

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

MATHEUS VIEIRA SCHERER

TESTE PROBABILÍSTICO DO DETERMINISMO BOHMIANO

CURITIBA

2023

MATHEUS VIEIRA SCHERER

TESTE PROBABILÍSTICO DO DETERMINISMO BOHMIANO

Dissertação de mestrado do Programa de Pós Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná como requisito parcial para a obtenção do grau de “Mestre em Física”.

Orientador: Prof. Dr. Renato Moreira Angelo

CURITIBA

2023

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Scherer, Matheus Vieira

Teste probabilístico do determinismo Bohmiano. / Matheus
Vieira Scherer.– Curitiba, 2023.

1 recurso on-line : PDF.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Paraná,
Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física.

Orientador: Prof. Dr. Renato Moreira Angelo

1. Teoria quântica. 2. Determinismo. 3. Mecânica Bohmiana. I.
Angelo, Renato Moreira. II. Universidade Federal do Paraná.
Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **MATHEUS VIEIRA SCHERER** intitulada: "**Teste probabilístico do determinismo bohmiano**", sob orientação do Prof. Dr. RENATO MOREIRA ANGELO, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 04 de Agosto de 2023.

Assinatura Eletrônica

05/08/2023 10:52:32.0

RENATO MOREIRA ANGELO

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

05/08/2023 11:51:56.0

FERNANDO ROBERTO DE LUNA PARISIO FILHO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO)

Assinatura Eletrônica

05/08/2023 18:53:14.0

MARCUS WERNER BEIMS

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Dr. Renato Moreira Angelo, meu orientador, pelos inestimáveis ensinamentos, orientação e disponibilidade ao longo desses dois anos de trabalho e amizade;
- Ao Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro, que foi meu orientador durante a graduação e atuou como coorientador durante o mestrado, pelos valiosos ensinamentos, orientação e apoio ao longo desses mais de dois anos de trabalho e amizade;
- Aos meus pais e irmãos, por sempre me proporcionarem condições e apoio para seguir em frente;
- Ao grupo de Fundamentos de Mecânica Quântica da UFPR, pelas discussões e ensinamentos relevantes no campo da física;
- Aos membros da banca, por aceitarem colaborar com a avaliação deste trabalho;
- Ao CNPq, pelo apoio financeiro concedido.

RESUMO

A mecânica quântica (MQ) é conhecida por ser não determinística, uma vez que não permite previsões, com precisão infinita, para todas as quantidades físicas relevantes em tempos iguais e posteriores à preparação. No entanto, podemos mostrar que, sem assumir conceitos suplementares acerca do tempo, a MQ falha em fornecer previsões probabilísticas para alguns experimentos emblemáticos, como o experimento da dupla-fenda. Por outro lado, a mecânica bohmiana (MB), que é equipada com trajetórias, restaura o determinismo e pode fornecer previsões probabilísticas acerca do tempo. Isso implica que a MB é capaz de descrever a estatística de experimentos para os quais a MQ não é capaz de fazê-lo. Como consequência, pode-se argumentar que MQ e MB não são apenas duas interpretações diferentes do mesmo formalismo, mas constituem duas teorias diferentes, com diferentes poderes preditivos. O confronto desses modelos com experimentos, nos permite, então, avaliar se a natureza é compatível com o determinismo bohmiano. Neste trabalho, formalizaremos essas ideias e as ilustraremos em três estudos de caso: (i) experimento da dupla-fenda, (ii) partícula livre e (iii) partícula em queda livre. Introduziremos uma prescrição para construir distribuições de probabilidade para um sistema físico qualquer, que por hipótese é determinista, aplicando tais prescrições para a MB e derivando a distribuição atemporal de cliques na tela de detecção para os sistemas mencionados. Acreditamos que a validade do determinismo das trajetórias bohmianas na MQ pode ser testada, em princípio, confrontando-se essas distribuições com experimentos exequíveis com a tecnologia atual. Para fins de comparação teórica com o formalismo suplementado com trajetórias determinísticas, suplementaremos a MQ com hipóteses *ad hoc* (MQS), como trajetórias (semi)clássicas e o operador tempo. Nesse contexto, esse trabalho permitirá diferenciar as previsões da MQS e MB, além de introduzir novas prescrições para se obter tais previsões, fornecendo a possibilidade de avaliar a noção de determinismo em sistemas físicos estatísticos.

Palavras-chaves: Mecânica quântica, mecânica Bohmiana, determinismo, tempo de voo.

ABSTRACT

Quantum mechanics (QM) is non-deterministic in the sense that its formalism does not allow one to predict, with full certainty, the value of all relevant physical quantities at equal or subsequent times to the system preparation. In fact, it can be shown that, without supplementary assumptions for the arrival time, QM fails to provide even probabilistic predictions to some emblematic settings, like the double-slit experiment. On the other hand, equipped with trajectories, Bohmian mechanics (BM) restores determinism and can, along with natural assumptions, raise a probability distribution for the arrival time. As a consequence, BM can provide predictions that QM cannot. This implies that these are not only different interpretations of the same formalism but different theories. In this work, we formalize the above statements and illustrate them in three case studies, namely, (i) double-slit experiment, (ii) free particle and (iii) free fall under a uniform gravitational field. We start by introducing a prescription that allows one to build an arrival-time probability distribution for trajectory-equipped theories. We then apply this prescription to BM and derive a timeless probability of clicks in a detection screen for the aforementioned experiments. Hopefully, these results can be confronted with actual experiments thus assessing the validity of Bohm's deterministic trajectories. Finally, for the sake of comparison, we supplement QM with some *ad hoc* concepts (SQM), like (semi)classical trajectories and a time operator, and then use our prescription to build a corresponding arrival-time probability distribution. In this context, this work will allow differentiating the predictions of SQM and BM, as well as introducing new prescriptions to obtain such predictions, providing the possibility of evaluating the notion of determinism in statistical physical systems.

Key-words: Quantum mechanics, Bohmian mechanics, determinism.

LISTA DE ABREVIATURAS E DE SIGLAS

EPR Einstein, Podolsky e Rosen

HJ Hamilton-Jacobi

MB Mecânica Bohmiana

MC Mecânica Clássica

MQ Mecânica Quântica

MQS Mecânica Quântica Suplementada

MVOP Medida Valorada por Operador Positivo

TET Teoria Equipada com Trajetórias

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	CONCEITOS PRELIMINARES	16
2.1	NOÇÕES BÁSICAS DA TEORIA DE PROBABILIDADE	16
2.2	POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	18
2.3	MECÂNICA BOHMIANA	22
2.3.1	Partícula livre em estado gaussiano	27
2.3.2	Partícula em queda livre preparada em um estado gaussiano	29
2.4	OPERADOR TEMPO	33
2.4.1	Teorema de Pauli	33
2.4.2	Distribuição de Kijowski	35
3	TEORIA EQUIPADA COM TRAJETÓRIAS	40
3.1	HIPÓTESES E FORMULAÇÃO	45
3.1.1	Trajectoria com um campo de velocidades associado	45
3.1.2	Trajectoria no espaço de fase	53
3.2	ABORDAGENS OPERACIONAIS NA MQ	55
3.2.1	Tempo médio de voo	56
3.2.2	Abordagem geométrica	57
4	ESTUDOS DE CASO	60
4.1	EXPERIMENTO DA DUPLA-FENDA	60
4.2	PARTÍCULA LIVRE	65
4.2.1	Superposição de Estados	74
4.3	PARTÍCULA EM QUEDA LIVRE	78
4.3.1	Caso não Unívoco	87
5	CONCLUSÃO	92
APÊNDICES		96
APÊNDICE A MECÂNICA CLÁSSICA		97
A.1	TRANSFORMAÇÃO DE LEGENDRE	97
A.2	FORMALISMO HAMILTONIANO	98
A.3	FORMALISMO DE HAMILTON-JACOBI	99

A.4	FORMALISMO LIOUVILLIANO	101
APÊNDICE B	APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA	105
	REFERÊNCIAS	111

1 INTRODUÇÃO

O determinismo local é uma visão de mundo amplamente discutida ao longo da história humana, que afirma que todos os eventos são completamente determinados por causas anteriores. Essa perspectiva filosófica tem suas raízes no período pré-socrático, quando os pensadores da antiguidade exploravam a natureza do universo e do ser humano em busca de respostas fundamentais. Nesse contexto, emergiu um dualismo¹ entre o acaso e o destino, que se tornou um ponto central nas discussões acerca do determinismo. Os filósofos pré-socráticos, como Tales de Mileto, Heráclito e Parmênides, contribuíram para essa discussão, apresentando concepções diversas e muitas vezes antagônicas sobre o tema. Enquanto alguns defendiam a ideia de um mundo regido pelo acaso, em que os eventos ocorriam de maneira aleatória e imprevisível, outros sustentavam a existência de um destino inexorável, onde tudo estava predestinado a ocorrer de uma maneira específica e predeterminada.

Além de ser uma questão metafísica, o determinismo é uma suposição fundamental na mecânica clássica (MC), onde é possível determinar o estado de um sistema em qualquer instante posterior, dadas as condições iniciais adequadas. Em [1], Pierre-Simon Laplace disserta acerca do determinismo na MC, na passagem:

"Podemos considerar o estado atual do universo como o efeito de seu passado e a causa de seu futuro. Uma inteligência que, em um instante determinado, pudesse conhecer todas as forças que põem em movimento a natureza, e todas as posições de todos os objetos dos quais a natureza é composta, se esta inteligência fosse ampla o suficiente para submeter esses dados à análise, ela englobaria em uma única fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e dos menores átomos; para tal inteligência nada seria incerto e o próprio futuro, assim como o passado, estaria evidentes a seus olhos."

A tal inteligência mencionada por Laplace é conhecida atualmente como "demônio de Laplace", onde demônio deve ser entendido no sentido original grego da palavra, uma divindade ou *daemon* [2]. Segundo Laplace, tal inteligência deve ter as seguintes propriedades para dizer que o sistema é determinista:

- (i) Onisciência instantânea: conhece completamente o estado do universo em um instante de tempo.

¹ Dualismo é um conceito filosófico que postula a existência de dois princípios fundamentais, opostos e independentes na realidade.

- (ii) Erudição nomológica: sabe com exatidão todas as leis do universo.
- (iii) Super computação: é capaz de realizar cálculos em um intervalo infinitesimal.
- (iv) Não distúrbio: uma medição realizada em um sistema não afeta as leis fundamentais do universo nem altera o estado do sistema em si. Em outras palavras, o ato de medir o sistema não deve perturbá-lo de nenhuma forma.

A noção de estado adotada por Laplace está associada a um conjunto de variáveis que descreve o sistema. Dessa forma, se os valores dessas variáveis fossem conhecidos para um determinado instante, o estado do sistema estaria completamente determinado. Por exemplo, para um sistema clássico, se a posição e o momento forem conhecidos em um dado instante de tempo, o estado do sistema estará completamente determinado.

Diversos experimentos questionavam os fundamentos da MC, resultando em uma profunda reconsideração de suas premissas. Entre essas experiências pioneiras, o experimento da dupla-fenda com uma única partícula [3, 4] ganhou destaque notável. Nessa experiência, a luz ou partículas elementares eram direcionadas a uma placa equipada com duas fendas estreitas, o que gerava um padrão de interferência observado em uma tela de projeção localizada além da placa. A descoberta surpreendente foi que, mesmo quando fótons ou partículas eram emitidos individualmente, ao longo do tempo, um padrão de interferência ondulatória se formava na tela de projeção. Esse fenômeno de interferência, caracterizado pela combinação e anulação de ondas em certas regiões, desafiou as concepções clássicas de que a luz e as partículas seguiam trajetórias previamente definidas. Em vez disso, o experimento revelou que a natureza exibia propriedades ondulatórias e que a presença de um observador ou a realização de medições interferiam na maneira como as partículas se comportavam. Essa descoberta fundamental abriu caminho para o desenvolvimento da mecânica quântica (MQ), uma teoria que incorpora aspectos aleatórios irreduzíveis, como expresso no princípio de incerteza de Heisenberg [5], e questionou os princípios deterministas e a causalidade da física clássica, lançando luz sobre a presença de elementos aleatórios e probabilísticos na descrição do mundo físico.

Com o desenvolvimento da MQ e suas interpretações, a questão do determinismo foi novamente debatida. A interpretação de Copenhague [6, 7] prevê que as propriedades dos objetos quânticos não têm valores definidos até que sejam medidas, sendo as previsões probabilísticas e conseqüentemente não determinísticas, mesmo que o estado quântico inicial seja totalmente determinado. Essa interpretação foi duramente criticada, mesmo que suas previsões fossem compatíveis com os experimentos. O artigo escrito por A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen (EPR) [8], argumentou que a teoria quântica não é completa, sugerindo que deveriam existir variáveis dinâmicas

ocultas que restaurariam o comportamento determinístico do sistema. Essa noção de determinismo implica, de certa forma, na noção de realismo. Admite-se o realismo em cenários nos quais é possível prever, com precisão infinita, o valor de uma variável física sem produzir qualquer distúrbio no sistema, antes mesmo de medi-la. Em particular, o trabalho de EPR adotou a noção de realismo local, que sustenta que a realidade das quantidades físicas está definida e não pode ser alterada instantaneamente por uma ação a distância. Atualmente, há vários trabalhos que exploram a noção de realismo e suas consequências na MQ [9–15]. Alguns autores consideram os termos determinismo e realismo como sinônimos, argumentando que se as propriedades físicas estiverem bem definidas em todos os instantes, o sistema é determinístico e, conseqüentemente, realista. Isso implica que as propriedades físicas do sistema existem independentemente e antes da intervenção de um observador.

Posteriormente, em 1952, David Bohm apresentou o que seria o primeiro modelo de variáveis ocultas, conhecido como mecânica bohmiana (MB), em seus trabalhos [16, 17]. Ele postula que as posições das partículas são as suas variáveis ocultas, e define o conjunto de trajetórias que o sistema deve respeitar. Vale ressaltar que esta dinâmica é governada também por um potencial adicional, escolhido adequadamente para que exista concordância entre MB e MQ. As trajetórias bohmianas não podem ser especificadas completamente devido às condições de contorno ocultas. A teoria de Bohm recupera o determinismo, ao mesmo tempo em que mantém as previsões probabilísticas consistentes com a MQ. No entanto, é importante destacar que as trajetórias bohmianas são caracterizadas por uma não-localidade inerente, devido à natureza da função de onda, que nessa interpretação é um campo físico real. Nesse formalismo, as condições iniciais das trajetórias bohmianas são interpretadas como variáveis ocultas, que são não-locais devido à sua relação com a função de onda no instante inicial. Em particular, essa abordagem possibilita fazer previsões sobre o tempo de voo [18], que representa o intervalo de tempo necessário para que uma partícula se desloque da posição inicial até a posição final, um tópico delicado para a MQ. Embora haja grandes diferenças de interpretação entre a MQ e a MB, acredita-se que essas teorias apresentam previsões equivalentes, como apontado em [19]. Nesse sentido, não poderíamos afirmar, a priori, se uma interpretação descreve melhor a natureza em comparação com a outra, ou ainda se os sistemas quânticos são determinísticos.

A MB propõe uma concepção de determinismo distinta da definição de Laplace, apresentada no início deste capítulo. Embora mantenha as hipóteses de erudição nomológica e onisciência instantânea, a MB relaxa a suposição de que o estado inicial do sistema é completamente conhecido. Em outras palavras, conhecemos o estado inicial do sistema com uma alguma incerteza, permitindo-nos prever como essa incerteza evoluirá, desde que tenhamos conhecimento das leis físicas que o regem. Desse modo, se o sistema for hipoteticamente determinista, mas tiver uma

incerteza nas condições iniciais, o estado do sistema evoluirá em uma única direção, que não pode ser acessada devido à incerteza inicial. As previsões que poderíamos fazer sobre o sistema seriam, portanto, probabilísticas, limitadas pela incerteza inicial e regidas pelas leis físicas do sistema. Essa formulação alternativa do determinismo é nomeada como determinismo bohmiano e, neste trabalho, adotamos essa definição de determinismo.

Em [20], John Bell demonstrou que, ao tentarmos preencher as lacunas conceituais da MQ, apresentadas por EPR, seria necessário recorrer a variáveis ocultas não-locais, semelhantes à abordagem adotada na MB. Em essência, o teorema de Bell estabelece de forma conclusiva a impossibilidade de reproduzir com precisão as previsões da MQ utilizando-se apenas variáveis ocultas locais, o que foi verificado por meio de vários experimentos livres de brecha [21–26]. Esse resultado notável de Bell é amplamente reconhecido por meio de suas desigualdades, essas desigualdades em específico foram nomeadas em sua homenagem como as desigualdades de Bell. Quando uma desigualdade de Bell é violada, isso acarreta na violação de uma ou mais das hipóteses fundamentais de Bell, como a existência de variáveis ocultas realistas e localidade. Isso, por sua vez, pode implicar na inexistência de super-determinismo. Nesse contexto, o super-determinismo refere-se à hipótese de que todos os eventos do universo são inexoravelmente determinados desde o momento em que o instante inicial foi estabelecido, o que nega a existência de livre-arbítrio e aleatoriedade genuína. A diferença fundamental entre a noção de determinismo, definida no início deste capítulo, e o super-determinismo é que o primeiro ainda permite a ideia de que diferentes escolhas poderiam levar a diferentes resultados, enquanto o segundo afirma que cada evento é inevitável e não poderia ter ocorrido de outra maneira.

Atualmente, a questão da relação entre a MQ e o determinismo permanece como um problema em aberto, suscitando uma ampla gama de interpretações dentro da MQ. Duas das interpretações mais proeminentes são a interpretação de Copenhague e a interpretação bohmiana, com a primeira sendo não determinista e a segunda sendo determinista. Apesar dessa diferença em relação ao determinismo, é importante destacar que, em termos de previsões experimentais, ambas as interpretações são indistinguíveis, o que adiciona complexidade ao debate sobre a natureza do determinismo dentro do contexto quântico.

Outro problema em aberto que será abordado neste trabalho, refere-se à questão do tempo na MQ. Enquanto na teoria da relatividade de Einstein [27], o espaço e o tempo são tratados de forma equivalente, na MQ não há tal equivalência. Em outras palavras, o espaço é quantizado, sendo um operador no formalismo que carrega consigo incertezas fundamentais. Por outro lado, o tempo não é quantizado; é considerado um parâmetro e, portanto, não carrega incertezas fundamentais. Sendo assim, do ponto

de vista da MQ, não faz sentido fazer previsões sobre o tempo, uma vez que este é um parâmetro. Diante desse contexto, diversos estudos surgiram para investigar esse problema, sendo que muitos deles propuseram abordagens que complementam a MQ com conceitos *ad hoc* sobre o tempo. Neste trabalho, nos referiremos a essas teorias como mecânica quântica suplementada (MQS).

Na referência [28], Pauli apresenta uma ideia que descarta a possibilidade de representar o tempo como um operador na MQ, conhecida atualmente como teorema de Pauli. Kijowski utilizou aproximações semiclássicas para obter previsões temporais de um sistema físico específico [29]. Ambos os formalismos serão descritos no capítulo 2. Outra tentativa de abordar o problema do tempo na MQ é o mecanismo de Page-Wooters [30], no qual o tempo é considerado uma coordenada inacessível e sua passagem é entendida como uma consequência das correlações entre os subsistemas do estado global. Além disso, o formalismo proposto por Dias e Parisio [31] trata o tempo de forma equivalente ao espaço, resultando em uma equação de Schrödinger para o tempo. Existem outras abordagens para tratar o problema do tempo na MQ, sendo exemplos [32, 33]. Essas diferentes abordagens representam esforços para elucidar a questão do tempo na MQ; algumas delas serão exploradas ao longo deste trabalho.

Há inúmeras discussões físicas e filosóficas relacionadas à MQ, porém, um fato é incontestável: o formalismo da MQ nunca falhou em descrever a distribuição de cliques nos detectores em experimentos. Esse sucesso pode levar alguns a acreditar que a MQ possui respostas objetivas (ainda que não interpretativas) para todos os fenômenos observáveis. Neste trabalho, demonstraremos que a MQ, sem hipóteses adicionais, não consegue prever aspectos temporais da estatística de sistemas simples. Por outro lado, como a MB recupera, de certa forma, a noção de determinismo através de suas trajetórias, permitindo previsões envolvendo tempo. Além da MB, apresentaremos uma teoria geral que pode ser aplicada a diferentes trajetórias, independentemente de o sistema físico ser quântico ou clássico. Isso nos permite fornecer previsões estatísticas para sistemas limitados por incertezas subjetivas, mas regidos por trajetórias determinísticas. Essa teoria permitirá evoluir a distribuição de probabilidade inicial e obter a distribuição para o tempo de voo. A partir do momento em que estejam compreendidos os elementos fundamentais para realizar previsões acerca do tempo, passaremos a comparar abordagens diferentes usando sistemas particulares. Testaremos o formalismo envolvendo a MB, uma descrição análoga à clássica, e uma aproximação semiclássica envolvendo trajetórias complexas. Além disso, estes resultados também serão confrontados com aqueles obtidos por meio da MQS. O objetivo final é demonstrar que teorias baseadas em trajetórias são capazes de fornecer previsões temporais que fogem do escopo da MQ, abrindo assim novas possibilidades para a compreensão da natureza no limite quântico. Além disso, demonstraremos que a previsão da MB para a distribuição de tempo de voo é válida

apenas para sistemas físicos específicos, enquanto a formulação que construiremos tem aplicação mais geral.

Esta dissertação está estruturada como segue.

No Capítulo 2, apresentamos a formulação da MQ por meio da interpretação de Copenhague, descrevendo seus postulados e prescrições matemáticas. Em seguida, introduzimos a interpretação bohmiana, seus postulados e formulações matemáticas. Encerramos o capítulo explorando um trabalho sobre MQS, de modo que se possa descrever previsões relacionadas com o tempo.

No Capítulo 3, apresentamos a teoria equipada com trajetórias (TET), que descreve sistemas determinísticos, garantidos por suas trajetórias, com incerteza nas condições iniciais. Analisamos dois casos particulares: o primeiro, análogo à MB, em que a equação de movimento é uma equação diferencial de primeira ordem. Nesse caso, trajetórias são determinadas apenas através da sua posição inicial, já que seus momentos estão codificados em uma função auxiliar. Apenas a posição inicial tem incerteza associada. O segundo, análogo ao caso clássico, em que, por hipótese, a equação de movimento que descreve o sistema é uma equação diferencial de segunda ordem, sendo, portanto, necessárias duas condições iniciais com incertezas independentes associadas. Demonstramos que a formulação pode ser estendida para qualquer quantidade física mapeada pela trajetória, permitindo a obtenção de sua distribuição de probabilidade. Além disso, apresentamos dois outros modelos vinculados à MQ para obter distribuições de probabilidade de tempos de voo.

No Capítulo 4, conduzimos três estudos de caso: (i) experimento da dupla-fenda, (ii) partícula livre e (iii) partícula em queda livre. Em cada exemplo, utilizamos as formulações e aproximações teóricas relevantes apresentadas nos capítulos anteriores para descrever e compreender os sistemas em estudo. Para cada caso, analisamos como a TET é capaz de prever o comportamento do sistema, comparando os resultados com as previsões da MQS. Ao fazer isso, podemos avaliar a eficácia da TET em sistemas em que a MQ é limitada.

Por fim, no Capítulo 5, concluímos e revisitamos os principais tópicos abordados no trabalho.

2 CONCEITOS PRELIMINARES

Neste capítulo, apresentamos as ideias que são fundamentais para a compreensão de nosso trabalho. Abordaremos os seguintes assuntos: noções básicas da teoria de probabilidade, postulados da mecânica quântica, mecânica bohmiana e operador tempo. Para uma organização lógica do capítulo, seguiremos a ordem em que os temas foram listados acima.

2.1 NOÇÕES BÁSICAS DA TEORIA DE PROBABILIDADE

Nesta seção, revisaremos algumas noções básicas da teoria de probabilidade que são fundamentais para a abordagem da MQ e da MC utilizada nesse trabalho, além da teoria geral equipada com trajetórias que será introduzida posteriormente. Para uma discussão mais aprofundada sobre os conceitos da teoria de probabilidade, consulte a referência [34].

Experimento Aleatório. Um experimento aleatório é um processo ou evento cujo resultado não pode ser determinado com certeza, pois está sujeito à incerteza ou variabilidade inerente. Em outras palavras, é um experimento no qual o resultado pode variar entre diferentes tentativas, mesmo que as condições iniciais sejam idênticas.

Espaço Amostral. É o conjunto de todos os possíveis resultados de um experimento. Ele representa todas as opções únicas e distintas que podem ser observadas ou obtidas. Por exemplo, ao lançar um dado justo de seis faces, o espaço amostral é $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

Variável Aleatória. Uma variável aleatória é uma função que associa valores numéricos aos resultados de um experimento aleatório. Em outras palavras, é uma função que mapeia o espaço amostral Σ do experimento aleatório em um conjunto de valores numéricos. Se o conjunto de valores que a variável aleatória pode assumir é enumerável, então ela é denominada variável aleatória discreta. Caso contrário, se o conjunto é contínuo, então a variável é denominada variável aleatória contínua. Por exemplo, no lançamento de um dado de seis lados, o espaço amostral é representado pelas faces do dado, que são enumeradas de 1 a 6. A variável aleatória associada ao resultado do lançamento é o valor na face voltada para cima, e como os valores possíveis são contáveis, temos uma variável aleatória discreta.

Função densidade de probabilidade. Uma função densidade de probabilidade $\wp(x)$ deve satisfazer as seguintes propriedades:

$$(i) \wp(x) \geq 0, \wp : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \forall x \in \mathbb{R};$$

$$(ii) \int_{-\infty}^{\infty} \wp(x) dx = 1.$$

A função $\wp(x)$ representa a distribuição de probabilidade de uma variável aleatória contínua X que, em princípio, pode assumir qualquer valor real. Para um intervalo finito $[x_1, x_2]$, a probabilidade¹ de X assumir valores nessa região é dada por

$$p(x_1 \leq X \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \wp(x) dx. \quad (2.1)$$

Se o intervalo for infinitesimal, ou seja, $x \in [x, x + dx]$, a probabilidade de X assumir um valor nesta região é dada por $\wp(x) dx$ e será representada simplesmente por $dp(x)$. Ou seja,

$$dp(x) = \wp(x) dx. \quad (2.2)$$

Note que $dp(x)$ é infinitesimal, já que a função densidade de probabilidade é contínua, por hipótese. Consequentemente, a probabilidade de X assumir precisamente o valor x é igual a zero.

Probabilidade Conjunta e Condicional. Sejam duas variáveis aleatórias contínuas X e Y , pertencentes ao mesmo espaço amostral Σ . A probabilidade conjunta $p(x, y)$ dos valores de X e Y estarem nos intervalos infinitesimais $[x, x + dx]$ e $[y, y + dy]$, simultaneamente, é definida por

$$p(x, y) \equiv p(x \cap y) = p(x|y) p(y), \quad (2.3)$$

onde $p(x \cap y)$ expressa a probabilidade da interseção dos eventos ocorrerem. A função $p(x|y)$ é a probabilidade de X estar no intervalo $[x, x + dx]$, condicionada ao fato de que Y está no intervalo $[y, y + dy]$.

É conveniente expressar a definição apresentada pela equação (2.3) em termos de distribuições de probabilidade:

$$dp(x, y) = \wp(x, y) dx dy \equiv \wp(x|y) dx \wp(y) dy$$

ou

$$\wp(x, y) = \wp(x|y) \wp(y). \quad (2.4)$$

As distribuições de probabilidade conjunta $\wp(x, y)$ e condicional $\wp(x|y)$ devem satisfazer as seguintes propriedades:

- (i) $\wp(x, y) \geq 0$ e $\wp(x|y) \geq 0$ para quaisquer valores x e y ;

¹ Por questão de conveniência e clareza, ao longo do restante do trabalho não explicitaremos a região à qual a probabilidade está se referindo, considerando que tal informação é inferida pelo contexto. Nesse sentido, utilizaremos a notação simplificada $p(x)$ para nos referirmos à probabilidade.

$$(ii) \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \varphi(x, y) = 1 \text{ e } \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x|y) = 1.$$

Note que as duas distribuições de probabilidade que aparecem nas equações acima não são equivalentes. Toda distribuição de probabilidade será representada por φ , de modo que a distinção entre uma distribuição conjunta, condicional, ou marginal (descrita abaixo) é feita pelos parâmetros de entrada explícitos e pela forma estrutural em φ .

Probabilidade Marginal. Considere novamente duas variáveis aleatórias contínuas X e Y pertencentes ao mesmo espaço amostral Σ . A probabilidade marginal de X , definida como $dp(x)$, é obtida a partir da distribuição de probabilidade de X isolada, desprezando-se qualquer informação sobre Y . Para obtê-la, integramos a probabilidade conjunta $\varphi(x, y)$ em relação a y :

$$\begin{aligned} dp(x) &\equiv \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x, y) dy \right] dx \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x|y) \varphi(y) dy \right] dx, \end{aligned}$$

onde a segunda igualdade é obtida a partir da definição da distribuição conjunta (2.4). Comparando-a com a equação (2.2), podemos escrever a distribuição de probabilidade marginal de X como

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x|y) \varphi(y) dy. \quad (2.5)$$

Note que $\varphi(x)$ representa a distribuição de probabilidade de X ignorando-se a informação sobre a variável Y . Além disso, as propriedades da probabilidade marginal podem ser obtidas a partir das propriedades da probabilidade conjunta e concordam com as condições apresentadas no início desta seção para a distribuição de uma única variável aleatória: $\varphi(x) \geq 0$ e $\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) = 1$.

Os conceitos da teoria de probabilidade estabelecidos anteriormente desempenham um papel fundamental em nossas discussões subsequentes. Em particular, esses conceitos serão essenciais na próxima seção, na qual exploraremos os postulados da MQ.

2.2 POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Nesta seção, vamos apresentar os postulados fundamentais da MQ, que constituem uma estrutura matemática e conceitual essencial para a compreensão dos sistemas físicos de natureza quântica. Os postulados básicos conectam o mundo físico com o formalismo matemático da MQ e foram obtidos por meio de um longo processo de tentativa e erro, tornando, por vezes, difícil identificar suas motivações.

De acordo com [35], uma teoria que tem como objetivo descrever um sistema físico deve ser capaz de responder às seguintes questões fundamentais:

- (i) Como descrever e preparar o estado de um sistema físico em um tempo t_0 ?
- (ii) Como descrever e prever o estado de um sistema em um tempo $t > t_0$?

Analisaremos como os postulados da MQ respondem a essas questões, dando ênfase à questão (ii) dada a sua relevância para o nosso trabalho. Apresentaremos os postulados de forma geral e abrangente, para depois mostrarmos como eles se reduzem à forma mais comum encontrada nos livros-texto [28, 36, 37].

Postulado 1. O estado de um sistema no instante t_0 é completamente determinado pelo operador densidade $\hat{\rho}$. Esse operador deve satisfazer as seguintes propriedades:

- (i) Hermiticidade: $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$;
- (ii) Traço unitário: $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$;
- (iii) Positividade: $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$ para todo $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, em que \mathcal{E} é o espaço de Hilbert.

A forma mais geral do operador densidade é descrita como uma soma convexa de estados completamente conhecidos, denominados estados puros $|\psi_j\rangle \langle \psi_j|$, que satisfazem todas as propriedades mencionadas anteriormente. Essa representação é expressa pela equação:

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad (2.6)$$

onde p_j são os pesos estatísticos associados aos estados puros $|\psi_j\rangle \langle \psi_j|$.

Postulado 2 (variável discreta). Toda grandeza física mensurável \mathcal{A} é descrita por um operador hermitiano \hat{A} atuante em \mathcal{E} . Os resultados possíveis para uma medição de \mathcal{A} são os autovalores de \hat{A} .

O operador \hat{A} , que, neste caso, também é chamado de observável \hat{A} , admite uma decomposição espectral, isto é, um estado qualquer $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ pode ser decomposto nos autovetores de \hat{A} . A decomposição espectral de \hat{A} é dada por

$$\hat{A} = \sum_n \left[a_n \sum_{i=1}^{g_n} (|\phi_n^i\rangle \langle \phi_n^i|) \right], \quad (2.7)$$

onde o primeiro somatório varre todos os possíveis autovalor a_n , com degenerescência g_n e autovetor $|\phi_n^i\rangle$ (i indexa cada degenerescência). Associamos um projetor ortogonal a cada autovalor a_n :

$$\hat{\mathcal{P}}_{a_n} = \sum_{i=1}^{g_n} (|\phi_n^i\rangle \langle \phi_n^i|), \quad (2.8)$$

que satisfaz as seguintes propriedades:

- (i) Idempotência: $\hat{\mathcal{P}}_{a_n}^k = \hat{\mathcal{P}}_{a_n}$;
- (ii) Ortogonalidade: $\hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\mathcal{P}}_{a_m} = \delta_{n,m} \hat{\mathcal{P}}_{a_n}$;
- (iii) Completeza: $\sum_n \hat{\mathcal{P}}_{a_n} = \mathbb{1}$, onde $\mathbb{1}$ é o operador identidade em \mathcal{E} .

Postulado 2 (Variável contínua). Toda grandeza física mensurável \mathcal{B} é descrita por um operador hermitiano \hat{B} atuante em \mathcal{E} . Os resultados possíveis de uma medição de \mathcal{B} são os autovalores $b \in \mathbb{R}$ do operador \hat{B} , sendo $\hat{B} |b\rangle = b |b\rangle$.

Além disso, o operador \hat{B} admite uma decomposição espectral, ou seja, é possível decompor um estado qualquer $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ nos autovetores do observável \hat{B} . A decomposição espectral de \hat{B} é dada por:

$$\hat{B} = \int_{-\infty}^{\infty} db b |b\rangle \langle b|. \quad (2.9)$$

Podemos associar um projetor ortogonal a cada autovalor $b \in [b_1, b_2]$:

$$\hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]} = \int_{b_1}^{b_2} db |b\rangle \langle b|. \quad (2.10)$$

Esse projetor ortogonal devem satisfazer as seguintes propriedades:

- (i) Idempotência: $\hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]}^k = \hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]}$;
- (ii) Ortogonalidade: $\hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]} \hat{\mathcal{P}}_{[b'_1, b'_2]} = \hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2] \cap [b'_1, b'_2]}$;
- (iii) Completeza: $\hat{\mathcal{P}}_{[-\infty, \infty]} = \mathbb{1}$.

Postulado 3 (variável discreta). Após medir uma grandeza física \mathcal{A} , descrita por um operador hermitiano \hat{A} atuando no espaço de Hilbert \mathcal{E} , e obter o resultado a_n , o estado do sistema descrito pelo operador densidade $\hat{\rho}$ colapsa para o estado $\hat{\rho}_{a_n}$ dado por

$$\hat{\rho}_{a_n} = \frac{\hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\rho} \hat{\mathcal{P}}_{a_n}}{\text{Tr}(\hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\rho})}, \quad (2.11)$$

onde $\hat{\mathcal{P}}_{a_n}$ é o projetor associado ao autovalor a_n , definido pela equação (2.8). O denominador na equação acima é necessário para que a matriz densidade resultante seja normalizada.

Postulado 3 (Variável contínua). Após medir uma grandeza física \mathcal{B} , descrita por um operador hermitiano \hat{B} atuando no espaço de Hilbert \mathcal{E} , e obter o resultado b , o

estado do sistema descrito pelo operador densidade $\hat{\rho}$ colapsa para o estado $\hat{\rho}_b$ dado por

$$\hat{\rho}_b = \frac{\hat{\mathcal{P}}_b \hat{\rho} \hat{\mathcal{P}}_b}{\text{Tr}(\hat{\mathcal{P}}_b \hat{\rho})}, \quad (2.12)$$

onde $\hat{\mathcal{P}}_b$ é o projetor associado ao autovalor b , definido pela equação (2.10) quando $b_1 \rightarrow b$ e $b_2 \rightarrow b + \delta b$ no limite $\delta b \rightarrow 0$.

Postulado 4. A evolução temporal do operador densidade $\hat{\rho}$ é governada pela equação de Liouville-von Neumann

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}], \quad (2.13)$$

onde \hat{H} é o operador hamiltoniano do sistema e o comutador $[\hat{H}(t), \hat{\rho}] = \hat{H}(t) \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H}(t)$. Se o estado é puro, $\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, a equação de Liouville-von Neumann se reduz à equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.14)$$

Em contraste com o colapso provocado pela medição (postulado 3), a evolução temporal de um estado isolado é contínua, suave e reversível.

Postulado 5 (variável discreta). Se a_n é um autovalor de um observável \hat{A} , a probabilidade condicional $p(a_n|t)$ de se obter a_n , em uma medição da grandeza física \mathcal{A} em um estado $\hat{\rho}(t)$, que evoluiu até o instante de tempo t , é dada por

$$p(a_n|t) = \text{Tr}[\hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\rho}(t)] \quad (2.15)$$

e o valor esperado, usando a equação (2.7), é dado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle (t) &= \text{Tr}[\hat{A} \hat{\rho}(t)] \\ &= \text{Tr} \left[\sum_n a_n \hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\rho}(t) \right] \\ &= \sum_n a_n \text{Tr}[\hat{\mathcal{P}}_{a_n} \hat{\rho}(t)] \\ &= \sum_n a_n p(a_n|t). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Se o estado é puro, $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, utiliza-se a equação (2.8), chegando-se à forma mais conhecida da regra de Born:

$$p(a_n|t) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \phi_n^i | \psi(t) \rangle|^2, \quad (2.17)$$

em que g_n é o grau de degenerescência do autovalor a_n e $\{|\phi_n^i\rangle\}$ com $i = \{1, \dots, g_n\}$ é uma base para espaço de Hilbert do autovalor correspondente.

Postulado 5 (variável contínua). A probabilidade condicional $p(b|t)$ de medir \mathcal{B} no intervalo finito $[b_1, b_2]$ para um estado $\rho(t)$, que evoluiu até o instante de tempo t , é dada por

$$p(b|t) = \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]} \hat{\rho}(t) \right], \quad (2.18)$$

onde $\hat{\mathcal{P}}_{[b_1, b_2]}$ é o projetor ortogonal definido pela equação (2.10). Se o estado é puro, isto é, $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, utiliza-se a equação (2.10) e encontra-se

$$p(b|t) = \int_{b_1}^{b_2} db |\psi(b, t)|^2, \quad (2.19)$$

onde $\psi(b, t) \equiv \langle b | \psi(t) \rangle$. Ao compararmos as equações (2.2) e (2.19), concluímos que a distribuição de probabilidade, condicionada ao instante de tempo t , é definida por

$$\wp(b|t) = |\psi(b, t)|^2. \quad (2.20)$$

É importante salientar que interpretamos as probabilidades e distribuições de probabilidade que decorrem do postulado 5 como condicionadas a um tempo t no qual o sistema evoluiu, isso difere da interpretação convencional presente em livros-texto de MQ. Esse ponto será relevante em discussões futuras.

