

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

LEONARDO OLIVEIRA MENDES

**UM ESTUDO DE TEORIAS COM
DERIVADAS SUPERIORES: O
OSCILADOR DE PAIS-UHLENBECK**

Maringá

2017

LEONARDO OLIVEIRA MENDES

**UM ESTUDO DE TEORIAS COM
DERIVADAS SUPERIORES: O
OSCILADOR DE PAIS-UHLENBECK**

Dissertação apresentada à Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre.

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá

2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá, PR, Brasil)

M538e Mendes, Leonardo Oliveira
Um estudo de teorias com derivadas superiores : o oscilador de Pais-Uhlenbeck / Leonardo Oliveira Mendes. -- Maringá, 2017.
74 f.

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2017.

1. Oscilador de Pais-Uhlenbeck. 2. Formalismo de Ostrogradsky. 3. Derivadas superiores. I. Mendes, Renio dos Santos, orient. II. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 23.ed. 530.1

GVS-003764

LEONARDO OLIVEIRA MENDES

**UM ESTUDO DE TEORIAS COM DERIVADAS
SUPERIORES: O OSCILADOR DE PAIS-UHLENBECK**

Dissertação apresentada à
Universidade Estadual de
Maringá, como requisito
parcial para a obtenção do
título de mestre.

Aprovado em: Maringá, 24
de fevereiro de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes
Universidade Estadual de Maringá

Prof. Dr. Angel Akio Tateishi
Universidade Tecnológica Federal do Paraná -
Pato Branco

Prof. Dr. Luis Carlos Malacarne
Universidade Estadual de Maringá

Dedico este trabalho, primeiramente, aos meus pais que sempre me apoiaram e me incentivaram ao estudo durante toda minha vida.

Em segundo lugar, dedico à Mariana que sempre foi minha muleta nos momentos difíceis e soube me criticar e me ouvir nas horas certas.

A realização desta conquista dedico unicamente a vocês.

Agradecimentos

Agradeço, em primeiro lugar, ao Prof. Renio dos Santos Mendes não só pela orientação, mas por me oferecer esse projeto, por acreditar que poderíamos completá-lo, pela paciência nas conversas e orientações e, também, pela oportunidade que eu tive de colaborar, por meio do estágio-docência, com o preparo de aulas de uma disciplina muito cara para mim.

Aos professores da Pós-graduação de Física que, embora não ligados diretamente ao objeto deste trabalho, me auxiliaram na compreensão de disciplinas como Mecânica Quântica e Mecânica Clássica, compreensão essa fundamental para a concretização desta dissertação.

Aos meus colegas de Pós-graduação, pois tenho firme convicção que ciência é algo social, por necessidade. Discutir problemas, ter contato, através de exposições e palestras, com resultados de outras áreas são o fundamento da ciência e do aprendizado e vocês me propiciaram isso.

καὶ τὸ μὲν οὖν σαφὲς οὐτις ἀνὴρ ἴδεν οὐδὲ τις ἔσται
εἰδῶς ἀμφὶ θεῶν τε καὶ ἄσσα λέγω περὶ πάντων·
εἰ γὰρ καὶ τὰ μάλιστα τύχοι τετελεσμένον εἰπῶν,
αὐτὸς ὅμως οὐκ οἶδε· δόκος δ' ἐπὶ πᾶσι τέτυκται.

Ξενοφάνης

E é, de fato, certo que não existiu nem existirá homem
que conhece as coisas dos deuses e todas as coisas de que falo.
Pois certamente se, por ventura, ele proferisse algo perfeito,
apesar disso, ele mesmo não saberia:
tudo não passa de uma rede de conjecturas¹.

Xenófanes

¹ Tradução própria. Mais literalmente, talvez, “a opinião(δόκος) influencia todas as coisas” ou “a opinião enreda todas as coisas”. Mas Hom. *Od.* 8.250 para τεύχω como fazer uma armadilha ou rede.

RESUMO

A maioria dos modelos teóricos, como na mecânica Newtoniana e na eletrostática Coulombiana, está relacionada a equações com derivadas de segunda ordem. Usualmente, parece não haver nenhuma razão *a priori* para não termos derivadas de ordem maior que dois e, no entanto, tais derivadas aparecem apenas raramente em modelos teóricos e, em geral, estão associadas com alguma expansão perturbativa. Dessa forma, há um interesse conceitual em compreender problemas de derivadas de ordem superior. Neste trabalho, estudamos um dos modelos mais simples de derivada de ordem superior, o Oscilador de Pais-Uhlenbeck(PU). Empregando os formalismos clássico e quântico, investigamos algumas de suas propriedades. Apesar de sua simplicidade, há alguns problemas em aberto na investigação do oscilador PU e, por isso, o interesse de pesquisa nessa área. Dentre as dificuldades envolvendo o oscilador PU estão a possibilidade de energias arbitrariamente negativas, estados de norma negativa e obstáculos para formular uma mecânica estatística. Nosso estudo é direcionado a rever esses temas com base na literatura recente. Para isso, interpretamos uma lagrangeana que dá origem ao oscilador PU. Discutimos problemas inerentes à quantização desse oscilador. Investigamos, ainda, a possibilidade de estabelecer um modelo mecânico-estatístico, baseado nas equações de Langevin e Fokker-Planck de dois osciladores acoplados e extraímos algumas propriedades importantes do sistema. Na tentativa de produzir um trabalho o mais auto-contido possível, começamos com uma apresentação sobre osciladores acoplados, passamos pelo formalismo de Ostrogradsky para lagrangeanas com derivadas de ordem maior que dois, pela quantização baseada nesse formalismo e concluímos com uma discussão sobre a aplicabilidade das equações de Langevin e de Fokker-Planck para o oscilador PU.

Palavras-chaves: Oscilador de Pais-Uhlenbeck. Formalismo de Ostrogradsky. Derivadas superiores.

