se busca é estabelecer uma

relação entre os dois operadores observando a sua atuação sobre o operador densidade de estados. Assim, o que se deseja é que os operadores satisfaçam, se possível, à relação

$$\hat{V}(t, t-\tau) \hat{\rho}_0 = \hat{U}(t, t-\tau) \hat{\rho}_0 \hat{U}'(t, t-\tau) , \quad (\text{A.15})$$

onde a ação diferenciada dos dois operadores se deve ao fato do operador \hat{V} , dado por (A.13), ser um operador bilinear, enquanto que \hat{U} , dado por (A.5), é um operador linear.

Essa relação é válida no caso contínuo, onde os operadores de evolução atuam sobre o operador densidade segundo a expressão

$$\hat{\rho}(t) = \exp[-i \hat{\mathcal{L}}(t-t_0)/\hbar] \hat{\rho}_0 = \exp[-i \hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar] \hat{\rho}_0 \exp[i \hat{\mathbf{H}}(t-t_0)/\hbar] . \quad (\text{A.16})$$

Considerando-se a base de autoestados do hamiltoniano, $\{|n\rangle\}$, tem-se que

$$\langle n | \hat{\mathcal{L}} \hat{\rho}(0) | m \rangle = (E_n - E_m) \rho_{nm}(0) , \quad (\text{A.17})$$

de modo que

$$\exp(-i \hat{\mathcal{L}} t) \hat{\rho}(0) = \exp[-i t (E_n - E_m)] \rho_{nm}(0) , \quad (\text{A.18})$$

$$\exp[-i \hat{\mathbf{H}} t] \hat{\rho}_0 \exp[i \hat{\mathbf{H}} t] = \exp[-i t (E_n - E_m)] \rho_{nm}(0) . \quad (\text{A.19})$$

A questão é saber se para o caso discreto a relação equivalente é válida. Para o caso retardado, deve-se verificar se a relação

$$\frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathcal{L}} + \frac{\tau^2}{\hbar^2} \hat{\mathbf{H}} \dots \hat{\mathbf{H}}\right]^{(t-t_0)/\tau}} \hat{\rho}_0 = \frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}}\right]^{(t-t_0)/\tau}} \hat{\rho}_0 \frac{1}{\left[1 - \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathbf{H}}\right]^{(t-t_0)/\tau}} \quad (\text{A.20})$$

é válida. Se o for, tem-se que as duas formulações são compatíveis. O que se obtém é que, se se considera que as relações do tipo (A.18) e (A.19) continuem válidas no caso discreto, a igualdade acima se verifica. Ou seja, para um elemento genérico da matriz do operador tem-se que

$$\frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} (E_n - E_m) + \frac{\tau^2}{\hbar^2} E_n E_m\right]^{i/\tau}} \rho_{nm}(0) = \frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} E_n\right]^{i/\tau}} \rho_{nm}(0) \frac{1}{\left[1 - \frac{i\tau}{\hbar} E_m\right]^{i/\tau}} .$$

Essa equivalência pode também ser verificada para os demais casos. Quando se considera o resultado obtido na formalização *coarse grained*, verifica-se pois uma incompatibilidade com a expressão obtida via Schrödinger. Para (A.14) tem-se que

$$\langle n | \frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} \hat{\mathcal{L}}\right]^{1/\tau}} \hat{\rho}(0) | m \rangle = \frac{1}{\left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} (E_n - E_m)\right]^{1/\tau}} \rho_{nm}(0) .$$

A questão é saber qual a diferença fundamental existente entre as duas descrições; se ambas são válidas e em que situação o são.

Alguns comentários devem ser feitos. Primeiramente, é preciso lembrar que a descrição *coarse grained* é uma descrição semiclássica, que pressupõe um sistema com um certo grau de complexidade, enquanto que a descrição provida pelo vetor estado é uma descrição fundamentalmente quântica, em princípio não impondo condições com relação ao número de graus de liberdade do sistema descrito. Existe uma diferença básica na própria maneira como é concebido o conceito de *crônon*. No caso da descrição *coarse grained*, este é entendido como sendo uma grandeza intimamente ligada às limitações experimentais ou, no caso ideal, às limitações impostas pelas relações de incerteza. No caso da equação de Schrödinger, o valor de τ é tomado como sendo um intervalo de tempo fundamental associado aos processos de interação entre os componentes do sistema, e do sistema como um todo com algum potencial externo; ou seja, associado aos processos internos do sistema, assim como foi concebido para o caso do elétron clássico. A discretização introduzida na formalização *coarse grained* não teve, em princípio, o caráter fundamental considerado ao discretizar a equação de Schrödinger.