Existe ainda um sexto postulado que se refere à propriedade de indistinguibilidade de partículas idênticas. Esse postulado sustenta que partículas que compartilham os mesmos estados quânticos são intrinsecamente indistinguíveis. Isso significa que não é possível atribuir identidades distintas a essas partículas idênticas, pois elas não possuem características individuais que as diferenciem quando ocupam os mesmos estados quânticos.

Na presente seção, expusemos os postulados da MQ, que adota uma interpretação não determinista, onde o estado do sistema só é definido quando medido. No entanto, na próxima seção, iremos explorar a MB, uma abordagem que reinterpreta a MQ, resgatando o determinismo da teoria por meio da introdução de dois postulados adicionais.

2.3 MECÂNICA BOHMIANA

Embora a MQ seja consistente com os testes experimentais, houve críticas com relação à sua natureza probabilística. Segundo EPR [8], a descrição do estado físico do sistema nesta teoria estaria incompleta e deveriam haver variáveis ocultas determinando o verdadeiro comportamento do sistema. Nesse sentido, o caráter probabilístico da MQ se explicaria pela impossibilidade de acessar tais variáveis. A primeira proposta de um modelo de variáveis ocultas, buscando contribuir com as ideias de EPR, foi apresentada por David Bohm [16, 17], e é conhecida atualmente como mecânica

bohmiana. Tal construção recupera a dinâmica baseada em trajetórias, fornecendo uma descrição análoga à MC, mas mantendo as previsões probabilísticas consistentes com a MQ. Nesta seção, apresentaremos primeiramente os fundamentos da MB e, em seguida, alguns exemplos.

Reinterpretação da equação de Schrödinger. A equação de Schrödinger, na representação de posição, descreve a evolução temporal da função de onda $\psi(x, t)$ de uma partícula sujeita a um potencial clássico $\mathcal{V}(x, t)$. Ela pode ser escrita como

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mathcal{V}(x, t) \right) \psi(x, t). \quad (2.21)$$

É possível reescrever a função de onda $\psi(x, t)$ na forma polar, $\psi(x, t) = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$, onde $\rho = |\psi(x, t)|^2$ e $S = S(x, t)$ são funções reais. Substituindo a representação polar da função de onda na equação de Schrödinger e separando o resultado em partes real e imaginária, obtemos

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \left(\frac{\rho \nabla S}{m} \right) = 0, \quad (2.22)$$

$$\partial_t S + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + \mathcal{V}(x, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = 0. \quad (2.23)$$

Com base nessas equações, a MB identifica trajetórias no cenário quântico, com uma analogia às trajetórias que surgem no formalismo de Hamilton-Jacobi (HJ). A formulação HJ é apresentada no apêndice A.3, e as equações de HJ são definidas pelas equações (A.29) e (A.30), que são repetidas abaixo para uma única variável canônica² ($j = 1$):

$$H(q, \partial_q s, t) + \frac{\partial s}{\partial t} = 0, \quad (2.24)$$

$$\dot{q} = \frac{\pi}{m} = \frac{1}{m} \frac{\partial s}{\partial q},$$

onde $s = s(q, \Pi, t)$, $\dot{\Pi} = 0$ e $\pi = \partial_q s$. A ideia é reinterpretar as equações (2.22) e (2.23) utilizando a intuição do formalismo de HJ. A equação (2.23) pode ser identificada como a equação de HJ quântica, na qual o termo adicional $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$, que não é previsto no modelo clássico, será posteriormente interpretado como o potencial quântico. No limite em que a constante \hbar tende a zero, a equação (2.23) adquire a mesma forma matemática que a equação de HJ clássica, dada pela equação (2.24). É importante destacar que, embora as equações (2.24) e (2.23) tenham a mesma forma matemática, elas apresentam diferenças conceituais. Observamos algumas similaridades entre S e

² No apêndice A.3, apresentamos o desenvolvimento do formalismo de HJ, onde empregamos as variáveis $\{q, \pi\}$ para representar as variáveis canonicamente conjugadas e $\{Q, \Pi\}$ como as variáveis canônicas resultantes de uma transformação canônica.

s , no entanto, sem fazer um postulado específico em relação a S , ambos permanecem conceitualmente distintos. A função s representa a solução do gerador das trajetórias clássicas, enquanto a função S é apenas uma fase da função de onda, nesse contexto.

A equação (2.22) é reconhecida como a equação de continuidade, na qual $\frac{\rho \nabla S}{m}$ é interpretada como a densidade de corrente de probabilidade. Logo, $\frac{\nabla S}{m}$ corresponde ao campo de velocidades que conduz a evolução dos elementos de probabilidade. Esta identificação é importante porque vincula posição da partícula em um dado instante de tempo, à sua velocidade no mesmo instante. A partir dessa analogia com o formalismo de HJ, Bohm postulou [16]:

Postulado 1. A dinâmica de uma partícula em uma realização específica de um ensemble experimental é determinada por uma trajetória contínua, obtida através da integração de

$$\dot{x} = v(x, t) = \frac{\nabla S(x, t)}{m}. \quad (2.25)$$

A partícula se move, a partir de $\psi(x, t_0)$, sob a influência da função de onda que é solução da equação de Schrödinger.

Vamos realizar a seguinte manipulação utilizando a função de onda:

$$\ln [\psi(x, t)] = \frac{1}{2} \ln [\rho(x, t)] + \frac{i}{\hbar} S(x, t).$$

A partir disso, podemos escrever:

$$S(x, t) = \hbar \operatorname{Im} (\ln \psi). \quad (2.26)$$

Para maior conveniência, reescrevemos o campo de velocidades em termos da função de onda, fazendo uso da equação (2.26):

$$v(x, t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\frac{\nabla \psi}{\psi} \right). \quad (2.27)$$

A partir desse postulado, podemos interpretar a equação (2.23) como a equação de HJ quântica, na qual a fase global S é o gerador das trajetórias bohmianas. No entanto, como já apontado anteriormente, essa equação apresenta um termo extra, não previsto classicamente, que é identificado como o potencial quântico:

$$Q(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}, \quad (2.28)$$

originado do, agora campo físico, $\psi(x, t)$. É importante lembrar que o formalismo de HJ e o formalismo newtoniano são equivalentes. No contexto da MB, essa equivalência surge a partir da analogia com o formalismo de HJ, o qual também apresenta uma versão "quântica" da equação de HJ. Assim, é possível expressar a dinâmica da MB

utilizando o formalismo newtoniano, ao adicionar o potencial quântico \mathcal{Q} à segunda lei de Newton:

$$F(\mathbf{x}, t) = m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\nabla [\mathcal{Q}(\mathbf{x}, t) + \mathcal{V}(\mathbf{x}, t)]. \quad (2.29)$$

A função de onda ψ é promovida a um campo físico real, em que o seu valor define a força "quântica" que a partícula naquele ponto estará sujeita.

Devido à presença do campo de velocidades, a equação diferencial que descreve o sistema tende a exibir menor linearidade em comparação com seu correspondente clássico. Portanto, não é absurdo esperar que as trajetórias bohmianas sejam mais instáveis (caóticas) em relação às trajetórias clássicas. Note que, dada a condição inicial³ $x(t_0)$, é possível, ao menos numericamente, resolver a equação (2.25), determinando o estado do sistema em qualquer instante t . Diante disso, para adequar este determinismo à natureza probabilística da MQ, Bohm considerou que a posição inicial é determinada por uma variável oculta, postulando o seguinte:

Postulado 2 (Hipótese de equilíbrio quântico). A posição inicial $x(t_0)$ é inacessível e distribui-se conforme $|\psi(x, t_0)|^2$.

Dessa forma, toda a incerteza na MB é oriunda da posição inicial, uma vez que a teoria é determinística, e as variáveis conectadas à posição inicial pela trajetória propagam tal incerteza. Em [19], é mostrado o princípio da *equivariância*, que, ao assumir a regra de Born para o instante inicial, garante, por conta da conservação de probabilidade (equação (2.22)), que essa valerá para qualquer tempo t . Tal propriedade é relevante, uma vez que justifica a equivalência entre as previsões probabilísticas da MQ e MB. É importante ressaltar que a estatística oriunda da MB é um reflexo da ignorância subjetiva do observador acerca das condições iniciais do sistema, sendo uma necessidade prática da teoria. Por outro lado, acredita-se que a estatística oriunda da MQ é uma propriedade intrínseca da natureza.

Uma consequência interessante da MB é que as trajetórias nunca se cruzam no espaço de posição e tempo, devido a serem originadas de equações diferenciais de primeira ordem. Isso é análogo ao caso das trajetórias clássicas, que nunca se cruzam no espaço de fase por serem derivadas de equações diferenciais de segunda ordem. Essa afirmação pode ser provada por contradição. Suponha que temos duas trajetórias bohmianas com condições iniciais diferentes, $\{x_{0,1}, x_{0,2}\}$, que se cruzam em um ponto X e instante T . Para que ocorra o cruzamento, as velocidades das trajetórias devem ser diferentes no ponto de cruzamento. No entanto, na teoria bohmiana, a velocidade da trajetória é definida pelo campo de velocidades, que é único em cada ponto do espaço-tempo. Portanto, as velocidades em (X, T) para ambas as trajetórias devem

³ A velocidade inicial está vinculada à posição inicial pelo campo de velocidades $v(t_0) = \frac{\nabla S[x(t_0), t_0]}{m}$.

ser iguais. Isso é uma contradição, e assim concluímos que trajetórias bohmianas com diferentes condições iniciais nunca se cruzam.

A partir desse ponto do texto, iremos restringir o problema a uma única dimensão. Nesta seção, vimos que a MB recupera o determinismo na MQ, já que as trajetórias são definidas pela posição x_0 . Como consequência, o intervalo de tempo t que a partícula leva para percorrer a distância entre x_0 e X , denominado tempo de voo, manifestará uma incerteza associada a x_0 , diferentemente da interpretação de Copenhague, na qual o tempo é apenas um parâmetro. Uma questão que pode surgir é: qual é a distribuição de probabilidade dos tempos de voo na MB? Na referencia [18], é apresentada uma proposta para obter tal distribuição de probabilidade. De maneira geral, um sistema, por hipótese, é descrito por uma trajetória $x = \phi(x_0, t)$, que conecta um ponto inicial x_0 a um ponto final x em um tempo t . A distribuição de probabilidade $\wp(f)$ para uma propriedade física f , que é função da condição inicial $f = F(x_0)$, é descrita pela seguinte equação

$$\wp(f) = \int dx_0 \wp(x_0) \delta(f - F(x_0)), \quad (2.30)$$

onde $\wp(x_0)$ é a distribuição de probabilidade para a posição inicial. A formulação acima é estabelecida com base na probabilidade marginal, conforme definida pela equação (2.5). No caso a função do tempo de chegada bohmiano⁴ $T(X, x_0)$, em que a posição final X é fixada, a distribuição de probabilidade do tempo de voo pode ser expressa utilizando a equação (2.30) da seguinte forma:

$$\wp(T|X) = \int dx_0 \wp(x_0) \delta(T(X, x_0) - t). \quad (2.31)$$

É necessário usar a propriedade da função delta de Dirac [38], que é dada por

$$\delta(g(x)) = \sum_{n=1}^N \frac{\delta(x - x_n)}{|\partial_x g(x)|_{x=x_n}}, \quad (2.32)$$

em que $g(x_n) = 0$ com $n = 1, 2, \dots, N$. Aplicando a propriedade da função delta de Dirac (2.32) em $\delta(\phi(x_0, T) - X)$, em que $\phi(x_0, T)$ representa a trajetória bohmiana que descreve o sistema, chega-se em

$$\delta(\phi(x_0, T) - X) = \frac{\delta(T(x_0, X) - t)}{|\partial_t \phi(x_0, t)|_{t=T(x_0, X)}}. \quad (2.33)$$

Isolando a função delta de Dirac referente ao tempo e definindo o campo de velocidades $\partial_t \phi(x_0, t) \equiv v(\phi(x_0, t), t)$, obtém-se

$$\begin{aligned} \delta(T(x_0, X) - t) &= |v(\phi(x_0, T), T)| \delta(\phi(x_0, T) - X) \\ &= |v(X, T)| \delta(\phi(x_0, T) - X). \end{aligned}$$

⁴ Consideramos que essa função $T(X, x_0)$ é biunívoca, ou seja, para um dado par (X, x_0) , obtemos apenas um único tempo de voo. Essa propriedade terá implicações em discussões futuras.

Substituindo a equação acima na equação (2.31), obtemos

$$\wp(T|X) = |v(X, T)| \int dx_0 \wp(x_0) \delta(\phi(x_0, T) - X),$$

onde usando a equação (2.30) identificamos a integral na equação acima como sendo a distribuição de probabilidade⁵ $\wp(X|T)$, com $F(x_0) = \phi(x_0, T)$:

$$\wp(X|T) = \int dx_0 \wp(x_0) \delta(\phi(x_0, T) - X).$$

A densidade de corrente de probabilidade é definida por $J(X, T) = v(X, T)\wp(X|T)$. Assim, impondo-se normalização, obtém-se

$$\wp_{ML}(T|X) = \frac{|v(X, T)|\wp(T|X)}{\int_0^\infty dt |v(X, t)|\wp(X|t)} = \frac{|J(X, T)|}{\int_0^\infty dt |J(X, t)|}. \quad (2.34)$$

Observe que essa formulação está restrita a trajetórias bohmianas que passam apenas uma vez pela coordenada X . Isso ocorre devido à imposição de que $T(x_0, X)$ seja uma função biunívoca no formalismo, garantindo a existência de um único tempo de voo possível para cada par (X, x_0) . No entanto, é possível estender essa formulação para descrever casos mais gerais, exigindo que, ao inverter a trajetória, sejam encontradas n funções $T_j(X, x_0)$. Tal generalização precisa ser incluída ao aplicar a propriedade (2.32). Neste trabalho, não abordaremos essa extensão específica para o trabalho de Muga-Leavens. No próximo capítulo, apresentaremos uma teoria geral capaz de descrever os casos em que a trajetória bohmiana atravessa a mesma coordenada X em instantes de tempo diferentes, mais de uma vez. Para obtermos uma melhor compreensão da MB, vamos aplicá-la a dois exemplos: o caso da partícula livre e o caso da partícula em queda livre.

2.3.1 Partícula livre em estado gaussiano

Suponha uma partícula livre ($\mathcal{V} = 0$) de massa m , em uma dimensão, inicialmente preparada em um estado gaussiano dado por

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{x,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x}_0)^2}{4\sigma_{x,0}^2}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\bar{p}_0 x\right], \quad (2.35)$$

onde $\sigma_{x,0}$ é a dispersão inicial da gaussiana, \bar{x}_0 é a posição média inicial, e \bar{p}_0 é o momento médio inicial. Para evoluir a função de onda, seguiremos a referência [35]. Lembrando que a transformada de Fourier \mathcal{F} converte uma função de onda na repre-

⁵ Outra maneira de obter essa distribuição é através de transformações de variáveis ($x \rightarrow t$), em que o termo $|v(X, T)|$ surge do determinante da matriz jacobiana associada à transformação.

sentação de posição para representação de momento, obtemos

$$\begin{aligned}\varphi(p,0) &= \mathcal{F}\{\psi(x,0)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\psi(x,0) \exp\left(-i \frac{px}{\hbar}\right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma_{p,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(p-\bar{p}_0)^2}{4\sigma_{p,0}^2}\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-\bar{p}_0)\bar{x}_0\right],\end{aligned}\quad (2.36)$$

em que $\sigma_{p,0} = \frac{\hbar}{2\sigma_{x,0}}$ é a dispersão inicial do momento. O hamiltoniano é dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m},$$

portanto, o operador de evolução temporal é definido como $\hat{U}_t = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$. Ao evoluirmos a função de onda na representação de momento, lembrando que $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$, obtemos:

$$\begin{aligned}\varphi(p,t) &= \langle p|\hat{U}_t|\psi\rangle \\ &= \langle p|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{P}^2}{2m}t\right)|\psi\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\varphi(p,0).\end{aligned}$$

Para retornar ao espaço de posição, podemos aplicar a transformada de Fourier inversa, dada por:

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right) \varphi(p,0) \exp\left(i \frac{px}{\hbar}\right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma_{x,t}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0-\frac{\bar{p}_0 t}{m})^2}{4\sigma_{x,t}^2}\right] e^{iS(x,t)/\hbar},\end{aligned}\quad (2.37)$$

sendo que as expressões para a dispersão do pacote gaussiano no instante t e a função S são dadas, respectivamente, por

$$\sigma_{x,t} = \sigma_{x,0} \sqrt{1 + \left(\frac{t\hbar}{2m\sigma_{x,0}^2}\right)^2}, \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned}S(x,t) &= \frac{\hbar^2 t}{8m\sigma_{x,t}^2\sigma_{x,0}^2} \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0 t}{m}\right)^2 + \bar{p}_0 \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0 t}{m}\right) + \\ &+ \frac{\bar{p}_0^2}{2m}t - \frac{\hbar}{2} \arctan\left[\frac{\hbar t}{2m\sigma_{x,0}^2}\right].\end{aligned}\quad (2.39)$$

A equação (2.37) está expressa na forma polar, de modo que

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,t}^2}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0-\frac{\bar{p}_0 t}{m})^2}{2\sigma_{x,t}^2}\right] \quad (2.40)$$

representa a densidade de probabilidade da partícula estar em x no instante t , e a fase $S(x, t)$ é o gerador de trajetórias bohmianas. As trajetórias bohmianas são obtidas resolvendo

$$\dot{x} = v(x, t) = \frac{\partial_x S(x, t)}{m} = \frac{\hbar^2 t}{4m^2 \sigma_{x,t}^2 \sigma_{x,0}^2} \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m} t \right) + \frac{\bar{p}_0}{m}, \quad (2.41)$$

o que leva a

$$x(x_0, t) = \bar{x}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m} t + \frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}} (x_0 - \bar{x}_0), \quad (2.42)$$

em que x_0 é a posição inicial da trajetória, distribuída segundo $|\psi(x_0, 0)|^2$, e o momento inicial da trajetória pode ser calculado com $p_0 = \partial_x S(x, t)|_{x=x_0, t=0}$. Se a posição inicial for igual à posição média do pacote gaussiano inicial ($x_0 = \bar{x}_0$), a trajetória bohmiana será a trajetória clássica seguida pelo centro do pacote gaussiano. Para obter a distribuição de probabilidade de tempo de voo t para a MB, restringindo essa observação a uma posição final x , utilizamos as equações (2.34) e (2.41). Assim, encontra-se a distribuição de probabilidade

$$\wp_{ML}(t|x) = \frac{\rho(x, t) |v(x, t)|}{N} = \frac{1}{N} \left| \frac{\bar{p}_0}{m} + \frac{t}{\tau^2} \frac{x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m} t}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \right| |\psi(x, t)|^2, \quad (2.43)$$

onde

$$\tau = \frac{2m\sigma_{x,0}^2}{\hbar} \quad \text{e} \quad N = \int_0^\infty dt \rho(x, t) |v(x, t)|. \quad (2.44)$$

A equação (2.43) é consistente com o comportamento esperado da distribuição de tempos de voo. Observa-se que, nas proximidades de $x = \bar{x}_0$, é esperado que um tempo de voo infinito corresponda a uma probabilidade nula, conforme $t \rightarrow \infty$. A distribuição $\wp_{MB}(t|x)$ tende a zero devido a $|\psi(\bar{x}_0, t)|^2 \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Da mesma forma, espera-se que a distribuição se anule nas proximidades de $X \gg \bar{x}_0$ quando $t \rightarrow 0$, novamente devido à distribuição de probabilidade em x que se anula nesse caso. Na figura 1, traçamos a distribuição de probabilidade do tempo de voo para a partícula livre, conforme a equação (2.43). Para cada curva, variamos a posição de chegada da partícula, representada por x .

2.3.2 Partícula em queda livre preparada em um estado gaussiano

O caso anterior pode ser facilmente estendido para tratarmos de uma partícula em um campo gravitacional uniforme $\hat{V} = -mg\hat{Y}$, em que m é a massa da partícula e g a aceleração da gravidade. Para diferenciar tais problemas, aqui faremos a substituição $x \rightarrow y$. Assim, a partícula é preparada em um estado gaussiano dado por

$$\psi(y, t = 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{y,0}^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(y - \bar{y}_0)^2}{4\sigma_{y,0}^2} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \bar{p}_0 y \right]. \quad (2.45)$$

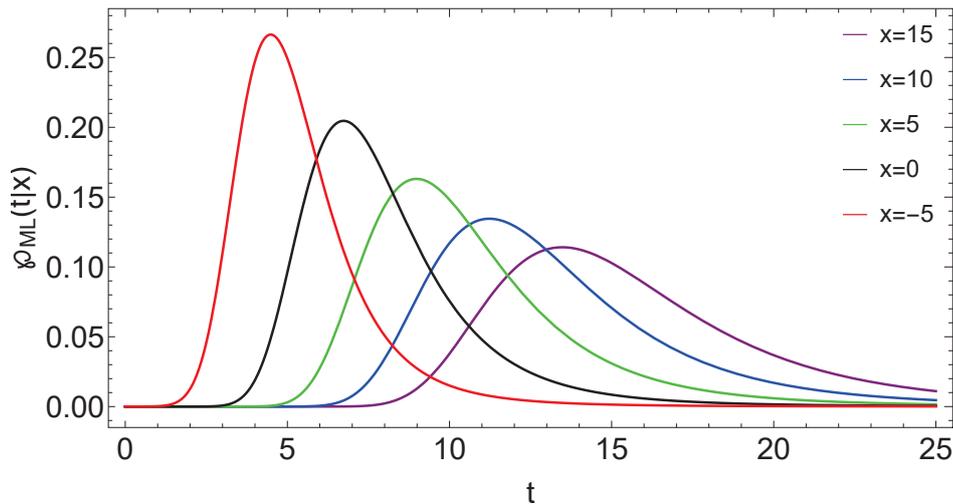


FIGURA 1 – Distribuição de probabilidade de tempo de voo para a partícula livre, obtida por meio da equação (2.43). Utilizamos os seguintes conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{x}_0 = -15, \bar{p}_0 = 1, m = 0.5\}$. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias. Variamos a posição de chegada para cada curva: $\{-5, 0, 5, 10, 15\}$.

O hamiltoniano para o sistema em questão pode ser expresso como

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + mg\hat{Y}.$$

Para evoluir a função de onda, empregaremos o método da representação de interação, introduzindo a definição $\hat{W} \equiv mg\hat{Y}$. Assim, realizaremos a transformação

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\hat{W}t/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (2.46)$$

onde $|\psi(t)\rangle$ representa a solução da equação de Schrödinger. Aplicaremos essa transformação à equação de Schrödinger, obtendo

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar\partial_t \left(e^{i\hat{W}t/\hbar} |\psi(t)\rangle \right) \\ &= -\hat{W}e^{i\hat{W}t/\hbar} |\psi(t)\rangle + i\hbar e^{i\hat{W}t/\hbar} \partial_t |\psi(t)\rangle \\ &= -\hat{W}e^{i\hat{W}t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{i\hat{W}t/\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ &= -\hat{W}e^{i\hat{W}t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{i\hat{W}t/\hbar} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{W} \right) e^{-i\hat{W}t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle \\ &= \frac{1}{2m} e^{i\hat{W}t/\hbar} \hat{p}^2 e^{-i\hat{W}t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle \\ &= \frac{1}{2m} e^{i[\hat{W}, \bullet]t/\hbar} \hat{p}^2 |\psi_I(t)\rangle, \end{aligned}$$

em que $[\hat{W}, \bullet]$ é um superoperador, ou seja, um operador que atua em outro operador, e sua regra de atuação é definida por $[\hat{W}, \bullet]\hat{A} = [\hat{W}, \hat{A}]$. Para obter mais detalhes sobre os cálculos mencionados acima, recomenda-se consultar o trabalho [39]. A regra para uma potência de tal superoperador pode ser expressa como:

$$[\hat{A}, \bullet]^n \hat{B} = [\hat{A}, \bullet]^{n-1} [\hat{A}, \bullet] \hat{B} = [\hat{A}, \bullet]^{n-2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, \hat{B}]]]. \quad (2.47)$$

Dessa forma, podemos reescrever a exponencial como:

$$\begin{aligned}
e^{i[\hat{W}, \bullet]t/\hbar} \hat{P}^2 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\hat{W}, \bullet]^n \hat{P}^2}{n!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\hat{W}, [\hat{W}, \dots [\hat{W}, \hat{P}^2]]]}{n!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^n \\
&= \hat{P}^2 - 2mgt\hat{P} + m^2g^2t^2\mathbb{1} \\
&= (\hat{P}^2 - mgt\mathbb{1})^2.
\end{aligned}$$

Lembre-se que a cadeia de comutadores terá um tamanho de n , conforme ilustrado na equação (2.47). Portanto

$$i\hbar\partial_t |\psi_I(t)\rangle = \frac{(\hat{P}^2 - mgt\mathbb{1})^2}{2m} |\psi_I(t)\rangle, \quad (2.48)$$

onde $\hat{H}_I = \frac{(\hat{P}^2 - mgt\mathbb{1})^2}{2m}$. Podemos resolver a equação (2.48) diretamente e obter a solução na representação original utilizando $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{W}t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle$:

$$\begin{aligned}
|\psi_I(t)\rangle &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_I(t')\right] |\psi(0)\rangle \\
&= \exp\left[-\frac{img^2t^3}{6\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{P}^2t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{igt^2\hat{P}}{2\hbar}\right] |\psi(0)\rangle.
\end{aligned} \quad (2.49)$$

O fator $\exp\left[-\frac{img^2t^3}{6\hbar}\right]$ corresponde apenas a uma fase global e pode ser ignorada. Por outro lado, a exponencial unitária $\exp\left[\frac{igt^2\hat{P}}{\hbar}\right]$ é conhecida como o termo de deslocamento, pois desloca a função de onda $\psi(y, 0)$ em $-gt^2/2$. A exponencial unitária $\exp\left[-\frac{i\hat{P}^2t}{2m\hbar}\right]$ é o operador responsável pela dinâmica da dispersão do pacote. Vale ressaltar que ambas as operações comutam entre si. Assim, retornando à representação original, obtemos:

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{W}t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle \\
&= \exp\left[-\frac{imgt\hat{Y}}{\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{P}^2t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{igt^2\hat{P}}{2\hbar}\right] |\psi(0)\rangle,
\end{aligned} \quad (2.50)$$

onde a exponencial $\exp\left[-\frac{imgt\hat{Y}}{\hbar}\right]$ é responsável pelo deslocamento no momento médio. Finalmente, encontramos a função de onda na representação de posição:

$$\begin{aligned}
\psi(y, t) &= \langle y|\psi(t)\rangle = \langle y|\exp\left[-\frac{imgt\hat{Y}}{\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{P}^2t}{2m\hbar}\right] \exp\left[\frac{igt^2\hat{P}}{\hbar}\right] |\psi(0)\rangle \\
&= \exp\left[-\frac{imgty}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{\hbar t\partial_y^2}{2m}\right] \exp\left[\frac{gt^2\partial_y}{2}\right] \langle y|\psi(0)\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi\sigma_{y,t}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(y - \bar{y}_t)^2}{4\sigma_{y,t}^2}\right] e^{iS(y,t)/\hbar},
\end{aligned} \quad (2.51)$$

onde

$$\sigma_{y,t} = \sigma_{y,0} \sqrt{1 + \left(\frac{t\hbar}{2m\sigma_{y,0}^2} \right)^2}$$

é a largura do pacote no tempo t ,

$$\bar{y}_t = \bar{y}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m}t - \frac{gt^2}{2}$$

é a posição média da partícula e $S(y,t)$ é o gerador de trajetórias bohmianas dado por

$$S(y,t) = \frac{\hbar^2 t}{8m\sigma_y^2\sigma_{y,0}^2} (y - \bar{y}_t)^2 + (\bar{p}_0 - mgt)(y - \bar{y}_t) + \frac{\bar{p}_0^2}{2m}t - \frac{\hbar}{2} \arctan \left[\frac{\hbar t}{2m\sigma_{y,0}^2} \right]. \quad (2.52)$$

Para encontrar a família de trajetórias bohmianas, é necessário resolver a equação

$$\dot{y} = \frac{\partial_y S(y,t)}{m} = \frac{\hbar^2 t}{4m^2\sigma_y^2\sigma_{y,0}^2} (y - \bar{y}_t) + \frac{p_0}{m} - gt, \quad (2.53)$$

encontrando

$$y(y_0, t) = \bar{y}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m}t - \frac{gt^2}{2} + \frac{\sigma_y}{\sigma_{y,0}} (y_0 - \bar{y}_0), \quad (2.54)$$

onde y_0 é a condição inicial. Obtemos a distribuição de probabilidade de tempo de voo para a MB, utilizamos as equações (2.34) e (2.53). Assim, a distribuição de probabilidade condicional é dada por

$$\begin{aligned} \wp_{MB}(t|y) &= \frac{|J(y,t)|}{N} = \frac{\rho(y,t) |v(y,t)|}{N} \\ &= \frac{1}{N} \left| \frac{t}{\tau^2} \frac{(y - \bar{y})}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} + \frac{\bar{p}_0}{m} - gt \right| |\psi(y,t)|^2 \end{aligned} \quad (2.55)$$

onde τ é dado pela equação (2.44) e

$$N = \int dt \rho(y,t) |v(y,t)|. \quad (2.56)$$

Observe que, quando $g = 0$, a equação (2.55) se reduz ao resultado da partícula livre (2.43). Na figura 2, traçamos a distribuição de probabilidade do tempo de voo para a partícula em queda livre, conforme a equação (2.55). Para cada curva, variamos a posição de chegada da partícula, representada por y .

No próximo capítulo, discutiremos o problema da partícula em queda livre em duas dimensões. No grau de liberdade x , a partícula estará livre, enquanto que, no grau de liberdade y , ela estará imersa em um campo gravitacional. Como esse problema é separável (ou seja, $H = H_x + H_y$), se considerarmos um estado inicial separável

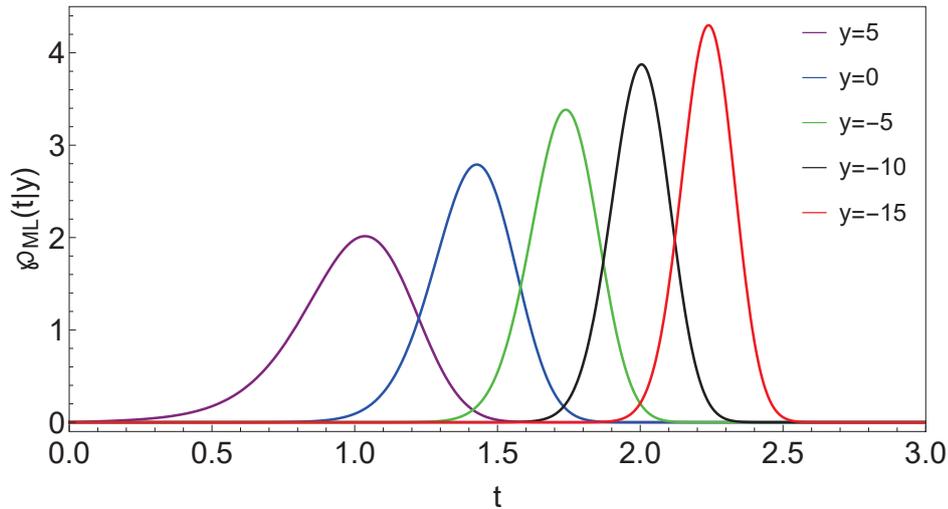


FIGURA 2 – Distribuição de probabilidade de tempo de voo para a partícula em queda livre, obtida por meio da equação (2.55). Utilizamos os seguintes conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{y}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 1\}$. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias. Variamos a posição de chegada para cada curva: $\{5, 0, -5, -10, -15\}$.

($\psi(x, y, 0) = \psi_x(x, 0) \psi_y(y, 0)$), as trajetórias bohmianas poderão ser calculadas independentemente para cada grau de liberdade. Ambos os casos já foram resolvidos, portanto, a descrição bohmiana para o problema da queda livre em duas dimensões é orientada pelas trajetórias

$$y(y_0, t) = \bar{y}_0 + \frac{\bar{p}_{y,0}}{m}t - \frac{gt^2}{2} + \frac{\sigma_{y,t}}{\sigma_{y,0}}(y_0 - \bar{y}_0)$$

$$x(x_0, t) = \bar{x}_0 + \frac{\bar{p}_{x,0}}{m}t + \frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}}(x_0 - \bar{x}_0)$$

onde as condições iniciais são dadas por $\{y_0, x_0\}$ e $\{\bar{p}_{y,0}, \bar{p}_{x,0}\}$ representam os momentos iniciais médios.

Nesta seção, nos aprofundamos no formalismo da MB e em como essa interpretação resgata o determinismo na MQ. Demonstramos que, por meio dessa abordagem, é possível obter a distribuição de probabilidade de tempos de voo sem a necessidade de introduzir conceitos *ad hoc*. Na próxima seção, iremos explorar a ideia de como suplementar a MQ com conceitos relacionados ao tempo, a fim de obter as distribuições de tempo de voo.

2.4 OPERADOR TEMPO

2.4.1 Teorema de Pauli

No livro-texto [28], Wolfgang Pauli apresenta o famoso estudo que exclui a possibilidade de construção de um operador auto-adjunto canonicamente conjugado com o operador hamiltoniano de um sistema limitado inferiormente, ou seja, que possui

um estado fundamental. Nesta seção, apresentamos o argumento conhecido como teorema de Pauli. A demonstração que seguiremos está baseada no trabalho [40].

Teorema de Pauli: Considere um sistema físico no qual é possível construir um operador autoadjunto $\hat{T} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, sendo $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ o conjunto de todos os operadores lineares que atuam no espaço de Hilbert \mathcal{H} . Esse operador deve satisfazer a relação canônica de comutação com o operador hamiltoniano:

$$[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar \mathbb{1}. \quad (2.57)$$

Então, o hamiltoniano $\hat{H} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ deve ser um operador ilimitado, o que significa que seus autovalores abrangem todo o eixo real.

Prova: Para provar o teorema, vamos supor que exista um operador autoadjunto \hat{T} que satisfaça a relação de comutação (2.57). Podemos definir o operador de translação $\hat{U}_\gamma = e^{-i\gamma\hat{T}/\hbar}$, que desloca o autoestado de energia por um valor $\gamma \in \mathbb{R}$. Para demonstrar tal propriedade, primeiro provamos a relação de comutação:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{U}_\gamma] &= \frac{d\hat{U}_\gamma}{d\hat{T}} [\hat{H}, \hat{T}] \\ &= \left(-\frac{i\gamma}{\hbar}\right) \hat{U}_\gamma i\hbar \mathbb{1} \\ &= \gamma \hat{U}_\gamma. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Agora, vamos aplicar o operador hamiltoniano \hat{H} em $\hat{U}_\gamma |E\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{H} (\hat{U}_\gamma |E\rangle) &= ([\hat{H}, \hat{U}_\gamma] + \hat{U}_\gamma \hat{H}) |E\rangle \\ &= (\gamma \hat{U}_\gamma + \hat{U}_\gamma E) |E\rangle \\ &= (E + \gamma) (\hat{U}_\gamma |E\rangle). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Se $\gamma \in \mathbb{R}$, então a equação (2.59) implica diretamente que o hamiltoniano é ilimitado, ou seja, o conjunto de autovalores do hamiltoniano é todo eixo real. Dessa forma, demonstramos o teorema de Pauli. ■

Como consequência, se o sistema for limitado inferiormente⁶ (superiormente), ou seja, se os autovalores de energia têm um valor mínimo (máximo) E_0 , para o qual todos os outros autovalores $E > E_0$ ($E < E_0$), então uma ou ambas das suposições iniciais feitas sobre o operador \hat{T} devem ser falsas. Essas suposições são: satisfazer a relação canônica de comutação com o operador hamiltoniano \hat{H} e ser autoadjunto. Caso a segunda seja falsa, o operador tempo não será um observável no formalismo da MQ. Nesse contexto, não seria possível construir um operador tempo que seja simultaneamente autoadjunto e canonicamente conjugado ao hamiltoniano.

⁶ Essa hipótese é bastante natural, uma vez que sistemas físicos reais geralmente possuem um estado fundamental.

No próximo segmento, abordaremos a construção do operador tempo para a partícula livre, o qual, embora não seja auto-adjunto, é canonicamente conjugado ao hamiltoniano, respeitando o teorema de Pauli. Para obtermos as distribuições de probabilidade, complementaremos a MQ com alguns conceitos adicionais.