ABSTRACT

Most theoretical models, such as Newtonian mechanics and Coulombian electrostatics, are related to equations with second order derivatives. Usually, it appears there is no a priori reason for not having derivatives of order greater than two, and yet such derivatives appear only rarely in theoretical models and are generally associated with some perturbative expansion. Therefore, there is a conceptual interest in understanding problems of higher order derivatives. In this work, we study one of the simplest models of higher-order derivative, the Pais-Uhlenbeck Oscillator (PU). Using both the classical and the quantum formalisms, we investigate some of its properties. Despite its simplicity, there are some open issues in the investigation of the PU oscillator and, thus, research interest in this area. Some of the difficulties involving the PU oscillator are the possibility of arbitrarily negative energy, states of negative norm and obstacles to the formulation of a statistical mechanics. Our study is directed to review these themes based on existing recent literature. With this goal, we interpreted one Lagrangian that gives origin to the PU oscillator. We discuss problems inherent in the quantization of this oscillator. We also investigated the possibility of establishing a mechanical statistical model, based on the Langevin and Fokker-Planck equations of two coupled oscillators, and extracted some important properties of the system. In an attempt to produce as self-contained a work as possible, we begin with a presentation on coupled oscillators, followed by the Ostrogradsky formalism for Lagrangeans with derivatives of order greater than two, by quantization based on this formalism, and we conclude with a discussion about the applicability of Langevin and Fokker-Planck equations for the PU oscillator.

Key-words: Pais-Uhlenbeck oscillator. Ostrogradsky formalism. Higher derivatives.

Sumário

Introdução	9
1 O formalismo clássico e o oscilador clássico de Pais-Uhlenbeck	13
1.1 Tratamento elementar de dois osciladores acoplados	13
1.2 Formalismo de Ostrogradsky	19
1.2.1 Derivada temporal de primeira ordem	20
1.2.2 Derivada temporal de segunda ordem	21
1.2.3 O oscilador com um termo não-harmônico	23
1.2.4 Generalização para derivadas de ordem N	25
1.2.5 Algumas implicações da instabilidade de Ostrogradsky	27
1.3 O tratamento clássico para osciladores acoplados	29
1.3.1 O oscilador de Pais-Uhlenbeck de quarta ordem	29
1.3.2 O oscilador de Pais-Uhlenbeck de ordem $2N$	32
2 O formalismo quântico e a quantização do oscilador de Pais-Uhlenbeck	35
2.1 A mecânica quântica de um oscilador harmônico simples	35
2.2 A quantização canônica do oscilador de Pais-Uhlenbeck com derivada de se- gunda ordem	37
2.3 Alternativas à quantização canônica do oscilador de Pais-Uhlenbeck	42
3 Considerações sobre uma mecânica estatística do oscilador de Pais-Uhlenbeck	46
3.1 Equações de Langevin e de Fokker-Planck	46
3.2 Dois osciladores acoplados	50
3.3 O oscilador de Pais-Uhlenbeck	57
4 Conclusão	62
5 Referências	65
APÊNDICE A Introdução às equações de Langevin e Fokker-Planck	70
A.1 A função característica da equação de Langevin e a equação de Fokker-Planck	70
A.2 A equação de Fokker-Planck com N variáveis	71

A.3 Dinâmica de momentos 72

Introdução

Como é sabido, a maioria dos modelos teóricos, como na mecânica Newtoniana e na eletrostática Coulombiana, está relacionada a equações com derivadas de segunda ordem. Não há, porém, nenhuma razão *a priori* para não termos derivadas de ordem maior que dois. No entanto, tais derivadas aparecem apenas raramente em modelos teóricos e, em geral, estão associadas com alguma expansão perturbativa. De uma maneira geral, existe um interesse conceitual em compreender problemas de derivadas de ordem superior. Dentro desse contexto, o oscilador de Pais-Uhlenbeck(PU)[1] é um dos modelos mais simples de derivadas de ordem superior.

Além do interesse conceitual, há interesse prático nas derivadas de ordem superior, como, por exemplo, na gravitação[2-11] e na teoria quântica de campos[12, 13]. Esse interesse se verifica devido ao fato de as derivadas de ordem superior surgirem naturalmente como correções efetivas a candidatas a teorias fundamentais, como teoria de cordas[3], gravitação quântica[15] e geometria não comutativa[16]. Vale ressaltar que o estudo de derivadas de ordem superior em gravitação, embora fuja ao tema do presente trabalho, é de especial interesse teórico, pois a gravidade $R + R^2$ é renormalizável, mas, por outro lado, a gravidade descrita pela ação de Einstein-Hilbert não é, em que R é o escalar de curvatura[2, 3, 9]. Em geral, com derivadas de ordem superior, obtém-se uma melhor convergência nos diagramas de Feynman[13]. No entanto, a teoria de derivadas de ordem superior enfrenta a instabilidade de Ostrogradsky[17], assunto a ser discutido no capítulo 1, embora as referências [4-6] tenham demonstrado que o oscilador de Pais-Uhlenbeck clássico e interagente é estável para um intervalo de dados iniciais. É importante notar como o oscilador de Pais-Uhlenbeck, um sistema de quarta ordem com derivadas em relação ao tempo, pode ser conectado com um sistema de dois osciladores acoplados.

Apesar de sua simplicidade, o oscilador PU apresenta alguns problemas em aberto e, por isso, o interesse de pesquisa nessa área. Ao quantizarmos canonicamente esse oscilador clássico, percebemos que surgem estados com energia negativa, o que leva a um decaimento inevitável do vácuo quântico. No entanto, esses estados podem ser quantizados de uma maneira que evita a instabilidade, introduzindo norma negativa[1] e, no contexto de campos, a partícula resultante é chamada de *ghost* na literatura. A presença do *ghost* impede que a teoria seja interpretada usando a teoria quântica unitária, mas uma interpretação consistente talvez ainda seja possível[9]. De

maneira geral, é possível lidar com a presença de tais estados pelo menos de duas formas: i) muitos trabalhos[3, 4, 18-20] tratam de remover tais *ghosts* do espectro energético da teoria com derivada de ordem superior, notavelmente por meio de condições de contorno não-triviais; ii) estados de normas negativas podem não ser tão perigosos se todos os resultados mensuráveis de um experimento forem apenas probabilidades positivas e que não excedam a unidade[21]. No entanto, uma interpretação consistente e uma maneira geral de lidar com os estados de norma negativa não foram obtidas.

O objetivo deste trabalho será tratar o oscilador PU clássico de forma detalhada e, depois, aplicar a quantização para entender melhor o surgimento e existência desses estados espúrios com norma negativa (e o *ghost* associado) e, por fim, discutir aspectos relacionados à mecânica estatística. Para isso, tentaremos interpretar melhor a lagrangeana que deu origem ao oscilador PU. Investigaremos ainda a tentativa de estabelecer um modelo estatístico (baseado nas equações de Langevin e Fokker-Planck) de dois osciladores acoplados e extrairemos algumas propriedades importantes do sistema. Há um outro problema no processo de quantização usual que focaremos: o limite clássico do oscilador quântico não necessariamente coincide com o oscilador clássico inicial. Dito de outra forma, o limite quântico não é a mecânica clássica e, como sabemos, ao tratar de mecânica quântica de baixas energias, é conveniente obter o limite semiclássico.