Desse modo, pode-se compreender a ausência do termo misto no operador de evolução obtido pelo procedimento semiclássico e sua incompatibilidade com a descrição mais puramente quântica provida pelas equações de Schrödinger. O que se pode concluir é que, sendo uma descrição semiclássica, o espectro de aplicabilidade da formalização *coarse grained* se estende aos casos em que o sistema estudado não é puramente microscópico, aplicando-se particularmente a processos de medida, em que se tem um sistema microscópico interagindo com um aparelho macroscópico. Observe-se que nessa formalização apenas a equação retardada foi obtida. Nesse caso, tem-se que o sistema descrito dissipa energia (sendo portanto um sistema aberto). E é justamente essa característica que permite que se tenha acesso ao resultado de um processo de medida.

Com relação ao operador obtido diretamente do formalismo de Schrödinger para o caso retardado, tem-se que, com o passar do tempo, todos os elementos da matriz de densidade decaem com o tempo, mesmo os diagonais. Existe, além disso, a questão de que, na teoria quântica, não existe um limite de aplicabilidade da teoria no que se refere ao número de graus de liberdade envolvidos. Não há no formalismo uma distinção entre um sistema macroscópico e um microscópico, de modo que ele deveria ser capaz de reproduzir o que se obtém com o formalismo *coarse grained*. Ou seja, o problema da medida aparece também no formalismo discreto sob a forma da não equivalência entre os operadores de evolução temporal obtidos (A.13 e A.14).

Apêndice B: Operadores Não-Hermitianos no Formalismo Discreto

Um dos aspectos que assinalamos ao longo deste trabalho é o caráter "não-hermitiano" do formalismo discreto. Na representação de Schrödinger, por exemplo, a equação contínua pode reproduzir os resultados obtidos com as equações discretizadas uma vez que se substitua o hamiltoniano convencional por um hamiltoniano não-hermitiano adequado, que denominamos anteriormente "hamiltoniano equivalente".

Uma característica dos operadores não-hermitianos é o fato de seus autovalores estarem definidos sobre o campo dos números complexos. Pode-se sempre considerar que um operador linear não-hermitiano seja composto por uma parte hermitiana, que fornece a componente real dos autovalores, e por uma parte anti-hermitiana que fornece a componente complexa.

Vamos considerar, no caso contínuo, que o hamiltoniano seja um operador não-hermitiano dado por

$$\tilde{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{v}} + i \hat{\mathbf{k}}, \quad (\text{B.1})$$

onde $\hat{\mathbf{v}}$ e $\hat{\mathbf{k}}$ são hermitianos. Temos então, no formalismo de Schrödinger, sendo o hamiltoniano independente do tempo, que o operador de evolução temporal é dado por

$$\hat{\mathbf{U}}_{\text{cont}}(t, t_0) = \exp\left[\frac{1}{\hbar}(\hat{\mathbf{k}} - i \cdot \hat{\mathbf{v}})(t - t_0)\right]. \quad (\text{B.2})$$

Para o formalismo discreto, vimos no apêndice A que o operador de evolução para os estados retardados é dado por (A.5)

$$\hat{\mathbf{U}}(t, t_0) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \tau \hat{\mathbf{H}}\right]^{-(t-t_0)/\tau}, \quad (\text{A.5})$$

onde $\hat{\mathbf{H}}$ é o operador hermitiano associado ao hamiltoniano convencional. Podemos reescrever esse operador de evolução como

$$\hat{\mathbf{U}}_{\text{ret}}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{(t-t_0)}{2\tau} \ln\left(1 + \frac{\tau^2 \hat{\mathbf{H}}^2}{\hbar^2}\right)\right] \exp\left[-\frac{i(t-t_0)}{\tau} \tan^{-1}\left(\frac{\tau \hat{\mathbf{H}}}{\hbar}\right)\right]. \quad (\text{B.3})$$

Comparando (B.2) e (B.3), obtemos que a equivalência entre os hamiltonianos se verifica uma vez que \hat{v} e $\hat{\kappa}$ sejam dados por

$$\hat{v} = \frac{\hbar}{\tau} \tan^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right), \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{\kappa} = -\frac{\hbar}{2\tau} \ln \left(1 + \frac{\tau^2 \hat{H}^2}{\hbar^2} \right). \quad (\text{B.5})$$

Para o caso avançado, obtêm-se as mesmas expressões a menos do sinal negativo em $\hat{\kappa}$. Para o caso simétrico, abaixo do limite crítico, tem-se que

$$\hat{v} = \frac{\hbar}{\tau} \text{sen}^{-1} \left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right), \quad \hat{\kappa} = 0. \quad (\text{B.6})$$