2.4.2 Distribuição de Kijowski

Nesta seção, iremos derivar a distribuição de tempo de chegada para uma partícula livre, conhecida como distribuição de Kijowski. No entanto, diferentemente da derivação original proposta por J. Kijowski [29], não faremos aproximações baseadas em distribuições de probabilidade de tempo de chegada para *ensembles* clássicos. Começamos considerando uma partícula livre de massa m com o hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Para definir o operador tempo, buscaremos inspiração na descrição clássica do sistema. Seja, portanto, o sistema clássico análogo, com velocidade constante $v = p/m$ e condição inicial $x(t = 0) = x_0$. O tempo de chegada em $x = 0$ é dado por

$$t = -\frac{x_0}{v} = -\frac{x_0 m}{p} = -m x_0 p^{-1}. \quad (2.60)$$

É importante destacar que o tempo de chegada pode ser negativo, indicando que a partícula passou pela origem em um instante anterior ao estabelecido como $t = 0$. É natural quantizar o tempo clássico de chegada usando a regra de simetrização para a equação (2.60)

$$\hat{T} = -\frac{m}{2} (\hat{X}\hat{P}^{-1} + \hat{P}^{-1}\hat{X}). \quad (2.61)$$

O operador tempo descrito acima é conhecido como o operador tempo de Aharonov-Bohm, proposto no artigo [41]. Note que o operador tempo de Aharonov-Bohm é canonicamente conjugado ao hamiltoniano da partícula livre $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{T}] &= -\frac{1}{4} \left([\hat{p}^2, \hat{X}\hat{P}^{-1}] + [\hat{p}^2, \hat{P}^{-1}\hat{X}] \right) \\ &= -\frac{1}{4} \left(\hat{p}^2 \hat{X} \hat{P}^{-1} - \hat{X} \hat{P}^{-1} \hat{p}^2 + \hat{p}^2 \hat{P}^{-1} \hat{X} - \hat{P}^{-1} \hat{X} \hat{p}^2 \right) \\ &= -\frac{1}{4} \left(\hat{P} ([\hat{P}, \hat{X}] + \hat{X}\hat{P}) \hat{P}^{-1} - \hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X} - \hat{P}^{-1} ([\hat{X}, \hat{P}] + \hat{P}\hat{X}) \hat{P} \right) \\ &= -\frac{1}{4} \left(\hat{P} (-i\hbar\mathbb{1} + \hat{X}\hat{P}) \hat{P}^{-1} - \hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X} - \hat{P}^{-1} (i\hbar\mathbb{1} + \hat{P}\hat{X}) \hat{P} \right) \\ &= -\frac{1}{4} (-i\hbar\mathbb{1} + \hat{P}\hat{X} - \hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X} - i\hbar\mathbb{1} - \hat{X}\hat{P}) \\ &= \frac{1}{4} (2 [\hat{X}, \hat{P}] + 2i\hbar\mathbb{1}) \\ &= i\hbar\mathbb{1}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Portanto, para satisfazer o teorema de Pauli, esse operador não pode ser auto-adjunto⁷. Para determinar a distribuição de probabilidade associada ao tempo de chegada é necessário construir uma medida valorada por operador positivo (MVOP) em \mathbb{R} do operador tempo. Para isso, é conveniente definir os autoestados do operador tempo \hat{T} como $|t\rangle$, de modo que

$$\hat{T} |t\rangle = t |t\rangle,$$

com $t \in \mathbb{R}$. Utilizando a equação (2.61) na representação de momento, e considerando que $\hat{X} = i\hbar \frac{d}{dp}$, podemos obter a expressão para a quantidade $\langle p | \hat{T} | \varphi \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{T} | \varphi \rangle &= -\frac{m}{2} \langle p | \left(\hat{X} \hat{P}^{-1} + \hat{P}^{-1} \hat{X} \right) | \varphi \rangle \\ &= -\frac{im\hbar}{2} \left(\frac{d}{dp} \left[\frac{\varphi(p)}{p} \right] + \frac{1}{p} \frac{d\varphi(p)}{dp} \right) \\ &= -\frac{im\hbar}{2} \left(\frac{1}{p} \frac{d\varphi(p)}{dp} - \frac{\varphi(p)}{p^2} + \frac{1}{p} \frac{d\varphi(p)}{dp} \right) \\ &= \frac{im\hbar}{2} \left(\frac{\varphi(p)}{p^2} - \frac{2}{p} \frac{d\varphi(p)}{dp} \right), \end{aligned} \quad (2.63)$$

em que $\langle p | \varphi \rangle \equiv \varphi(p)$ é a amplitude de probabilidade de encontrarmos a partícula com momento p . Definindo-se $\zeta_t(p) = \langle p | t \rangle$, escreve-se

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{T} | t \rangle &= t \zeta_t(p), \\ &= -\frac{im\hbar}{2} \langle p | \left(\frac{d}{dp} \hat{P}^{-1} + \hat{P}^{-1} \frac{d}{dp} \right) | t \rangle \\ &= -\frac{im\hbar}{2} \left(\frac{d}{dp} \left[\frac{\zeta_t(p)}{p} \right] + \frac{1}{p} \frac{d\zeta_t(p)}{dp} \right) \\ &= \frac{im\hbar}{2} \left(\frac{\zeta_t(p)}{p^2} - \frac{2}{p} \frac{d\zeta_t(p)}{dp} \right), \end{aligned}$$

a qual produz

$$\frac{d\zeta_t(p)}{dp} = \left[\frac{1}{2p} + \frac{ipt}{m\hbar} \right] \zeta_t(p).$$

Observa-se que a equação diverge em $p = 0$, portanto, podemos considerar duas famílias de funções $\zeta_t(p)$ possivelmente distintas para $p > 0$ e $p < 0$. Para diferenciar as duas famílias, utiliza-se o subíndice $\lambda = \pm 1$, com $\lambda = +1$ para $p > 0$, e $\lambda = -1$ para $p < 0$. Dessa forma, escrevem as soluções $\langle p | t \rangle$ da equação anterior como

$$\zeta_t(p, \lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\hbar}} \theta(\lambda p) \sqrt{|p|} e^{ip^2 t/2m} = \langle p | t, \lambda \rangle, \quad (2.64)$$

⁷ O operador tempo de Aharonov-Bohm é hermitiano, porém não é auto-adjunto. Para mais detalhes, consulte o trabalho [42, 43].

em que $\theta(\lambda p)$ é a função degrau definida por

$$\theta(\lambda p) = \begin{cases} 1, & \text{se } \lambda p \geq 0 \\ 0, & \text{se } \lambda p < 0. \end{cases} \quad (2.65)$$

A constante $\frac{1}{\sqrt{2\pi m\hbar}}$ foi incluída para conveniência futura. Note que as autofunções $\zeta_t(p, \lambda)$ não pertencem ao conjunto das funções de quadrado integrável definidas sobre algum intervalo ($L^2(\mathbb{R})$), já que elas não são normalizáveis. No entanto, assim como ocorre no caso de ondas planas (autofunções de momento na representação de posição) que não são normalizadas, trataremos de forma análoga os autovetores $|t, \lambda\rangle$. Entretanto, há uma diferença nessa analogia: enquanto a base $\{|x\rangle\}$ e a base $\{|p\rangle\}$ são ortogonais, o mesmo não ocorre para os autoestados do tempo de voo \hat{T} . Verifica-se a ortogonalidade dos estados $|t, \lambda\rangle$, para $\lambda \neq \lambda'$

$$\begin{aligned} \langle t, \lambda | t', \lambda' \rangle &= \int dp \langle t, \lambda | p \rangle \langle p | t', \lambda' \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi m} \int dp \theta(p) \theta(-p) |p| e^{ip^2(t'-t)/2m} = 0. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Porém, se $\lambda = \lambda'$, a expressão para o produto interno $\langle t, \lambda | t', \lambda \rangle$ vale:

$$\begin{aligned} \langle t, \lambda | t', \lambda \rangle &= \int dp \langle t, \lambda | p \rangle \langle p | t', \lambda \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi m} \int dp \theta(p) |p| e^{ip^2(t'-t)/2m} \\ &= \frac{1}{2\pi m} \int_0^\infty dp p e^{ip^2(t'-t)/2m}. \end{aligned}$$

Resolvendo a integral, obtém-se

$$\langle t, \lambda | t', \lambda \rangle = \frac{1}{2} \delta(t' - t) + \frac{i}{2\pi(t' - t)}. \quad (2.67)$$

Para obter mais detalhes sobre os cálculos mencionados anteriormente, é recomendado consultar o trabalho [42]. O resultado mostra que o autoestado $|t, \lambda\rangle$ não forma um conjunto ortogonal em \mathcal{H} . No entanto, isso não é surpreendente, pois o operador \hat{T} não é auto-adjunto e, portanto, não podemos esperar que seus autoestados sejam ortogonais para diferentes autovalores t . A seguir, apresenta-se a relação de completeza do estado $|t, \lambda\rangle$, a partir da expressão

$$\sum_\lambda \int_{-\infty}^\infty dt \langle p' | t, \lambda \rangle \langle t, \lambda | p \rangle = \frac{1}{2\pi m} \sum_\lambda \int_{-\infty}^\infty dt \sqrt{|p|} \sqrt{|p'|} \theta(\lambda p) \theta(\lambda p') e^{it(p^2 - p'^2)/2m}. \quad (2.68)$$

Lembrando-se da forma integral da função delta de Dirac

$$\delta(u - u') = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{it(u-u')}, \quad (2.69)$$

escreve-se

$$\frac{1}{2m\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(p^2-p'^2)/2m} = \frac{1}{m} \delta\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m}\right). \quad (2.70)$$

Utilizando-se a propriedade da função delta de Dirac dada pela equação (2.32), chega-se a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(p^2-p'^2)/2m} &= \frac{1}{m} [\delta(p - |p'|) + \delta(p + |p'|)] \left| \frac{m}{p'} \right| \\ &= \frac{1}{|p'|} [\delta(p - |p'|) + \delta(p + |p'|)]. \end{aligned}$$

A partir da equação (2.68) e de

$$\theta(\lambda p)\theta(\lambda p') [\delta(p - |p'|) + \delta(p + |p'|)] = \delta(p - p'),$$

temos

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle p'|t, \lambda \rangle \langle t, \lambda|p \rangle &= \sum_{\lambda} \sqrt{|p|} \sqrt{|p'|} \theta(\lambda p)\theta(\lambda p') \frac{1}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(p^2-p'^2)/2m} \\ &= \sqrt{|p|} \sqrt{|p'|} \frac{1}{|p|} \delta(p - p') \\ &= \delta(p - p'). \end{aligned}$$

Utilizando-se a identidade $\langle p'|p \rangle = \delta(p - p')$, identifica-se que

$$\sum_{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dt |t, \lambda \rangle \langle t, \lambda| = \mathbb{1}. \quad (2.71)$$

Apresentaremos o MVOP do operador tempo para a partícula livre. Para cada intervalo $\Delta t = (t_1, t_2)$, define-se o operador $\hat{\mathbb{T}}(\Delta t)$ como a soma sobre todos os possíveis estados da partícula livre em um intervalo de tempo Δt entre t_1 e t_2 , dado por

$$\hat{\mathbb{T}}(\Delta t) = \sum_{\lambda} \int_{t_1}^{t_2} dt |t, \lambda \rangle \langle t, \lambda|. \quad (2.72)$$

À medida que os limites $t_1 \rightarrow -\infty$ e $t_2 \rightarrow \infty$ são tomados, recuperamos a identidade $\hat{\mathbb{T}} \rightarrow \mathbb{1}$. Vale lembrar que estamos trabalhando com um sistema físico específico: uma partícula livre preparada no estado $|\psi\rangle$, que será detectada em $x = 0$. De acordo com o formalismo do MVOP, a probabilidade de que a partícula chegue ao detector em um instante tempo entre t_1 e t_2 é dada por

$$\begin{aligned} p(\Delta t|x=0) &= \langle \psi | \hat{\mathbb{T}}(\Delta t) | \psi \rangle = \sum_{\lambda} \int_{t_1}^{t_2} dt \langle \psi | t, \lambda \rangle \langle t, \lambda | \psi \rangle, \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{\lambda} |\langle \psi | t, \lambda \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Para uma discussão mais detalhada sobre o formalismo do MVOP, recomenda-se a leitura de [44]. Identifica-se a distribuição de probabilidade de Kijowski como

$$\wp_K(t|x=0) = \sum_{\lambda} |\langle \psi|t, \lambda \rangle|^2, \quad (2.74)$$

sendo esta distribuição mais conhecida na representação de momento

$$\wp_K(t|x=0) = \sum_{\lambda} \int dp \int dp' \frac{\theta(\lambda p)\theta(\lambda p')}{2\pi m} \varphi^*(p)\varphi(p') \sqrt{|pp'|} e^{it(p^2-p'^2)/2m} \quad (2.75)$$

onde $\varphi(p)$ representa a função de onda inicial na representação de momento. Por conveniência, nos exemplos abordados neste trabalho, utilizaremos a equação (2.74), pois a quantidade $\langle \psi|t, \lambda \rangle$ pode ser calculada de maneira trivial.

Vale ressaltar que essa distribuição de probabilidade admite tempos negativos. Conforme discutido em [45], a interpretação física para $t < 0$ é que o sistema é preparado em um instante fixo τ , e nesse caso apenas valores de tempo $t > \tau$ são registrados pelo detector. Porém, se o sistema for preparado em um passado longínquo, de tal forma que $\tau \rightarrow -\infty$, e evoluir até o tempo $t = 0$ sem nenhuma perturbação, existe a possibilidade de prevermos tempos negativos. Portanto, tempos negativos são inclusos nas previsões devido à preparação do estado, embora nos experimentos apenas medidas de tempo de chegada positivas sejam registradas. Lembrando que tal formalismo limita-se apenas ao caso da partícula livre.

Encerramos o capítulo de conceitos preliminares, e é crucial destacar a importância de todos os conceitos apresentados para as discussões subsequentes. Em especial, o formalismo de Kijowski, abordado nesta seção, desempenhará um papel fundamental ao compararmos os resultados das formulações que serão propostas no próximo capítulo. A aplicação desse formalismo nos permitirá realizar uma análise criteriosa do novo formalismo proposto, avaliando sua consistência e coerência em relação aos resultados estabelecidos pelo formalismo de Kijowski.

3 TEORIA EQUIPADA COM TRAJETÓRIAS

Neste capítulo, exploraremos uma abordagem de um sistema físico em que as condições iniciais são indeterminadas, porém assumiremos determinismo bohmiano no sistema. Para isso, examinaremos dois casos particulares: o primeiro, análogo à MB, em que a equação que descreve a posição em função do tempo é uma equação diferencial de primeira ordem; o segundo, análogo ao caso clássico, em que esta equação é uma equação diferencial de segunda ordem. Além disso, apresentaremos duas abordagens operacionais da MQ para obter a distribuição de probabilidade de tempo de voo. Entretanto, antes de construir tais formulações, argumentaremos que a ausência de uma distribuição de tempo de voo na MQ torna essa interpretação incapaz de prever as saídas de certos experimentos.

Na maioria dos experimentos físicos, com algumas exceções, o único grau de liberdade ao qual temos acesso é a posição da partícula. Por exemplo, no famoso experimento de Stern-Gerlach, medimos a posição do átomo para inferir o valor de seu spin, explorando a correlação entre os dois graus de liberdade.

Se estamos interessados em medir a posição de uma partícula em um determinado experimento, os dados que coletaremos estarão condicionados à posição do detector de partículas. Por exemplo, considere um sistema genérico que tenha dois graus de liberdade espaciais $\{x, y\}$, e que estejamos interessados em medir a posição y da partícula. Para ilustrar este cenário, propomos um experimento hipotético cujo diagrama é apresentado na figura 3. A partícula é preparada no estado $\psi(x, y, t = 0)$ e posteriormente tem sua coordenada y medida pelo conjunto de detectores posicionados em $x = x_f$, em um instante de tempo qualquer. Ao repetir o experimento diversas vezes, é possível obter a distribuição de probabilidade associada à posição y . No entanto, essa distribuição está condicionada à posição do grupo de detectores. Ou seja, se alterarmos a posição do conjunto de detectores, a distribuição de probabilidade em y também será alterada. A curva rosa na figura 3 ilustra uma hipotética distribuição de probabilidade $\wp_E(y|x_f)$ (o subíndice E indica que a distribuição é oriunda do experimento). Neste cenário, não há qualquer registro do instante de tempo no qual a partícula foi detectada. As curvas apresentadas na figura são meramente ilustrativas e não representam dados reais.

Vimos em seções anteriores que a previsão da MQ é dada pela equação (2.19) (postulado 5). Entretanto, essa previsão é condicionada ao tempo de voo da partícula. Na figura 3, representamos essa distribuição, para um tempo t fixo, pela curva azul, enfatizando que, rigorosamente, não é possível comparar a previsão da MQ com o experimento de maneira direta, conforme discutiremos a seguir.

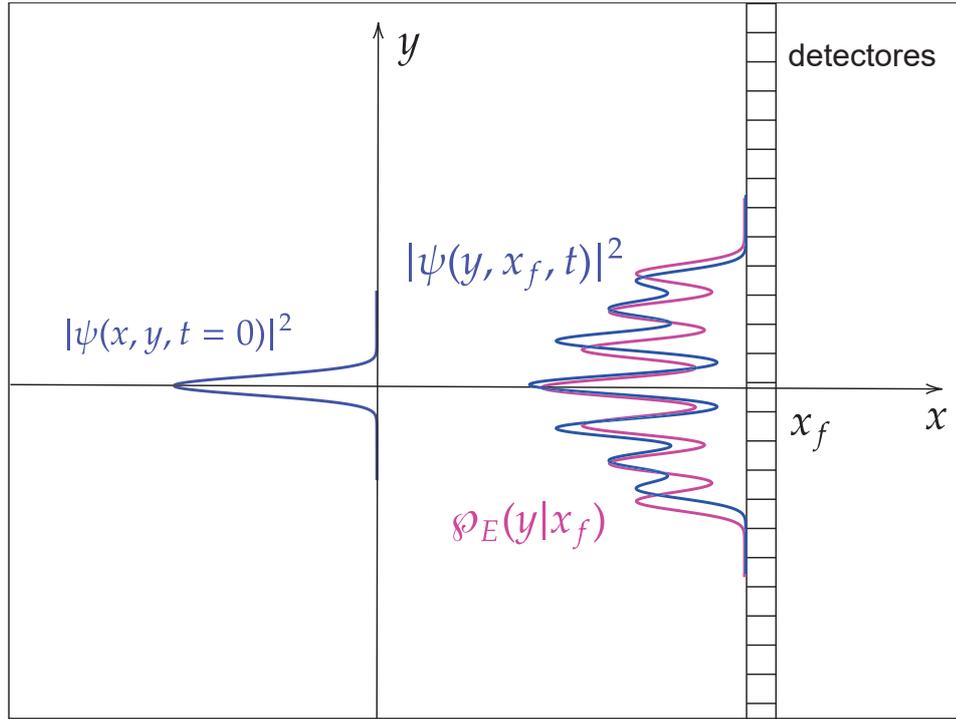


FIGURA 3 – Diagrama do sistema físico genérico. As curvas são meramente ilustrativas e não representam dados reais. A curva em azul ilustra uma possível distribuição de probabilidade inicial e a previsão teórica da MQ para um valor de tempo t selecionado. A curva em rosa é uma ilustração dos dados coletados em um experimento em que o tempo não é monitorado. Neste diagrama, o estado inicial de uma partícula, representada por $\psi(x, y, t = 0)$, evolui livremente até atingir um conjunto de detectores localizados em $x = x_f$.

Nesse contexto experimental, não é possível fazer pós-seleção no tempo, isto é, considerar na estatística apenas as partículas que voaram precisamente durante um intervalo t , devido a restrições experimentais. Em decorrência disso, torna-se apropriado, sempre que possível, manipular a previsão teórica $\wp_T(x, y|t)$ (o subíndice T indica que a distribuição é oriunda da teoria) para encontrar a distribuição de probabilidade atemporal $\wp_T(y|x_f)$, para ser comparada com $\wp_E(y|x_f)$.

Considere a distribuição de probabilidade $\wp_T(x, y|t) = |\psi(x, y, t)|^2$, obtida por meio da reinterpretação da regra de Born, como discutido na seção 2.2. Usando a definição de probabilidade conjunta (2.4), podemos obter a distribuição condicional $\wp_T(y|x, t)$ da posição y dada a posição x e o tempo t , com

$$\begin{aligned}
 \wp_T(y|x, t) &= \frac{\wp_T(x, y|t)}{\wp_T(x|t)} \\
 &= \frac{\wp_T(x, y|t)}{\int dy \wp_T(x, y|t)} \\
 &= \frac{|\psi(x, y, t)|^2}{\int dy |\psi(x, y, t)|^2}.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

A distribuição conjunta $\wp_T(y, t|x_f)$ pode ser obtida a partir da definição de probabilidade

conjunta (2.4)

$$\wp_T(y, t|x_f) = \wp_T(y|x_f, t) \wp_T(t|x_f). \quad (3.2)$$

Obtemos a previsão teórica $\wp_T(y|x_f)$ marginalizando a distribuição $\wp_T(y, t|x_f)$ ao longo do tempo t ,

$$\begin{aligned} \wp_T(y|x_f) &= \int dt \wp_T(y, t|x_f) \\ &= \int dt \wp_T(y|x_f, t) \wp_T(t|x_f) \\ &= \int dt \frac{|\psi(x_f, y, t)|^2}{\int dy |\psi(x_f, y, t)|^2} \wp_T(t|x_f). \end{aligned} \quad (3.3)$$

A expressão acima evidencia que, para compararmos a previsão teórica com o resultado experimental, é necessário ter a distribuição de probabilidade do tempo de voo $\wp_T(t|x_f)$. No entanto, a MQ é incapaz de fornecer tais distribuições, a menos que seja suplementada com suposições não declaradas em sua estrutura axiomática padrão, como operadores de tempo ou trajetórias bohmianas. A seguir, apresentaremos dois exemplos concretos de sistemas físicos cujos resultados estatísticos não podem ser previstos pela MQ.

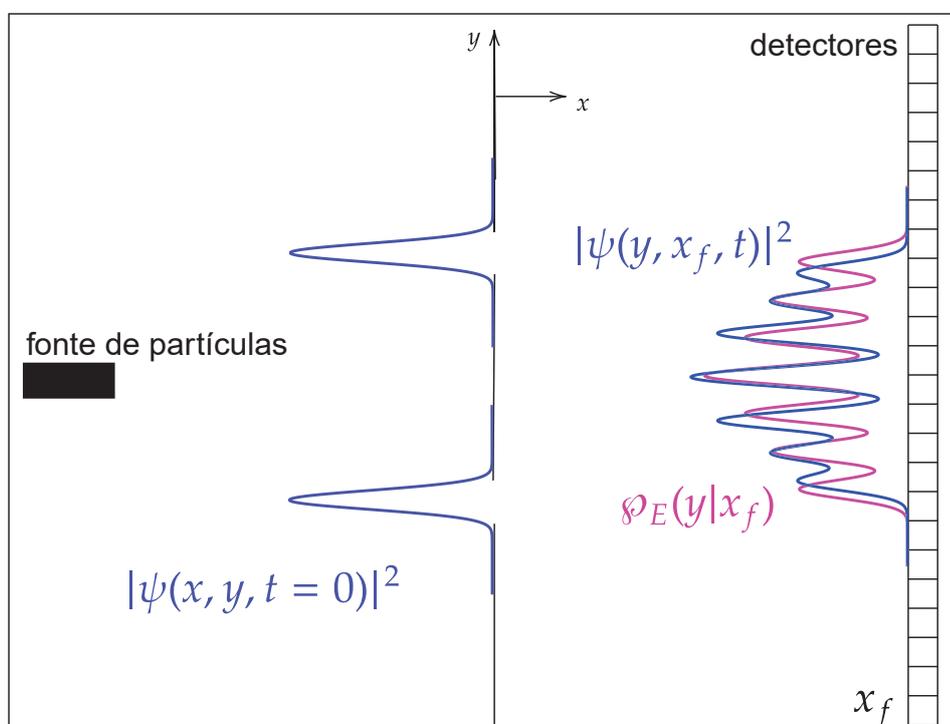


FIGURA 4 – Diagrama do experimento da dupla-fenda. As funções na figura são meramente ilustrativas e não representam dados reais. As curvas em azul mostram uma possível distribuição de probabilidade inicial e a previsão teórica da MQ para um dado t . A curva rosa ilustra a distribuição de probabilidade esperada obtida experimentalmente, ignorando o instante de tempo na qual a medida é realizada.

Experimento da dupla-fenda. Na figura 4, apresentamos uma representação do experimento da dupla-fenda (gráficos meramente ilustrativos). Após sair da fonte, a partícula é descrita pela função de onda $\Psi(x, y, t)$, sendo que o tempo $t = 0$ é definido como o instante imediatamente após a interação com o anteparo contendo a dupla fenda. Por hipótese, temos $\Psi(x, y, t = 0) = \psi_y(y, t = 0) \psi_x(x, t = 0)$. Devido ao fato de o sistema ser separável, isto é, $H = H_x + H_y$, a função de onda para qualquer instante t permanecerá separável: $\Psi(x, y, t) = \psi_y(y, t) \psi_x(x, t)$, já que não há interação entre as partes. Este sistema possui semelhanças com o caso geral que discutimos no início da seção, exceto pelo fato de ser separável, logo, a previsão teórica para o experimento será análoga à previsão do sistema geral dada pela equação (3.3). Portanto, podemos escrever a distribuição de probabilidade para a posição y , condicionada à posição dos detectores x_f , como

$$\begin{aligned}
 \wp_T(y|x_f) &= \int dt \frac{|\Psi(x_f, y, t)|^2}{\int dy |\Psi(x_f, y, t)|^2} \wp_T(t|x_f) \\
 &= \int dt \frac{|\psi_y(y, t)|^2 |\psi_x(x_f, t)|^2}{|\psi_x(x_f, t)|^2 \int dy |\psi_y(y, t)|^2} \wp_T(t|x_f) \\
 &= \int dt |\psi_y(y, t)|^2 \wp_T(t|x_f). \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

No experimento da dupla-fenda, a medição é feita ao longo de um anteparo paralelo ao eixo y . É importante ressaltar que essa medida está condicionada à coordenada x_f do aparato de detecção, uma vez que o padrão de interferência (franjas) depende da distância entre a dupla fenda e o anteparo. Assim, a distribuição de probabilidade construída a partir dos dados experimentais deve ser condicionada à posição do anteparo (ou conjunto de detectores), ou seja, $\wp_E(y|x_f)$. No entanto, a MQ não fornece previsão teórica para comparação com os resultados experimentais, uma vez que não é capaz de descrever a distribuição de tempo de voo $\wp_T(t|x_f)$ e, conseqüentemente, $\wp_T(y|x_f)$.

Partícula em queda livre. Na figura 5, é apresentada uma representação esquemática do sistema de uma partícula em queda livre. Novamente, os elementos gráficos da figura não representam dados reais, e são usados apenas para fins ilustrativos. Por convenção, a posição x é medida sob a condição de que os detectores estão em $y = 0$. Como já mostramos em seções anteriores, o hamiltoniano do sistema é separável e, se o estado inicial também o for, ou seja, $\Psi(x, y, t = 0) = \psi_x(x, t = 0) \psi_y(y, t = 0)$, então para qualquer instante de tempo a função de onda também será separável: $\Psi(x, y, t) = \psi_x(x, t) \psi_y(y, t)$. Este sistema possui semelhanças com o caso geral que discutimos no início da seção, exceto pelo fato de ser separável. Portanto, a previsão teórica da distribuição de probabilidade atemporal $\wp_T(x|y = 0)$ é equivalente à

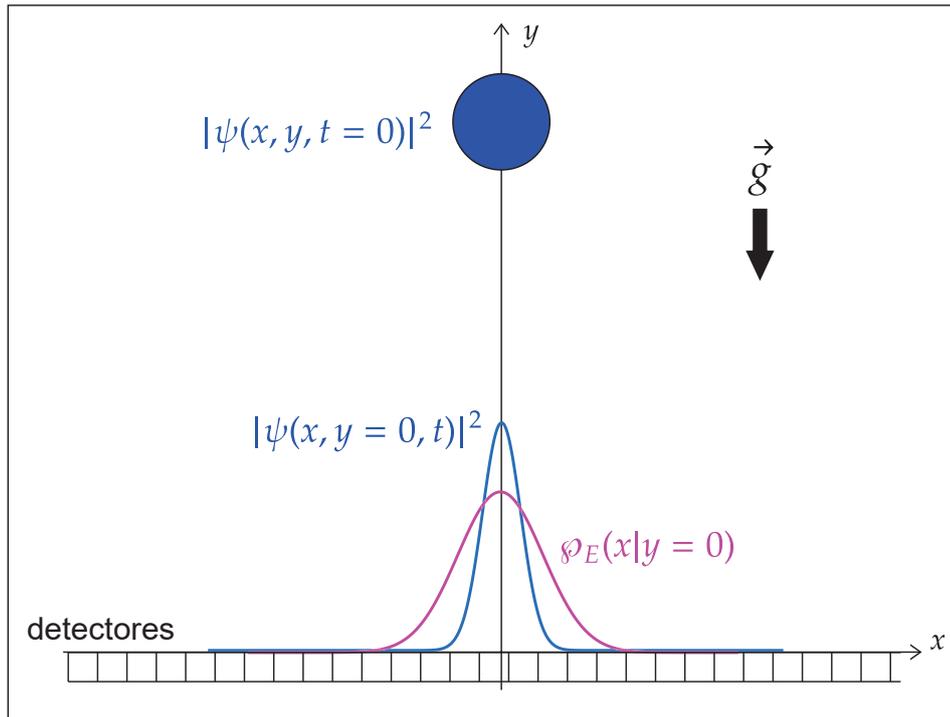


FIGURA 5 – Ilustração da partícula em queda livre. As funções nesta figura são meramente ilustrativas e não representam dados reais. A curva em azul mostra uma possível previsão teórica da MQ, enquanto a curva rosa ilustra os dados experimentais esperados. Já o círculo azul representa a distribuição de probabilidade inicial que é uma gaussiana vista do plano (x, y) .

equação (3.3),

$$\begin{aligned}
 \wp_T(x|y=0) &= \int dt \frac{|\Psi(x, y=0, t)|^2}{\int dx |\Psi(x, y=0, t)|^2} \wp_T(t|y=0) \\
 &= \int dt \frac{|\psi_x(x, t)|^2 |\psi_y(y=0, t)|^2}{|\psi_y(y=0, t)|^2 \int dx |\psi_x(x, t)|^2} \wp_T(t|y=0) \\
 &= \int dt |\psi_x(x, t)|^2 \wp_T(t|y=0).
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Note que, nesse experimento, medimos a posição x sob a condição de que os detectores estão em $y = 0$. Portanto, é importante considerar essa restrição na construção da distribuição de probabilidade, ou seja, a distribuição de probabilidade que se constrói a partir dos dados experimentais deve ser condicionada à posição dos detectores $\wp_E(x|y=0)$. Novamente, a MQ não é capaz de descrever a distribuição de tempo de voo $\wp_T(t|y=0)$, o que limita sua capacidade de confrontar as previsões teóricas com os resultados experimentais. É importante ressaltar que, em nenhum momento durante o experimento, é feita uma medição direta do tempo da partícula, sendo que a única informação obtida pelo experimentador é a medida da posição da partícula.

3.1 HIPÓTESES E FORMULAÇÃO

Motivados pelo fato de que a MQ é incapaz de descrever distribuições de tempo de voo, nesta seção formalizaremos uma teoria equipada com trajetórias, que pretende preencher essa lacuna, a partir da descrição de um sistema probabilístico geral sob a hipótese de determinismo Bohmiano. Ou seja, supõe-se que existem trajetórias que descrevem as variáveis do sistema, mas que não são necessariamente acessíveis, devido à eventual impossibilidade das condições iniciais serem precisamente conhecidas. Demonstraremos que a distribuição de tempo de voo emerge naturalmente desta teoria.

3.1.1 Trajetória com um campo de velocidades associado

Nesse caso, as trajetórias são definidas pelas variáveis $\{q, q_0, t\}$, onde q é a posição final, q_0 é a posição inicial e t o tempo. Note que não é necessário impor uma condição adicional sobre a momento (velocidade) inicial para que o sistema seja completamente descrito, uma vez que assumimos que tal quantidade, em qualquer instante de tempo t , é definida pelas variáveis $\{q, t\}$: $p = p(q, t)$. Isso significa que a equação que descreve a trajetória do sistema $q(t)$ deve ser uma equação diferencial de primeira ordem, precisando apenas de uma condição de contorno, semelhante ao que ocorre na MB. Abordaremos o caso em que uma trajetória atravessa repetidamente a posição Q em tempos diferentes. Consideraremos que ao inverter a trajetória, obtemos n funções $t_j = \vartheta_j(Q, q_0)$. Com base nessa observação, faremos as seguintes hipóteses:

- **Hipótese do determinismo bohmiano:** supomos que, se o sistema for determinístico, existe uma trajetória $q = \phi(q_0, t)$ que conecta um ponto inicial q_0 a um ponto q . Durante o intervalo de tempo $[0, t_n]$, a partícula atravessa a coordenada Q n vezes, resultando em um conjunto de tempos $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ nos quais a avaliação da trajetória nos fornece $Q = \phi(q_0, t_j)$ para $t_j \in \{t_1, t_2, \dots, t_n\}$. Com base nisso, definimos os seguintes vínculos:

$$Q = \phi(q_0, t_j), \quad q_0 = \Lambda(Q, t_j) \quad \text{e} \quad \{t_j = \vartheta_j(Q, q_0)\}.$$

Em outras palavras, ao possuímos informações sobre duas das três variáveis, a terceira será determinada por uma das equações acima. No caso do tempo de voo, não obteremos o valor exato, mas sim seus possíveis valores. Consequentemente, é natural construirmos as distribuições de probabilidade a partir dessa ideia de vínculo que emerge da trajetória:

$$\wp(q|q_0, t) = \delta(q - \phi(q_0, t)), \quad (3.6)$$

$$\wp(t|Q, q_0) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \delta(t - \vartheta_j(Q, q_0)). \quad (3.7)$$

Ambas as distribuições de probabilidade satisfazem as seguintes propriedades: $\wp(q|q_0, t) \geq 0$, $\wp(t|Q, q_0) \geq 0$, $\int dq \wp(q|q_0, t) = 1$ e $\int_0^\infty dt \wp(t|Q, q_0) = 1$.

- **Hipótese de independência de preparação:** o sistema é preparado de forma que a distribuição de probabilidade inicial é independente das variáveis futuras q e $t > 0$. Ou seja,

$$\wp(q_0|q, t) = \wp(q_0) \equiv \rho_0(q_0). \quad (3.8)$$

Com base nas hipóteses mencionadas anteriormente, na definição de probabilidade marginal dada pela equação (2.5), juntamente com a propriedade (2.32) da delta de Dirac, deduzimos a seguinte expressão para a distribuição de probabilidade $\wp(q|t)$:

$$\begin{aligned} \wp(q|t) &= \int dq_0 \wp(q|q_0, t) \wp(q_0|t) \\ &= \int dq_0 \delta(q - \phi(q_0, t)) \rho_0(q_0). \end{aligned}$$

Aqui, definimos $g(q_0) \equiv q - \phi(q_0, t)$, obtendo

$$\begin{aligned} \wp(q|t) &= \int dq_0 \delta(g(q_0)) \rho_0(q_0) \\ &= \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \Lambda(q, t))}{|\partial_{q_0} q - \partial_{q_0} \phi(q_0, t)|_{q_0=\Lambda(q, t)}} \rho_0(q_0) \\ &= \frac{\rho_0(\Lambda(q, t))}{|\partial_{q_0} \phi(q_0, t)|_{q_0=\Lambda(q, t)}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Vamos demonstrar que a distribuição de probabilidade $\wp(q|t)$ satisfaz as propriedades de distribuições de probabilidade: $\wp(q|t) \geq 0$, para todo $q \in \mathbb{R}$, e $\int_{-\infty}^{\infty} \wp(q|t) dq = 1$. A distribuição de probabilidade inicial $\rho_0(q_0)$, por definição, já satisfaz ambas as propriedades. Além disso, o denominador $|\partial_{q_0} \phi(q_0, t)|$ na equação (3.9) é sempre maior que zero devido à função de valor absoluto. Portanto, a primeira propriedade é satisfeita. Para demonstrar a segunda propriedade, iniciamos com a normalização de $\rho_0(q_0)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \rho_0(q_0) = 1.$$

Fazendo a mudança de variável¹ $q_0 = \Lambda(q, t)$, com o tempo t fixo, temos $dq_0 = |\partial_q \Lambda(q, t)|_t dq$, resultando em:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq |\partial_q \Lambda(q, t)|_t \rho_0(\Lambda(q, t)) = 1.$$

¹ Seja o teorema da mudança de variável: $\prod_n dx_n = |\det \mathcal{J}(y_n)| \prod_n dy_n$, em que $\mathcal{J}(y_n)$ é a matriz jacobiana associada à transformação. Como estamos trabalhando em uma dimensão, o determinante da matriz jacobiana se reduz à derivada $\partial_q \Lambda(q, t)$.

Podemos utilizar a relação $|\partial_q \Lambda(q, t)|_t = |\partial_{q_0} \phi(q_0, t)|_t^{-1}$, lembrando que $q_0 = \Lambda(q, t)$, obtendo

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{\rho_0(\Lambda(q, t))}{|\partial_{q_0} \phi(q_0, t)|_{q_0=\Lambda(q, t)}} = \int dq \varphi(q|t) = 1. \quad (3.10)$$

Observamos que o tempo t está fixo em $\varphi(q|t)$, o que é coerente com a construção que realizamos. Assim, demonstramos que a distribuição de probabilidade $\varphi(q|t)$ satisfaz as propriedades requeridas para uma distribuição de probabilidade.

Analogamente, construiremos a distribuição de probabilidade $\varphi(t|Q)$, utilizando a definição de probabilidade marginal dada pela equação (2.5), juntamente com a propriedade (2.32) da função delta de Dirac, obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \varphi(t|Q) &= \int dq_0 \varphi(t|Q, q_0) \varphi(q_0|Q) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \int dq_0 \delta(t - \vartheta_j(Q, q_0)) \rho(q_0) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\rho(\Lambda(Q, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_j(Q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Observe que teremos uma distribuição de probabilidade que é a soma de todas as distribuições de probabilidades associadas aos tempos t_j . Semelhante ao caso da distribuição de probabilidade $\varphi(q|t)$, mostraremos que a distribuição de probabilidade $\varphi(t|Q)$ satisfaz as seguintes propriedades: $\varphi(t|Q) \geq 0$, para todo $t \in \mathbb{R}$, e $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t|Q) dt = 1$. Utilizaremos os mesmos argumentos: a distribuição de probabilidade inicial $\rho_0(q_0)$, por definição, já satisfaz ambas as propriedades, e o denominador $|\partial_{q_0} \vartheta_j(Q, q_0)| > 0$ na equação (3.11). Portanto, a primeira propriedade é satisfeita. Para demonstrar a segunda propriedade, partimos da normalização de $\rho_0(q_0)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \rho_0(q_0) = 1.$$

Fazendo a mudança de variável $q_0 = \Lambda(q, t)$, com a posição final Q fixa, temos $dq_0 = |\partial_t \Lambda(Q, t)|_Q dt$, encontramos

$$\int_0^{\infty} dt |\partial_t \Lambda(Q, t)|_Q \rho_0(\Lambda(Q, t)) = 1.$$

Podemos utilizar a relação $|\partial_t \Lambda(Q, t)|_Q = |\partial_{q_0} \vartheta_j(Q, q_0)|_Q^{-1}$, lembrando que $q_0 = \Lambda(Q, t)$, para obter

$$\int_0^{\infty} dt \frac{\rho_0(\Lambda(Q, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_j(Q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}} = 1. \quad (3.12)$$

Integrando a equação (3.11) e utilizando a equação acima obtemos

$$\begin{aligned}\int dt \wp(t|Q) &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \int dt \frac{\rho(\Lambda(Q, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_j(Q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n 1 = 1.\end{aligned}\quad (3.13)$$

Observamos que a posição final esta fixa em Q , sendo coerente com a construção que realizamos. Assim, demonstramos que a distribuição de probabilidade satisfaz as propriedades requeridas.