Além disso, recentemente, uma nova forma de quantizar teorias com derivadas de ordem superior foi proposta, a saber, tratando a teoria como uma teoria complexa e desenvolvendo o oscilador de Pais-Uhlenbeck complexo. Não nos utilizaremos dessa nova proposta, mas convidamos o leitor interessado a ler a referência [22] e as referências contidas nela. Também podemos citar que há bastante interesse no sistema de osciladores PU emaranhados e sua aplicação no contexto da holografia e do cálculo da entropia de emaranhamento em teorias de campo conforme [23-25]. O leitor interessado pode encontrar uma revisão na referência [26].

Talvez seja importante explicar algo: em algum sentido, poderíamos supor que a não-existência de teorias de derivadas de ordem superior se devesse simplesmente ao fato de ignorarmos termos de ordem superior de uma expansão em série (por exemplo, quando expandimos em série de Taylor em torno de um ponto de equilíbrio, mantemos até segunda ordem. Caso mantivéssemos até quarta ordem teríamos termos de derivadas de ordem superior. No entanto, tais termos seriam dominados pelos termos de ordem dois e a contribuição seria negligenciável). Conceitualmente, portanto, estamos preocupados com teorias em que os termos de ordem supe-

rior apareçam naturalmente. No caso do oscilador PU, objeto de estudo do presente trabalho, a derivada quártica surgirá diretamente da escolha da lagrangeana, portanto, não será um termo perturbativo. Assim, uma correta descrição física do modelo deve encontrar uma interpretação válida para os termos de ordem superior: eles devem representar alguma característica necessária do modelo do oscilador PU. Se o modelo PU for aplicado para resolver alguma situação física (como, por exemplo, no caso de dois osciladores acoplados), a derivada de ordem quarta deve ser convenientemente interpretada.

Em particular, a instabilidade de Ostrogradsky não é suprimida, em geral, pelo *cutoff* Λ de uma teoria efetiva. No entanto, existem casos em que a instabilidade é suprimida, como discutido nas referências [27,28], em que a teoria efetiva emergente é saudável e as derivadas superiores (pelo menos no limite de validade da escala) podem ser interpretadas fisicamente. A solução reside no fato que, para energias acima de Λ , se a teoria efetiva tiver derivadas superiores, precisamos considerar novos termos que podem cancelar a partícula *ghost*. Para energias abaixo de Λ , embora desconsideremos esses termos na lagrangeana, temos liberdade para “ignorar” a instabilidade e, assim, a teoria é saudável. O problema é que nem sempre pode-se escrever termos que cancelem o *ghost*, ou seja, nem todas as teorias de derivada superior podem ser pensadas como teorias de campo efetivo.

Chamamos a atenção para isso, pois trataremos um modelo de dois (depois generalizaremos para $2N$) osciladores acoplados. Resolveremos o problema de imediato como é comum na física básica e, depois, faremos uma substituição de variável para reduzir o sistema de duas equações para uma equação de ordem superior. Embora, a princípio, ambas descrições pareçam equivalentes, há algumas sutilezas no tratamento físico nos dois casos. A existência dessas sutilezas implica nos problemas da existência de estados de normas negativas que aparecem no tratamento quântico do oscilador PU.

Neste trabalho, começaremos com uma discussão elementar de osciladores acoplados e, a seguir, com o formalismo de Ostrogradsky²[17], aplicando-o ao oscilador quártico³ (PU). Veremos que uma maneira ingênua de resolver o problema (usando um sistema de dois osciladores acoplados) encontra uma dificuldade no limite em que as frequências de oscilação são

² Mikhail Vasilyevich Ostrogradsky (1801-1862) foi um matemático e físico russo. Contribuiu especialmente aos campos de cálculo variacional, teoria de números e integração de funções algébricas, entre outros. Uma curiosidade sobre ele: enquanto membro da Academia de Ciência de São Petersburgo, ele recebeu o trabalho de N. I. Lobachevsky na geometria não-euclidiana (a geometria hiperbólica), mas rejeitou-o[29]

³ O termo quártico é empregado neste texto no sentido de derivada de quarta ordem no tempo e não como uma teoria contendo um termo não linear de potência igual a quatro.

iguais, fato que fica claro ao aplicarmos o procedimento de quantização canônica ao oscilador PU. Nesse caso, surgirão estados de energia negativa, como comentado anteriormente, que não são facilmente tratados (em particular, o limite clássico da quantização não necessariamente recupera o oscilador harmônico não-interagente, como esperaríamos). Finalmente, investigaremos a possibilidade de um tratamento estatístico do oscilador PU clássico por meio das equações de Langevin e Fokker-Planck. Assim como nas investigações das vertentes clássica e quântica, verificamos que dificuldades são manifestadas no estudo da mecânica estatística do oscilador PU.

Ademais, numa tentativa de produzir um trabalho o mais auto-contido possível, fornecemos, nos apêndices, introduções às ferramentas utilizadas ao longo do trabalho: o apêndice *A* é dedicado a certas passagens no cálculo que surgem no capítulo 2. O apêndice *B* refere-se às equações de Langevin e de Fokker-Planck, utilizadas no capítulo 3, com a generalização para N variáveis. Como uma nota final à introdução, uma tese recentemente apresentada (referência [30], em italiano) contém uma revisão bastante pedagógica do formalismo de Ostrogradsky e de teorias de ordem superior.

1 O formalismo clássico e o oscilador clássico de Pais-Uhlenbeck

Este capítulo será dedicado ao estudo do formalismo canônico clássico com aplicação a osciladores. Embora seja um trabalho preparatório para o tratamento quântico, trata-se de um capítulo importante, porque, como comentado na introdução deste trabalho, é útil que o tratamento quântico, no limite de baixas energias, coincida com o tratamento clássico, se possível. Para que possamos fazer uma comparação e para nos auxiliar na interpretação física, entendemos que seja conveniente entender o problema de dois osciladores acoplados classicamente (e, depois, generalizar para $2N$ osciladores acoplados).

Dito isso, desenvolveremos, primeiramente, um tratamento elementar de dois osciladores clássicos acoplados, tanto como uma motivação teórica quanto como uma forma de estabelecer a notação utilizada ao longo do nosso trabalho, em particular no terceiro capítulo. Feitas essas observações, investigaremos o formalismo de Ostrogradsky. Embora não façamos uso dele no tratamento clássico, ele é importante no tratamento quântico do problema em questão. A versão que trataremos aqui é a de teoria clássica e, depois, usaremos esses resultados para tentar fazer uma versão do formalismo adequada à teoria quântica.