Acima do limite crítico, \hat{v} deixa de ser hermitiano. Neste caso, o operador de evolução temporal pode ser escrito como

$$\hat{U}_{\text{sim}}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i\pi}{2\tau} (t - t_0) \right] \exp \left\{ -\frac{(t - t_0)}{\tau} \ln \left[\left| \frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right| + \sqrt{\left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right)^2 - 1} \right] \right\} \quad (\text{B.7})$$

de onde podemos obter que

$$\hat{v} = \frac{\hbar\pi}{2\tau}, \quad (\text{B.8})$$

$$\hat{\kappa} = -\frac{\hbar}{\tau} \ln \left\{ \left| \frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right| + \sqrt{\left(\frac{\tau \hat{H}}{\hbar} \right)^2 - 1} \right\}, \quad (\text{B.9})$$

em que \hat{v} passa a ser independente do hamiltoniano \hat{H} , e $\hat{\kappa}$ deixa de ser nulo.

As relações obtidas acima mostram quais as características que \hat{v} e $\hat{\kappa}$ devem ter de modo que a equação contínua reproduza os resultados das equações discretas. Observando o operador de evolução contínuo, temos que a parte anti-hermitiana de \hat{H} tem um comportamento não estacionário, resultando num termo de decaimento ou de amplificação associado ao estado quântico sobre o qual ele é aplicado. Assim, temos soluções

estacionárias apenas no caso simétrico abaixo do limite crítico. Nas demais situações $\hat{\kappa}$ é não-nulo, estando o termo transiente sempre presente.

Na mecânica quântica, operadores não-hermitianos têm sido utilizados apenas como artifícios matemáticos, como no caso da equação de Lippmann-Schwinger na teoria de espalhamento. Já se observou, também, que a introdução desses operadores possibilitaria a descrição de estados instáveis, associando fenomenologicamente o fator transiente ao tempo de vida do estado considerado (Cohen-Tannoudji et al., 1977). Se num instante $t_0 = 0$ o sistema descrito se encontra num estado $|n\rangle$ que é um autoestado do hamiltoniano \hat{H} então, se esse estado é instável, espera-se que a probabilidade de encontrá-lo neste mesmo estado num instante t posterior seja dada por

$$P_n(t) = \left| \langle n | \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) | n \rangle \right| = \exp(-t/\tau_L) ,$$

o que nos permite especificar o tempo de vida τ_L , para o caso retardado, como sendo

$$\tau_L = \frac{\tau}{\ln\left(1 + \frac{\tau^2 E_n^2}{\hbar^2}\right)} , \tag{B.10}$$

e para o caso simétrico, acima da energia crítica,

$$\tau_L = \frac{\tau}{2 \ln\left(\left|\frac{\tau E_n}{\hbar}\right| + \sqrt{\frac{\tau^2 E_n^2}{\hbar^2} - 1}\right)} .$$

Esses tempos de vida estão ligados a estados que, na formulação discreta, são intrinsecamente instáveis. Apenas a equação retardada parece ser associada a estados quânticos que decaem no tempo. Se isso for realmente válido, tem-se uma expressão por meio da qual se poderia determinar fenomenologicamente o valor do crônon. Quando se considera o elétron, por exemplo, pode-se de imediato antecipar que os tempos de vida fornecidos por (B.10) são extremamente curtos.

O que podemos observar é que a discretização temporal dá origem a um formalismo que, mesmo considerando apenas operadores hermitianos, apresenta uma descrição equivalente à introdução de operadores não-hermitianos.