Por conveniência, vamos associar as distribuição de probabilidade dos tempos de voo e posição. Partindo da distribuição de probabilidade $\wp(q|q_0, t)$ e utilizando a propriedade (2.32) da função delta de Dirac, podemos reescrevê-la da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\wp(Q|q_0, t) &= \delta(Q - \phi_t(q_0)) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{\delta(t - \vartheta_j(Q, q_0))}{|\partial_t \phi(x_0, t)|_{t=\vartheta_j(Q, q_0)}} \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{\delta(t - \vartheta_j(Q, q_0))}{v_j(Q, \vartheta_j(Q, q_0))},\end{aligned}\quad (3.14)$$

onde introduzimos $v_j(Q, q_0) \equiv |\partial_t \phi(x_0, t)|_{t=\vartheta_j(Q, q_0)} \geq 0$. Agora, vamos construir a distribuição de probabilidade $\wp(Q|t)$ utilizando a equação (3.14):

$$\begin{aligned}\wp(Q|t) &= \int dq_0 \wp(Q|q_0, t) \wp(q_0|t) \\ &= \sum_{j=1}^n \int dq_0 \frac{\delta(t - \vartheta_j(Q, q_0))}{v_j(Q, q_0)} \rho(q_0) \\ &= \sum_{j=1}^n \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \Lambda(Q, t))}{v_j(Q, q_0) |\partial_{q_0} \vartheta_j(q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}} \rho(q_0) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{\rho(\Lambda(Q, t))}{v_j(Q, q_0) |\partial_{q_0} \vartheta_j(q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}}.\end{aligned}\quad (3.15)$$

Em geral, $v_j(Q, q_0) \neq v_i(Q, q_0)$ para $j \neq i$. No entanto, no caso específico em que $v_j(Q, q_0) = v_i(Q, q_0) \equiv v(Q, t)$, obtemos

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^n \frac{\rho(\Lambda(Q, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_j(q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}} &= v(Q, t) \wp(Q|t) \\ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\rho(\Lambda(Q, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_j(q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q, t)}} &= \frac{1}{n} v(Q, t) \wp(Q|t) \\ \wp(t|Q) &= \frac{v(Q, t) \wp(Q|t)}{n}.\end{aligned}\quad (3.16)$$

Especificamente, no contexto da MB, identificamos $v_j(Q, q_0)$ como o campo de velocidades. No caso em que há simetria, ou seja, $v_j(Q, q_0) = v_i(Q, q_0) = v(Q, t)$ para o campo

de velocidades, ou seja, todas as n vezes que a partícula passa pela coordenada Q , o módulo do campo de velocidades é o mesmo. Isso nos leva a obter a seguinte relação:

$$\wp_{ML}(t|Q) = \frac{|J(Q,t)|}{n}, \quad (3.17)$$

onde $J(Q,t) = v(Q,t)\wp(Q|t)$ é a densidade de corrente de probabilidade. É importante destacar que esse resultado é específico para o caso em que há simetria no campo de velocidades. No caso geral, descrito pela equação (3.15), temos uma formulação mais abrangente do que o resultado da MB, dado pela equação (2.34). É válido ressaltar que esse resultado específico se aplica a trajetórias bohmianas, em uma dimensão, que não passam pela mesma coordenada Q em diferentes tempos, ou seja, a inversão da trajetória bohmiana $t = \vartheta(Q, q_0)$ define uma função unívoca. No capítulo 4, apresentaremos um caso em que a trajetória bohmiana passa pela mesma coordenada Q em dois tempos distintos. Nesse caso, mostraremos que a densidade de corrente de probabilidade $|J(Q,t)|$ não pode ser interpretada como uma distribuição de probabilidade, uma vez que não satisfaz a propriedade de normalização. Portanto, é necessário utilizar a formulação dada pela equação (3.11). No caso específico em que a inversão da trajetória $t = \vartheta(Q, q_0)$ define uma função unívoca, a distribuição de tempos de voo é reduzida a

$$\wp(t|Q) = \frac{\rho_0(\Lambda(Q,t))}{|\partial_{q_0}\vartheta(Q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q,t)}}, \quad (3.18)$$

e a distribuição de probabilidade $\wp(Q|t)$

$$\begin{aligned} \wp(Q|t) &= \frac{\rho(\Lambda(Q,t))}{v(Q, q_0) |\partial_{q_0}\vartheta_j(q, q_0)|_{q_0=\Lambda(Q,t)}} \\ &= \frac{\wp(t|Q)}{v(Q, q_0)}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde $v(Q, q_0) = |\partial_t\phi(x_0, t)|_{t=\vartheta(Q, q_0)}$. E no caso em que a trajetória é a bohmiana, obtemos

$$\wp_{TB}(t|Q) = \wp_{TB}(Q|t) |\partial_t\phi(q_0, t)|_{q_0=\Lambda(Q,t)} \quad (3.20)$$

$$= \rho(Q, t) |v(Q, t)| = |J(Q, t)|. \quad (3.21)$$

O formalismo da TET aplicado para a trajetória bohmiana que passa uma única vez pela coordenada Q recupera o resultado da MB, dado pela equação (2.34), mas é importante destacar que a TET é uma ferramenta poderosa que permite obter as distribuições de probabilidade $\wp(q|t)$ e $\wp(t|q)$ para qualquer trajetória, não se limitando apenas à distribuição oriunda da MB. Podemos estender essas ideias para uma quantidade física qualquer. Por simplicidade, vamos realizar essa construção considerando uma trajetória cuja inversa é uma função unívoca. No entanto, essa formulação pode ser estendida para qualquer trajetória invertível.

Formulação para uma quantidade física qualquer. É possível estender a formulação apresentada para qualquer quantidade física que possa ser mapeada pelas variáveis $\{q, q_0, t\}$, como $\mathcal{F} = F(q, q_0, t)$. A partir da hipótese de determinismo, se conhecermos duas variáveis, o valor \mathcal{F} fica determinado, já que temos os vínculos

$$q = \phi(q_0, t), \quad q_0 = \Lambda(q, t) \quad \text{e} \quad t = \vartheta(q, q_0).$$

Nesse caso, considerando $F(q, q_0, t)$, com $q = \phi(q_0, t)$, temos a distribuição de probabilidade de f associada a \mathcal{F} é dada por:

$$\wp(f|q_0, t) = \delta(f - F(\phi(q_0, t), q_0, t)). \quad (3.22)$$

Considerando agora $t = \vartheta(q, q_0)$, temos

$$\wp(f|q, q_0) = \delta(f - F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))). \quad (3.23)$$

A equação (3.22) deve ser lida como a distribuição de probabilidade de se obter f , condicionada aos valores de q_0 e t , e a equação (3.23) deve ser lida como a distribuição de probabilidade de se obter f , condicionada aos valores de q_0 e q . A hipótese de independência de preparação ainda é válida, ou seja, a preparação do estado independe do valor futuro de f , q e $t > 0$. Portanto,

$$\wp(q_0|f, q) = \wp(q_0) \equiv \rho(q_0) \quad \text{e} \quad \wp(q_0|f, t) = \wp(q_0) \equiv \rho(q_0). \quad (3.24)$$

A partir da definição de probabilidade marginal (2.5), obtemos

$$\begin{aligned} \wp(f|q) &= \int dq_0 \wp(f|q, q_0) \wp(q_0|q) \\ &= \int dq_0 \delta(f - F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))) \rho(q_0). \end{aligned}$$

Utilizando a propriedade da delta de Dirac (2.32), com $g(q_0) \equiv f - F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))$, e definindo a função $\mu_q(q, f)$, obtida pela inversão $q_0 = \mu_q(q, f)$ na equação $f - F(q, q_0, \vartheta(q, q_0)) = 0$, podemos escrever

$$\begin{aligned} \wp(f|q) &= \int dq_0 \delta(f - F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))) \rho(q_0) \\ &= \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \mu_q(q, f))}{|\partial_{q_0} F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))|_{q_0 = \mu_q(q, f)}} \rho(q_0) \\ &= \frac{\rho(\mu_q(q, f))}{|\partial_{q_0} F(q, q_0, \vartheta(q, q_0))|_{q_0 = \mu_q(q, f)}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

De forma análoga, para obtermos a distribuição $\wp(f|t)$, temos

$$\begin{aligned}
 \wp(f|t) &\equiv \int dq_0 \wp(f, q_0|t) = \int dq_0 \wp(f|q_0, t) \wp(q_0|t) \\
 &= \int dq_0 \delta(f - F(\phi(q_0, t), q_0, t)) \rho_0(q_0) \\
 &= \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \mu_t(t, f))}{|\partial_{q_0} F(\phi(q_0, t), q_0, t)|_{q_0=\mu_t(t, f)}} \rho_0(q_0) \\
 &= \frac{\rho_0(\mu_t(t, f))}{|\partial_{q_0} F(\phi(q_0, t), q_0, t)|_{q_0=\mu_t(t, f)}}, \tag{3.26}
 \end{aligned}$$

onde a função $\mu_t(t, f)$ é obtida a partir da equação $f - F(\phi(q_0, t), q_0, t) = 0$, manipulando-a para que $q_0 = \mu_t(t, f)$.

Podemos generalizar a ideia para uma quantidade física que depende das variáveis

$$\{q_1, q_2, \dots, q_n, t_1 > 0, t_2 > t_1, \dots, t_n > t_{n-1}, q_0\},$$

ou seja, esta depende de n coordenadas espaciais q_j associadas a n instantes de tempo t_j . A partir da hipótese de determinismo, os vínculos serão expressos por $q_j = \phi(q_0, t_j)$ com $j = 1, 2, \dots, n$, em que uma partícula evolui de uma posição inicial q_0 até uma posição q_j , no instante t_j . Nesse caso, a distribuição de probabilidade condicionada, considerando-se a nova quantidade $F(\phi(q_0, t_1), \phi(q_0, t_2), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, t_2, \dots, t_n, q_0)$, é dada por

$$\wp(f|t_1, t_2, \dots, t_n, q_0) = \delta(f - F(\phi(q_0, t_1), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, \dots, t_n, q_0)).$$

Se for possível inverter a trajetória de tal forma que t_j seja expresso como $t_j = \vartheta(q_j, q_0)$ para qualquer j , podemos obter o vínculo $F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0)$. Dessa forma, a distribuição de probabilidade condicional de f , dados $\{q_1, q_2, \dots, q_n, q_0\}$, é definida como

$$\wp(f|q_1, q_2, \dots, q_n, q_0) = \delta(f - F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0)).$$

A hipótese de independência de preparação mantém-se válida, o que implica que a distribuição de probabilidade de q_0 pode ser expressa como

$$\wp(q_0|f, q_1, q_2, \dots, q_n) = \rho(q_0) \quad \text{e} \quad \wp(q_0|f, t_1, t_2, \dots, t_n) = \rho(q_0).$$

Admitimos que seja possível obter as funções inversas $q_0 = \mu_q(f, q_1, q_2, \dots, q_n)$ e $q_0 = \mu_t(f, t_1, t_2, \dots, t_n)$, a partir de

$$\begin{aligned}
 f - F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0) &= 0 \\
 f - F(\phi(q_0, t_1), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, \dots, t_n, q_0) &= 0,
 \end{aligned}$$

respectivamente. Novamente, utilizamos a definição de probabilidade marginal (2.5) e a propriedade da delta de Dirac (2.32) para encontrar a distribuição de probabilidade condicional de f dado $\{q_1, q_2, \dots, q_n\}$. Assim, temos

$$\begin{aligned}
\wp(f|q_1, q_2, \dots, q_n) &\equiv \int dq_0 \wp(f, q_0|q_1, q_2, \dots, q_n) \\
&= \int dq_0 \wp(f|q_1, q_2, \dots, q_n, q_0) \wp(q_0|q_1, q_2, \dots, q_n) \\
&= \int dq_0 \delta(f - F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0)) \rho_0(q_0) \\
&= \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \mu_q(f, q_1, q_2, \dots, q_n)) \rho_0(q_0)}{|\partial_{q_0} F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0)|_{q_0=\mu_q(f, q_1, \dots, q_n)}} \\
&= \frac{\rho_0(\mu_q(f, q_1, q_2, \dots, q_n))}{|\partial_{q_0} F(q_1, \dots, q_n, \vartheta(q_1, q_0), \dots, \vartheta(q_n, q_0), q_0)|_{q_0=\mu_q(f, q_1, \dots, q_n)}}. \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Analogamente, para a distribuição $\wp(f|t_1, t_2, \dots, t_n)$,

$$\begin{aligned}
\wp(f|t_1, \dots, t_n) &\equiv \int dq_0 \wp(f, q_0|t_1, \dots, t_n) \\
&= \int dq_0 \wp(f|q_0, t_1, t_2, \dots, t_n) \wp(q_0|t_1, t_2, \dots, t_n) \\
&= \int dq_0 \delta(f - F(\phi(q_0, t_1), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, \dots, t_n, q_0)) \rho_0(q_0) \\
&= \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \mu_t(f, t_1, \dots, t_n)) \rho_0(q_0)}{|\partial_{q_0} F(\phi(q_0, t_1), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, \dots, t_n, q_0)|_{q_0=\mu_t(f, t_1, \dots, t_n)}} \\
&= \frac{\rho_0(\mu_t(f, t_1, \dots, t_n))}{|\partial_{q_0} F(\phi(q_0, t_1), \dots, \phi(q_0, t_n), t_1, \dots, t_n, q_0)|_{q_0=\mu_t(f, t_1, \dots, t_n)}}. \quad (3.28)
\end{aligned}$$

Uma aplicação direta da equação (3.27) é obter a distribuição de probabilidade do intervalo de tempo $\Delta t = t_2 - t_1$ que uma partícula leva para se deslocar de x_1 até x_2 . O vínculo, em termos de $t_2 = \vartheta(x_2, x_0)$ e $t_1 = \vartheta(x_1, x_0)$ é expresso por

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \vartheta(x_2, x_0) - \vartheta(x_1, x_0) \equiv F_2(x_1, x_2, q_0). \quad (3.29)$$

Ao invertermos o vínculo F_2 de forma que $q_0 = \mu_x(\Delta t, x_1, x_2)$, a equação (3.27) pode ser aplicada diretamente, resultando em

$$\wp(\Delta t|x_1, x_2) = \frac{\rho_0(\mu_x(\Delta t, x_1, x_2))}{|\partial_{q_0} F_2(x_1, x_2, q_0)|_{q_0=\mu_x(\Delta t, x_1, x_2)}}. \quad (3.30)$$

A equação (3.30) pode ser útil para obter a distribuição de probabilidade para o tempo de tunelamento de uma partícula, dado que a barreira começa em x_1 e termina em x_2 .

3.1.2 Trajetória no espaço de fase

Considere um sistema que envolve uma trajetória no espaço de fase $q = \phi(q_0, p_0, t)$ e $p = \omega(q_0, p_0, t)$, com as respectivas condições iniciais $q(t = 0) \equiv q_0$ e $p(t = 0) \equiv p_0$. Um ponto importante é que a incerteza de q_0 pode ser independente da incerteza de p_0 , o que significa que temos duas variáveis incertas independentes. A distribuição de probabilidade inicial é dada por $\rho(q_0, p_0 | t = 0) \equiv \rho_0(q_0, p_0)$. Por conveniência, vamos assumir que ao inverter a trajetória no espaço de fase para $t = \vartheta_q(q, q_0, p_0)$ ou $t = \vartheta_p(p, q_0, p_0)$, obtemos uma função unívoca. Isso significa que, dado um conjunto de valores $\{q, q_0, p_0\}$ ou $\{p, q_0, p_0\}$, obtemos apenas um valor de t . Em outras palavras, a trajetória no espaço de fase passa pelo ponto (q, p) apenas uma vez. É possível estender a teoria de forma a incluir casos mais gerais, mas que não será explorada neste trabalho. Para formalizar a teoria, introduzimos as seguintes hipóteses:

- **Hipótese do determinismo bohmiano:** se um sistema for determinístico, então há uma trajetória no espaço de fase $q = \phi(q_0, p_0, t)$ e $p = \omega(q_0, p_0, t)$ que conecta um ponto inicial $\{q_0, p_0\}$ ao ponto final $\{q, p\}$. A coordenada q é uma função das variáveis $\{q_0, p_0, t\}$, o que significa que se tivermos informações sobre essas três variáveis é possível encontrar q a partir dessa relação. De modo geral, quando temos informações sobre essas três das cinco variáveis, conseguimos determinar o valor da quarta e da quinta variável por meio da trajetória no espaço de fase. Nesse contexto, surge a ideia de um vínculo devido à trajetória. Dessa forma, é viável isolar as variáveis na trajetória para obter as seguintes relações para a trajetória em coordenadas q :

$$q = \phi(q_0, p_0, t), \quad p_0 = \zeta_q(q, q_0, t), \quad q_0 = \Lambda_q(q, p_0, t) \quad \text{e} \quad t = \vartheta_q(q, q_0, p_0).$$

Analogamente para p :

$$p = \omega(q_0, p_0, t), \quad q_0 = \zeta_p(p, p_0, t), \quad p_0 = \Lambda_p(p, q_0, t) \quad \text{e} \quad t = \vartheta_p(p, q_0, p_0).$$

Observe que os pares $(\vartheta_p(p, q_0, p_0), \vartheta_q(q, q_0, p_0))$, $(\Lambda_q(q, p_0, t), \zeta_p(p, p_0, t))$ e $(\zeta_q(q, q_0, t), \Lambda_p(p, q_0, t))$ são compostos de funções distintas. Assim, conhecendo três das variáveis $\{q, q_0, p, p_0, t\}$, podemos determinar as outras duas pelas trajetórias. A partir dessas relações, podemos construir as seguintes distribuições de probabilidade condicional, utilizando a ideia de vínculo,

$$\wp(q, p | q_0, p_0, t) = \delta(q - \phi(q_0, p_0, t)) \delta(p - \omega(q_0, p_0, t)), \quad (3.31)$$

$$\wp(p, t | q, q_0, p_0) = \delta(p - \omega(q_0, p_0, t)) \delta(t - \vartheta_q(q, q_0, p_0)), \quad (3.32)$$

$$\wp(q, t | p, q_0, p_0) = \delta(q - \phi(q_0, p_0, t)) \delta(t - \vartheta_p(p, q_0, p_0)). \quad (3.33)$$

- **Hipótese de independência de preparação:** o sistema é preparado de tal forma que a distribuição de probabilidade inicial conjunta é independente de variáveis futuras $\{q, p, t\}$, ou seja,

$$\wp(q_0, p_0|q, p, t) = \wp(q_0, p_0) \equiv \rho_0(q_0, p_0). \quad (3.34)$$

Com base nas hipóteses mencionadas acima e na definição de probabilidade marginal definida pela equação (2.5), juntamente com a propriedade (2.32) da delta de Dirac, construímos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \wp(q, p|t) &= \int dp_0 \int dq_0 \wp(q, p|q_0, p_0, t) \wp(q_0, p_0|t) \\ &= \int dp_0 \int dq_0 \delta(q - \phi(q_0, p_0, t)) \delta(p - \omega(q_0, p_0, t)) \rho_0(q_0, p_0). \end{aligned}$$

Aqui, definimos $g_1(q_0) \equiv q - \phi(q_0, p_0, t)$. É importante destacar que, inicialmente, resolveremos a integral em relação a q_0 , considerando p_0 como um parâmetro constante neste contexto. Obtemos

$$\begin{aligned} \wp(q, p|t) &= \int dp_0 \int dq_0 \frac{\delta(q_0 - \Lambda_q(q, p_0, t)) \delta(p - \omega(q_0, p_0, t)) \rho_0(q_0, p_0)}{|\partial_{q_0} g_1(q_0)|_{q_0=\Lambda_q(q, p_0, t)}} \\ &= \int dp_0 \frac{\rho_0(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0) \delta(p - \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t))}{|\partial_{q_0} \phi(q_0, p_0, t)|_{q_0=\Lambda_q(q, p_0, t)}}. \end{aligned}$$

Agora, iremos resolver a integral em p_0 . Definindo $g_2(p_0) \equiv p - \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t)$, obtemos

$$\begin{aligned} \wp(q, p|t) &= \int dp_0 \frac{\rho_0(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0) \delta(p - \Lambda_p(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0))}{|\partial_{q_0} \phi(q_0, p_0, t)|_{q_0=\Lambda_q(q, p_0, t)} |\partial_{p_0} \Lambda_p(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0)|_{p_0=\chi_t(q, p, t)}} \\ &= \frac{\rho_0(\Lambda_q(q, \chi_t, t), \chi_t)}{|\partial_{q_0} \phi(q_0, \chi_t, t)|_{q_0=\Lambda_q(q, \chi_t, t)} |\partial_{p_0} \Lambda_p(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0)|_{p_0=\chi_t(q, p, t)}}, \quad (3.35) \end{aligned}$$

onde $p_0 = \chi_t(q, p, t)$ é encontrado isolando-se p_0 na equação $p - \Lambda_p(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t) = 0$. Basta marginalizar o momento p para obter

$$\wp(q|t) = \int dp \wp(q, p|t). \quad (3.36)$$

Analogamente, podemos obter a expressão para $\wp(p, t|q)$, definimos $g_1(q_0) \equiv t - \vartheta_q(q, q_0, p_0)$:

$$\begin{aligned} \wp(p, t|q) &= \int dp_0 \int dq_0 \wp(p, t|q, q_0, p_0) \wp(q_0, p_0|q) \\ &= \int dp_0 \int dq_0 \delta(p - \omega(q_0, p_0, t)) \delta(t - \vartheta_q(q, q_0, p_0)) \rho_0(q_0, p_0) \\ &= \int dp_0 \frac{\rho_0(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0) \delta(p - \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_q(q, q_0, p_0)|_{q_0=\Lambda_q(q, p_0, t)}}. \end{aligned}$$

Agora, iremos resolver a integral em p_0 , definindo $g_2(p_0) \equiv p - \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t)$:

$$\wp(p, t|q) = \frac{\rho_0(\Lambda_q(q, \chi_q(q, p, t), t), \chi_q(q, p, t))}{|\partial_{q_0} \vartheta_q(q, q_0, \chi_q)|_{q_0=\Lambda_q(q, \chi_q, t)} |\partial_{p_0} \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t)|_{p_0=\chi_q(q, p, t)}}, \quad (3.37)$$

onde $p_0 = \chi_q(q, p, t)$ é encontrado isolando-se p_0 em $p - \omega(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t) = 0$. Basta marginalizar p para obtermos a distribuição

$$\wp(t|q) = \int dp \wp(p, t|q). \quad (3.38)$$

Já para a distribuição de probabilidade $\wp(q, t|p)$, definindo $g_1(p_0) \equiv t - \vartheta_p(p, q_0, p_0)$:

$$\begin{aligned} \wp(q, t|p) &= \int dq_0 \int dp_0 \wp(q, t|p, q_0, p_0) \wp(q_0, p_0|p) \\ &= \int dq_0 \int dp_0 \delta(q - \phi(q_0, p_0, t)) \delta(t - \vartheta_p(p, q_0, p_0)) \rho_0(q_0, p_0) \\ &= \int dq_0 \frac{\rho_0(q_0, \Lambda_p(p, q_0, t)) \delta(q - \phi(q_0, \Lambda_p(p, q_0, t), t))}{|\partial_{p_0} \vartheta_p(p, q_0, p_0)|_{p_0=\Lambda_p(p, q_0, t)}}. \end{aligned}$$

Agora, resolveremos a integral em q_0 , definindo $g_2(q_0) \equiv q - \phi(q_0, \Lambda_p(p, q_0, t), t)$:

$$\wp(q, t|p) = \frac{\rho_0(\chi_p(q, p, t), \Lambda_p(p, \chi_p(q, p, t), t))}{|\partial_{p_0} \vartheta_p(p, \chi_p, p_0)|_{p_0=\Lambda_p(p, \chi_p, t)} |\partial_{q_0} \phi(q_0, \Lambda_p(p, q_0, t), t)|_{q_0=\chi_p(q, p, t)}}, \quad (3.39)$$

onde $q_0 = \chi_p(q, p, t)$ é encontrado isolando-se p_0 em $q - \phi(q_0, \Lambda_p(p, q_0, t), t) = 0$. Para obtermos a distribuição $\wp(t|p)$ basta marginalizar q :

$$\wp(t|p) = \int dq \wp(q, t|p). \quad (3.40)$$

Neste seção, desenvolvemos o formalismo que chamaremos de TET, que descreve um sistema físico genérico sob a hipótese de determinismo bohmiano. Na próxima seção, iremos abordar a construção de aproximações da MQ para realizar uma comparação com a TET. Essas aproximações nos permitirão explorar diferentes aspectos e perspectivas da MQ, a fim de avaliar a validade e o desempenho da TET em relação a elas.

3.2 ABORDAGENS OPERACIONAIS NA MQ

Nesta seção, apresentaremos duas propostas de abordagens operacionais na MQ que permitem obter a distribuição de probabilidade dos tempos de voo ou previsões probabilísticas atemporais, sem a necessidade de recorrer a postulados adicionais ou hipóteses *ad hoc* sobre o tempo. Essas abordagens operacionais serão aplicadas ao caso específico da partícula em queda livre.

3.2.1 Tempo médio de voo

Suponha um sistema físico com dois graus de liberdade de posição $\{x, y\}$, para o qual nos interessa medir a coordenada x da partícula. As equações de movimento de Heisenberg para os operadores de posição e momento² associado a coordenada y $\{\hat{Y}, \hat{P}\}$ são expressas por

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{Y}_H &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{Y}_H, \hat{H}] + \left(\frac{\partial \hat{Y}}{\partial t}\right)_H, \\ \frac{d}{dt}\hat{P}_H &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}_H, \hat{H}] + \left(\frac{\partial \hat{P}}{\partial t}\right)_H.\end{aligned}$$

Resolvendo essas equações, obtemos a dinâmica do operador posição $\hat{Y}_H(t)$. Suponha agora que estejamos interessados em um experimento em que a partícula seja detectada em uma coordenada final y_f . Conhecendo o estado inicial do sistema, definimos $\langle \hat{Y}_H(t_f) \rangle = y_f$ e isolamos o tempo, encontrando o tempo médio de voo t_f . No entanto, em uma evolução livre (que não considera a ação do aparato de detecção), sempre teremos uma incerteza $\Delta Y > 0$, o que impede de garantir o resultado y_f com certeza. Seria necessário, então, supor um modelo no qual a medição ocorre abruptamente, com a partícula sendo "engolida" por um detector de largura $\Delta Y \simeq 0$. Dessa forma, garantimos que a partícula seja detectada em y_f , sem nenhuma incerteza. Admitindo esse modelo, podemos aproximar a distribuição de probabilidade $\wp(x|y_f)$, como

$$\wp(x|y_f) \approx |\psi(x, t_f(y_f))|^2. \quad (3.41)$$

Partícula em queda livre. Aplicaremos as ideias descritas anteriormente ao sistema bidimensional de uma partícula em queda livre, mostrado na figura 5, cuja função de onda inicial é dada pela equação (2.45). Utilizando a equação de movimento de Heisenberg para os operadores posição e momento, em que o hamiltoniano vale $\hat{H}_y = \frac{\hat{P}_H^2}{2m} + mg\hat{Y}_H$ e $\frac{\partial \hat{Y}}{\partial t} = 0$, a solução é dada por

$$\hat{Y}_H(t) = \hat{Y}_H(0) + \frac{\hat{P}_H(0)}{m} t - \frac{gt^2}{2} \mathbb{1}, \quad (3.42)$$

$$\hat{P}_H(t) = \hat{P}_H(0) - mgt \mathbb{1}. \quad (3.43)$$

Considerando que $\langle \hat{P}_H(0) \rangle = 0$ e $\langle \hat{Y}_H(0) \rangle = \bar{y}_0$, temos

$$\langle \hat{Y}_H(t) \rangle = \bar{y}_0 - \frac{gt^2}{2}. \quad (3.44)$$

² Nesse caso, o momento associado à coordenada y será representado pelo operador \hat{P}_H , sendo implícita a sua associação com a coordenada y . Optamos por adotar essa convenção para evitar sobrecarregar a notação.

Impondo $\langle \hat{Y}_H(t_f) \rangle = y_f$ e isolando t_f , obtemos

$$t_f(y_f) = \pm \sqrt{\frac{2(\bar{y}_0 - y_f)}{g}}. \quad (3.45)$$

A solução negativa é descartada por não ter sentido físico. Para determinar a distribuição de probabilidade $\wp(x|y_f)$, utiliza-se a equação (3.41) e o estado inicial dado pela equação (2.45), de modo que

$$\wp(x|y_f) \approx |\psi(x, t_f(y_f))|^2, \quad (3.46)$$

onde a função de onda em x é dada pela equação (2.37).

3.2.2 Abordagem geométrica

Novamente, consideremos um sistema bidimensional, preparado como pacotes gaussianos separáveis com dispersões iniciais iguais em x e y , isto é, $\sigma_{x,0} = \sigma_{y,0} = \sigma_0$. Esses pacotes são inicialmente centrados na posição (\bar{x}_0, \bar{y}_0) e possuem momento médio inicial nulo. Evoluindo os pacotes, a dispersão³ em x e y é

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right)^2}, \quad (3.47)$$

como mostrado na seção 2.3.

Na figura 6, representamos a função de onda do sistema por uma "círculo de probabilidade", que consiste em definir uma circunferência e aproximar o pacote gaussiano em duas dimensões por um valor diferente de zero dentro desta curva, ignorando o que estiver fora. A aproximação a ser feita consiste em considerar que a distribuição de probabilidade de tempo de voo é uniforme, ou seja, todos os instantes de tempo em que a "círculo de probabilidade" intercepta a linha de detecção (x, y_f) são igualmente prováveis. Então, a distribuição de probabilidade do tempo de voo pode ser aproximada por

$$\wp(t|y_f) = \begin{cases} \frac{1}{t_2 - t_1}, & \text{se } t_1 \leq t \leq t_2, \\ 0, & \text{se } t > t_2 \text{ ou } t < t_1, \end{cases} \quad (3.48)$$

onde t_1 é o primeiro instante de tempo que a "círculo de probabilidade" toca a linha de detecção⁴, interceptando-a, definido por

$$y_f = \bar{y}(t_1) + \frac{\sigma(t_1)}{2}, \quad (3.49)$$

³ Aqui, para representar a dispersão em ambas as direções x e y simultaneamente, utilizaremos a notação $\sigma(t)$ sem subíndice, uma vez que essa grandeza é igual em qualquer instante t . Em outras palavras, $\sigma(t)$ denota a dispersão espacial da distribuição de probabilidade da partícula em ambas as direções, sem distinguir entre x e y .

⁴ A primeira vez que a "círculo de probabilidade" toca a linha de detecção é representada pela "círculo de probabilidade" vermelha na figura 6.

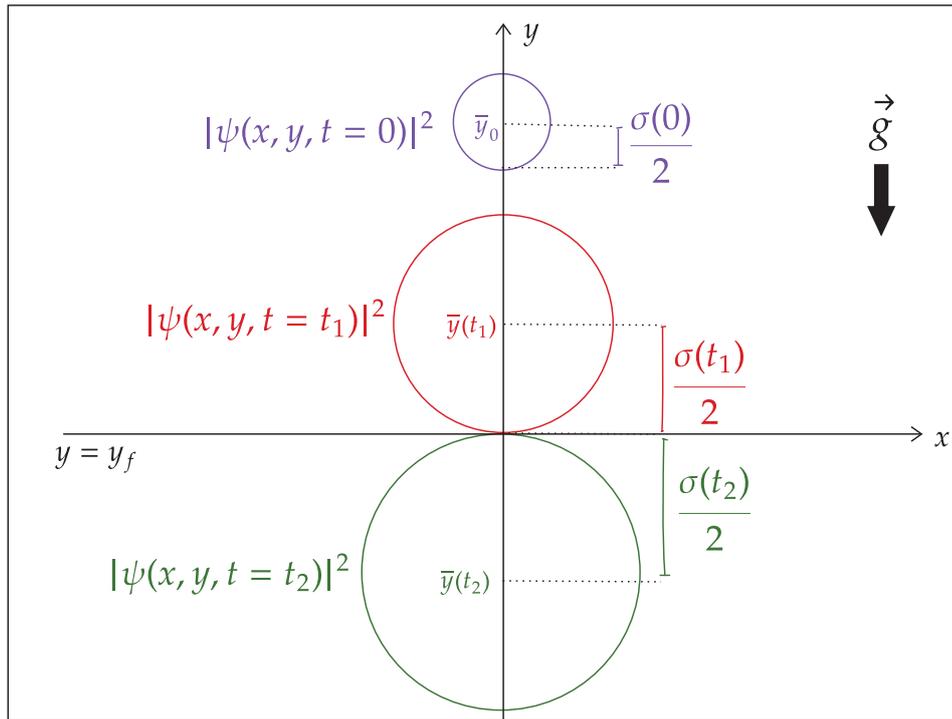


FIGURA 6 – Representação de um sistema físico preparado como pacotes gaussianos separáveis em x e y . A figura representa o sistema como uma "círculo de probabilidade", que consiste em aproximar o pacote gaussiano em duas dimensões por uma circunferência, ignorando o valor da função de onda fora desta região. O eixo x representa a linha de detecção. A "círculo de probabilidade" é mostrada em roxo para $t = 0$, em vermelho para o instante t_1 , em que a "círculo de probabilidade" intercepta a linha de detecção pela primeira vez, e em verde para a última interceptação em t_2 .

em que $\bar{y}(t)$ é a trajetória do centro do pacote gaussiano. O instante t_2 , em que ocorre a última interceptação⁵, é dado por

$$y_f = \bar{y}(t_2) - \frac{\sigma(t_2)}{2}. \quad (3.50)$$

Ao resolver as equações (3.49) e (3.50) para t_1 e t_2 , respectivamente, obtemos a distribuição de probabilidade dos tempos de voo. Utilizando a definição de probabilidade conjunta dada pela equação (2.4) e a distribuição de probabilidade $\wp(t|y_f)$ definida pela equação (3.48), podemos relacionar a distribuição de probabilidade condicional $\wp(x|y_f, t)$ com a distribuição de probabilidade marginal $\wp(x|t)$. Devido ao sistema ser separável, temos que $\wp(x|y_f, t) = \wp(x|t)$. Portanto, podemos calcular a distribuição de probabilidade $\wp(x|y_f)$ como:

$$\begin{aligned} \wp(x|y_f) &= \int dt \wp(x|y_f, t) \wp(t|y_f) \\ &= \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} dt \wp(x|t). \end{aligned} \quad (3.51)$$

⁵ A última vez que a "círculo de probabilidade" toca a linha de detecção é representada pela "círculo de probabilidade" verde na figura 6.

No entanto, é importante notar que essa abordagem é satisfatória apenas para estados gaussianos. Ao aproximarmos a função de onda por uma "círculo de probabilidade", consideramos que a partícula está localizada nessa região, de modo que a probabilidade de encontrarmos a partícula fora dessa região é irrelevante. A abordagem geométrica é satisfatória quando a função de onda tem uma distribuição de probabilidade bem definida e limitada na região da circunferência, como no caso do estado gaussiano. No entanto, para casos mais gerais, as funções de onda não necessariamente estarão localizadas dentro da região delimitada pela "círculo de probabilidade", tornando a abordagem geométrica inadequada e outras técnicas devem ser utilizadas.

Nesta seção, a última do capítulo 3, exploramos diferentes abordagens operacionais da MQ que serão utilizadas para realizar comparações com a TET. Essas abordagens são fundamentais para uma análise comparativa abrangente. No próximo capítulo, iremos aplicar todas as formulações apresentadas neste trabalho, examinando cuidadosamente suas implicações. Com base nessa avaliação comparativa, poderemos obter informações valiosas sobre a validade e o desempenho das abordagens teóricas estudadas, contribuindo para um maior entendimento sobre a validade do determinismo na MQ.

4 ESTUDOS DE CASO

Neste capítulo, apresentamos a aplicação das formulações e abordagens operacionais expostas no capítulo 3 em três estudos de caso: na seção 4.1, exploramos o experimento da dupla fenda; na seção 4.2, apresentamos a análise da partícula livre; e na seção 4.3, analisamos a partícula em queda livre. Em cada uma das seções, utilizaremos as abordagens/modelos pertinentes para descrever e compreender os sistemas em estudo. Lembramos que a TET foi construída para uma trajetória genérica. Portanto, utilizaremos três trajetórias provenientes de formalismos amplamente estabelecidos: a trajetória clássica, semiclássica e bohmiana. Essas trajetórias representam abordagens distintas e nos permitirão explorar diferentes perspectivas sobre o comportamento dos sistemas em análise. Os resultados obtidos por meio destas três aplicações da TET serão confrontados com aqueles fornecidos pelo formalismo de Kijowski, assim como outras abordagens já apresentadas.

4.1 EXPERIMENTO DA DUPLA-FENDA

O experimento da dupla-fenda é comumente associado com o problema da dualidade onda-partícula [35, 36], em que as franjas de interferência observadas são explicadas pela superposição das funções de onda da partícula que passaram pelas duas fendas. No entanto, outro aspecto fundamental a ser considerado é o tempo: em uma realização do experimento, a partícula é descrita pela função de onda $\psi(x, y, t)$. No capítulo 3, mostramos que a previsão teórica, que pode ser comparada com os dados experimentais, deve ser dada pela equação (3.3). É importante lembrar que nessa previsão aparece a distribuição de probabilidade de tempo de voo $\wp_T(t|x = x_f)$, que a MQ sem hipóteses adicionais acerca do tempo não é capaz de prever.

Nesse cenário, vamos nos colocar no papel do realizador do experimento. O experimento da dupla-fenda é realizado com uma única partícula de cada vez. Portanto, a cada rodada do experimento, uma partícula será gerada, que irá interagir com as fendas e será detectada em $x = x_f$. Após realizar várias rodadas, obtém-se os dados necessários para se construir a distribuição de probabilidade atemporal $\wp_E(y|x = x_f)$. Ao buscarmos suporte teórico da MQ, nos deparamos com o problema enunciado no parágrafo anterior, em que a MQ não é capaz de obter tal distribuição devido à incapacidade de prever a distribuição de probabilidade de tempos de voo $\wp_T(t|x = x_f)$.