1.1 Tratamento elementar de dois osciladores acoplados

Antes de considerar osciladores acoplados, relembremos rapidamente o caso de um único oscilador. Assumiremos que o oscilador harmônico simples tenha massa m e frequência angular ω . A lagrangeana é dada por

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \quad (1.1)$$

A equação de movimento (veja equação (1.35)) e a sua solução geral são, respectivamente,

$$\ddot{x}(t) = -\omega^2x(t) \quad \implies \quad x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{\dot{x}_0}{\omega} \sin(\omega t), \quad (1.2)$$

em que $x_0 = x(0)$ e $\dot{x}_0 = \dot{x}(0)$ são as condições iniciais. As variáveis canônicas desse sistema são

$$X = x, \quad P = m\dot{x} \quad \implies \quad V(X, P) = \frac{P^2}{m}. \quad (1.3)$$

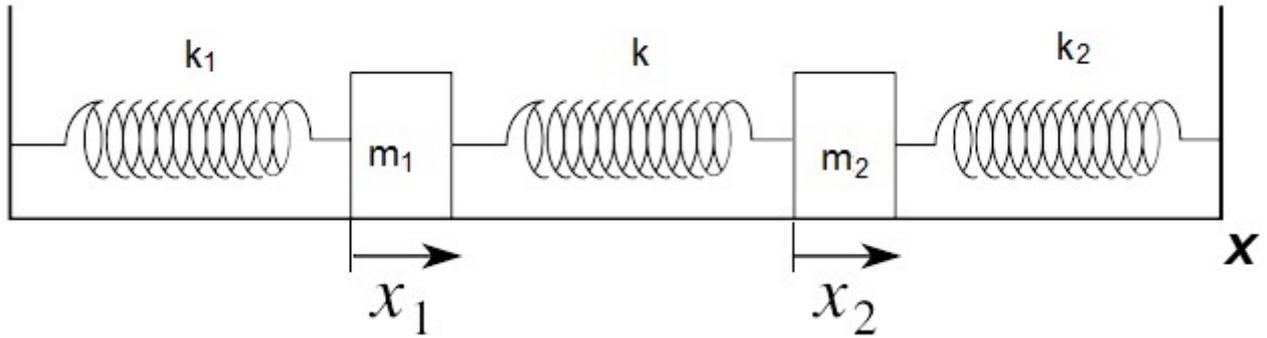


Figura 1: Sistema de dois osciladores acoplados.

Assim, nas variáveis canônicas, a hamiltoniana (veja a equação (1.42)) se resume a

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2. \quad (1.4)$$

Como H é quadrática em X e P , a hamiltoniana tem um mínimo $H_{min} = 0$.

Passamos, agora, ao caso de dois osciladores acoplados. Um dos motivos para este tratamento introdutório e elementar desse caso é que esse sistema apresenta interesse teórico direto. De fato, não apenas é um dos sistemas físicos de maior aplicação em diversos modelos, como um entendimento sólido deste sistema é de interesse desta pesquisa, já que diversas vezes voltaremos a ele, seja como um limite desejado, seja como um sistema em que os formalismos desenvolvidos possam ser aplicados imediatamente.

Partimos do sistema de dois osciladores acoplados como mostrado na figura 1. A lagrangeana desses dois osciladores acoplados é

$$L = \frac{m_1 \dot{x}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{x}_2^2}{2} - \left[\frac{1}{2}k_1 x_1^2 + \frac{1}{2}k_2 x_2^2 + \frac{1}{2}k(x_2 - x_1)^2 \right]. \quad (1.5)$$

A partir dessa lagrangeana, podemos deduzir as equações de movimento do sistema:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 &= -k_1 x_1 + k(x_2 - x_1) = -(k_1 + k)x_1 + kx_2, \\ m_2 \ddot{x}_2 &= -k_2 x_2 + k(x_1 - x_2) = -(k_2 + k)x_2 + kx_1, \end{aligned} \quad (1.6)$$

ou ainda, escrevendo estas equações de uma da forma mais usual

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 + (k_1 + k)x_1 - kx_2 &= 0, \\ m_2 \ddot{x}_2 + (k_2 + k)x_2 - kx_1 &= 0. \end{aligned} \quad (1.7)$$

A forma mais comum de resolver o sistema (1.7) é assumindo que o movimento tem um comportamento oscilatório, já que ambos os osciladores são harmônicos no regime desacoplado.

Dessa forma, supomos soluções da forma

$$\begin{aligned}x_1(t) &= A_1 e^{i\omega t}, \\x_2(t) &= A_2 e^{i\omega t}.\end{aligned}\tag{1.8}$$

Substituindo essas funções-teste em (1.7), estabelecemos as equações

$$\begin{aligned}(k_1 + k - m_1\omega^2)A_1 - kA_2 &= 0, \\(k_2 + k - m_2\omega^2)A_2 - kA_1 &= 0.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Para termos soluções não triviais (que são desinteressantes fisicamente, já que, nesses casos, teríamos $A_1 = A_2 = 0$), impomos a seguinte condição sobre o determinante de (1.9)

$$\det \begin{vmatrix} k_1 + k - m_1\omega^2 & -k \\ -k & k_2 + k - m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0.\tag{1.10}$$

Calculando o determinante, obtemos

$$\begin{aligned}\det \begin{vmatrix} k_1 + k - m_1\omega^2 & -k \\ -k & k_2 + k - m_2\omega^2 \end{vmatrix} &= m_1 m_2 \omega^4 - [m_1(k_2 + k) + m_2(k_1 + k)] \omega^2 + \\ &+ (k_1 + k)(k_2 + k) - k^2 = 0,\end{aligned}\tag{1.11}$$

que é um polinômio biquadrático em ω . Dessa forma, podemos escrever

$$\begin{aligned}\omega^2 &= \frac{1}{2m_1 m_2} \left[(k_2 + k)m_1 + (k_1 + k)m_2 \right. \\ &\quad \left. \pm \sqrt{[(k_2 + k)m_1 + (k_1 + k)m_2]^2 - 4m_1 m_2 [(k_1 + k)(k_2 + k) - k^2]} \right].\end{aligned}\tag{1.12}$$