Referências

- Agodi, A., M. Baldo e E. Recami (1973) "Approach to the Theory of Unstable States", *Annals of Physics* **77**, 157.
- Ambarzumian, V. e D. Ivanenko (1930) "Zur Frage nach Vermeidung der unendlichen Selbststrückwirkung des Elektrons", *Zeits. für Phys.* **64**, 563.
- Arzeliès, H. (1966) "*Rayonnement ed Dinamique du Corpuscule Chargé Fortement Accéléré*", Gauthier-Villars, Paris.
- Ballentine, L. E. (1970) "The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.* **42**(4), 358.
- Ballentine, L. E. (1986) "What is the point of the Quantum Theory of Measurement?", in "Fundamental Questions in Quantum Mechanics" eds. L. Roth & A. Inomata, Gordon & Breach.
- Barut, A. O. (1978) "The Mass of the Muon", *Phys. Lett. B* **73**, 310.
- Barut, A. O. (1979) "Lepton Mass Formula", *Phys. Rev. Lett.* **42**(19), 1251.
- Bateman, H. (1910) "The Transformation of the Electrodynamical Equations", *Proc. London Math. Soc. B* **8**, 223.
- Bell, J. S. (1987) "Are There Quantum Jumps?", in "Schrödinger: Centenary Celebration of a Polymath", C. W. Kilmister (ed.), Cambridge U. P., Cambridge, UK, p. 41-52.
- Bhabha, H. I. (1946) "On the expansibility of Solutions in Powers of the Interaction Constant", *Phys. Rev.* **70**, 759.
- Bohm, D. e M. Weinstein (1948) "The Self-Oscillations of a Charged Particle", *Phys. Rev.* **74** (12), 1789.
- Bohr, N. (1935) "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?", *Phys. Rev.* **48**, 696.
- Bonifacio, R. (1983) "A Coarse Grained Description of Time Evolution: Irreversible State Reduction & Time-Energy Relation", *Lett. Nuovo Cim.* **37**, 481.
- Bonifacio, R. e P. Caldirola (1982) "Unstable States of a Finite-Difference Schrödinger Equation", *Lett. Nuovo Cim.* **33**(7), 197.
- Bonifacio, R. e P. Caldirola (1983) "Finite-Difference Equations and Quasi-Diagonal Form in Quantum Statistical Mechanics", *Lett. Nuovo Cim.* **38**, 615.
- Caldirola, P. (1956) "A New Model of Classical Electron", *Suppl. Nuovo Cimento* **3**, 297.
- Caldirola, P. (1976) "On the Introduction of a Fundamental Interval of Time in Quantum Mechanics", *Lett. Nuovo Cim.* **16**(5), 151.

- Caldirola, P. (1978) "The Chronon in The Quantum Theory of the Electron and the Existence of the Heavy Leptons", *Il Nuovo Cimento* **45A**(4), 549.
- Caldirola, P. (1979) "A Relativistic Theory of the Classical Electron", *Riv. Nuovo Cimento* **2**(13), 1.
- Caldirola, P. (1980) "The Introduction of the Chronon in the Electron and a Charged-Lepton Mass Formula", *Lett. Nuovo Cimento* **27**(8), 225.
- Caldirola, P. & E. Montaldi (1979) "A New Equation for Quantum Dissipative Systems", *Il Nuovo Cim.* **53B**(2), 291.
- Caldirola, P. e E. Recami (1978) "The Concepts of Time in Physics", *Epistemologia* **1**, 263.
- Casagrande, F. (1977) "The Introduction of the Chronon into the Classical and Quantum Theory of the Electron", *Scientia* **112**, 417.
- Casagrande, F. e E. Montaldi (1977) "Some Remarks on Finite-Difference Equations of Physical Interest", *Il Nuovo Cimento* **40A**(4), 369.
- Casagrande, F. e E. Montaldi (1978) "On the Discrete-Time Schrödinger Equation for the Linear Harmonic Oscillator", *Il Nuovo Cimento* **44A**(4), 453.
- Cohen-Tannoudji, C. , B. Diu e F. Laloë (1977) "*Quantum Mechanics*", Wiley, New York.
- Cunningham, E. (1909) "The Principle of Relativity in Electrodynamics and an Extension Thereof", *Proc. London Math. Soc.* **8**, 77.
- Daneri, A. , A. Loinger e G. M. Prosperi (1962) "Quantum Theory of Measurement and Ergodicity Conditions", *Nucl. Phys.* **33**, 297.
- Dirac, P. A. M. (1938) "Classical Theory of Radiating Electrons", *Proc. Roy. Soc.* **A167**, 148.
- Dirac, P. A. M. (1962) "An Extensible Model of the Electron", *Proc. Roy. Soc.* **A268**, 57.
- Ehrlich, R. (1976) "Possible Evidence for the Quantization of Particle Lifetimes", *Phys. Rev. D*, **13**(1), 50.
- Erber, T. (1961) "The Classical Theories of Radiation Reaction", *Fortschritte für Physik* **9**, 343.
- Everett III, H. (1957) "Relative State Formulation of Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.* **29**, 454.
- Fock, V. A. (1962) "Criticism of an Attempt to Disprove the Uncertainty Relation Between Time and Energy", *Sov. Phys. JETP* **15**(4), 784.
- Friedberg, R. e T. D. Lee (1983) "Discrete Quantum Mechanics", *Nucl. Phys.* **B225**, 1.
- Fulton, T. e F. Rohrlich (1960) "Classical Radiation from a Uniformly Accelerated Charge", *Ann. of Phys.* **9**, 499.
- Ghirardi, G. C., A. Rimini e T. Weber (1985) "Unified Dynamics for Microscopic and Macroscopic Systems", *Phys. Rev. D* **34**, 470.