Do ponto de vista experimental, é possível fazer algumas aproximações em relação ao tempo de chegada. Podemos estimar uma janela de tempo $\Delta t = t_2 - t_1$, na qual a partícula é detectada, de acordo com algum critério físico definido pelo realizador

do experimento. No entanto, é importante lembrar que o tempo de voo das partículas no experimento geralmente não pode ser controlado pelo seu realizador, tornando impossível inferi-lo em determinada rodada do experimento. Portanto, ao considerar o cenário experimental relacionado ao tempo, é comum assumir que a partícula tenha a mesma probabilidade de ser detectada em qualquer instante dentro do intervalo de tempo Δt . Em outras palavras, podemos adotar que a distribuição de probabilidade de tempo de voo seja uniforme e expressa por

$$\wp(t|x_f) = \begin{cases} \frac{1}{t_2-t_1}, & \text{se } t \in [t_1, t_2], \\ 0, & \text{se } t < t_1 \text{ e } t > t_2. \end{cases} \quad (4.1)$$

A distribuição uniforme proposta para o tempo de voo representa, na teoria da informação clássica, a distribuição com máxima incerteza possível sobre a saída de tal variável aleatória. Esse modelo reflete uma intuição clássica que temos acerca de sistemas probabilísticos, na qual a ausência de informação leva à escolha da distribuição uniforme como uma opção natural. Assim como no lançamento de um dado honesto, em que a probabilidade de saída de cada face é igual, no experimento da dupla-fenda, aproximamos a distribuição de tempos de voo por uma função uniforme. Como a MQ não oferece ferramentas para prevermos a distribuição de probabilidade de tempos de voo, a intuição que temos de problemas clássicos (como o lançamento de um dado) nos leva a supor que esta distribuição é uma aproximação adequada. Portanto, a distribuição de probabilidade atemporal $\wp(y|x = x_f)$ é dada por

$$\wp(y|x = x_f) = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} dt |\psi(y, t)|^2. \quad (4.2)$$

Utilizaremos agora a TET para obter a distribuição via trajetórias bohmianas e compararemos com a equação (4.2). Antes de tudo, é necessário obter a trajetória bohmiana em x . No capítulo 3, mencionamos que esse sistema é separável, ou seja, $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$ e consideramos inicialmente as funções de onda separáveis, em que a função de onda em y é uma superposição de gaussianas centradas nas fendas e, em x , é uma onda plana normalizada no espaço entre as fendas e o anteparo, dada por

$$\psi_x(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{x_f}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\bar{p}_0 x - E)t \right], & \text{se } 0 \leq x \leq x_f \\ 0, & \text{se } x < 0 \text{ e } x > x_f, \end{cases} \quad (4.3)$$

onde E é a energia do sistema. O gerador das trajetórias bohmianas é dado por $S(x, t) = \bar{p}_0 x - E$, e o campo de velocidades é dado por

$$\dot{x} = v(x, t) = \frac{1}{m} \frac{dS}{dx} = \frac{\bar{p}_0}{m}.$$

Integrando a equação acima, encontramos a trajetória bohmiana

$$x = \phi(x_0, t) = x_0 + \frac{\bar{p}_0}{m} t, \quad (4.4)$$

que é equivalente à trajetória clássica. Observe que $|\psi(x, t)|^2 = 1/x_f$, $|\partial_{x_0}\phi(x_0, t)| = 1$, e $|\partial_t\phi(x_0, t)| = |\bar{p}_0/m|$. Dessa forma, segundo as equações (2.20) e (3.20), podemos obter a distribuição de probabilidade via trajetórias bohmianas em x e em t :

$$\wp_{TB}(x|t) = \begin{cases} \frac{1}{x_f}, & \text{se } 0 \leq x \leq x_f, \\ 0, & \text{se } x < 0 \text{ e } x > x_f, \end{cases} \quad (4.5)$$

e

$$\begin{aligned} \wp_{TB}(t|x_f) &= \wp_{TB}(x_f|t) |\partial_t\phi(x_0, t)|_{x_0=\Lambda(x_f, t)} \\ &= \begin{cases} \frac{|\bar{p}_0|}{mx_f}, & \text{se } 0 \leq t \leq \frac{mx_f}{|\bar{p}_0|} \\ 0, & \text{se } t < 0 \text{ e } t > \frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Observe que, devido à distribuição de probabilidade ser igualmente provável no intervalo $x \in [0, x_f]$, a distribuição de probabilidade dos tempos de voo também é igualmente provável no intervalo de tempo $t \in [0, \frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}]$. Isso é consistente com a discussão realizada no início desta seção, com a diferença de que, neste cenário teórico, a janela de tempo, que normalmente seria definida pelo realizador do experimento, é determinada pelo formalismo. Note que $\frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}$ representa o tempo clássico que a partícula levaria para ir de uma das fendas até o anteparo. Assim, a previsão da TET é dada por

$$\wp(y|x_f) = \frac{|\bar{p}_0|}{mx_f} \int_0^{\frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}} dt |\psi(y, t)|^2. \quad (4.7)$$

Se escolhermos o intervalo de tempo $t \in [0, \frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}]$ no modelo (4.2), obteremos a mesma previsão da TET, dada pela equação (4.7). No entanto, é importante ressaltar que, embora este modelo seja natural do ponto de vista experimental, não há justificativa teórica rigorosa para ele na teoria quântica. O aspecto mais relevante desse exemplo é demonstrar a limitação da teoria quântica em fazer previsões sobre o tempo, o que a impede de confrontar diretamente suas previsões com os resultados experimentais. Na TET, tais previsões surgem de forma natural, sem a necessidade de introduzir hipóteses adicionais na teoria. Conseqüentemente, a TET, fornece previsões para o experimento da dupla-fenda os quais a MQ não é capaz de fazê-lo. Caso a função de onda em x fosse diferente de uma onda plana, a distribuição de tempo de voo que obteríamos para a trajetória bohmiana via TET seria diferente da aproximação dada pela equação (4.1).

Nesse contexto, seja um cenário típico do experimento da dupla-fenda, em que as função de onda é separável, dada pela equação (4.3) em x e

$$\psi_y(y, t=0) = \frac{e^{-(y+\bar{y}_0)^2/4\sigma_{y,0}^2} e^{i\bar{p}_{y,0}(y+\bar{y}_0)/\hbar} + e^{-(y-\bar{y}_0)^2/4\sigma_{y,0}^2} e^{-i\bar{p}_{y,0}(y-\bar{y}_0)/\hbar}}{\sqrt{2 + 2 e^{-\frac{\bar{y}_0^2}{2\sigma_{y,0}^2}} e^{\frac{2\bar{p}_{y,0}^2\sigma_{y,0}^2}{\hbar}}}} (2\pi\sigma_{y,0})^{1/4}$$

em y . Agora, vamos obter a distribuição de probabilidade atemporal $\wp(y|x_f)$ utilizando a TET para a trajetória bohmiana e pelo modelo de tempo médio, apresentado na seção 3.2.

TET. No início desta seção, mostramos como obter a distribuição atemporal $\wp_{TB}(y|x_f)$, conforme dado pela equação (4.7). Para obter essa distribuição, é necessário evoluir a função de onda e resolver a integral correspondente. Para maior conveniência, ambos os procedimentos serão realizados numericamente.

Modelo de tempo médio. Utilizando a equação de movimento de Heisenberg para os operadores posição e momento em x , em que o hamiltoniano vale $\hat{H}_x = \frac{\hat{P}_H^2}{2m}$ e $\frac{\partial \hat{X}_H}{\partial t} = 0$, a solução é dada por:

$$\hat{X}_H(t) = \hat{X}_H(0) + \frac{\hat{P}_H(0)}{m} t, \quad (4.8)$$

$$\hat{P}_H(t) = \hat{P}_H(0). \quad (4.9)$$

Considerando que $\langle \hat{P}_H(0) \rangle = \bar{p}_{x,0}$ e $\langle \hat{X}_H(0) \rangle = \bar{x}_0$, temos

$$\langle \hat{X}_H(t) \rangle = \bar{x}_0 + \frac{\bar{p}_{x,0}}{m} t. \quad (4.10)$$

Impondo $\langle \hat{X}_H(t_f) \rangle = x_f$ e isolando t_f , obtemos

$$t_f(x_f) = \frac{m(x_f - \bar{x}_0)}{\bar{p}_{x,0}}, \quad (4.11)$$

onde $\bar{p}_{x,0} \neq 0$. Utilizando a equação (3.41) obtemos a distribuição de probabilidade atemporal:

$$\wp_{tm}(y|x_f) = |\psi_y(y, t_f(x_f))|^2. \quad (4.12)$$

Por conveniência, a evolução da função de onda ψ_y será realizada numericamente. A figura 7 apresenta a distribuição atemporal para a TET utilizando a trajetória bohmiana (curva preta) e o modelo do tempo médio (curva vermelha).

Diferentemente da formulação da TET, no modelo de tempo médio, observamos que à medida que aumentamos a distância entre as fendas e o anteparo, o padrão de interferência desaparece das previsões. Isso ocorre devido ao comportamento da função de onda: o método do tempo médio avalia o módulo ao quadrado da função de onda em um tempo médio, que depende da posição do anteparo em relação às fendas¹. Consequentemente, quanto mais distante o anteparo estiver das fendas, maior

¹ É verdade que, nas fórmulas, o tempo médio acaba dependendo matematicamente da posição x_f do anteparo. No entanto, dentro da perspectiva clássica de tempo de voo, podemos considerar que é o ponto x_f do anteparo que deve ser escolhido com base na nossa escolha para o tempo de voo. Podemos simplificar o fenômeno para uma dimensão, como ilustrado na figura 9. Ao escolher um tempo em que os pacotes se sobrepõem, podemos observar a interferência. Do ponto de vista experimental, isso corresponde a realizar uma pós-seleção estatística para o valor desejado de tempo. Portanto, fundamentalmente falando, o tempo que atribuímos à densidade de probabilidade é uma escolha do observador.

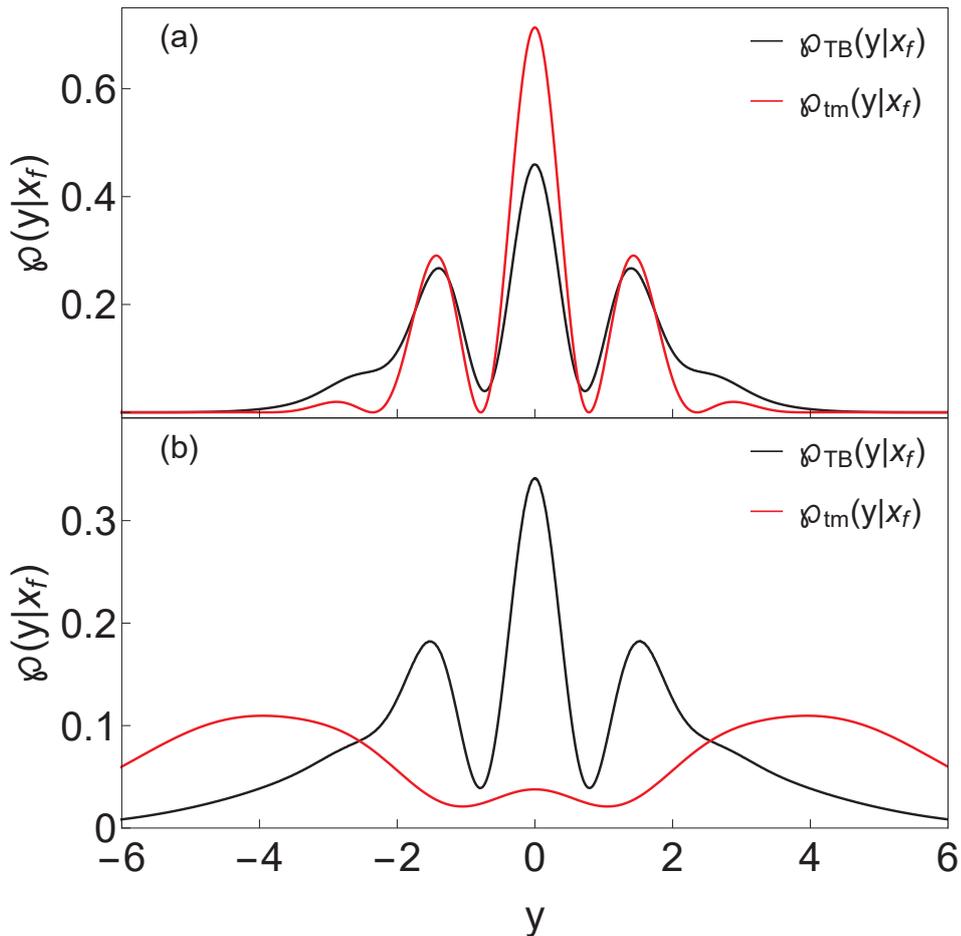


FIGURA 7 – Distribuições de probabilidade atemporal $\varphi(y|x_f)$ para o experimento da dupla-fenda obtidas pelos métodos da TET utilizando a trajetória bohmiana e pelo modelo de tempo médio (tm). Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 1, \bar{y}_0 = 0, \bar{p}_{x,0} = 1, \bar{p}_{y,0} = 2, m = 0.5, x_f = 1\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 1, \bar{y}_0 = 0, \bar{p}_{x,0} = 1, \bar{p}_{y,0} = 2, m = 0.5, x_f = 3\}$, respectivamente, a única diferença sendo a distância do sistema de detectores às fendas. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

será o tempo médio. Se avaliarmos a função de onda em y durante um tempo longo, dependendo do sistema, veremos dois pacotes afastados, sem sobreposição espacial e, portanto, sem a formação de um padrão de interferência acentuado (veja a figura 9 para uma ilustração deste aspecto). Ao descrevermos a função de onda na direção como uma onda plana, resulta na distribuição de tempos de voo obtida através da TET utilizando trajetórias bohmianas, que é uniforme (conforme a equação (4.6)) no intervalo $t \in \left[0, \frac{mx_f}{|\bar{p}_0|}\right]$. Isso, por sua vez, leva a distribuição de probabilidade atemporal $\varphi(y|x_f)$, dada pela equação (4.7), que é uma média uniforme sobre a função de onda em y . Consequentemente, nas figuras 7 (a) e (b), observamos um comportamento de interferência nas distribuições de probabilidade $\varphi(y|x_f)$. Esse comportamento decorre da natureza da média, visto que nessa média estamos considerando todos os possíveis tempos de voo dentro desse intervalo, em vez de um único tempo que poderia ou não gerar interferência, evidenciado pela distribuição de probabilidade $\varphi_{tm}(y|x_f)$.

Outro ponto de discussão diz respeito à visibilidade das distribuições de probabilidade, que representa uma medida da nitidez ou contraste do padrão de interferência. A visibilidade é determinada pela diferença entre a intensidade máxima e mínima do padrão de interferência, sendo alta quando os máximos e mínimos são bem distintos e baixa quando estão próximos uns dos outros. Vários fatores, como a coerência do feixe de partículas, a distância entre as fendas e o comprimento de onda das partículas, podem influenciar a visibilidade.

Ao observar as curvas da figura 7 (a), podemos notar que a visibilidade da distribuição resultante da abordagem da TET (curva preta) é menor em comparação com o modelo de tempo médio (curva vermelha). Esse fenômeno é análogo à descoerência, que é o fenômeno de perda de coerência quântica devido à interação com graus de liberdade incontroláveis, geralmente associados ao ambiente externo. No contexto do experimento da dupla-fenda, a descoerência pode se manifestar como uma redução da visibilidade. Para mais informações sobre descoerência, recomenda-se consultar as referências [46, 47]. No entanto, no caso em questão, a redução da visibilidade pode não estar diretamente associada à descoerência, mas sim, como mostramos, às contribuições dos vários tempos de voo. É crucial ressaltar que esse comportamento só é observado para uma distância x_f que seja consistente com um padrão de interferência no modelo de tempo médio. Conforme x_f aumenta, notamos que a visibilidade da distribuição resultante da abordagem da TET aumenta em comparação com o modelo de tempo médio, o que fica claro no painel (b).

Na seção subsequente, procederemos à investigação do caso da partícula em movimento livre. Nessa análise, empreenderemos uma comparação entre o formalismo da TET para as trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana, em contraste com o formalismo de Kijowski. Além disso, demonstraremos que a formulação bohmiana, para a distribuição dos tempos de voo, dada pela equação (2.34), não se revela coerente com as propriedades inerentes a uma distribuição de probabilidade, quando a trajetória bohmiana atravessa o mesmo ponto em dois instantes de tempo distintos.

4.2 PARTÍCULA LIVRE

Seja uma partícula livre, de massa m , preparada em um estado gaussiano descrito por

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{x,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x}_0)^2}{4\sigma_{x,0}^2}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\bar{p}_0(x - \bar{x}_0)\right], \quad (4.13)$$

sendo \bar{x}_0 a posição média inicial, $\sigma_{x,0}$ a dispersão do pacote gaussiano e \bar{p}_0 o momento médio inicial. Na seção 2.3, mostramos como evoluir tal sistema via MQ. Assim, a

função de onda em um instante de tempo t é dada por

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{x,t}^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0 t}{m})^2}{4\sigma_{x,t}^2} \right] e^{iS(x,t)/\hbar},$$

onde a dispersão $\sigma_{x,t}$ é dada por

$$\sigma_{x,t} = \sigma_{x,0} \sqrt{1 + \left(\frac{t\hbar}{2m\sigma_{x,0}^2} \right)^2}$$

e a fase $S(x, t)$ resulta em

$$\begin{aligned} S(x, t) &= \frac{\hbar^2 t}{8m\sigma_{x,t}^2 \sigma_{x,0}^2} \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0 t}{m} \right)^2 + \bar{p}_0 \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0 t}{m} \right) + \\ &+ \frac{\bar{p}_0^2}{2m} t - \frac{\hbar}{2} \arctan \left[\frac{\hbar t}{2m\sigma_{x,0}^2} \right]. \end{aligned}$$

Iremos obter a distribuição de probabilidade do tempo de voo dada que a partícula está em $x_f = 0$, a partir da TET utilizando trajetórias clássicas, bohmianas e semiclássicas (descritas no apêndice B). Utilizaremos as trajetórias clássicas e semiclássicas como um contexto de teste, ou seja, se essas trajetórias forem consistentes com as previsões da trajetória bohmiana, do formalismo de Kijowski ou com os dados experimentais, se tivermos acesso a eles, não podemos descartá-las. Como este exemplo não envolve duas dimensões, o objetivo é obter a distribuição de probabilidade $\wp(t|x_f)$. A partir da formulação proposta por Kijowski (seção 2.4.2), obteremos a distribuição de probabilidade a partir do formalismo da MQS, que será comparada com a TET.

Distribuição de Kijowski. A distribuição de Kijowski é expressa pela equação (2.75). Para calcular essa distribuição, precisamos da função de onda inicial na representação de momento, que foi obtida na seção 2.3

$$\varphi(p, 0) = \left(\frac{2\sigma_{x,0}^2}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\sigma_{x,0}^2 (p - \bar{p}_0)^2}{\hbar^2} \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p - \bar{p}_0) \bar{x}_0 \right].$$

Podemos reescrever a distribuição de Kijowski (2.74) considerando $\hbar = 1$ e utilizando a equação (2.64). Assim obtemos

$$\begin{aligned} \langle \psi|t, \lambda \rangle &= \int dp \langle \psi|p \rangle \langle p|t, \lambda \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi m\hbar}} \int dp \theta(\lambda p) \sqrt{|p|} e^{ip^2 t/2m} \varphi^*(p, 0), \end{aligned}$$

o que resulta em

$$\begin{aligned} \wp_K(t|x=0) &= \sum_{\lambda} |\langle \psi|t, \lambda \rangle|^2 \\ &= \frac{\sigma_{x,0}}{m\pi\sqrt{2\pi}} \sum_{\lambda=\pm 1} \left| \int dp \theta(\lambda p) \sqrt{|p|} e^{i(p-\bar{p}_0)\bar{x}_0} e^{-\sigma_{x,0}^2 (p-\bar{p}_0)^2} e^{itp^2/2m} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Porém, não é possível prosseguir analiticamente a partir desse ponto, sendo necessário resolver a integral numericamente.

Trajétória clássica. Uma maneira de avaliar a distribuição de tempos de voo envolve a análise sobre o sistema clássico análogo, sem informação sobre o campo de velocidades. Em última instância, estamos investigando se existem trajetórias clássicas determinísticas subjacentes à natureza. Nesse sentido, a trajetória de uma partícula clássica é dada por

$$x(t) = \phi(x_0, p_0, t) = x_0 + \frac{p}{m} t, \quad (4.15)$$

$$p(t) = \omega(x_0, p_0, t) = p_0, \quad (4.16)$$

onde $x(t=0) \equiv x_0$ e $p(t=0) \equiv p_0$. Utilizaremos a equação (3.36) para encontrar a distribuição clássica $\wp_c(x|t)$ a partir de $\wp(x, p|t)$ dada pela equação (3.35). Invertendo as trajetórias, encontramos

$$x_0 = \Lambda_x(x, p_0, t) = x - \frac{p_0}{m} t,$$

$$p_0 = \Lambda_p(p, x_0, t) = p,$$

e as derivadas

$$\partial_{x_0} \phi(x_0, p_0, t) = 1,$$

$$\partial_{p_0} \omega(x_0, p_0, t) = 1,$$

importantes para a definição do denominador da equação (3.35). A função auxiliar χ_t , encontrada a partir do isolamento de p_0 na equação $p - \Lambda_p(\Lambda_x(x, p_0, t), p_0, t) = 0$, torna-se $p_0 = \chi_t(x, p, t) = p$. O estado clássico inicial é compatível com a descrição quântica. Ou seja, é uma gaussiana separável no espaço de fase $\rho_0(x, p) = \rho_0(x)\rho_0(p)$, com $\rho_0(x) = |\psi(x, t=0)|^2$, definida pela equação (4.13). Já a distribuição de probabilidade inicial de momento é dada por

$$\rho_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p,0}^2}} \exp\left[-\frac{(p - \bar{p}_0)^2}{2\sigma_{p,0}^2}\right], \quad (4.17)$$

sendo \bar{p}_0 o momento médio inicial e $\sigma_{p,0}$ a dispersão média inicial. Obteremos a distribuição para o espaço de fase utilizando a equação (3.35)

$$\begin{aligned} \wp_c(x, p|t) &= \rho_0(\Lambda_x(x, \chi_t(x, p, t), t)) \rho_0(\chi_t(x, p, t)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,0}^2}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x}_0 - \frac{p}{m} t)^2}{2\sigma_{x,0}^2}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p,0}^2}} \exp\left[-\frac{(p - \bar{p}_0)^2}{2\sigma_{p,0}^2}\right]. \end{aligned}$$

O subíndice em $\wp_c(t|x)$ indica que esta distribuição de probabilidade é calculada a partir da descrição clássica. Marginalizando-se sobre p , encontra-se

$$\begin{aligned}\wp_c(x|t) &= \int dp \wp_c(x, p|t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,t}^2}} \exp \left[-\frac{(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m} t)^2}{2\sigma_{x,t}^2} \right],\end{aligned}\quad (4.18)$$

com

$$\sigma_{x,t} = \sigma_{x,0} \sqrt{1 + \left(\frac{\sigma_{p,0} t}{m\sigma_{x,0}} \right)^2}.\quad (4.19)$$

Note que o calculo reproduz o formalismo Liouvilliano², em que $\wp_c(x, p|t)$ descreve como uma distribuição de probabilidade clássica evolui no tempo, bastando aplicar o mapa inverso da trajetória na distribuição de probabilidade inicial. Se utilizarmos o limite inferior para a relação de incerteza de Heisenberg $\sigma_{x,0} \sigma_{p,0} \geq \frac{\hbar}{2}$ e definirmos a incerteza no momento em função da incerteza na posição, ou seja, $\sigma_{p,0} = \frac{\hbar}{2\sigma_{x,0}}$, obteremos

$$\wp_c(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,t}^2}} \exp \left[-\frac{(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m} t)^2}{2\sigma_{x,t}^2} \right] = |\psi(x, t)|^2.\quad (4.20)$$

Ou seja, o resultado clássico recupera o resultado quântico, dado pela equação (2.40). Esse resultado é específico para o sistema em questão, em que não há características quânticas como superposição de estados.

Para obter a distribuição $\wp_c(t|x = 0)$, utilizaremos a equação (3.37). Antes disso, porém, precisamos manipular (4.15) e (4.16) para obter

$$\begin{aligned}\vartheta_x(x, x_0, p_0) &= \frac{m}{p_0}(x - x_0) \\ \partial_{x_0} \vartheta_x(x, x_0, p_0) &= -\frac{m}{p_0}.\end{aligned}$$

A função auxiliar χ_x , obtida isolando-se p_0 em $p - \omega(\Lambda_x(x, p_0, t), p_0, t) = 0$, torna-se $p_0 = \chi_x(x, p, t) = p$. Observe que esta função é independente da posição inicial x_0 . Portanto,

$$\begin{aligned}\wp_c(p, t|x) &= \frac{\rho_0(\Lambda_x(x, \chi_x(x, p, t), t), \chi_x(x, p, t))}{\left| \partial_{x_0} \vartheta_q(x, x_0, \chi_x) \right|_{x_0=\Lambda_x(x, \chi_x, t)} \left| \partial_{p_0} \omega(\Lambda_x(x, p_0, t), p_0, t) \right|_{p_0=\chi_x(x, p, t)}} \\ &= \left| \frac{p}{m} \right| \rho_0 \left(x - \frac{p}{m} t, p \right).\end{aligned}\quad (4.21)$$

² O formalismo Liouvilliano é descrito no apêndice A.

Finalmente, para encontrar a distribuição condicional de tempo, basta marginalizarmos a distribuição $\wp_c(p, t|x)$ em p :

$$\begin{aligned}\wp_c(t|x) &= \int dp \wp_c(p, t|x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,0}^2}\sqrt{2\pi\sigma_{p,0}^2}} \int dp \left|\frac{p}{m}\right| \exp\left[-\frac{(x - \bar{x}_0 - \frac{p}{m}t)^2}{2\sigma_{x,0}^2}\right] \exp\left[-\frac{(p - \bar{p}_0)^2}{2\sigma_{p,0}^2}\right],\end{aligned}$$

a integral será resolvida numericamente.

Trajétória bohmiana. Aqui faremos uma terceira abordagem sobre o mesmo sistema físico. De acordo com a teoria bohmiana, a trajetória para a partícula livre é dada pela equação (2.42), que é repetida abaixo:

$$x(t) = \phi(x_0, t) = \bar{x}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m}t + \frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}}(x_0 - \bar{x}_0).$$

A trajetória bohmiana não é típica de uma partícula livre, uma vez que há aceleração proveniente do campo quântico, evidenciada pelo termo $\frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}}(x_0 - \bar{x}_0)$ na trajetória. Note que, diferentemente da abordagem clássica, nesta descrição as trajetórias são plenamente determinadas apenas pela posição inicial, uma vez que o momento inicial está embutido no gerador de trajetórias bohmianas $S(x, t)$. Para calcular a distribuição de probabilidade $\wp_{TB}(x|t)$ com a trajetória bohmiana, primeiro precisamos inverter a trajetória

$$x_0 = \Lambda(x, t) = \bar{x}_0 + \frac{\sigma_{x,0}}{\sigma_{x,t}} \left(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m}t \right). \quad (4.22)$$

Calculamos também

$$\partial_{x_0}\phi(x_0, t) = \frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}} = \sqrt{1 + \left(\frac{t\hbar}{2m\sigma_{x,0}^2}\right)^2}.$$

Lembre-se que $\sigma_{x,t}$ e $\sigma_{x,0}$ são positivos e não dependem de x_0 , portanto

$$|\partial_{x_0}\phi(x_0, t)|_{x_0=\Lambda(x,t)} = \frac{\sigma_{x,t}}{\sigma_{x,0}}. \quad (4.23)$$

Usando a equação (3.9), obtemos a distribuição de probabilidade $\wp_{TB}(x|t)$

$$\begin{aligned}\wp_{TB}(x|t) &= \frac{\rho_0(\Lambda(x, t))}{|\partial_{x_0}\phi(x_0, t)|_{x_0=\Lambda(x,t)}} \\ &= \frac{\sigma_{x,0} e^{-(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m}t)^2/2\sigma_{x,t}^2}}{\sigma_{x,t} \sqrt{2\pi\sigma_{x,0}^2}} \\ &= \frac{e^{-(x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m}t)^2/2\sigma_{x,t}^2}}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,t}^2}} = |\psi(x, t)|^2,\end{aligned} \quad (4.24)$$

com

$$\begin{aligned}\sigma_{x,t} &= \sigma_{x,0} \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}, \\ \tau &= \frac{2m\sigma_{x,0}^2}{\hbar}.\end{aligned}\quad (4.25)$$

Note que, ao utilizar a trajetória bohmiana encontramos a mesma distribuição oriunda da MQ, definida pela equação (2.40). Isso era esperado por conta do princípio da *equivariância*. Finalmente para obter a distribuição de tempos de voo, utilizamos a equação (3.20). Para tal, calculamos

$$\partial_t \phi(x_0, t) = \frac{\bar{p}_0}{m} + \frac{t}{\tau^2} \frac{x_0 - \bar{x}_0}{\sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}}, \quad (4.26)$$

e, a partir da equação (4.22), obtemos

$$|\partial_t \phi(x_0, t)|_{x_0=\Lambda(x,t)} = \left| \frac{\bar{p}_0}{m} + \frac{t}{\tau^2} \frac{x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m}t}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \right|.$$

Assim, a distribuição de probabilidade de tempo de voo é dada por

$$\begin{aligned}\wp_{TB}(t|x) &= \wp(x|t) |\partial_t \phi(x_0, t)|_{x_0=\Lambda(x,t)} \\ &= \left| \frac{\bar{p}_0}{m} + \frac{t}{\tau^2} \frac{x - \bar{x}_0 - \frac{\bar{p}_0}{m}t}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \right| |\psi(x, t)|^2.\end{aligned}\quad (4.27)$$

Note que esta distribuição de probabilidade do tempo de voo obtida pela TET para a trajetória bohmiana é equivalente à distribuição obtida pelo formalismo de Muga-Leavens, exceto pela normalização, como expresso na equação (2.43). No entanto, para esse caso específico, mostramos numericamente que a normalização é igual a 1, o que significa que os resultados são equivalentes.

Trajatória semiclássica. Uma outra abordagem para descrever a distribuição de probabilidade dos tempos de voo envolve a utilização de aproximações semiclássicas, conforme apresentado no apêndice B e descrito no artigo [48]. Nesse trabalho, o objetivo é propagar pacotes de onda no limite semiclássico. A grandeza em estudo é a função de onda dependente do tempo, dada por

$$\psi(x_f, t) = \int dx_i \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | x_i \rangle \psi(x_i, 0),$$

sendo que $\psi(x_i, 0)$ é determinada pela equação (4.13) e $\hat{U}(t_0, t)$ o operador evolução temporal. Na abordagem utilizada, a distribuição de probabilidade é expressa em termos de uma trajetória clássica específica da descrição clássica equivalente. Para encontrá-la, é necessário calcular a ação clássica $S(x_1, x_2, t)$. Vale ressaltar que essa

função não é trivial, pois deve depender apenas das posições genéricas inicial x_1 e final x_2 , além do tempo t . A partir de S , podemos determinar o ponto inicial da trajetória, ou seja, sua posição x_0 e momento p_0 . Essa quantidade deve satisfazer a seguinte condição:

$$p_0 = -\partial_{x_0} S(x_f, x_0, t) = p_0(x_f, x_0, t),$$

enquanto a posição é dada por

$$\frac{x_0 - \bar{x}_0}{b} + i \frac{p_0 - \bar{p}_0}{c} = 0.$$

A equação acima nos permite escrever $x_0 = x_0(x_f, t)$. No entanto, no cenário atual, observamos que o momento inicial da trajetória não depende exclusivamente de x_0 e t , diferentemente das trajetórias bohmianas. Isso implica que não é possível definir a trajetória apenas a partir de x_0 . No entanto, ao assumir que a relação $x_0 = x_0(x_f, t)$ entre os parâmetros (x_0, x_f, t) é reversível, podemos encontrar $x_f = x_f(x_0, t)$. Portanto, o formalismo TET mais adequado seria aquele que envolve trajetórias com um campo de velocidade associado (seção 3.1.1).

Adaptamos esse formalismo para o estudo do tempo de voo necessário para uma partícula, preparada de acordo com a equação (4.13), alcançar uma determinada posição x_f . Assumimos que, nesse problema, as trajetórias descritas acima são responsáveis pelo determinismo discutido no capítulo 3. Para uma partícula livre, temos:

$$S(x_f, x_0; t) = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_0)^2}{t},$$

a partir da qual obtemos a posição e o momento inicial:

$$x_0 = \Lambda(x, t) = \frac{x + i\omega t \left(\bar{x}_0 + i \frac{1}{m\omega} \bar{p}_0 \right)}{1 + i\omega t} \quad (4.28)$$

$$p_0 = \frac{\bar{p}_0 + im\omega(x - \bar{x}_0)}{1 + i\omega t} \quad (4.29)$$

onde

$$\omega = \frac{\hbar}{2m\sigma_{x,0}^2}. \quad (4.30)$$

A partir da equação (4.28), podemos definir a trajetória, isolando x :

$$x = \phi(x_0, t) = x_0 + \left(\frac{\bar{p}_0}{m\omega} - i\bar{x}_0 \right) \omega t + ix_0 \omega t, \quad (4.31)$$

de modo que

$$\partial_{x_0} \phi(x_0, t) = 1 + i\omega t. \quad (4.32)$$

Usando a equação (3.9), temos que a distribuição de probabilidade semiclássica é dada por

$$\begin{aligned}
\wp_{sc}(x|t) &= \frac{\rho_0(\Lambda(x,t))}{|\partial_{x_0}\phi(x_0,t)|_{x_0=\Lambda(x,t)}}, \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,0}^2}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0-\frac{\bar{p}_0}{m}t)^2}{2\sigma_{x,0}^2(1+(\omega t)^2)}\right] \frac{1}{|1+i\omega t|} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{x,c}^2}} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x}_0-\frac{\bar{p}_0}{m}t)^2}{2\sigma_{x,c}^2}\right]
\end{aligned} \tag{4.33}$$

com

$$\sigma_{x,c} = \sigma_{x,0} \sqrt{1+(\omega t)^2}. \tag{4.34}$$

Note que, se a equação (4.30) for satisfeita, isso implica que $\wp_{sc}(x|t) = |\psi(x,t)|^2$. Para obter a distribuição de tempo de voo $\wp_{sc}(t|x)$, utilizamos a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial\vartheta(x,x_0)}{\partial x_0}\right)_x^{-1} &= \left(\frac{\partial\Lambda(x,t)}{\partial t}\right)_x \\
\left|\frac{\partial\vartheta(x,x_0)}{\partial x_0}\right|_{x_0=\Lambda(x_0,t)}^{-1} &= \left|\frac{\partial\Lambda(x,t)}{\partial t}\right|.
\end{aligned} \tag{4.35}$$

A partir dessas expressões, a derivada da trajetória inversa é escrita como

$$|\partial_t\Lambda(x,t)| = \left| -\frac{\left(\frac{\bar{p}_0}{m\omega} + i(x-\bar{x}_0)\right)\omega}{(1+i\omega t)^2} \right|, \tag{4.36}$$

e assim, obtemos a distribuição de tempo de voo $\wp_{sc}(t|x)$

$$\begin{aligned}
\wp_{sc}(t|x) &= \frac{\rho_0(\Lambda(x,t))}{|\partial_{x_0}\vartheta(x,x_0)|_{x_0=\Lambda(x,t)}} \\
&= \rho_0(\Lambda(x,t)) |\partial_t\Lambda(x,t)| \\
&= \left| \frac{\left(\frac{\bar{p}_0}{m\omega} + i(x-\bar{x}_0)\right)\omega}{(1+i\omega t)^2} \right| \rho_0(\Lambda(x,t)).
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Vamos comparar quatro métodos para obter a distribuição de tempos de voo: a distribuição de Kijowski, o método TET utilizando as trajetórias clássica, bohmiana e semiclássica, sendo que para o caso clássico a incerteza do momento segue (em valor numérico) o princípio de incerteza de Heisenberg. Na figura 8, plotamos as distribuições $\wp_K(t|x=0)$, $\wp_c(t|x=0)$, $\wp_{TB}(t|x=0)$ e $\wp_{sc}(t|x=0)$ para dois conjuntos de variáveis. É pertinente destacar que, nos dois painéis considerados, a velocidade do centro do

pacote é idêntica, o que sugere que o centro da distribuição de tempos de voo deveria ser igual. No entanto, essa expectativa não se confirma devido à disparidade das massas entre as partículas representadas nos painéis (a) e (b). No caso específico abordado, a massa da partícula no painel (a) é significativamente menor do que a massa da partícula no painel (b), resultando em uma dispersão espacial mais ampla para o pacote gaussiano associado ao caso (a). Consequentemente, a probabilidade espacial, em um instante de tempo qualquer, para o caso (b) é mais localizado em relação ao caso (a), o que implica em um deslocamento do pico e uma maior dispersão da distribuição de tempos de voo no caso (a) com relação ao (b).