A equação (1.12), por ser relativamente extensa e conter vários parâmetros, não é de tão fácil interpretação imediata. Logo, o modo mais comum de efetuar essa tarefa é tomar algum caso limite bem definido fisicamente como, por exemplo, $k = 0$, que é equivalente a desacoplar o sistema. Nesse caso, a equação pode ser escrita como

$$\omega^2 = \frac{1}{2m_1 m_2} \left[(k_2 m_1 + k_1 m_2) \pm \sqrt{(k_2 m_1 + k_1 m_2)^2 - 4m_1 m_2 k_1 k_2} \right].\tag{1.13}$$

Expandindo o radicando e reagrupando os termos, encontramos

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k_1}{m_1} + \frac{k_2}{m_2} \pm \left| \frac{k_1}{m_1} - \frac{k_2}{m_2} \right| \right].\tag{1.14}$$

Suponhamos agora, sem perda de generalidade¹, que $\frac{k_1}{m_1} \geq \frac{k_2}{m_2}$. Portanto,

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k_1}{m_1} + \frac{k_2}{m_2} \pm \left(\frac{k_1}{m_1} - \frac{k_2}{m_2} \right) \right],\tag{1.15}$$

¹ Não perdemos generalidade já que, dado um sistema físico qualquer de osciladores acoplados, só precisamos checar qual das condições $k_1 m_2 \geq k_2 m_1$ ou $k_2 m_1 \geq k_1 m_2$ é verdadeira e escolher essa na equação (1.7). Sempre é possível fazer essa escolha.

isto é,

$$\omega^2 = \omega_{10}^2, \quad \omega_{10} = \sqrt{\frac{k_1}{m_1}}, \quad (1.16)$$

ou

$$\omega^2 = \omega_{20}^2, \quad \omega_{20} = \sqrt{\frac{k_2}{m_2}}. \quad (1.17)$$

São essas as soluções para o caso desacoplado, isto é, dois osciladores harmônicos independentes, como gostaríamos. Esses resultados mostram que os ω 's obtidos da equação (1.12) são correções das frequências angulares (1.16) e (1.17), a depender do valor da constante de acoplamento k .

Retornando à equação (1.18), expandindo e reagrupando termos comuns, obtemos

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k_2 + k}{m_2} + \frac{k_1 + k}{m_1} \pm \sqrt{\left[\frac{k_2 + k}{m_2} - \frac{k_1 + k}{m_1} \right]^2 - \frac{4k^2}{m_1 m_2}} \right]. \quad (1.18)$$

Podemos substituir as quatro raízes dadas por (1.18) no sistema (1.9), resolvê-lo para A_1 e A_2 e, dessa forma, obtermos a solução geral. Como essa solução se distancia do nosso foco no momento, postergaremos esse resultado para o final da seção.

Uma outra forma de se pensar para investigar o mesmo sistema seria, partindo da equação (1.7), transformar o sistema de duas equações de segunda ordem em uma única equação de quarta ordem. Para tal, derivamos a primeira equação de (1.7) duas vezes em relação ao tempo para obter

$$m_1 \ddot{\ddot{x}}_1 = -(k_1 + k)\ddot{x}_1 + k\ddot{x}_2. \quad (1.19)$$

Podemos utilizar a segunda equação de (1.7) para substituir \ddot{x}_2 em (1.19). Dessa forma,

$$m_1 \ddot{\ddot{x}}_1 = -(k_1 + k)\ddot{x}_1 - \frac{k(k_2 + k)}{m_2}x_2 + \frac{k^2}{m_2}x_1. \quad (1.20)$$

Ou ainda, isolando o termo de kx_2 da primeira equação de (1.7), podemos escrever

$$m_1 \ddot{\ddot{x}}_1 = -(k_1 + k)\ddot{x}_1 - \frac{k_2 + k}{m_2} [m_1 \ddot{x}_1 + (k_1 + k)x_1] + \frac{k^2}{m_2}x_1, \quad (1.21)$$

que pode ser rearranjado como

$$m_1 \ddot{\ddot{x}}_1 = - \left[(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2} \right] \ddot{x}_1 - \left[\frac{(k_2 + k)(k_1 + k)}{m_2} - \frac{k^2}{m_2} \right] x_1. \quad (1.22)$$

Note que se não houvesse o termo com $\ddot{\ddot{x}}$, a equação resultante seria formalmente equivalente a de um oscilador harmônico. Nesse sentido, é comum denominar o termo com $\ddot{\ddot{x}}$ de não-harmônico.

Inicialmente, visando comparar com o sistema (1.7), podemos analisar o caso em que $k = 0$ na equação (1.18), que corresponde ao caso desacoplado. Isso posto,

$$m_1 \ddot{x}_1 = - \left[k_1 + \frac{m_1 k_2}{m_2} \right] \ddot{x}_1 - \frac{k_1 k_2}{m_2} x_1. \quad (1.23)$$

Assumindo uma solução oscilatória da forma $x_1(t) = A_1 e^{i\omega t}$ e dividindo por m_1 , verificamos que

$$\left(\omega^4 - \left[\frac{k_1}{m_1} + \frac{k_2}{m_2} \right] \omega^2 + \frac{k_1 k_2}{m_1 m_2} \right) A_1 = 0. \quad (1.24)$$

Portanto, desconsiderando a solução trivial $A_1 = 0$, chegamos à

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k_1}{m_1} + \frac{k_2}{m_2} \pm \left| \frac{k_1}{m_1} - \frac{k_2}{m_2} \right| \right], \quad (1.25)$$

que é a equação (1.14). Assim, reobtemos as equações (1.16) e (1.17).

Todavia, no caso desacoplado, devemos ter apenas um oscilador correspondente a x_1 , aquele com $\omega^2 = \frac{k_1}{m_1}$. Entretanto, na equação com \ddot{x} aparece uma frequência que não deveria estar presente, a saber, $\omega^2 = \frac{k_2}{m_2}$. Esse é um problema sutil que surge nessa forma de resolver o sistema acoplado: qualitativamente, ao aumentarmos a ordem de derivadas do sistema, pensamos no sistema como um todo, mas com um enfoque especial para uma das variáveis. Dito de outra forma, a motivação de realizarmos as substituições descritas pelas equações (1.19)-(1.22) é encontrar uma equação com derivadas superiores mas que só dependa de uma variável (no caso da equação (1.22), x_1 e suas derivadas). Assim, há dois problemas: o primeiro é que nada no sistema original indicaria a necessidade de favorecer um oscilador ou o outro; o segundo, que relaciona-se ao primeiro, é que a solução, usando o sistema de equações acopladas, é perfeitamente simétrico, enquanto essa simetria parece ser quebrada no caso da equação com derivadas de ordem superior. Portanto, existe algum tipo de singularidade no caso $k = 0$.