- Hikasa, K et al. - Particle Data Group - (1992) "Review of Particle Properties", *Phys. Rev D* **45**, S1.
- Hill, E. L. (1945) "On Accelerated Coordinate Systems in Classical and Relativistic Mechanics", *Phys. Rev.* **67**, 358.
- Jammer, M. (1954) "*Concepts of Space*", Harvard U. Press, Cambridge, Mass.
- Jancel, R. (1969) "*Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics*", Pergamon Press.
- Lanz, L. (1962) "On the Energy Conservation for the Motion of a Radiating Electron with Particular Reference to a Hyperbolic Motion", *Il Nuovo Cim.* **23**, 195.
- Lee, T. D. (1983) "Can Time be a Discrete Dynamical Variable?", *Phys. Lett.* **122B** (3/4), 217.
- Lee, T. D. (1987) "Difference Equations and Conservation Laws", *J. Stat. Phys.* **46** (5/6), 843.
- Levi, R. (1926) "Théorie de L'Action Universelle et Descontinue", *Comptes Rendus* **183**, 865.
- McGoveran, D. e P. Noyes (1989) "Foundations of a Discrete Physics", *SLAC-PUB-4526*.
- Nambu, Y. (1952) "An Empirical Mass Spectrum of Elementary Particles", *Prog. Theor. Phys.* **7**, 595.
- Newton-Smith, W. H. (1980) "*The Structure of Time*", Routledge, London.
- Paṽsiĉ, M. e E. Recami (1982) "Charge Conjugation and Internal Space-Time Symmetries", *Lett. Nuovo Cim.* **34**, 357.
- Plass, G. N. (1961) "Classical Electrodynamical Equations of Motion with Radiative Reaction", *Rev. Mod. Phys.* **33**, 37.
- Pokrowski, G. I. (1928) "Zur Frage nach einer Struktur der Zeit", *Zeits. für Physik* **51**, 737.
- Recami, E. (1978) "How to Recover Causality in Special Relativity", *Found. Phys.* **8**, 329.
- Recami, E. e W. A. Rodrigues, Jr. (1982) "Antiparticles from Special Relativity with Ortho-chronous and Anti-chronous Lorentz Transformations", *Found. Phys.* **12**, 709; **13**, 533 (1983).
- Recami, E., W. A. Rodrigues, Jr. e P. Smrz (1983) "Some Applications of Non-Hermitian Operators in Quantum Mechanics and Quantum Field Theory", *Hadronic J.* **6**, 1773.
- Rohrlich, F. (1960) "Self-Energy and Stability of the Classical Electron", *Am. J. Phys.* **28**, 639.
- Rohrlich, F. (1965) "*Classical Charged Particles*", Addison-Wesley, Reading, Massachusetts.

- Sakurai, J. J. (1985) "*Modern Quantum Mechanics*", Benjamin/Cummings, Menlo Park, California.
- Schönberg, M. (1946) "Classical Theory of the Point Electron", *Phys. Rev.* **69**, 211.
- Snyder, H. S. (1947) "Quantized Space-Time", *Phys. Rev.* **71**(1), 38.
- Thomson, J. J. (1925/6) "The Intermittence of Electric Force", *Proc. Roy. Soc. Edimburg* **46**, 90.
- Wheeler, J. A. (1957) "Assessment of Everett's 'Relative State' Formulation of Quantum Theory", *Rev. Mod. Phys.* **29**, 463.
- Wheeler, J. A. e R. P. Feynman (1945) "Interaction with the Absorber as the Mechanism of Radiation", *Rev. Mod. Phys.* **17** (2,3), 157.
- Wigner, E. P. (1963) "The Problem of Measurement", *Am. J. Phys.* **31**, 6.
- Wolf, C. (1987a) "Possible Implications of the Discrete Nature of Time in Electron Spin Polarization Measurements", *Il Nuovo Cim.* **100B**, 431.
- Wolf, C. (1987b) "Electron Spin Resonance as a Probe to Measure the Possible Discrete Nature of Time as a Dynamical Variable", *Phys. Lett.* **123A**, 208.
- Wolf, C. (1989) "Discrete Time Effects and the Spectrum of Hydrogen", *Eur. J. Phys.* **10**, 197.
- Wolf, C. (1991) "Countability versus Continuum in the Quantum Mechanics of a Free Particle"