As distribuições de Kijowski e bohmiana são equivalentes em ambos os casos, o que era esperado devido ao princípio da *equivariância*. Além disso, para este exemplo em particular, é possível reproduzir o comportamento quântico utilizando tanto das

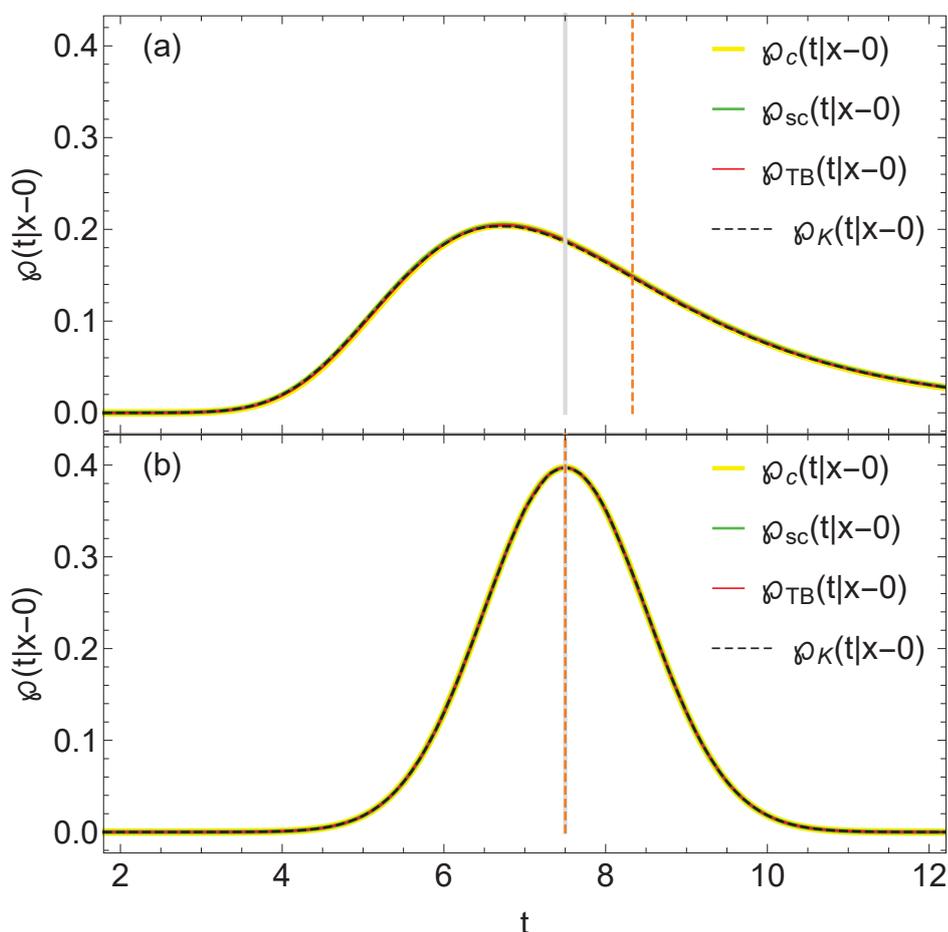


FIGURA 8 – Distribuição de probabilidade de tempo de voo para a partícula livre, obtida pelos métodos de Kijowski, TET utilizando as trajetórias clássica, bohmiana e semi-clássica. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{x}_0 = -15, \bar{p}_0 = 1, m = 0.5\}$ e $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{x}_0 = -15, \bar{p}_0 = 20, m = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias. A linha vertical cinza representa o tempo de voo clássico da partícula, enquanto a linha laranja tracejada representa o tempo médio de todas as distribuições. Verifica-se total concordância entre os modelos.

trajetórias clássicas quanto semiclássicas. Entretanto, uma vez que o exemplo que estamos estudando não envolve nenhum elemento exclusivamente quântico, como superposição de estados, a TET utilizando a trajetória clássica se mostra um bom modelo.

4.2.1 Superposição de Estados

Uma situação mais interessante é quando o estado é preparado em uma superposição. Neste caso, ainda estamos considerando o cenário unidimensional, permitindo-nos obter a distribuição de probabilidade do tempo de voo. O estado inicial é descrito como:

$$\psi(x, 0) = \frac{e^{-(x+\bar{x}_0-x_d)^2/4\sigma_{x,0}^2} e^{i\bar{p}_0(x+\bar{x}_0-x_d)/\hbar} + \alpha e^{-(x-\bar{x}_0-x_d)^2/4\sigma_{x,0}^2} e^{-i\bar{p}_0(x-\bar{x}_0-x_d)/\hbar}}{\sqrt{\alpha^2 + 2\alpha e^{-\frac{\bar{x}_0^2}{2\sigma_{x,0}^2}} e^{\frac{2\bar{p}_0^2\sigma_{x,0}^2}{\hbar}} + 1}} (2\pi\sigma_{x,0})^{1/4}$$

onde a constante α está associada à medida em que a função de onda está superposta, variando de $\alpha = 1$ para uma superposição máxima, até $\alpha = 0$, onde não há superposição. A constante x_d translada a função de onda no espaço. Nesse caso, a função de onda é uma combinação de duas gaussianas que se propagam em direções opostas. A primeira contribuição na superposição representa um pacote gaussiano se propagando

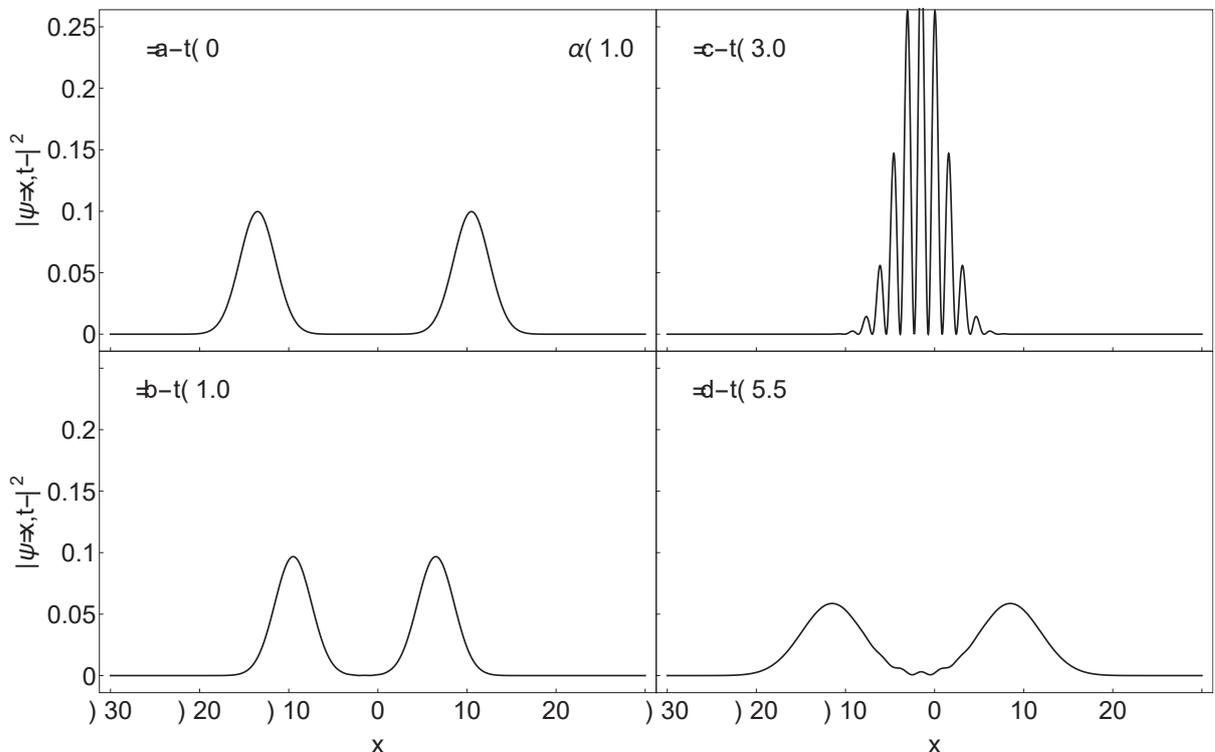


FIGURA 9 – A distribuição de probabilidade da posição em função do tempo para a partícula maximamente superposta ($\alpha = 1$). Foram utilizadas as quantidades $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{p}_0 = 2, m = 0.5, \bar{x}_0 = 12, x_d = 1.5\}$. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias. A distribuição está representada em tempos diferentes em cada painel, sendo $t = \{0, 1, 3, 5.5\}$, respectivamente.

para a direita, enquanto a segunda contribuição representa um pacote gaussiano se propagando para a esquerda. Na figura 9, são apresentadas as distribuições de probabilidade para $\alpha = 1$ em diferentes instantes de tempo, evidenciando o comportamento de interferência na distribuição de probabilidade causada pela superposição de estados.

É importante compreender a visão bohmiana deste sistema. Na figura 10, apresentamos um ensemble de trajetórias bohmianas para esse sistema. Cada curva representa uma trajetória bohmiana, em que as condições iniciais foram selecionadas de acordo com a distribuição de probabilidade inicial $|\psi(x_0, 0)|^2$ e evoluídas numericamente utilizando a respectiva trajetória bohmiana. Na figura, são apresentadas 200 trajetórias. Cada painel apresenta um valor distinto de α , variando de $\alpha = 1$ a $\alpha = 0$. No primeiro caso, temos a superposição máxima dos pacotes gaussianos, enquanto no segundo caso não há superposição entre os pacotes. Quando α está em um valor intermediário, ocorre superposição, porém a amplitude de probabilidade do pacote à direita de x_d é menor. Os pacotes gaussianos presentes no sistema serão nomeados como pacote 1, centrado em $-x_d - \bar{x}_0$ e com momento médio \bar{p}_0 , e pacote 2, centrado em $-x_d + \bar{x}_0$ e com momento médio $-\bar{p}_0$. Observe que, na figura 10, existem trajetórias bohmianas que passam pelo ponto $x = 0$ em dois instantes de tempo distintos, o que implica que a função $t = \vartheta(x, x_0)$ não é unívoca. Portanto, $J(x, t)$ não deve ser interpretado como a distribuição de tempos de voo. Segundo a TET, a equação (3.11) define a distribuição $\wp(t|x)$.

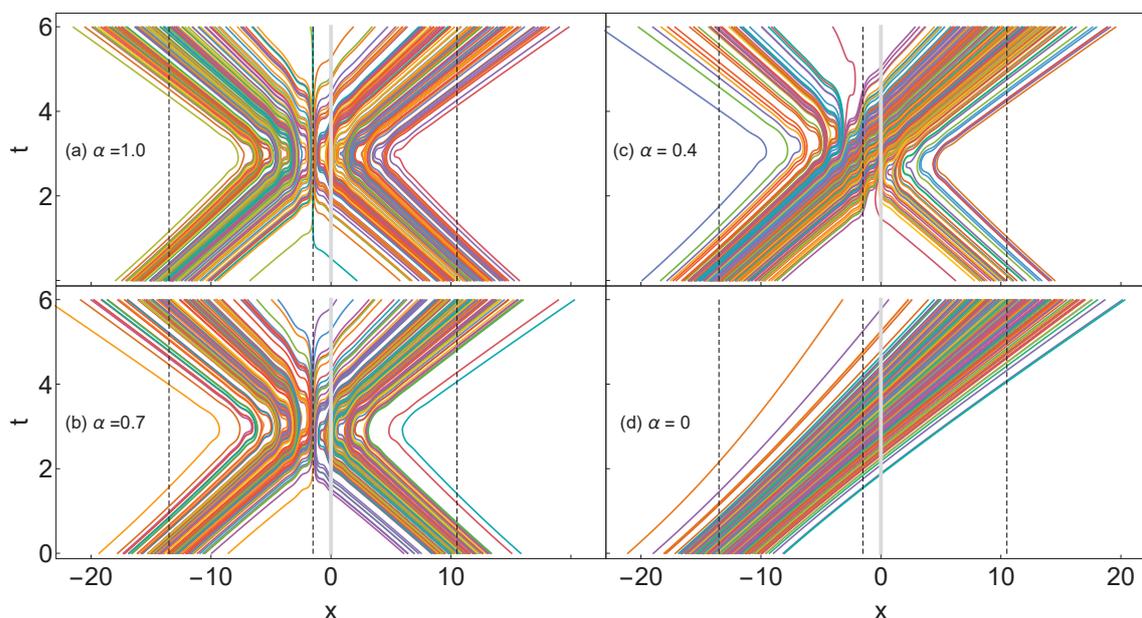


FIGURA 10 – Ensemble com 200 trajetórias bohmianas para o sistema preparado como uma superposição de duas funções de onda gaussianas. Utilizamos as quantidades $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{p}_0 = 2, m = 0.5, \bar{x}_0 = 12, x_d = 1.5\}$, todas em unidades arbitrárias. Cada painel representa um valor de $\alpha = \{1, 0.7, 0.4, 0\}$, respectivamente. As curvas verticais pretas tracejadas representam a posição dos centros dos pacotes inicialmente e a posição $x = x_d$, já a curva vertical cinza a posição $x = 0$.

No painel (a) da figura 10, em que $\alpha = 1$, a partícula tem igual probabilidade de estar no estado representado pelos pacotes 1 e 2. Nesse caso, devido à simetria do problema, nenhuma trajetória do ensemble cruza a posição x_d . O potencial quântico atua como uma barreira, em que a partícula tem energia menor que a energia da barreira, resultando na reflexão da partícula antes que ela alcance essa posição. No entanto, a figura 9(c) evidencia que há probabilidade da partícula estar em x_d . Dependendo das condições iniciais, a trajetória bohmiana pode se aproximar de x_d tanto pela esquerda (pacote 1) quanto pela direita (pacote 2), preservando assim o princípio da *equivariância*.

À medida que α diminui, mais trajetórias do pacote 1 cruzam a posição x_d . Quando $\alpha = 0$, apenas trajetórias do pacote 1 existem e este é o caso discutido no início desta seção. Na figura 11, apresentamos a distribuição de probabilidade de tempo de voo, dado que a posição final é $x = 0$, utilizando três métodos: o método de Kijowski, método de Muga-Leavens, dada pela equação (2.34) e uma simulação numérica baseada na trajetória bohmiana. A simulação numérica realizada é análoga ao método utilizado na figura 10, no qual foram selecionadas 6000 condições iniciais de acordo com a distribuição de probabilidade inicial $|\psi(x_0, 0)|^2$ e evoluídas numericamente utilizando as respectivas trajetórias bohmianas. Entretanto, a diferença é que, a cada

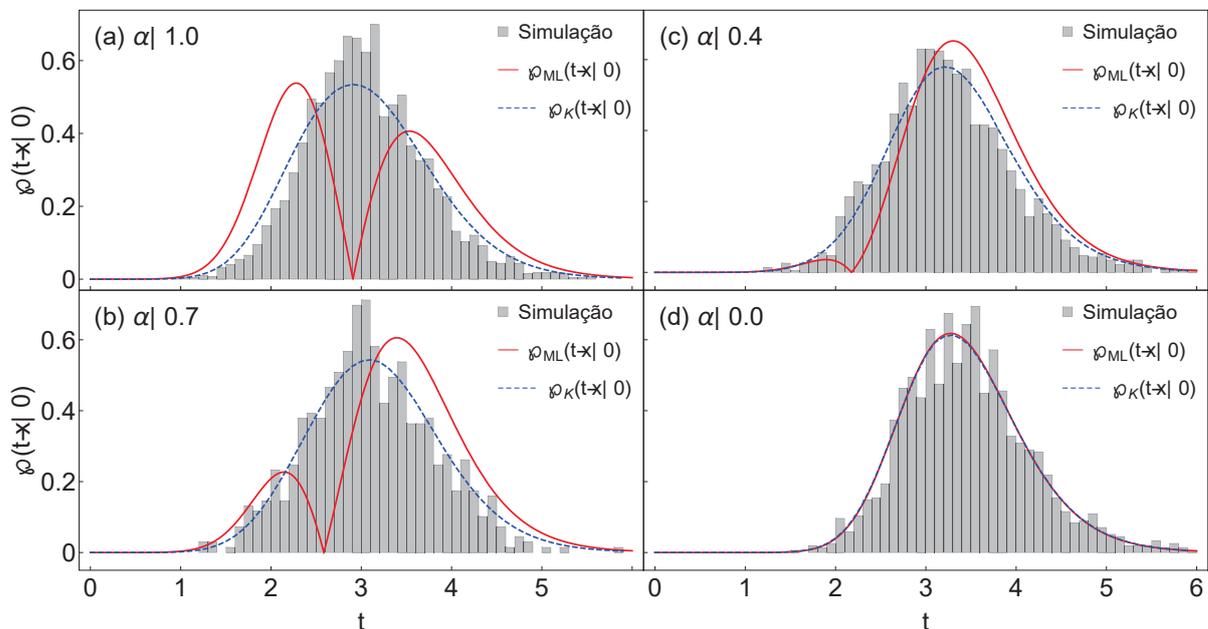


FIGURA 11 – Distribuição de probabilidade de tempos de voo para a posição final da partícula em $x = 0$, no caso em que o estado é preparado como uma superposição de gaussianas. As quantidades utilizadas são $\{\sigma_{x,0} = 2, \bar{p}_0 = 2, m = 0.5, \bar{x}_0 = 12, x_d = 1.5\}$, todas em unidades arbitrárias. Para obter as distribuições mencionadas, foram empregados os formalismos de Kijowski (φ_K), formalismo de Muga-Leavens (φ_{ML}) e uma simulação numérica (histograma em cinza). Cada painel representa um valor de $\alpha = \{1, 0.9, 0.3, 0\}$, respectivamente.

vez que a trajetória atravessava a coordenada $y = 0$, o tempo de voo correspondente era registrado. Assim, com o conjunto de tempos de voo, construímos um histograma para a distribuição de probabilidades associadas aos tempos de voo. Nesse caso, não utilizamos a trajetória semiclássica, uma vez que essa aproximação é construída para tratar de sistemas em que a função de onda inicial é representada por um pacote gaussiano. É importante mencionar que, para esse sistema, o campo de velocidades bohmiano não apresenta simetrias do tipo $|v(x, t_1)| = |v(x, t_2)|$. Portanto, para utilizar a TET é necessário aplicar a forma geral, dada pela equação (3.11), para encontrar a distribuição de probabilidade dos tempos de voo. No entanto, a implementação dessa abordagem não é trivial do ponto de vista matemático, uma vez que não possuímos uma forma analítica para a trajetória bohmiana nesse caso específico. Até o momento, ainda não aplicamos a TET para a trajetória bohmiana nesse contexto, mas sabemos que ela não terá a forma da previsão da MB, via o formalismo construído na seção 2.3, em que a distribuição de probabilidade de tempos de voo é a dada pela equação (2.34). Além disso, tal formalismo não foi construído para descrever esse problema, o que é evidenciado pela necessidade de impor a normalização na distribuição de probabilidade $\wp_{ML}(t|x=0)$, lembrando que, se não impusermos a normalização, a função que obtemos não satisfaz as propriedades fundamentais de uma distribuição de probabilidade. Nesse contexto, os resultados exibidos na figura 11 para a MB não são adequados. Outro aspecto a ser considerado é o mínimo presente na distribuição de probabilidade $\wp_{ML}(t|x=0)$. Esse mínimo surge devido à densidade de corrente de probabilidade, que é proporcional ao campo de velocidades. No caso específico das trajetórias bohmianas em que o ponto de retorno é exatamente na coordenada $x = 0$, o campo de velocidades se torna nulo nesse ponto, resultando nesse mínimo. Ao analisar a figura 10, observamos que as trajetórias com ponto de retorno exatamente na coordenada $x = 0$ estão associadas a condições iniciais próximas ao centro do pacote 1 inicial. Em um ensemble de trajetórias, é de se esperar que exista um número considerável de trajetórias com ponto de retorno em $x = 0$ com tempos de voo correspondentes. Essa observação é confirmada pela simulação numérica, na qual não há a presença desse mínimo na distribuição de probabilidade. Esse resultado indica que o formalismo desenvolvido na seção 2.3 não descreve adequadamente o comportamento da distribuição de probabilidade de tempos de voo para a trajetória bohmiana nesse sistema específico.

Por outro lado, a distribuição de Kijowski apresenta o mesmo comportamento que a distribuição obtida pela simulação numérica, indicando que o princípio de *equivariância* é satisfeito. Demonstramos que a TET é capaz de descrever essa classe de cenário, porém, até o momento, a implementação nesse contexto ainda não foi concluída. Nosso objetivo consiste em otimizar a implementação da TET, fazendo uso das trajetórias bohmianas, e comparar os resultados obtidos com a formulação de

Kijowski e da simulação numérica.

Nesta seção, exploramos dois casos: a partícula livre preparada em um estado gaussiano e em uma superposição de gaussianas. No primeiro caso, o mais simples, examinamos os formalismos de Kijowski e da TET para as trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana. Observamos que eles concordam devido à simplicidade do sistema, que não possui características quânticas significativas. No entanto, no segundo caso, a formulação bohmiana da distribuição de probabilidade dos tempos de voo não é compatível com o sistema físico em análise. Portanto, a TET surge como a opção mais apropriada para descrever cenários nos quais a trajetória bohmiana atravessa uma coordenada várias vezes. Na próxima seção, investigaremos o caso da partícula em queda livre. Nessa análise, compararemos o formalismo da TET para as trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana com as abordagens operacionais propostas na seção 3.2, destacando em que regime essas abordagens reproduzem o comportamento da TET.

4.3 PARTÍCULA EM QUEDA LIVRE

Ao contrário do exemplo da partícula livre, descrito na seção 4.2, o sistema em questão é bidimensional, o que nos levará a obter uma distribuição atemporal $\wp(x|y=0)$. Considere uma partícula imersa em um campo gravitacional uniforme, preparada em um estado gaussiano com momento médio inicial nulo na coordenada y , dado por

$$\psi(y, t=0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{y,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(y - \bar{y}_0)^2}{4\sigma_{y,0}^2}\right].$$

e na coordenada x como

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{x,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x}_0)^2}{4\sigma_{x,0}^2}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \bar{p}_0 x\right]. \quad (4.38)$$

Este sistema é análogo ao sistema descrito no final da subseção 2.3.2. Já evoluímos esse estado na seção 2.3, repetindo o estado evoluído na coordenada y abaixo:

$$\psi(y, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{y,t}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(y - \bar{y})^2}{4\sigma_{y,t}^2}\right] e^{iS(y,t)/\hbar}.$$

Vamos tratar primeiramente das teorias que geram distribuição de probabilidade de tempo de voo: TET para trajetória clássica, bohmiana e semiclássica. Em seguida, iremos obter a distribuição de probabilidade atemporal para essas formulações, bem como para as abordagens operacionais da MQ descritas na seção 3.2.

Trajétória clássica. Começamos com a trajetória mais simples, a clássica, definida por

$$y(t) = \phi(y_0, p_0, t) = y_0 + \frac{p_0}{m}t - \frac{gt^2}{2}$$

$$p(t) = \varpi(y_0, p_0, t) = p_0 - mgt.$$

A figura 12 ilustra o ensemble de 200 trajetórias clássicas $y(t)$. Cada curva da figura representa uma trajetória clássica. Para construir esse conjunto de trajetórias, foi aplicado o mesmo método utilizado na figura 10, utilizando a respectiva trajetória clássica que descreve o sistema. Observa-se que as trajetórias atravessam a coordenada $y = 0$ apenas uma vez, o que nos permite utilizar a formulação da TET para trajetórias em espaço de fase, conforme descrito na seção 3.1.2. Observe que há trajetórias com momentos iniciais tanto positivos quanto negativos. Isso decorre do fato de que a distribuição de probabilidade inicial de momento é uma gaussiana com momento médio

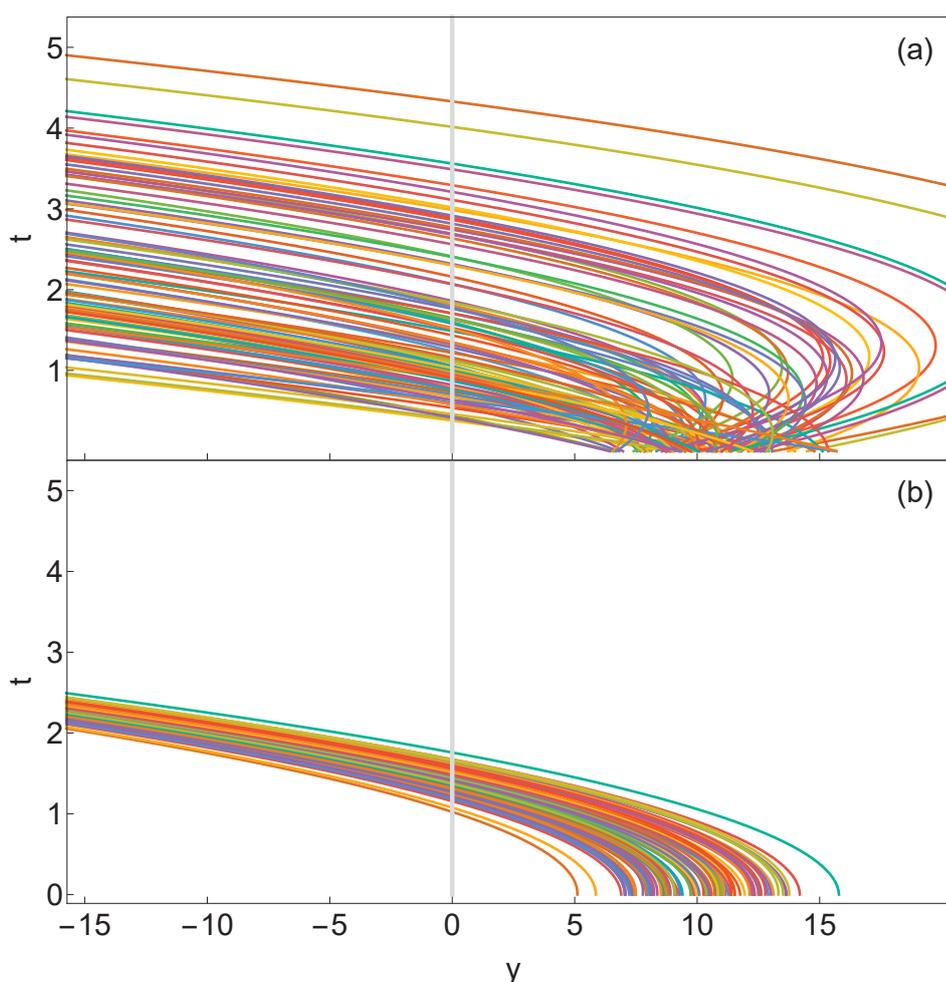


FIGURA 12 – Ensemble de 200 trajetórias clássicas $y(t)$ para a partícula em queda livre. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 0.03, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 1, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

zero. Consequentemente, no ensemble de trajetórias, é possível que a partícula tenha momentos positivos e negativos.

Para obter as distribuições de probabilidade, é necessário inverter as trajetórias. Dessa forma, obtemos:

$$y_0 = \Lambda_y(y, p_0, t) = y - \frac{p_0}{m}t + \frac{gt^2}{2}, \quad (4.39)$$

$$p_0 = \Lambda_p(p, q_0, t) = p + mgt, \quad (4.40)$$

cujas derivadas são dadas por

$$\partial_{y_0}\phi(y_0, p_0, t) = 1, \quad (4.41)$$

$$\partial_{p_0}\varpi(y_0, p_0, t) = 1, \quad (4.42)$$

$$\chi_t(y, p, t) = y + gt, \quad (4.43)$$

onde χ_t é encontrado isolando-se p_0 na equação $p - \Lambda_p(\Lambda_y(y, p_0, t), p_0, t) = 0$. Usando a equação (3.35), podemos obter a distribuição $\wp_c(y, p|t)$, lembrando que o estado inicial são gaussianas separáveis $\rho_0(y_0, p_0) = \rho_0(y_0)\rho_0(p_0)$ centradas em \bar{y}_0 e $\bar{p}_0 = 0$ e com dispersão $\sigma_{y,0}$ e $\sigma_{p,0}$

$$\begin{aligned} \wp_c(y, p|t) &= \rho_0(\phi_{-t}(y, \chi_t(y, p, t))) \rho_0(\chi_t(y, p, t)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2}} \exp\left[-\frac{\left(y - \bar{y}_0 - \frac{p}{m}t - \frac{gt^2}{2}\right)^2}{2\sigma_{y,0}^2}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p,0}^2}} \exp\left[-\frac{(p + mgt)^2}{2\sigma_{p,0}^2}\right]. \end{aligned}$$

Marginalizando a distribuição de probabilidade $\wp_c(y, p|t)$ sobre a variável p , encontramos

$$\begin{aligned} \wp_c(y|t) &= \int dp \wp_c(y, p|t) \\ &= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2}} \exp\left[-\frac{\left(y - \bar{y}_0 - \frac{p}{m}t - \frac{gt^2}{2}\right)^2}{2\sigma_{y,0}^2}\right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p,0}^2}} \exp\left[-\frac{(p + mgt)^2}{2\sigma_{p,0}^2}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \exp\left[-\frac{\left(y - \bar{y}_0 + \frac{gt^2}{2}\right)^2}{2\sigma_y^2}\right] \end{aligned} \quad (4.44)$$

com

$$\sigma_y = \sigma_{y,0} \sqrt{1 + \left(\frac{t\sigma_{p,0}}{m\sigma_{y,0}}\right)^2}. \quad (4.45)$$

De maneira análoga ao caso da partícula livre, se considerarmos que a relação entre as incertezas de posição e momento no instante inicial é definida pela relação

de incerteza de Heisenberg ($\sigma_{x,0} \sigma_{p,0} = \frac{\hbar}{2}$) então a distribuição clássica coincide com $|\psi(y, t)|^2$. Para encontrar a distribuição de probabilidade de tempo de voo, é necessário primeiro inverter a trajetória usando a equação

$$t = \vartheta_y(y, y_0, p_0) = \frac{p_0}{mg} \pm \frac{1}{g} \sqrt{\frac{p_0^2}{m^2} - 2g(y - y_0)}. \quad (4.46)$$

A raiz que faz sentido fisicamente é a negativa, pois se $y = y_0$ o tempo de voo deve ser $t = 0$. Em seguida, utilizando a equação (3.37), obtemos

$$|\partial_{y_0} \vartheta_y(y, y_0, p_0)|_{y_0=\Lambda_y(y, p_0, t)} = \left| \frac{1}{\frac{p_0}{m} - gt} \right| \quad (4.47)$$

e obtemos a função auxiliar

$$\begin{aligned} p &= \varpi(\Lambda_y(y, p_0), p_0, t) = p_0 - mgt \\ \chi_y(y, p, t) &= p_0 = p + mgt, \end{aligned} \quad (4.48)$$

onde a função χ_y é encontrada isolando-se p_0 na equação $p - \varpi(\Lambda_q(q, p_0, t), p_0, t) = 0$. Enfim, obtemos

$$\begin{aligned} \wp_c(p, t|y) &= \frac{\rho_0(\Lambda_y(y, \chi_y(y, p, t), t), \chi_y(y, p, t))}{|\partial_{y_0} \vartheta_y(y, y_0, p_0)|_{y_0=\Lambda_y(y, \chi_y(y, p, t))} |\partial_{p_0} \varpi(\Lambda_y(y, p_0, t), p_0, t)|_{p_0=\chi_y(y, p, t)}} \\ &= \frac{|\frac{p}{m} - gt|}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2} 2\pi\sigma_{p,0}^2} \exp \left[-\frac{\left(y - \bar{y}_0 - \frac{p}{m}t + \frac{gt^2}{2}\right)^2}{2\sigma_{y,0}^2} \right] \exp \left[-\frac{(p + mgt)^2}{2\sigma_{p,0}^2} \right], \end{aligned}$$

basta marginalizar p para obter a distribuição $\wp_c(t|y)$:

$$\begin{aligned} \wp_c(t|y) &= \int dp \wp_c(p, t|y) \\ &= \int dp \frac{|\frac{p}{m} - gt|}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2} 2\pi\sigma_{p,0}^2} \exp \left[-\frac{\left(y - \bar{y}_0 - \frac{p}{m}t + \frac{gt^2}{2}\right)^2}{2\sigma_{y,0}^2} \right] \exp \left[-\frac{(p + mgt)^2}{2\sigma_{p,0}^2} \right], \end{aligned}$$

sendo que a integral acima também será resolvida numericamente. Vale ressaltar que na seção 4.2 foi mostrado que se a relação de incerteza entre momento e posição for igual à relação de incerteza de Heisenberg, então para o grau de liberdade x , no qual não há potencial, $\wp_c(x|t) = |\psi(x, t)|^2$. Portanto

$$\begin{aligned} \wp_c(x|y=0) &= \int dt \wp_c(x|t) \wp_c(t|y) \\ &= \int dt |\psi(x, t)|^2 \wp_c(t|y), \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde a integração será resolvida numericamente.

Trajétória bohmiana. Para a MB, a trajetória é definida pela equação (2.54), repetida abaixo

$$y(t) = \phi(y_0, t) = \bar{y}_0 - \frac{gt^2}{2} + \frac{\sigma_{y,t}}{\sigma_{y,0}} (y_0 - \bar{y}_0).$$

A figura 13 ilustra o ensemble de trajetórias bohmianas. Cada curva da figura representa uma trajetória bohmiana. Para construir esse conjunto de trajetórias, foi aplicado o mesmo método utilizado na figura 10, utilizando a respectiva trajetória bohmiana que descreve o sistema. Análogo ao que aconteceu com a trajetória clássica, as trajetórias bohmianas atravessam a coordenada $y = 0$ apenas uma vez, o que nos permite utilizar a formulação associada à densidade de corrente de probabilidade, conforme expresso na equação (3.21), para obter a distribuição de probabilidade do tempo de voo. Da mesma forma que ocorre com a trajetória clássica, a distribuição de probabilidade

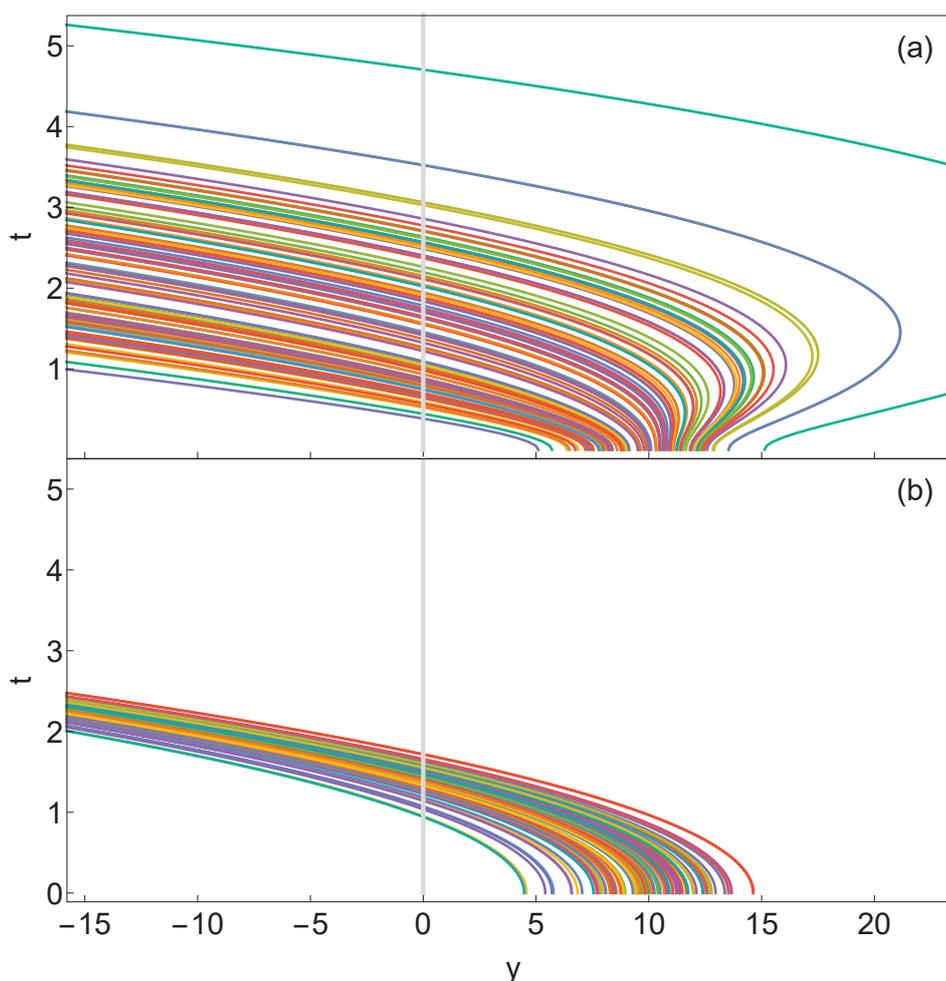


FIGURA 13 – Ensemble de 200 trajetórias bohmianas para a partícula em queda livre. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 0.03, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 1, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

inicial dos momentos é por gaussiana com média zero³. Isso resultará na presença de partículas no ensemble que possuem tanto momentos iniciais positivos quanto negativos.

Ao inverter a equação bohmiana, obtemos

$$y_0 = \Lambda(y, t) = \bar{y}_0 + \frac{\sigma_{y,0}}{\sigma_y} \left(y - \bar{y}_0 + \frac{gt^2}{2} \right). \quad (4.50)$$

Para obter a distribuição $\wp_{TB}(y|t)$, utilizamos a equação (3.9) e a derivada $\partial_{y_0}\phi(y_0, t)$, que pode ser expressa como

$$\partial_{y_0}\phi(y_0, t) = \frac{\sigma_{y,t}}{\sigma_{y,0}} = \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}.$$

Dessa forma, temos

$$\begin{aligned} \wp_{TB}(y|t) &= \frac{\rho_0(\Lambda(y, t))}{|\partial_{y_0}\phi(y_0, t)|_{y_0=\Lambda(y,t)}} \\ &= \frac{\sigma_{y,0} e^{-(y-\bar{y}_0+gt^2/2)^2/2\sigma_{y,t}^2}}{\sigma_{y,t} \sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,t}^2}} \exp\left[-\frac{(y-\bar{y})^2}{2\sigma_{y,t}^2}\right] = |\psi(y, t)|^2. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Analogamente ao estudo de caso da partícula livre, a distribuição $\wp_{TB}(y|t)$ é equivalente à previsão da MQ, evidenciando o princípio da *equivariância*. Para obter a distribuição de tempo de voo, necessitamos da derivada

$$\begin{aligned} \partial_t\phi(y_0, t) &= -gt + \frac{t}{\tau^2} \frac{y_0 - \bar{y}_0}{\sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2}} \\ |\partial_t\phi(y_0, t)|_{y_0=\Lambda(y,t)} &= \left| \left(\frac{t}{\tau^2}\right) \frac{y - \bar{y}_0 + \frac{gt^2}{2}}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} - gt \right|. \end{aligned}$$

Finalmente, utilizando a equação (3.20), obtemos a distribuição de tempo de voo

$$\wp_{TB}(t|y) = \left| \left(\frac{t}{\tau^2}\right) \frac{y - \bar{y}_0 + \frac{gt^2}{2}}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} - gt \right| |\psi(y, t)|^2. \quad (4.52)$$

Novamente, a distribuição de probabilidade que estamos obtendo é equivalente àquela proveniente do formalismo de Muga-Leavens, expressa pela equação (2.55),

³ É importante lembrar que a distribuição de probabilidade inicial dos momentos está relacionada com a distribuição inicial de posição, devido à transformação de representação da função de onda que ocorre por meio da transformada de Fourier.

com a única diferença sendo a normalização. No entanto, demonstramos numericamente que a distribuição de probabilidade é normalizada.