Voltando ao caso geral em que $k \neq 0$, podemos, ao assumir uma solução oscilatória da forma $A_1 e^{i\omega t}$ para a equação (1.22), verificar que (se $A_1 \neq 0$)

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k_2 + k}{m_2} + \frac{k_1 + k}{m_1} \pm \sqrt{\left[\frac{k_2 + k}{m_2} - \frac{k_1 + k}{m_1} \right]^2 - \frac{4k^2}{m_1 m_2}} \right], \quad (1.26)$$

que é exatamente a equação (1.18). Isso parece indicar que, de fato, as duas formas de resolver o sistema descrito pela lagrangeana (1.5) são equivalentes se $k \neq 0$. Nesse contexto de comparação entre as duas maneiras de resolver o sistema, é de grande valor para a presente pesquisa comparar as condições iniciais no caso geral em que $k \neq 0$ para verificar a possível equivalência, já que introduzimos uma derivada de quarta ordem na solução alternativa do sistema.

Sendo um sistema de duas equações com derivadas de segunda ordem, o sistema (1.7) necessita de quatro condições iniciais arbitrárias: $x_1(0)$, $\dot{x}_1(0)$, $x_2(0)$ e $\dot{x}_2(0)$. No caso da equação com derivada de ordem superior, as quatro condições iniciais são

$$\begin{aligned} x_1(0), & & \dot{x}_1(0), \\ \ddot{x}_1(0) = -\frac{k_1+k}{m_1}x_1(0) + \frac{k}{m_1}x_2(0), & & \ddot{x}_1(0) = -\frac{k_1+k}{m_1}\dot{x}_1(0) + \frac{k}{m_1}\dot{x}_2(0), \end{aligned} \quad (1.27)$$

em que se empregou a primeira equação de (1.7) para se obter $\ddot{x}_1(0)$ e $\ddot{x}_1(0)$. Entretanto, mais uma vez, aparecem dificuldades no caso $k = 0$. De fato, quando $k = 0$, as equações (1.27) fornecem

$$\begin{aligned} \ddot{x}_1(0) &= -\frac{k_1}{m_1}x_1(0), \\ \ddot{x}_1(0) &= -\frac{k_1}{m_1}\dot{x}_1(0), \end{aligned} \quad (1.28)$$

mostrando que as condições iniciais $\ddot{x}_1(0)$ e $\ddot{x}_1(0)$ dependem exclusivamente de $x_1(0)$ e $\dot{x}_1(0)$.

Passemos agora às soluções das equações (1.7) e (1.22). Como vimos que as frequências são exatamente as mesmas, a solução dessas equações, no que se refere à variável $x_1(t)$, é

$$x_1(t) = A_1 \cos \omega_1 t + B_1 \sin \omega_1 t + A_2 \cos \omega_2 t + B_2 \sin \omega_2 t, \quad (1.29)$$

em que ω_1^2 e ω_2^2 correspondem aos dois ω^2 's exibidos na equação (1.26). Mais precisamente,

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{k_2+k}{m_2} + \frac{k_1+k}{m_1} + \sqrt{\left[\frac{k_2+k}{m_2} - \frac{k_1+k}{m_1} \right]^2 - \frac{4k^2}{m_1 m_2}} \right]}, \\ \omega_2 &= \sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{k_2+k}{m_2} + \frac{k_1+k}{m_1} - \sqrt{\left[\frac{k_2+k}{m_2} - \frac{k_1+k}{m_1} \right]^2 - \frac{4k^2}{m_1 m_2}} \right]}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Por sua vez, as constantes de integração A_1, B_1, A_2, B_2 devem ser ajustadas usando as equações (1.27), ou seja, devemos ter

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= x_1(0), & \omega_1 B_1 + \omega_2 B_2 &= \dot{x}_1(0), \\ -\omega_1^2 A_1 - \omega_2^2 A_2 &= \ddot{x}_1(0), & -\omega_1^3 B_1 - \omega_2^3 B_2 &= \ddot{x}_1(0). \end{aligned} \quad (1.31)$$

Resolvendo essas equações para as constantes de integração, verificamos que

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\omega_2^2 x_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \\ A_2 &= -\frac{\omega_1^2 x_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \\ B_1 &= \frac{\omega_2^2 \dot{x}_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_1 (\omega_2^2 - \omega_1^2)}, \\ B_2 &= -\frac{\omega_1^2 \dot{x}_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2 (\omega_2^2 - \omega_1^2)}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Agora, ao invés de continuar considerando a situação geral, $k \neq 0$, nos restringiremos ao caso particular $k = 0$, que tem-se mostrado peculiar até o momento. Como vimos, nesse caso, as condições iniciais não podem ser quaisquer devido as condições impostas por (1.28). Usando os vínculos nas condições iniciais (1.28) nas equações (1.32), constatamos que

$$\begin{aligned} A_1 &= x_1(0), & A_2 &= 0, \\ B_1 &= \frac{\dot{x}_1(0)}{\omega_{10}}, & B_2 &= 0. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Consequentemente, demonstramos que

$$x_1(t) = x_1(0) \cos \omega_{10}t + \frac{\dot{x}_1(0)}{\omega_{10}} \sin \omega_{10}t. \quad (1.34)$$

Este último resultado é justamente a solução de um único oscilador harmônico, equação (1.2). Com isso, vemos que a dificuldade antes apresentada com o caso limite $k = 0$ não mais está presente, já que a contribuição do segundo oscilador harmônico não se faz presente depois de empregarmos os vínculos nas condições iniciais (1.28). Passaremos agora ao desenvolvimento do formalismo de Ostrogradsky e de sua aplicação para o caso de um oscilador com um termo não-harmônico, além de sua generalização para derivadas de ordem N .

1.2 Formalismo de Ostrogradsky

Há muito tempo, M. V. Ostrogradsky[17] enunciou um teorema sobre lagrangeanas não-degeneradas que, em linguagem moderna, pode ser colocado nos seguintes termos:

Teorema 1. *Uma lagrangeana não-degenerada que dependa de derivadas temporais em ordens superiores a um corresponde a uma hamiltoniana linearmente instável (via transformada de Legendre).*

Esse teorema é utilizado como uma explicação possível para a não-existência de equações diferenciais de ordem maior que dois na descrição de fenômenos físicos[31].