Trajétória semiclássica. Podemos facilmente estender o caso semiclássico da partícula livre para o caso da partícula em queda livre, substituindo x por $y + gt^2/2$ nas condições iniciais (consulte o apêndice B para mais detalhes):

$$y_0 = \Lambda(y, t) = \frac{y + \frac{gt^2}{2} + i\omega t \left(\bar{y}_0 + i\frac{1}{m\omega} \bar{p}_0 \right)}{1 + i\omega t}, \quad (4.53)$$

$$p_0 = \frac{\bar{p}_0 + im\omega \left(y + \frac{gt^2}{2} - \bar{y}_0 \right)}{1 + i\omega t}, \quad (4.54)$$

onde

$$\omega = \frac{\hbar}{2m\sigma_{y,0}^2}.$$

Analogamente ao método utilizado no estudo de caso da partícula livre, aplicaremos a TET com campo de velocidades associado. Para obter a trajetória, isolamos a posição final na equação (4.53), lembrando que $\bar{p}_0 = 0$:

$$y = \phi(y_0, t) = y_0 - \frac{gt^2}{2} + i\omega t (y_0 - \bar{y}_0), \quad (4.55)$$

a derivada da trajetória em relação à posição inicial é dada por

$$\partial_{y_0} \phi(y_0, t) = 1 + i\omega t. \quad (4.56)$$

Dessa forma, a distribuição de probabilidade é dada por

$$\begin{aligned} \wp_{sc}(y|t) &= \frac{\rho_0(\Lambda(y, t))}{|\partial_{y_0} \phi(y_0, t)|_{y_0=\Lambda(y, t)}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,0}^2}} \exp \left[-\frac{(y - \bar{x}_0 + \frac{gt^2}{2})^2}{2\sigma_{y,0}^2 (1 + (\omega t)^2)} \right] \frac{1}{|1 + i\omega t|} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y,c}^2}} \exp \left[-\frac{(y - \bar{y}_0 + \frac{gt^2}{2})^2}{2\sigma_{y,c}^2} \right] \end{aligned} \quad (4.57)$$

em que

$$\sigma_{y,c} = \sigma_{y,0} \sqrt{1 + (\omega t)^2}. \quad (4.58)$$

Assim como no caso da partícula livre, temos que $\omega = \hbar/2m\sigma_{y,0}^2$, o que implica que a distribuição de probabilidade semiclássica $\wp_{sc}(y|t)$ é igual à densidade de probabilidade quântica $|\psi(y, t)|^2$. A partir da equação (4.35), temos que

$$\begin{aligned} \wp_{sc}(t|y) &= \frac{\rho_0(\Lambda(y, t))}{|\partial_{y_0} \vartheta(y, y_0)|_{y_0=\Lambda(y, t)}} \\ &= \rho_0(\Lambda(y, t)) |\partial_t \Lambda(y, t)|, \end{aligned} \quad (4.59)$$

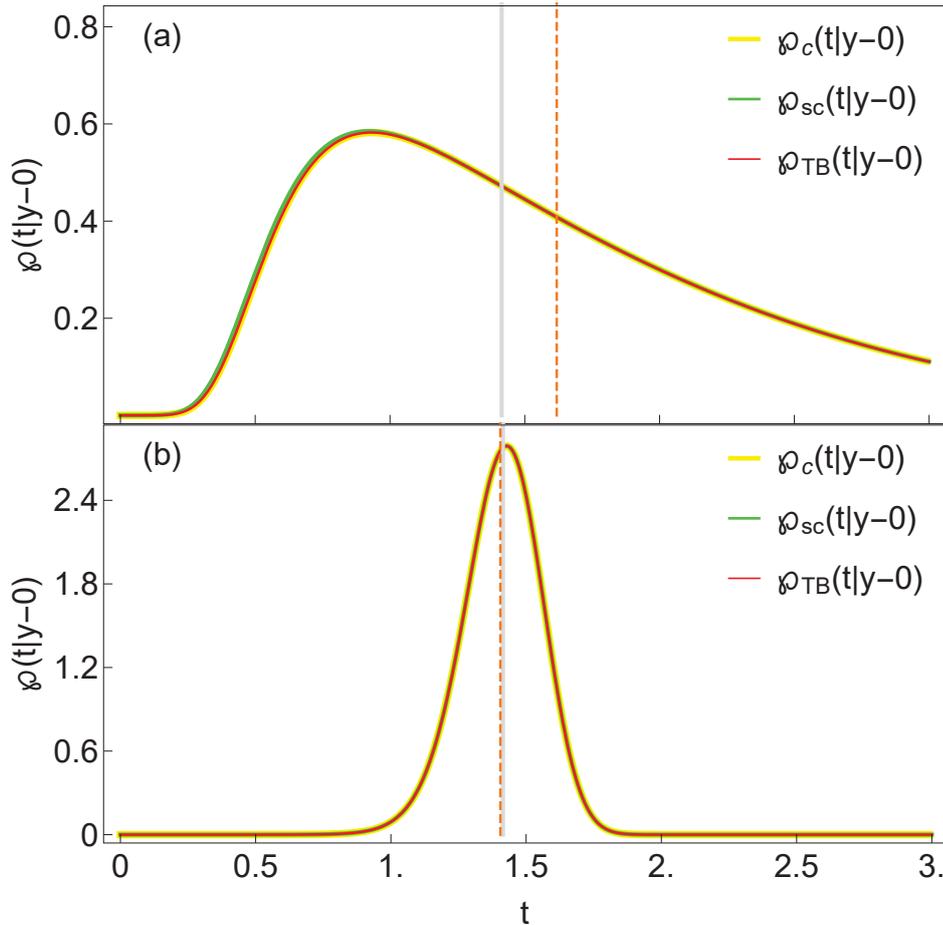


FIGURA 14 – Distribuição de probabilidade de tempo de voo para a partícula em queda livre, obtida pelos métodos da TET utilizando a trajetória clássica, bohmiana e semiclassical. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 0.03, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 1, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias. A linha vertical cinza representa o tempo de voo clássico da partícula, enquanto a linha laranja tracejada representa o tempo médio de todas as distribuições.

onde a derivada é calculada como

$$|\partial_t \Lambda(y, t)| = \left| i \frac{(y - \bar{y}_0)\omega + gt \left(\frac{\omega t}{2} - i\right)}{(1 + i\omega t)^2} \right|. \quad (4.60)$$

Substituindo essa expressão na equação (4.59), obtemos a distribuição de probabilidade para o tempo de voo

$$\wp_{sc}(t|y) = \rho_0(\Lambda(y, t)) \left| i \frac{(y - \bar{y}_0)\omega + gt \left(\frac{\omega t}{2} - i\right)}{(1 + i\omega t)^2} \right|. \quad (4.61)$$

Vamos comparar três métodos para obter a distribuição de tempos de voo: o método TET utilizando trajetória clássica, bohmiana e semiclassical⁴. Na figura 14,

⁴ Lembrando que, para esse exemplo, não é possível utilizar a formulação de Kijowski. Essa formulação foi construída especificamente para o caso da partícula livre e não é aplicável ao sistema em questão.

plotamos as distribuições $\varphi_c(t|y=0)$, $\varphi_{TB}(t|y=0)$ e $\varphi_{sc}(t|y=0)$ para dois conjuntos de variáveis. Da mesma forma que ocorreu com a partícula livre, é possível reproduzir o comportamento da distribuição $\varphi_{TB}(t|y=0)$ por meio das trajetórias clássica e semi-clássica. Vale ressaltar que essa semelhança é decorrente da simplicidade do sistema, no qual não há características quânticas evidentes nas distribuições de probabilidade, como interferência causada por superposição de estados.

Por fim, obteremos a distribuição de probabilidade atemporal $\varphi(x|y=0)$, considerando que a função de onda inicial na posição x foi preparada como um pacote gaussiano. Note que, para cada trajetória utilizada, na seção 4.2 calculamos a distribuição $\varphi(x|t)$. Assim, basta resolver numericamente a integral

$$\varphi(x|y=0) = \int dt \varphi(x|t) \varphi(t|y=0). \quad (4.62)$$

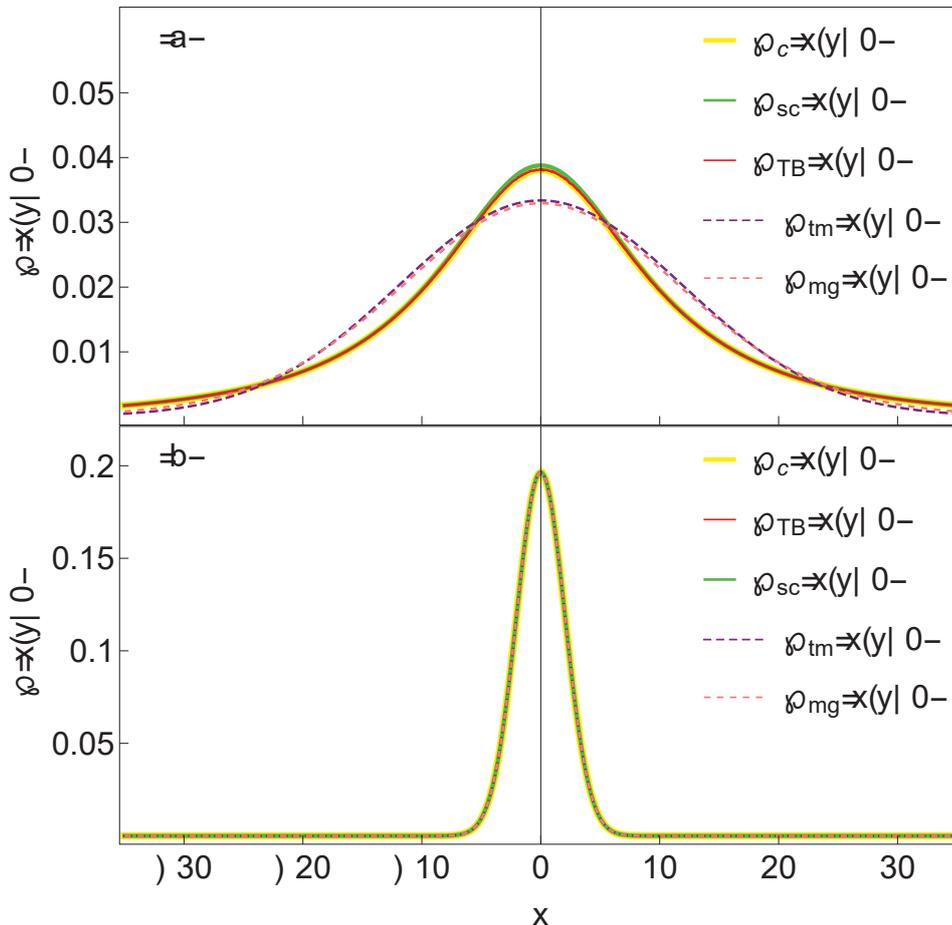


FIGURA 15 – Distribuições de probabilidade de atemporal $\varphi(x|y=0)$ para a partícula queda livre, obtida pelos métodos da TET utilizando as trajetórias clássica, bohmiana e semi-clássica, além dos modelos de tempo médio (tm) de voo e geométrica (geo). Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 0.03, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{x}_0 = 10, \bar{p}_0 = 0, m = 1, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

Lembrando que a presença da distribuição $\wp(x|t)$ na equação acima é devido ao sistema ser separável. É importante destacar que essa integração pode ser complicada, devido à presença da distribuição $\wp(t|y=0)$, e por isso será resolvida numericamente. Além disso, vamos comparar a distribuição obtida com os métodos operacionais propostos na seção 3.2. Na figura 15, apresentamos as distribuições de probabilidade atemporal obtidas utilizando-se o formalismo TET com a trajetória bohmiana $\wp_{TB}(x|y=0)$, a distribuição clássica $\wp_c(x|y=0)$ e a distribuição semiclássica $\wp_{sc}(x|y=0)$, bem como as distribuições $\wp_{mg}(x|y=0)$ e $\wp_{tm}(x|y=0)$, que foram obtidas por meio dos modelos geométrico e do tempo médio, respectivamente.

No painel (b) da figura 15, tanto os modelos geométrico e do tempo médio quanto as distribuições oriundas da TET concordam, evidenciando que a precisão de tais aproximações está relacionada com a massa da partícula, uma vez que no painel (a) a massa da partícula é pequena e as modelos discordam. Como mencionado no estudo de caso da partícula livre, sistemas que não exibem comportamento quântico são bem descritos pela TET clássica, que reproduz o comportamento observado pela TET bohmiana. Esse resultado valida a abordagem clássica para sistemas semelhantes. No entanto, em sistemas que exibem características quânticas, como superposição, não é esperado que a TET para a trajetória clássica seja capaz de descrever o sistema corretamente.

4.3.1 Caso não Unívoco

Vamos explorar um segundo caso para a partícula em queda livre, no qual a trajetória $y = \phi(y_0, t)$ atravessa a coordenada $y = 0$ em dois instantes diferentes. Conforme discutido na seção 3.1.1, de acordo com a TET, a distribuição de probabilidade de tempos de voo deve ser descrita pela equação (3.11). Na seção 2.3, vimos que a MB fornece uma prescrição para obter a distribuição de probabilidade de tempos de voo a partir do formalismo de Muga-Leavens, dada pela equação (2.34). No entanto, mencionamos que essa abordagem não é capaz de descrever sistemas que não são unívocos, ou seja, casos nos quais a trajetória passa por um ponto em dois instantes diferentes. Nesta subseção, mostraremos que a TET descreve a distribuição de probabilidade de tempos de voo para tais trajetórias bohmianas. Compararemos essa distribuição com a obtida pelo formalismo de Muga-Leavens e com uma distribuição resultante de uma simulação. Veremos que os resultados da TET e da simulação concordam, enquanto os resultados obtidos pelo formalismo de Muga-Leavens discordam. Como estamos analisando a distribuição de probabilidade de tempos de voo, não será necessário considerar uma dimensão adicional, portanto, utilizaremos o caso unidimensional da queda livre.

Considere uma partícula imersa em um campo gravitacional uniforme e prepa-

rada em um estado gaussiano, dado por

$$\psi(y, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_{y,0}^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(y - \bar{y}_0)^2}{4\sigma_{y,0}^2}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\bar{p}_0 y\right].$$

Já calculamos a trajetória bohmiana para esse caso, que é definida pela equação (2.54), repetida abaixo:

$$\phi(y_0, t) = \bar{y}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m}t - \frac{gt^2}{2} + \frac{\sigma_y}{\sigma_{y,0}}(y_0 - \bar{y}_0).$$

Neste caso, escolheremos os parâmetros de tal maneira que a partícula atravesse a coordenada $y = 0$ em dois momentos distintos. Na figura 16, são apresentados conjuntos de 100 trajetórias bohmianas. Para construir esse conjunto de trajetórias, foi aplicado o mesmo método utilizado na figura 10, utilizando a respectiva trajetória bohmiana que descreve o sistema. No painel (b), utilizamos uma massa maior para

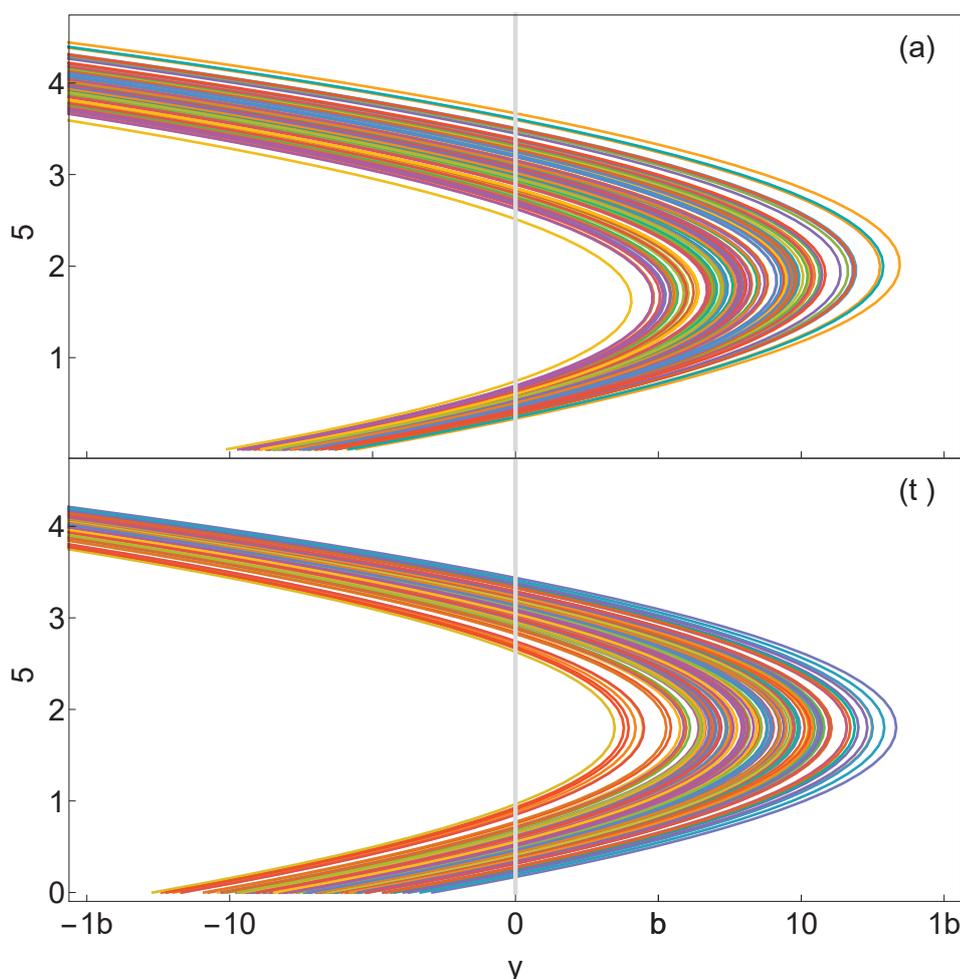


FIGURA 16 – Ensemble de 100 trajetórias bohmianas para a partícula em queda livre. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 1, \bar{p}_0 = 10, m = 0.5, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{p}_0 = 40, m = 2, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

a partícula em comparação com a usada na simulação mostrada no painel (a). Já calculamos a distribuição de probabilidade de tempos de voo para o formalismo de Muga-Leavens neste caso, que é dada pela equação (2.55), repetida abaixo:

$$\wp_{ML}(t|y) = \frac{1}{N} \left| \frac{t}{\tau^2} \frac{(y - \bar{y})}{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} + \frac{\bar{p}_0}{m} - gt \right| |\psi(y, t)|^2,$$

onde a função de onda é dada pela equação (2.51). Por conveniência, a normalização N será obtida numericamente.

Para a TET, é necessário inverter a trajetória e encontrar $\{t_1 = \vartheta_1(y, y_0), t_2 = \vartheta_2(y, y_0)\}$. Ao escrever explicitamente o tempo na trajetória, obtemos a equação:

$$\phi(y_0, t) = \bar{y}_0 + \frac{\bar{p}_0}{m}t - \frac{gt^2}{2} + \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2} (y_0 - \bar{y}_0),$$

onde

$$\tau = \frac{2m\sigma_{y,0}^2}{\hbar}. \quad (4.63)$$

Isso resulta em uma equação quártica para o tempo:

$$\begin{aligned} & \frac{g^2}{4}t^4 - \frac{\bar{p}_0g}{m}t^3 + \left[g(y - \bar{y}_0) + \left(\frac{\bar{p}_0}{m}\right)^2 + \frac{(y_0 - \bar{y}_0)^2}{\tau^2} \right] t^2 - \frac{2\bar{p}_0(y - \bar{y}_0)}{m}t + \\ & + (y - \bar{y}_0)^2 + (y_0 - \bar{y}_0)^2 = 0. \end{aligned}$$

Observamos que na figura 16, a trajetória cruza $y = 0$ em dois pontos, mas a equação acima nos dá quatro raízes para t , portanto, teremos duas raízes não físicas. Para encontrar as soluções físicas, utilizaremos o critério de que as soluções devem satisfazer

$$t_j = \vartheta_j(y, y_0) \geq 0, \quad \forall y, y_0 \quad \text{e} \quad t_j = \vartheta_j(y, \Lambda(y, t)),$$

onde $t_j = t$ deve ser satisfeito e $y_0 = \Lambda(y, t)$. Em outras palavras, se utilizarmos a inversão da posição inicial $y_0 = \Lambda(y, t)$, que é unívoca, dados y e t podemos encontrar y_0 . Se utilizarmos essa condição inicial na função ϑ_j e obtivermos $t_j = t$, então tal solução é considerada física para um determinado instante de tempo t . Dessa forma, encontramos as soluções físicas para cada intervalo de tempo. Para o caso em questão, esses critérios são suficiente para encontrar as soluções. No entanto, em casos mais complexos, podem ser necessários critérios adicionais para determinar as soluções físicas. Para maior conveniência, iremos realizar os cálculos numericamente, encontrando as trajetórias inversas, suas derivadas e implementando-as na equação (3.11). Na figura 17, apresentamos a distribuição de probabilidade utilizando o método

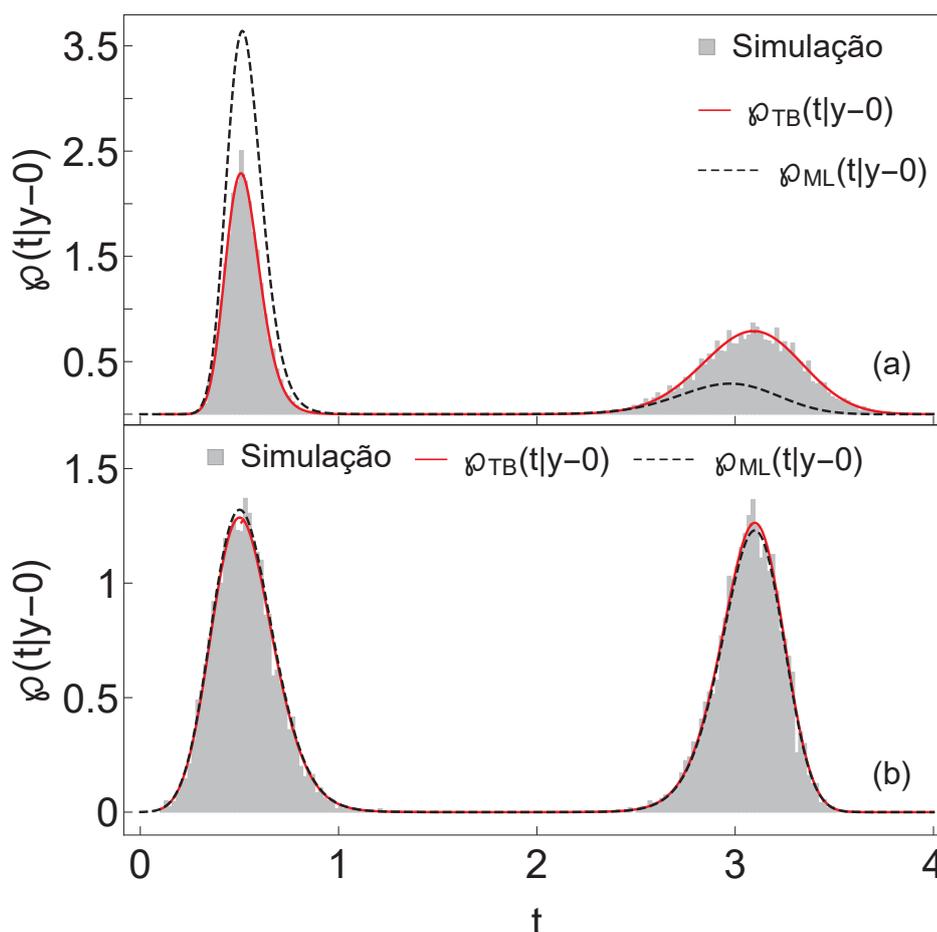


FIGURA 17 – Distribuição de probabilidade de tempo de voo para a partícula em queda livre, obtida pelos métodos da TET utilizando a trajetória bohmiana, o método de Muga-Leavens e pela simulação das trajetórias bohmianas, apresentada pelo histograma em cinza. Os painéis (a) e (b) apresentam as distribuições para dois conjuntos de variáveis: $\{\sigma_{y,0} = 1, \bar{p}_0 = 9, m = 0.5, g = 10\}$ e $\{\sigma_{y,0} = 2, \bar{p}_0 = 36, m = 2, g = 10\}$, respectivamente. Todas as quantidades físicas estão em unidades arbitrárias.

de Muga-Leavens (curva tracejada preta) e a TET via trajetória bohmiana (curva vermelha).

Por fim, realizaremos uma simulação utilizando as trajetórias bohmianas para obter a distribuição de probabilidade de tempos de voo. Essa simulação é idêntica àquela realizada na subseção 4.2.1 para obter o histograma mostrado na figura 11, com a diferença de que foi utilizado um conjunto de 10000 trajetórias. Na figura 17, apresentamos o histograma resultante dessa simulação numérica, em cinza.

Na figura 17, comparamos os três métodos para obter a distribuição de probabilidade de tempo de voo: a TET utilizando a trajetória bohmiana, o método de Muga-Leavens e a simulação das trajetórias bohmianas. Observamos que os resultados da TET e da simulação concordam, enquanto os resultados obtidos pelo Muga-Leavens discordam. Isso indica que o formalismo da TET descreve casos em que as trajetórias

bohmianas não são unívocas, enquanto o formalismo de Muga-Leavens não consegue descrevê-los. Para esse caso, é possível associar cada um dos picos, na distribuição de probabilidade obtida pela TET, a um cruzamento em $y = 0$. No painel (a), observamos uma diferença nas amplitudes dos picos, o que é uma manifestação da equação (3.12), indicando que cada contribuição de um determinado cruzamento para a distribuição de probabilidade deve ser normalizada. Portanto, quanto menor for a dispersão do cruzamento, maior será a amplitude do pico, e o inverso também é verdadeiro: quanto maior for a dispersão do cruzamento, menor será a amplitude do pico. No painel (b), devido à grande massa da partícula, a velocidade de dispersão é pequena. Isso implica que as amplitudes de ambas as contribuições devem ser próximas. Outro ponto interessante é que, à medida que a massa aumenta, o campo de velocidades se torna simétrico, ou seja, $|v(y = 0, t_1)| = |v(y = 0, t_2)|$, o que explica a concordância das teorias no painel (b).

Nesta seção, exploramos o caso da partícula em queda livre, analisando-o tanto pela perspectiva da TET quanto pelas abordagens geométricas e de tempo médio propostas na seção 3.2. Concluímos que essas aproximações concordam com os resultados da TET apenas para um regime em que a massa é grande.

5 CONCLUSÃO

O determinismo é um dos pilares que sustentam a MC, prescrevendo que é possível prever, sem nenhuma incerteza, o estado de um sistema em qualquer instante futuro, desde que se conheçam as leis físicas que o regem e suas condições iniciais. Com o surgimento da MQ, emergiram interpretações que manifestavam o comportamento não determinista do sistema, como a interpretação de Copenhague, que prevê que as propriedades dos objetos quânticos não têm valores definidos até que sejam medidas, implicando em não-determinismo. As previsões oriundas da interpretação de Copenhague são probabilísticas e compatíveis com a maioria dos experimentos. No entanto, outras interpretações surgiram, como a interpretação bohmiana, que recupera o determinismo para sistemas quânticos, mas mantém as previsões probabilísticas e compatíveis com a MQ. Como ambas as previsões são equivalentes, não é possível decidir qual das interpretações é a correta. Apesar das previsões estatísticas serem idênticas, não é possível menosprezar o fato de que uma delas traz em seu substrato trajetórias determinísticas. Este fato motiva a questão: é possível que esses aspectos determinísticos da MB impliquem alguma vantagem preditiva sobre a MQ? Em outras palavras, poderíamos fazer previsões para algum tipo de experimento para o qual a MQ é silenciosa? Se sim, então a hipótese do determinismo bohmiano poderia ser confortada com resultados experimentais.

Motivados por esses questionamentos, realizamos um estudo comparativo das interpretações de Copenhague e bohmiana em relação às suas previsões probabilísticas, com o objetivo de distinguir essas interpretações e eventualmente promovê-las a diferentes teorias em vez de meras interpretações do formalismo quântico. A partir desse estudo, foi possível constatar que a interpretação de Copenhague, sem hipóteses adicionais sobre o tempo, não é capaz de fornecer previsões para alguns experimentos devido à sua incapacidade de prever distribuições de probabilidade referentes ao tempo, uma vez que tal quantidade é tratada como um parâmetro. No entanto, a interpretação bohmiana é capaz de prever o comportamento das distribuições temporais, fornecendo previsões para experimentos os quais a interpretação de Copenhague não é capaz de descrever.

Nesse contexto, formulamos uma teoria equipada com trajetórias, que, sob a hipótese de determinismo bohmiano, descreve sistema probabilístico, e emerge naturalmente da teoria as distribuições do tempo e de qualquer quantidade física que possa ser mapeada pela trajetória do sistema. A incerteza em qualquer quantidade é oriunda da incerteza nas quantidades iniciais. A teoria foi formulada em dois contextos: o primeiro, análogo à MB, onde há apenas uma condição inicial com uma incerteza

associada; e o segundo, análogo à MQ, onde há duas condições iniciais com incertezas independentes associadas a ambas. A TET é geral, no sentido de que, dada a distribuição de probabilidade inicial, qualquer trajetória pode ser utilizada. Nos exemplos mostrados, as distribuições de probabilidade espaciais obtidas pela TET utilizando a trajetória bohmiana são equivalentes às obtidas na MQ. Esse resultado é crucial para validar nosso formalismo, pois funciona como uma autoavaliação. Caso contrário, ficaria evidente que nosso formalismo é inadequado. Além disso, formulamos dois modelos operacionais para a interpretação de Copenhague que podem ser comparados com resultados de experimentos realizáveis.

Com esses conceitos e ferramentas, estudamos três casos:

- **Experimento da dupla-fenda:** O objetivo deste exemplo é mostrar o problema do ponto de vista de um experimento bastante tradicional, a partir do qual obtém-se a distribuição de probabilidade atemporal $\wp_E(y|x = x_f)$, em que x_f é a posição do conjunto de detectores (anteparo) em relação às fendas. Mostramos que, para comparar tais resultados experimentais com a previsão oriunda da MQ, é necessário obter a distribuição de probabilidade de tempos de voo, o que não é possível sem suplementarmos a MQ com hipóteses *ad hoc* acerca do tempo. No entanto, do ponto de vista experimental, é possível sugerir uma aproximação para a distribuição de probabilidade de tempos de voo, de forma que se torne possível obter a distribuição de probabilidade atemporal via MQ e confrontar o resultado teórico com os dados experimentais. Mostramos que, para um estado inicial particular, a partir da TET para a trajetória bohmiana, a distribuição de probabilidade de tempos de voo é equivalente ao modelo experimental. O ponto crucial deste exemplo é destacar a dificuldade em confrontar os resultados experimentais com as previsões teóricas da MQ quando levamos em conta o tempo de voo do sistema, especialmente em um sistema físico tão emblemático quanto o experimento da dupla-fenda. Obtivemos a distribuição de probabilidade atemporal para a TET por meio das trajetórias bohmianas e pelo método operacional do tempo médio. Há uma redução na visibilidade da distribuição da TET em comparação com a distribuição obtida pelo tempo médio. Nesse caso, a tal redução pode não estar diretamente associada à descoerência, mas sim, com às contribuições dos diferentes tempos de voo.
- **Partícula livre:** Começamos pelo caso mais simples, que envolve uma partícula livre preparada em um pacote gaussiano. Utilizamos a teoria de Kijowski para calcular a distribuição de probabilidade de tempos de voo, tratando o tempo como um operador na interpretação de Copenhague. Em seguida, obtivemos a distribuição de probabilidade via TET utilizando as trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana. Notamos que todas as teorias utilizadas convergiram para as

mesmas previsões, o que pode ser explicado pelo fato de o sistema ser simples e não apresentar nenhuma característica quântica, como superposição inicial de estados.

Posteriormente, estendemos a análise para o caso em que o estado é preparado em uma superposição de estados gaussianos. Nesse caso, observamos que a distribuição de probabilidade de tempo de voo obtida pelo método de Kijowski e a simulação numérica discordam da distribuição obtida pela MB, enquanto as primeiras concordam. No entanto, as previsões da MB não foram construídas para descrever sistemas com trajetórias periódicas ou com pontos de retorno. Com isso, a TET se torna opção mais apropriada para descrever cenários nos quais a trajetória bohmiana atravessa uma coordenada várias vezes. Pretendemos concluir a implementação da TET para a trajetória bohmiana nesse cenário, a fim de obter a distribuição de tempo de voo de acordo com tal trajetória. Em seguida, faremos uma comparação com o formalismo de Kijowski e a simulação numérica, buscando assim verificar se a MB e a MQS são interpretações alternativas de uma mesma teoria ou se são teorias distintas. Esperamos que as distribuições obtidas pelos formalismos de Kijowski e da TET, utilizando trajetórias bohmianas, sejam equivalentes devido ao comportamento observado na simulação numérica com trajetórias bohmianas. Acreditamos que o comportamento das distribuições obtidas pela TET e pela simulação numérica deve convergir, indicando que o princípio da *equivariância* deve ser satisfeito.

- **Partícula em queda livre:** Nesta análise, estudamos um sistema de uma partícula em queda livre, preparada em um estado gaussiano. Utilizamos três métodos para obter a distribuição de probabilidade de tempo de voo: TET via trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana. Observamos que, para este sistema, tanto no limite massa grande quanto no de massa pequena, os três métodos convergiram. No entanto, a distribuição de probabilidade não apresenta nenhuma característica quântica, como interferência devido à superposição de estado. Assim, a TET clássica e semiclássica foram capazes de replicar o comportamento da distribuição oriunda da trajetória bohmiana.

Em seguida, calculamos a distribuição de probabilidade espacial atemporal, ou seja, a distribuição de probabilidade de um segundo grau de liberdade de posição dado que a posição do primeiro grau de liberdade (considerando o "chão" do sistema em $y = 0$ e os detectores nesse ponto). A partícula foi preparada como um pacote gaussiano em x . Novamente, consideramos dois regimes, o de massa grande e massa pequena, e observamos que em ambos os regimes a distribuição oriunda da TET via trajetória clássica, semiclássica e bohmiana concordam. No entanto, as aproximações geométrica e de tempo médio concordam apenas para

o regime massa grande, evidenciando que, para o regime de partícula com massa pequena, tais aproximações não concordam com o resultado da TET.

Exploramos, por fim, o caso em que a trajetória bohmiana para a partícula em queda livre não é unívoca. Demonstramos que a TET fornece previsões para a distribuição de probabilidade de tempos de voo que são consistentes com as simulações baseadas na trajetória bohmiana. Por outro lado, o método da MB, que utiliza a densidade de corrente de probabilidade, produz resultados discrepantes. Isso evidencia que o formalismo da TET é mais abrangente do que o da MB. É interessante notar que, para o caso específico em que a massa do sistema é grande, as teorias concordam. Esse resultado pode ser atribuído à natureza simétrica do campo de velocidades à medida que a massa aumenta.

Após examinarmos diferentes formulações da MQ e analisarmos a distribuição de tempo de voo em sistemas com e sem interferência quântica, concluímos que as distribuições de probabilidade de tempos de voo obtidas pela TET via trajetórias clássica, semiclássica e bohmiana, juntamente com o método de Kijowski, concordam em sistemas onde não há interferência quântica. No entanto, os métodos geométricos e de tempo médio só são válidas para sistemas com massa grande.

Nosso objetivo futuro consiste em realizar a implementação da TET para a trajetória bohmiana de uma partícula livre preparada em uma superposição de gaussianas, conforme discutido na subseção 4.2.1. A proposta é obter evidências teóricas que indiquem a distinção entre a MB e a MQS, ambas buscando descrever a natureza quântica. Caso as previsões teóricas da MQS e da MB sejam discrepantes, abrir-se-á espaço para futuros estudos em sistemas físicos realizáveis experimentalmente, a fim de verificar qual teoria efetivamente descreve o mundo quântico. Essa investigação aprofundada poderá contribuir para responder a uma questão fundamental: os sistemas quânticos são afinal determinísticos?

Uma abordagem adicional promissora consiste em aplicar a TET para a determinação do tempo de tunelamento, uma vez que existem resultados experimentais bem estabelecidos para essa grandeza, assim como previsões fornecidas pela MQ. Tal investigação proporcionaria uma forma indireta de avaliar se a MB ou a MQ são efetivas na descrição dos sistemas quânticos.

APÊNDICES

APÊNDICE A – MECÂNICA CLÁSSICA

Neste apêndice, exploraremos aspectos do formalismo da mecânica clássica (MC), que são fundamentais para o entendimento do trabalho. Organizamos este apêndice da seguinte forma: na seção A.1, abordaremos as transformações de Legendre; na seção A.2, trataremos do formalismo hamiltoniano; na seção A.3, analisaremos o formalismo de Hamilton-Jacobi; e, por fim, na seção A.4, exploraremos o formalismo Liouvilliano. Para uma análise mais aprofundada dos conceitos da MC, recomendamos consultar as referências [49, 50]. Essas seções fornecerão uma base sólida para o estudo das formulações clássicas utilizadas ao longo do trabalho.

A.1 TRANSFORMAÇÃO DE LEGENDRE

Considere a função $f(x, y)$ com as variáveis independentes $\{x, y\}$. A diferencial total de f é dada por

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy. \quad (\text{A.1})$$

Agora, seja a função $g(x, y, u) \equiv ux - f(x, y)$, onde u é uma variável adicional. A diferencial total de g é dada por

$$\begin{aligned} dg &= x du + u dx - df \\ &= x du + u dx - \frac{\partial f}{\partial x} dx - \frac{\partial f}{\partial y} dy. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Suponha que u seja uma função de $\{x, y\}$ definida por

$$u(x, y) \equiv \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (\text{A.3})$$

Substituindo a equação (A.3) na equação (A.2) obtemos

$$\begin{aligned} dg &= x du + u dx - \frac{\partial f}{\partial x} dx - \frac{\partial f}{\partial y} dy, \\ &= x du + \frac{\partial f}{\partial x} dx - \frac{\partial f}{\partial x} dx - \frac{\partial f}{\partial y} dy, \\ &= x du - \frac{\partial f}{\partial y} dy. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Essa equação mostra que g é uma função de u e y , ou seja, $g = g(u, y)$. Para obter uma expressão explícita para $g(u, y)$, precisamos primeiro inverter a equação $\partial_x f = u$ e obter $x(u, y)$. Então, podemos reescrever a função g como

$$g(u, y) = x(u, y) u - f(x(u, y), y). \quad (\text{A.5})$$

A equação (A.5) define a transformação de Legendre, que nos permite obter uma função $g(u, y)$ para qualquer função $f(x, y)$, onde $u = \partial_x f$. O ponto mais importante sobre essa transformação é que ela não perde informação, ou seja, é inversível, podendo recuperar toda a informação da função f usando a função g .

A.2 FORMALISMO HAMILTONIANO

Considere a Lagrangiana $L(q_i, \dot{q}_i, t)$, onde q_i representa a i -ésima coordenada generalizada, $\dot{q}_i \equiv \partial_t q_i$ é a derivada no tempo da i -ésima coordenada generalizada. Defina o i -ésimo momento generalizado π_i como

$$\pi_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \pi_i(q_j, \dot{q}_j, t). \quad (\text{A.6})$$

Invertendo a equação acima, temos $\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_j, \pi_j, t)$. Podemos então definir a hamiltoniana $H(q_i, \pi_i, t)$ como a transformada de Legendre da Lagrangiana L , dada por

$$H(q_i, \pi_i, t) = \sum_i \pi_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (\text{A.7})$$

A partir da equação (A.7), podemos escrever a diferencial total de H da seguinte forma:

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i d(\pi_i \dot{q}_i) - dL \\ &= \sum_i [\pi_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i d\pi_i] - \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \right] \\ &= \sum_i \left[\pi_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i d\pi_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \pi_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \right], \\ &= \sum_i \left[\dot{q}_i d\pi_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Por outro lado, a diferencial total de H deve ter a forma geral

$$dH = \sum_i \left[\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial \pi_i} d\pi_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \right]. \quad (\text{A.9})$$

Ao comparar as equações (A.8) e (A.9), chegamos a $2n + 1$ equações, sendo n a dimensão do espaço q :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial \pi_i}, \quad (\text{A.10})$$

$$\dot{\pi}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t}. \quad (\text{A.12})$$

Essas equações, (A.10), (A.11) e (A.12), são conhecidas como as equações de Hamilton. Podemos utilizar a notação de parênteses de Poisson para reescrever as equações de Hamilton, dada por

$$\{u, v\} \equiv \sum_i \left[\frac{\partial u}{\partial \pi_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} - \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial \pi_i} \right]. \quad (\text{A.13})$$

Com essa notação, as equações de Hamilton podem ser escritas como

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \quad (\text{A.14})$$

$$\dot{\pi}_i = \{\pi_i, H\} = -\{H, \pi_i\}, \quad (\text{A.15})$$

ou ainda na notação

$$\dot{q}_i = -\{H, \bullet\} q_i, \quad (\text{A.16})$$

$$\dot{\pi}_i = -\{H, \bullet\} \pi_i. \quad (\text{A.17})$$

De forma geral, temos que $\{H, \bullet\} u \equiv \{H, u\}$. Assim, podemos reescrever as equações de Hamilton em termos de parênteses de Poisson, o que é conveniente em algumas aplicações.

A.3 FORMALISMO DE HAMILTON-JACOBI

Considerando as equações de Hamilton dadas por (A.10) e (A.11), podemos nos perguntar quais transformações das coordenadas canônicas $\{q_i, \pi_i\}$ para um novo conjunto de coordenadas $\{Q_i, \Pi_i\}$ preservariam as equações de Hamilton. Em outras palavras, buscamos definir as novas coordenadas como

$$Q_i = Q_i(q_1, \dots, q_i, \pi_1, \dots, \pi_i, t),$$

$$\Pi_i = \Pi_i(q_1, \dots, q_i, \pi_1, \dots, p_i, t),$$

de forma que as equações de Hamilton sejam preservadas, ou seja,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial \Pi_i},$$

$$\dot{\Pi}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i},$$

onde $K(Q, \Pi, t)$ é a nova função hamiltoniana. Tal transformação é chamada de transformação canônica. As transformações de Legendre, mostradas na seção A.1, são mais gerais que as transformações canônicas, no entanto as transformações canônicas têm a vantagem de incluir a possibilidade de mesclar coordenadas q_i e momentos π_i na definição das novas variáveis, o que pode ser conveniente em certos casos.

Uma forma alternativa de obter as equações de Hamilton é através do princípio da ação mínima (ou princípio de Hamilton). Esse princípio afirma que a trajetória das

variáveis canônicas entre os instantes t_1 e t_2 , com $q_i(t_1)$ e $q_i(t_2)$ fixos, sempre será a trajetória que minimiza a ação s , definida como

$$s[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t). \quad (\text{A.18})$$

Matematicamente, o princípio da ação mínima impõe que a variação da ação deve ser zero, ou seja,

$$\delta s = \delta \left(\int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \right) = 0.$$

A partir da equação (A.7), podemos escrever a ação como

$$\delta s = \delta \left(\int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \pi_i \dot{q}_i + H(q_i, \pi_i, t) \right] \right) = 0, \quad (\text{A.19})$$

onde $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$. É possível adicionar qualquer função $dh(q_i, Q, t)/dt$ ao integrando da equação (A.19), sem alterar as equações de Hamilton, pois

$$\delta \left(\int_{t_1}^{t_2} dt \frac{dh}{dt} \right) = \delta (h(q_i, Q, t_2) - h(q_i, Q, t_1)) = 0, \quad (\text{A.20})$$

o que decorre de $\{q_i(t_1), q_i(t_2), Q\}$ serem fixos. A função h é conhecida como função geratriz.

Definiremos as novas variáveis canônicas $\{Q, \Pi\}$ que satisfazem as novas equações de Hamilton para K , impondo que a variação da ação seja nula:

$$\delta \left(\int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \Pi_i \dot{Q}_i + K(Q, \Pi, t) \right] \right) = 0, \quad (\text{A.21})$$

com $\delta Q_i(t_1) = \delta Q_i(t_2) = 0$. Para garantir que a equação (A.21) seja satisfeita, a maneira mais geral seria impor que

$$\sum_i \Pi_i \dot{Q}_i + K(Q, \Pi, t) = \lambda \left[\sum_i \pi_i \dot{q}_i + H(q_i, \pi_i, t) \right] - \frac{dh(q, Q, t)}{dt}, \quad (\text{A.22})$$

onde usamos a liberdade da equação (A.19) para adicionar uma função h na variação, sem alterar a equação de Hamilton. Integrando a equação (A.22) no tempo e aplicando a variação em ambos os lados, e ainda impondo que $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$, obtemos

$$\delta \left(\int dt \left[\sum_i \Pi_i \dot{Q}_i + K(Q, \Pi, t) \right] \right) = \frac{\partial h(q_2, Q_2, t_2)}{\partial Q_2} \delta Q_2 - \frac{\partial h(q_1, Q_1, t_1)}{\partial Q_1} \delta Q_1. \quad (\text{A.23})$$

Assim, se $\delta Q_1 = \delta Q_2 = 0$, a equação (A.21) será satisfeita. Para simplificar a notação, vamos fixar a constante de escala $\lambda = 1$, uma vez que ela afeta apenas a escala das coordenadas e momentos. Na equação (A.22), podemos escrever explicitamente a derivada total de h como:

$$\sum_i \Pi_i \dot{Q}_i + K(Q, \Pi, t) = \sum_i \pi_i \dot{q}_i + H(q_i, \pi_i, t) - \sum_i \left(\frac{\partial h}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial h}{\partial Q_i} \dot{Q}_i \right) + \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Para que o princípio da ação mínima (A.21) seja satisfeito, as seguintes relações devem ser válidas:

$$\pi_i = \frac{\partial h}{\partial q_i} \quad (\text{A.24})$$

$$\Pi_i = -\frac{\partial h}{\partial Q_i} \quad (\text{A.25})$$

$$K(Q, \Pi, t) = H(q(Q, \Pi, t), \pi(Q, \Pi, t), t) + \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (\text{A.26})$$

Portanto, a transformação canônica é implicitamente definida pela função geratriz $h(q, Q, t)$. No caso particular em que $K = 0$, a equação de Hamilton (A.12) é satisfeita se a função geratriz for a própria ação do sistema $h(q, Q, t) = s(q, Q, t)$, que nesse contexto é conhecida como função principal de Hamilton. As equações de Hamilton para as novas variáveis ficam triviais

$$\dot{Q}_i = 0 \quad \text{e} \quad \dot{\Pi}_i = 0, \quad (\text{A.27})$$

com o momento canônico definido como $\pi_i = \partial_{q_i} s$, e a equação (A.26) torna-se

$$H(q, \partial_{q_i} s, t) + \frac{\partial s}{\partial t} = 0. \quad (\text{A.28})$$

O estudo desta transformação canônica em específico é conhecido como formulação de Hamilton-Jacobi, e as equações de Hamilton-Jacobi são definidas por

$$H(q_1, \dots, q_i, \partial_{q_1} s, \dots, \partial_{q_i} s, t) + \frac{\partial s}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.29})$$

$$\dot{q}_i = \frac{\pi_i}{m} = \frac{1}{m} \frac{\partial s}{\partial q_i}, \quad (\text{A.30})$$

onde $s = s(q_1, \dots, q_i, \Pi_1, \dots, \Pi_i, t)$ é a função principal de Hamilton ou gerador de trajetórias.

A.4 FORMALISMO LIOUVILLIANO

Considere o operador Liouvilliano \mathcal{L} definido por

$$\mathcal{L} \equiv \{H, \bullet\}, \quad (\text{A.31})$$

a partir do qual podemos reescrever as equações de Hamilton como

$$\dot{q}_i = -\mathcal{L} q_i, \quad (\text{A.32})$$

$$\dot{\pi}_i = -\mathcal{L} \pi_i. \quad (\text{A.33})$$

Uma propriedade interessante desse operador é que, para o caso especial em que o hamiltoniano H não depende explicitamente do tempo, o operador Liouvilliano

também não depende do tempo. Isso significa que a evolução das trajetórias no espaço de fase é governada por operadores lineares fixos ao longo do tempo. Portanto, as soluções para as equações diferenciais (A.32) e (A.33) são dadas por

$$q(t) = \phi(q(0), t) = e^{-\mathcal{L}t} q(0), \quad (\text{A.34})$$

$$\pi(t) = \omega(\pi(0), t) = e^{-\mathcal{L}t} \pi(0). \quad (\text{A.35})$$

Observe que, dadas as condições iniciais $q(0), p(0)$, é possível evoluir a trajetória no espaço de fase utilizando o operador $e^{-\mathcal{L}t}$, que é análogo ao operador de evolução temporal presente no formalismo quântico. Essas equações representam a evolução temporal das variáveis canônicas q e π a partir de suas condições iniciais, dadas respectivamente por $q(0)$ e $\pi(0)$. O operador exponencial $e^{-\mathcal{L}t}$ atua como um propagador temporal que mapeia as variáveis iniciais para seus valores em qualquer instante t .

Com o formalismo Liouvilliano, é possível discutir a dinâmica de sistemas clássicos probabilísticos. Ou seja, se não temos acesso às condições iniciais exatas, mas a uma distribuição de probabilidade $\rho(q(0), \pi(0), t = 0)$, podemos encontrar a distribuição de probabilidade $\rho(q, \pi, t)$.

Primeiramente, consideremos que a distribuição de probabilidade no espaço de fase $\{q_1, \pi_1, q_2, \pi_2, \dots, q_N, \pi_N\}$ é incompressível, ou seja, uma variação da distribuição de probabilidade ρ no tempo está ligada a uma única corrente de probabilidade $\vec{j} \equiv \vec{\mathcal{V}}\rho$, em que $\vec{\mathcal{V}} = [\dot{q}_1, \dot{\pi}_1, \dot{q}_2, \dot{\pi}_2, \dots, \dot{q}_N, \dot{\pi}_N]$, que define a equação de continuidade

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (\text{A.36})$$

Substituindo a definição de corrente de probabilidade, obtemos

$$\partial_t \rho + (\nabla \rho) \cdot \vec{\mathcal{V}} + \rho (\nabla \cdot \vec{\mathcal{V}}) = 0,$$

o segundo termo pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} (\nabla \rho) \cdot \vec{\mathcal{V}} &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \dot{\pi}_i \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \frac{\partial \pi_i}{\partial t} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

e o terceiro termo pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \rho (\nabla \cdot \vec{\mathcal{V}}) &= \rho \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{\pi}_i}{\partial \pi_i} \right] \\ &= \rho \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial H}{\partial q_i \partial \pi_i} - \frac{\partial H}{\partial \pi_i \partial q_i} \right] = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

A equação (A.36) pode ser reescrita:

$$\partial_t \rho + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \frac{\partial \pi_i}{\partial t} \right] = 0. \quad (\text{A.39})$$

A equação (A.39) representa a derivada total de ρ , levando-nos à seguinte conclusão:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (\text{A.40})$$

Esse resultado é conhecido como o teorema de Liouville, que afirma que a distribuição de probabilidade $\rho(q, \pi)$ é constante ao longo de qualquer trajetória no espaço de fase. Além disso, o volume do espaço de fase permanece constante. Se considerarmos um volume infinitesimal $d\Gamma_i \equiv d\pi_i dq_i$ e evoluirmos um tempo δt infinitesimal, podemos calcular as variações infinitesimais dq_i e $d\pi_i$ como

$$dq'_i = dq_i + \partial_{q_i} \dot{q}_i dq_i \delta t, \quad (\text{A.41})$$

$$d\pi'_i = d\pi_i + \partial_{\pi_i} \dot{\pi}_i d\pi_i \delta t. \quad (\text{A.42})$$

Assim, podemos obter o volume evoluído $d\Gamma'$ em um instante infinitesimal posterior, considerando apenas os termos lineares de δt

$$\begin{aligned} d\Gamma' &= dq'_i d\pi'_i = dq_i d\pi_i \left[1 + \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{\pi}_i}{\partial \pi_i} \right) \delta t \right] \\ &= dq_i d\pi_i \left[1 + \left(\frac{\partial H}{\partial q_i \partial \pi_i} - \frac{\partial H}{\partial \pi_i \partial q_i} \right) \delta t \right] = dq_i d\pi_i. \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Esta última expressão ilustra que o volume do espaço de fase permanece constante no tempo, o que é uma consequência importante do formalismo Liouvilliano. Esse resultado pode ser generalizado para volumes finitos. Reescrevendo a equação (A.39), obtemos

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \frac{\partial \pi_i}{\partial t} \right] &= 0 \\ \partial_t \rho + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial \pi_i} - \frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] &= 0 \\ \partial_t \rho &= \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \rho}{\partial \pi_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} - \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial \pi_i} \right] = \{H, \cdot\} \rho. \\ \partial_t \rho &= \mathcal{L} \rho. \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

A equação (A.44) nos dá a dinâmica da distribuição de probabilidade ρ , se o hamiltoniano não depende explicitamente do tempo. Em outras palavras, a evolução temporal da distribuição de probabilidade pode ser obtida por

$$\rho(q, \pi, t) = e^{\mathcal{L}t} \rho(q_0, \pi_0, 0), \quad (\text{A.45})$$

onde $q_0 \equiv q(0)$ e $\pi_0 \equiv \pi(0)$. Observe que na equação (A.45), o operador $e^{\mathcal{L}t}$ age sobre as variáveis canônicas iniciais $\{q, \pi\}$. A partir das equações (A.34) e (A.35), podemos obter:

$$\begin{aligned} q_0(q, \pi_0, t) &= \Lambda_q(q, \pi_0, t) = e^{\mathcal{L}t} q(t), \\ \pi_0(q_0, \pi, t) &= \Lambda_\pi(q_0, \pi, t) = e^{\mathcal{L}t} \pi(t). \end{aligned}$$

Com base nessas equações, encontramos a trajetória inversa $\{q_0(q, \pi_0, t), \pi_0(q_0, \pi, t)\}$. Assim, a evolução de uma distribuição de probabilidade para um sistema clássico pode ser expressa como:

$$\rho(q, \pi, t) = \rho(\Lambda_q(q, \pi_0, t), \Lambda_\pi(q_0, \pi, t), 0). \quad (\text{A.46})$$

Concluimos, portanto, que evoluir a distribuição de probabilidade inicial utilizando o formalismo Liouvilliano é equivalente a avaliar a distribuição de probabilidade inicial na trajetória inversa $\{\Lambda_q(q, \pi_0, t), \Lambda_\pi(q_0, \pi, t)\}$.

APÊNDICE B – APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA

Neste apêndice, exploraremos o trabalho [48], no qual os autores realizam uma aproximação semiclássica utilizando o formalismo de propagadores de Feynman, com o objetivo de obter uma função de onda semiclássica. Essa abordagem resulta em uma trajetória semiclássica emergente para a partícula, que pertence ao espaço de fase complexo. O propósito deste apêndice é fornecer uma descrição detalhada desse formalismo, derivando as trajetórias semiclássicas para os sistemas físicos que serão analisados ao longo do trabalho.

Considerando a evolução temporal do estado $|\psi(t_0)\rangle$ na representação de posição, expressamos a função de onda $\psi(x_f, t)$ como

$$\begin{aligned}\psi(x_f, t) &= \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | \psi(t_0) \rangle = \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) \mathbb{1} | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int dx_i \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | x_i \rangle \langle x_i | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int dx_i \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | x_i \rangle \psi(x_i, t_0),\end{aligned}$$

sendo o propagador de Feynman $\langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | x_i \rangle = \langle x_f | \exp(-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar) | x_i \rangle$. No limite semiclássico, obtemos o propagador a partir da trajetória clássica que conecta o ponto inicial x_i ao ponto final x_f no tempo t . Essa aproximação é conhecida como aproximação de Van Vleck. Dessa forma, a função de onda semiclássica $\psi_{sc}(x_f, t)$ é dada por

$$\psi_{sc}(x_f, t) = \int dx_i \langle x_f | U(t_0, t) | x_i \rangle_{sc} \psi(x_i, t_0), \quad (\text{B.1})$$

em que $\langle x_f | U(t_0, t) | x_i \rangle_{sc}$ é o propagador de Van Vleck.

Consideramos um estado inicial $\psi(t_0)$ que é um pacote gaussiano com posição média \bar{x}_0 , momento médio \bar{p}_0 e incerteza na posição $\sigma_{x,0} = b/\sqrt{2}$ e momento $\sigma_{p,0} = \hbar/2\sigma_{x,0}$ com

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \text{e} \quad c = \sqrt{\hbar m\omega}.$$

Esses parâmetros definem a escala de comprimento e momento, respectivamente, satisfazendo $bc = \hbar$. É conveniente representar o estado inicial como o estado coerente $|z\rangle$ do oscilador harmônico de massa m e frequência ω , definido por

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{z\hat{a}^\dagger} |0\rangle,$$

em que $|0\rangle$ é o estado fundamental do oscilador harmônico, \hat{a}^\dagger é o operador criação definido como

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{X}}{b} - i\frac{\hat{P}}{c} \right),$$

e o rótulo z é um número complexo dado por

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\bar{x}_0}{b} + i \frac{\bar{p}_0}{c} \right).$$

A forma final da aproximação semiclássica do pacote de função de onda é dada por

$$\psi_{sc}(x_f, z; t) = \int dx_i \langle x_f | \hat{U}(t_0, t) | x_i \rangle_{sc} \langle x_i | z \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Antes de aplicar o método da fase estacionária para integrar a equação (B.2), é importante estabelecer a relação entre os elementos da matriz tangente M e segundas derivadas da ação $S(x_f, x_i; t)$ ¹ para a trajetória clássica, que é definida por $x(t)$ e $p(t)$, com as condições de contorno $x(t=0) = x_i$ e $x(t) = x_f$. A matriz tangente é responsável por conectar um pequeno deslocamento da posição δx_f e do momento δp_f final a um deslocamento inicial δx_i e δp_i , por meio de uma aproximação linear. A relação da matriz tangente com a ação é dada por

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{\delta x_f}{b} \\ \frac{\delta p_f}{c} \end{bmatrix} &\equiv M \begin{bmatrix} \frac{\delta x_i}{b} \\ \frac{\delta p_i}{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{xx} & m_{xp} \\ m_{px} & m_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\delta x_i}{b} \\ \frac{\delta p_i}{c} \end{bmatrix}, \\ M &\equiv \begin{bmatrix} -\frac{S_{ii}}{S_{if}} & -\frac{c}{b} \frac{1}{S_{if}} \\ \frac{b}{c} \left(S_{if} - S_{ff} \frac{S_{ii}}{S_{if}} \right) & -\frac{S_{ff}}{S_{if}} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

onde

$$S_{ii} \equiv \frac{\partial^2 S}{\partial x_i^2}, \quad S_{if} \equiv \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_f}, \quad S_{ff} \equiv \frac{\partial^2 S}{\partial x_f^2}.$$

A referência [51] oferece mais detalhes sobre a derivação da fórmula acima.

O propagador de Feynman é definido como

$$\langle x_f | U(t_0, t) | x_i \rangle = \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x_f, x_i] \right), \quad (\text{B.4})$$

sendo possível encontrar mais detalhes sobre a derivação dessa expressão na referência [36]. A ação S é definida como

$$S[x_f, x_i] = \int_0^t dt L(\dot{x}(t), x(t)),$$

na qual L é o lagrangiano ao longo do caminho $x(t)$ sujeito às condições de contorno $x(t=0) = x_i$ e $x(t) = x_f$. Ao aplicar o método da fase estacionária para resolver a integral na equação (B.4), obtemos o propagador de Van Vleck

$$\langle x_f | U(t_0, t) | x_i \rangle_{sc} = \frac{e^{iS/\hbar - i\pi/4}}{b \sqrt{2\pi m_{xp}}}.$$

¹ A ação clássica desempenha um papel fundamental no propagador de Van Vleck, sendo essencial expressá-la como uma função da matriz tangente.

Para os sistemas em que utilizaremos o formalismo de Van Vleck, não se verifica problemas do elemento da matriz tangente m_{xp} se anular. Contudo, em casos em que essa divergência ocorre, é necessário fazer a aproximação para ordens aproximativas maiores. O produto interno $\langle x_i|z \rangle$ é dado por

$$\langle x_i|z \rangle = \sqrt{\frac{1}{\pi b^2}} \exp \left[-\frac{(x_i - \bar{x}_0)^2}{2b^2} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \bar{p}_0 \left(x_i - \frac{\bar{x}_0}{2} \right) \right].$$

Assim, a equação (B.2) pode ser reescrita como

$$\psi_{sc}(x_f, z; t) = \int dx_i \frac{\exp \Phi}{A}, \quad (\text{B.5})$$

onde

$$\Phi(x_f, x_i; t) = \frac{i}{\hbar} \left[S + \bar{p}_0 \left(x_i - \frac{\bar{x}_0}{2} \right) \right] - \frac{(x_i - \bar{x}_0)^2}{2b^2} - i \frac{\pi}{4}$$

e o pré-fator é dado por

$$A = b^{3/2} \pi^{1/4} \sqrt{2\pi m_{xp}}.$$

Para resolver a integral na equação (B.5) vamos aplicar novamente a aproximação de fase estacionária. Nessa abordagem, expandimos a função Φ em torno do ponto de sela, definido por $\partial\Phi/\partial x_i = 0$. Assim, aproximamos a função Φ por

$$\Phi \approx \tilde{\Phi} + \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x_i} (x_i - \tilde{x}_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial x_i^2} (x_i - \tilde{x}_i)^2,$$

onde as quantidades avaliadas no ponto de sela receberão o símbolo $\tilde{}$ (til) sobre a letra que as representa. Calculando a derivada primeira de Φ , obtemos

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = \frac{i}{\hbar} (\bar{p}_0 - p_i) - \frac{(x_i - \bar{x}_0)}{b^2}.$$

Aqui, definimos

$$p_i(x_f, x_i; t) = -\frac{\partial S}{\partial x_i} \quad (\text{B.6})$$

como o momento conjugado de inicial da trajetória clássica. A derivada segunda de Φ em relação a x_i é

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} \equiv \partial_{x_i}^2 \Phi = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial p_i}{\partial x_i} - \frac{1}{b^2}. \quad (\text{B.7})$$

O ponto de sela $\tilde{x}_i \equiv x_0(x_f, t)$ é obtido a partir da equação

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = \frac{x_0 - \bar{x}_0}{b} - i \frac{p_0 - \bar{p}_0}{c} = 0, \quad (\text{B.8})$$

em que definimos

$$p_0(x_f; t) = p_i(x_f, x_0; t). \quad (\text{B.9})$$

Note que a equação (B.8) implica que x_0 pode ser um número complexo, o que faz com que a trajetória também o seja. Ao realizar a integração, obtemos

$$\begin{aligned} \psi_{sc}(x_f, z; t) &= \frac{e^{\tilde{\Phi}}}{A} \int dx_i \exp \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial x_i^2} (x_i - x_0)^2 \right] \\ &= \frac{e^{\tilde{\Phi}}}{b^{3/2} \pi^{1/4} \sqrt{2\pi m_{xp}}} \sqrt{\frac{-2\pi}{\partial_{x_i}^2 \tilde{\Phi}}}. \end{aligned}$$

Utilizando a equação (B.7) e as definições das matrizes tangente, é possível reescrever a segunda derivada de $\tilde{\Phi}$ como

$$\partial_{x_i}^2 \tilde{\Phi} = \frac{iS_{ii}}{\hbar} - \frac{1}{b^2} = \frac{i}{b^2} \frac{m_{xx} + im_{xp}}{m_{xp}}.$$

Assim, podemos reescrever $\psi_{sc}(x_f, z; t)$ como

$$\psi_{sc}(x_f, z; t) = \frac{1}{b^{1/2} \pi^{1/4} \sqrt{m_{xx} + im_{xp}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{S} + \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_0 \left(x_0 - \frac{\bar{x}_0}{2} \right) - \frac{(x_0 - \bar{x}_0)^2}{2b^2} \right], \quad (\text{B.10})$$

sendo essa a forma final para a aproximação semiclássica da função de onda.

Utilizando o formalismo semiclássico apresentado, iremos calcular as trajetórias semiclássicas a partir das condições de contorno para os sistemas que serão estudados neste trabalho.

Partícula Livre. Considere uma partícula livre preparada como um pacote gaussiano definido por (2.35), com hamiltoniana dada por $H = P^2/2m$. Nesse caso, a ação clássica é definida por

$$S(x_f, x_i; t) = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{t}, \quad (\text{B.11})$$

O parâmetro ω é definido como

$$\omega = \frac{c}{mb} = \frac{\hbar}{mb^2} = \frac{\hbar}{2m\sigma_{x,0}^2},$$

e os elementos da matriz tangente são: $m_{xx} = 1$, $m_{xp} = \omega t$, $m_{px} = 0$ e $m_{pp} = 1$. A trajetória é definida pela trajetória clássica

$$x(t) = A + Bt,$$

onde A e B são constantes arbitrárias. Como $x(0) = x_0$ e $x(T) = x_f$, então

$$A = x_0 \quad \text{e} \quad B = \frac{x_f - x_0}{T}. \quad (\text{B.12})$$

A partir das condições iniciais definidas pelas equações (B.8) e $p_0(x_f, z; t) = p_i(x_f, x_i; t) = \partial_{x_i} S$, obtemos as seguintes relações

$$\frac{x_0 - \bar{x}_0}{b} + i \frac{p_0 - \bar{p}_0}{c} = 0$$

$$p_0 = m \frac{x_f - x_0}{t}.$$

Resolvendo o sistema de equações

$$x_0(x_f, z; t) = \frac{x_f + i\omega t \left(\bar{x}_0 + i \frac{1}{m\omega} \bar{p}_0 \right)}{1 + i\omega t}. \quad (\text{B.13})$$

Por fim, de $p_0(x_f, z; t) = p_i(x_f, x_0; t) = \partial_{x_i} S$, obtemos

$$p_0(x_f, z; t) = \frac{\bar{p}_0 + im\omega (x_f - \bar{x}_0)}{1 + i\omega t}. \quad (\text{B.14})$$

Então, a partir da equação (B.10), temos a função de onda semiclássica ψ_{sc} para a partícula livre.

Partícula em queda livre. Considere uma partícula em queda livre, cuja preparação inicial seja um pacote gaussiano definido por (2.45), com hamiltoniana $H = P^2/2m + gmY$. A ação clássica para este sistema é dada por

$$S(y_f, y_i; t) = \frac{m}{2} \frac{(y_f - y_i)^2}{t} - \frac{mg}{2} (y_f + y_i)t - \frac{5mg^2 t^3}{24}. \quad (\text{B.15})$$

Novamente é conveniente definir o parâmetro ω como

$$\omega = \frac{c}{mb} = \frac{\hbar}{mb^2} = \frac{\hbar}{m\sigma_{y,0}^2}.$$

Os elementos da matriz tangente são: $m_{yy} = 1$, $m_{yp} = \omega t$, $m_{py} = 0$ e $m_{pp} = 1$. A trajetória semiclássica é definida por

$$y(t) = A + Bt - \frac{gt^2}{2}$$

onde A e B são constantes arbitrárias. Como $y(0) = y_0$ e $y(T) = y_f$, então

$$A = y_0 \quad \text{e} \quad B = \frac{y_f - y_i}{T} + \frac{g}{2}T. \quad (\text{B.16})$$

A partir das condições iniciais definidas pelas equações (B.8) e $p_0(y_f, z; t) = p_i(y_f, y_i; t) = \partial_{y_i} S$, obtemos as seguintes relações

$$\frac{y_0 - \bar{y}_0}{b} + i \frac{p_0 - \bar{p}_0}{c} = 0$$

$$p_0 = m \frac{y_f - y_0}{t} + \frac{mg}{2}t.$$

Resolvendo esse sistema de equações, obtemos a expressão para a condição inicial y_0

$$y_0(y_f, z; t) = \frac{y_f + \frac{gt^2}{2} + i\omega t \left(\bar{y}_0 + i \frac{1}{m\omega} \bar{p}_0 \right)}{1 + i\omega t}, \quad (\text{B.17})$$

e a expressão para o momento inicial p_0 é definida como

$$p_0(y_f, z; t) = \frac{\bar{p}_0 + im\omega \left(y_f + \frac{gt^2}{2} - \bar{y}_0 \right)}{1 + i\omega t}. \quad (\text{B.18})$$

A partir da equação (B.10), obtemos a função de onda semiclássica para a partícula em queda livre.

REFERÊNCIAS

- [1] P. S. de Laplace, F.W. Truscott e F.L. Emory. *A Philosophical Essay on Probabilities*. A Philosophical Essay on Probabilities. Wiley, 1902 (ver p. 10).
- [2] J. Earman. *A Primer on Determinism*. Springer Dordrecht, 1986 (ver p. 10).
- [3] G. Matteucci et al. “Build-up of Interference Patterns with Single Electrons”. Em: *European Journal of Physics* 34 (2013), p. 511 (ver p. 11).
- [4] A. Tonomura et al. “Demonstration of Single-Electron Buildup of an Interference Pattern”. Em: *American Journal of Physics* 57.2 (1989), p. 2 (ver p. 11).
- [5] W. Heisenberg. “The actual content of quantum theoretical kinematics and mechanics”. English. Em: (1983) (ver p. 11).
- [6] N. Bohr. “The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Theory”. Em: *Nature* 121.3050 (1928), pp. 580–590 (ver p. 11).
- [7] T. Mančal. “Translation of Werner Heisenberg’s Paper “Quantum-Theoretical Reinterpretation of Kinematic and Mechanical Relations”Zeitschrift”. Em: (2021). arXiv: 2108.03119 [physics.ed-ph] (ver p. 11).
- [8] A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen. “Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?” Em: *Physical Review* 47.10 (1935), pp. 777–780 (ver pp. 11, 22).
- [9] A. L. O. Bilobran e R. M. Angelo. “A measure of physical reality”. Em: *Europhysics Letters* 112.4 (2015), p. 40005 (ver p. 12).
- [10] P. R. Dieguez e R. M. Angelo. “Information-reality complementarity: The role of measurements and quantum reference frames”. Em: *Physical Review A* 97 (2 2018), p. 022107 (ver p. 12).
- [11] I. L. Paiva et al. “Coherence and realism in the Aharonov-Bohm effect”. Em: *Physical Review A* 107 (3 2023), p. 032213 (ver p. 12).
- [12] A. Orthey e R. Angelo. “Quantum realism: Axiomatization and quantification”. Em: *Physical Review A* 105 (2022), p. 052218 (ver p. 12).
- [13] P. R. Dieguez et al. “Experimental assessment of physical realism in a quantum-controlled device”. Em: *Communications Physics* 5 (2021), pp. 1–8 (ver p. 12).
- [14] N. Engelbert e R. Angelo. “Hardy’s Paradox as a Demonstration of Quantum Irrealism”. Em: *Foundations of Physics* 50 (fev. de 2020) (ver p. 12).
- [15] F. R. Lustosa, P. R. Dieguez e I. G. da Paz. “Irrealism from fringe visibility in matter-wave double-slit interference with initial contractive states”. Em: *Physical Review A* 102 (5 2020), p. 052205 (ver p. 12).

- [16] D. Bohm. "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden"Variables. I". Em: *Physical review* 85.2 (1952), pp. 166–179 (ver pp. 12, 22, 24).
- [17] D. Bohm. "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden"Variables. II". Em: *Physical Review* 85.2 (1952), pp. 180–193 (ver pp. 12, 22).
- [18] J. G. Muga e C. R. Leavens. "Arrival time in quantum mechanics". Em: *Physics Reports* 338.4 (2000), pp. 353–438 (ver pp. 12, 26).
- [19] D. Durr, S. Goldstein e N. Zangui. "Quantum Equilibrium and the Origin of Absolute Uncertainty". Em: *Journal of Statistical Physics* 67.5-6 (2003), pp. 843–907 (ver pp. 12, 25).
- [20] J. S. Bell. "On the Einstein Podolsky Rosen paradox". Em: *Physics Physique Fizika* 1 (3 1964), pp. 195–200 (ver p. 13).
- [21] B. Hensen et al. "Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres". Em: *Nature* 526 (2015) (ver p. 13).
- [22] M. Giustina et al. "Significant-Loophole-Free Test of Bell's Theorem with Entangled Photons". Em: *Physical Review Letters* 115 (25 2015), p. 250401 (ver p. 13).
- [23] L. K. Shalm et al. "Strong Loophole-Free Test of Local Realism". Em: *Physical Review Letters* 115 (25 2015), p. 250402 (ver p. 13).
- [24] B. Hensen et al. "Loophole-free Bell test using electron spins in diamond: second experiment and additional analysis". Em: *Scientific Reports* 6 (mar. de 2016) (ver p. 13).
- [25] D. Rauch et al. "Cosmic Bell Test Using Random Measurement Settings from High-Redshift Quasars". Em: *Physical Review Letters* 121 (8 2018), p. 080403 (ver p. 13).
- [26] Ming-Han Li et al. "Test of Local Realism into the Past without Detection and Locality Loopholes". Em: *Physical Review Letters* 121 (8 2018), p. 080404 (ver p. 13).
- [27] A. Einstein. "On the Electrodynamics of Moving Bodies". Em: *Annalen der Physik* (1905), pp. 891–921 (ver p. 13).
- [28] P. Achuthan, W. Pauli e K. Venkatesan. *General Principles of Quantum Mechanics*. Springer, 2012 (ver pp. 14, 19, 33).
- [29] J. Kijowski. "On the time operator in quantum mechanics and the heisenberg uncertainty relation for energy and time". Em: *Reports on Mathematical Physics* 6.3 (1974), pp. 361–386 (ver pp. 14, 35).

- [30] N. Page e K. Wootters. “Evolution without evolution: Dynamics described by stationary observables”. Em: *Physical Review D* 27 (12 1983), pp. 2885–2892. DOI: 10.1103/PhysRevD.27.2885 (ver p. 14).
- [31] E. O. Dias e F. Parisio. “Space-time-symmetric extension of nonrelativistic quantum mechanics”. Em: *Physical Review A* 95 (2017), p. 032133 (ver p. 14).
- [32] A. J. S. de Lara e M. W. Beims. “Non-Hermiticity of Tunneling Time in a Spacetime-symmetric Extension of Nonrelativistic Quantum Mechanics”. Em: *Physical Review A* 107 (5 2023), p. 052220 (ver p. 14).
- [33] J. S. Briggs e J. M. Rost. “Time Dependence in Quantum Mechanics”. Em: *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular and Optical Physics* 2.1 (2000). DOI: 10.1007/s100530050554 (ver p. 14).
- [34] W. Feller e V. Feller. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. An Introduction to Probability Theory and Its Applications. Wiley, 1957 (ver p. 16).
- [35] C. Cohen-Tannoudji et al. *Quantum mechanics*. A Wiley-Interscience publication. 1977 (ver pp. 19, 27, 60).
- [36] R. Feynman e A. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. 1^a ed. Dover Books, 2005 (ver pp. 19, 60, 106).
- [37] A. Nielsen e L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010 (ver p. 19).
- [38] M. L. Boas. *Mathematical methods in the physical sciences*. Wiley, 2006 (ver p. 26).
- [39] G. R. Jost. “Aspectos de Gauge em Trajetórias Bohmianas”. Diss. de mestr. Universidade Federal do Paraná, 2021 (ver p. 30).
- [40] E. Galapon. “Pauli’s theorem and quantum canonical pairs: the consistency of a bounded, self-adjoint time operator canonically conjugate to a Hamiltonian with non-empty point spectrum”. Em: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 458.2018 (2002) (ver p. 34).
- [41] Y. Aharonov e D. Bohm. “Time in the Quantum Theory and the Uncertainty Relation for Time and Energy”. Em: *Physical Review* 122.5 (1961), pp. 1649–1658 (ver p. 35).
- [42] M. Zambianco. “The issue of time in Quantum Mechanics”. Diss. de mestr. Universidade Estadual Paulista, 2021 (ver pp. 36, 37).
- [43] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific, 1998 (ver p. 36).

- [44] R. Giannitrapani. “Positive-operator-valued time observable in quantum mechanics”. Em: *International Journal of Theoretical Physics* 36.7 (1997), pp. 1575–1584 (ver p. 39).
- [45] N. Grot, C. Rovelli e R. S. Tate. “Time of arrival in quantum mechanics”. Em: *Physical Review A* 54.6 (1996), pp. 4676–4690 (ver p. 39).
- [46] W. Zurek. “Quantum Darwinism”. Em: *Nature Physics* 5 (2009) (ver p. 65).
- [47] M. Schlosshauer. *Decoherence and the Quantum-To-Classical Transition*. Springer Berlin, Heidelberg, 2007 (ver p. 65).
- [48] M. A. M. de Aguiar et al. “Semiclassical propagation of wavepackets with complex and real trajectories”. Em: *Journal of Physics. A, Mathematical and General* 38.21 (2005), pp. 4645–4664 (ver pp. 70, 105).
- [49] H. Goldstein, C. P. Poole e J. L. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2002 (ver p. 97).
- [50] W. Greiner. *Classical Mechanics: Systems of Particles and Hamiltonian Dynamics*. Classical theoretical physics v. 1. Springer, 2003 (ver p. 97).
- [51] F. Grossmann e M. F. Herman. “Comment on ‘Semiclassical approximations in phase space with coherent states’”. Em: *Journal of Physics. A, Mathematical and General* 35.44 (2002), pp. 9489–9492 (ver p. 106).