Para demonstrarmos esse teorema e investigar algumas implicações físicas, seguimos a ref. [32], inclusive na notação. Nesse contexto, vamos considerar uma partícula cuja posição é dada por $x(t)$. Eventualmente, trataremos o problema em termos de campos clássicos, mas, nesse primeiro momento, discutiremos o teorema para uma única partícula. Dividiremos o tratamento da partícula em quatro partes: na primeira, vamos utilizar a construção de Ostrogradsky para uma lagrangeana com derivada temporal de primeira ordem. Na segunda, estenderemos a

construção para derivadas temporais de segunda ordem. Na terceira, faremos a generalização para derivadas de ordem N . Por último, comentaremos *en passant* a natureza da instabilidade².

1.2.1 Derivada temporal de primeira ordem

Como é bem conhecido, no caso usual $L = L(x, \dot{x})$, a equação de Euler-Lagrange é dada por

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0 \quad (1.35)$$

ou, alternativamente, por

$$\frac{\partial L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial x} - \dot{x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \ddot{x} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} = 0. \quad (1.36)$$

Quando

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \neq 0, \quad (1.37)$$

L é chamada de não-degenerada e a hipótese (1.37) é chamada de hipótese da não-degenerescência.

Se a lagrangeana for não-degenerada, podemos escrever (1.36) na forma da segunda lei de Newton:

$$\ddot{x} = F(x, \dot{x}), \quad (1.38)$$

cujas soluções podem ser escritas como

$$x(t) = \chi(t, x_0, \dot{x}_0), \quad (1.39)$$

em que $x_0 = x(0)$ e $\dot{x}_0 = \dot{x}(0)$ são as duas condições iniciais. Como há duas condições iniciais, pode-se considerar duas coordenadas, X e P . Usualmente, essas coordenadas, chamadas de canônicas, são escritas como

$$X \equiv x, \quad P \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (1.40)$$

A não-degenerescência (equação (1.37)) possibilita inverter essa última relação, isto é, resolvendo para \dot{x} em função de X e P . Dito de outra forma, podemos empregar uma velocidade $V(X, P)$ ditada pela relação:

$$\left. \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right|_{x=X, \dot{x}=V} = P. \quad (1.41)$$

A hamiltoniana canônica é obtida a partir da transformação de Legendre em \dot{x} :

$$H(X, P) \equiv P\dot{x} - L = PV(X, P) - L(X, V(X, P)). \quad (1.42)$$

² Um comentário mais detalhado da natureza da instabilidade será feito no tratamento quântico.

Se usarmos a condição (1.41) e a equação de Euler-Lagrange (1.35), podemos obter a evolução canônica do sistema como

$$\dot{X} \equiv \frac{\partial H}{\partial P}, \quad (1.43)$$

$$\dot{P} \equiv -\frac{\partial H}{\partial X}. \quad (1.44)$$

De fato,

$$\frac{\partial H}{\partial P} = V + P \frac{\partial V}{\partial P} - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{\partial V}{\partial P} = V, \quad (1.45)$$

$$\frac{\partial H}{\partial X} = P \frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \frac{\partial V}{\partial X} = -\frac{\partial L}{\partial x}, \quad (1.46)$$

em que as equações (1.35) e (1.41) devem ser usadas para obter \dot{P} .

As equações (1.43) e (1.44), conhecidas como equações de Hamilton, mostram que a evolução temporal do sistema pode ser obtida a partir da hamiltoniana H . Quando a lagrangeana não tem dependência temporal explícita, H é uma quantidade conservada, usualmente associada à energia do sistema. Realmente, usando-se a equação (1.42),

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dP}{dt} V + P \frac{dV}{dt} - \frac{\partial L}{\partial X} V - \frac{\partial L}{\partial V} \dot{V} - \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad (1.47)$$

Passamos agora ao caso de uma partícula descrita por $x(t)$ com uma lagrangeana com termos de derivadas temporais de ordem superior a um.

1.2.2 Derivada temporal de segunda ordem

Passemos a considerar agora um sistema em que $L = L(x, \dot{x}, \ddot{x})$ depende de forma não-degenerada de \ddot{x} , isto é,

$$\frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} \neq 0. \quad (1.48)$$

A equação de Euler-Lagrange é, então, dada por

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \frac{d^2}{dt^2} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} = 0. \quad (1.49)$$

A não-degenerescência nos possibilita escrever (1.49) de uma forma que lembra a equação (1.38), embora com a presença de derivadas de ordem superior. A equação (1.49) pode ser escrita como

$$\ddot{\ddot{x}} = F(x, \dot{x}, \ddot{x}, \ddot{\ddot{x}}), \quad (1.50)$$

cuja solução pode ser escrita como

$$x(t) = \chi(t, x_0, \dot{x}_0, \ddot{x}_0, \dddot{x}_0), \quad (1.51)$$

em que $x_0 = x(0)$, $\dot{x}_0 = \dot{x}(0)$, $\ddot{x}_0 = \ddot{x}(0)$ e $\dddot{x}_0 = \dddot{x}(0)$. Como temos quatro condições iniciais, teremos quatro coordenadas (canônicas). Ostrogradsky escolheu-as da seguinte forma:

$$X_1 \equiv x, \quad P_1 \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}}, \quad (1.52)$$

$$X_2 \equiv \dot{x}, \quad P_2 \equiv \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}}. \quad (1.53)$$

A não-degenerescência³, a definição de P_2 e $L = L(\ddot{x}, \dot{x}, x)$ implicam que podemos resolver para \ddot{x} em termos de x , \dot{x} e P_2 , isto é, em termos de X_1 , X_2 e P_2 . Portanto, tem-se uma aceleração $A(X_1, X_2, P_2)$ tal que

$$\left. \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} \right|_{x=X_1, \dot{x}=X_2, \ddot{x}=A} = P_2. \quad (1.54)$$

Cabe ressaltar que a aceleração A não depende de P_1 , P_1 somente será usado para resolver a terceira derivada temporal. A hamiltoniana no contexto da teoria de Ostrogradsky é escrita a partir da transformação de Legendre em $\dot{x} = x^{(1)}$ e $\ddot{x} = x^{(2)}$:

$$H(X_1, X_2, P_1, P_2) \equiv \sum_{i=1}^2 P_i x^{(i)} - L = P_1 X_2 + P_2 A(X_1, X_2, P_2) - L(X_1, X_2, A(X_1, X_2, P_2)). \quad (1.55)$$

Para confirmar que essa escolha de coordenadas canônicas é aceitável, precisamos verificar se a evolução temporal do sistema é dada pela hamiltoniana de Ostrogradsky, pois queremos que a hamiltoniana do sistema esteja ligada à evolução temporal, como no caso usual quando temos derivadas de primeira ordem no tempo. Em especial, queremos identificar a hamiltoniana com a energia do sistema quando a lagrangeana não depender explicitamente do tempo. A evolução temporal é dada por

$$\dot{X}_i \equiv \frac{\partial H}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i \equiv -\frac{\partial H}{\partial X_i}. \quad (1.56)$$

Não é difícil demonstrar que esse conjunto de equações dá a evolução temporal do sistema. No entanto, gostaríamos de chamar atenção para a evolução temporal de P_1 :

$$\dot{P}_1 = -\frac{\partial H}{\partial X_1} = -P_2 \frac{\partial A}{\partial X_1} + \frac{\partial L}{\partial x} + \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} \frac{\partial A}{\partial X_1}. \quad (1.57)$$

³ A hipótese da não-degenerescência é suficientemente geral para que o resultado final seja forte: quando dizemos que uma lagrangeana é não-degenerada, só queremos afirmar que não podemos eliminar \ddot{x} por integração parcial.

Mas $P_2 \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$, logo

$$\dot{P}_1 = \frac{\partial L}{\partial x}, \quad (1.58)$$

e a evolução temporal de P_1 está diretamente conectada à equação de Euler-Lagrange do sistema. Quando a lagrangeana não possuir uma dependência temporal explícita, chamaremos a hamiltoniana de Ostrogradsky coincide de energia do sistema, no sentido de que ela é uma grandeza conservada quando L não depende explicitamente do tempo, como no caso em que $L = L(x, \dot{x})$. A verificação de que H não depende do tempo se L não depender explicitamente de t é similar ao apresentado na equação (1.47).

No entanto, há um problema sério: o primeiro termo da hamiltoniana do sistema, $P_1 X_2$, é linear no momento P_1 . Nenhum sistema dessa forma pode ser estável, pois existirão modos de energia negativa. O problema é que não podemos minimizar a hamiltoniana, já que podem existir momentos negativos. Dito de outra forma, a hamiltoniana não é limitada inferiormente, contendo modos positivos e negativos. Trataremos do caso quântico mais à frente, mas já é possível imaginar que um problema similar surgirá na quantização canônica do sistema. Gostaríamos de chamar a atenção para a generalidade do resultado: este se aplica a toda lagrangeana $L = L(x, \dot{x}, \ddot{x})$ que dependa não-degenerativamente de \ddot{x} , independentemente das especificidades dessa lagrangeana. A seguir, veremos um exemplo em que ocorre esse problema.

1.2.3 O oscilador com um termo não-harmônico

Consideremos o exemplo⁴ de um oscilador que difira do oscilador harmônico simples por um parâmetro adimensional ϵ . A lagrangeana é

$$L = -\frac{\epsilon m}{2\tilde{\omega}^2} \ddot{x}^2 + \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\tilde{\omega}^2}{2} x^2, \quad (1.59)$$

em que introduzimos a notação $\tilde{\omega}$ para não nos confundirmos com o ω do início do capítulo e ϵ é apenas um parâmetro numérico que controla quão diferente esse oscilador é do oscilador harmônico (ou, dito de outra forma, quão “anarmônico” é esse oscilador). Dessa forma, a equação de Euler-Lagrange é

$$0 = \frac{d^2}{dt^2} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial L}{\partial x} = -m \left[\frac{\epsilon}{\tilde{\omega}^2} \ddot{\ddot{x}} + \ddot{x} + \tilde{\omega}^2 x \right] \quad (1.60)$$

e

$$x(t) = A_1 \cos(\omega_1 t) + A_2 \sin(\omega_1 t) + B_1 \cos(\omega_2 t) + B_2 \sin(\omega_2 t) \quad (1.61)$$

⁴ Esse exemplo segue a referência [32], porém com a notação modificada de acordo com o começo do capítulo.

é a solução dessa equação, conforme a equação (1.29). Em termos dos parâmetros $\tilde{\omega}$ e ϵ , as frequências ω_1 e ω_2 (equação (1.26)) podem ser reescritas como

$$\omega_{1,2} \equiv \tilde{\omega} \sqrt{\frac{1 \mp \sqrt{1 - 4\epsilon}}{2\epsilon}}. \quad (1.62)$$

Além disso, comparando a equação (1.22) com as equações (1.53) e denotando por m por m_1 e x por x_1 , podemos relacionar ϵ , $\tilde{\omega}$, k_1 , k_2 , m_1 e m_2 :

$$\frac{m_1}{k_1 + k + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2}} = \frac{\epsilon}{\tilde{\omega}^2}. \quad (1.63)$$

De fato, dividindo a equação (1.22) por $(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2}$ e identificar com a equação (1.53), constatamos que

$$\tilde{\omega}^2 = \frac{\frac{(k_2+k)(k_1+k)}{m_2} - \frac{k^2}{m_2}}{(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2}} \quad (1.64)$$

e

$$\frac{\epsilon}{\tilde{\omega}^2} = \frac{m_1}{(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2}} \quad (1.65)$$

Por sua vez, as constantes A 's e B 's são funções dos valores iniciais do sistema, $x_0, \dot{x}_0, \ddot{x}_0, \ddot{x}_0$ (equação 1.32):

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\omega_2^2 x_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \\ A_2 &= -\frac{\omega_1^2 x_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \\ B_1 &= \frac{\omega_2^2 \dot{x}_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_1 (\omega_2^2 - \omega_1^2)}, \\ B_2 &= -\frac{\omega_1^2 \dot{x}_1(0) + \ddot{x}_1(0)}{\omega_2 (\omega_2^2 - \omega_1^2)}. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Usando os momentos canônicos P_1 e P_2 (1.52)-(1.53), podemos escrever \ddot{x} e \ddot{x} como:

$$P_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} = m\dot{x} + \frac{\epsilon m}{\tilde{\omega}^2} \ddot{x} \quad \Longrightarrow \quad \ddot{x} = \frac{\tilde{\omega}^2 P_1 - m\tilde{\omega}^2 \dot{x}}{\epsilon m}, \quad (1.67)$$

$$P_2 = \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} = -\frac{\epsilon m}{\tilde{\omega}^2} \ddot{x} \quad \Longrightarrow \quad \ddot{x} \equiv A = -\frac{\tilde{\omega}^2 P_2}{\epsilon m}. \quad (1.68)$$

A hamiltoniana, então, pode ser escrita em termos das variáveis canônicas ou das variáveis do espaço de configuração:

$$\begin{aligned} H &= P_1 X_2 + P_2 \ddot{x} - L = P_1 X_2 - \frac{\tilde{\omega}^2}{2\epsilon m} P_2^2 - \frac{m}{2} X_2^2 + \frac{m\tilde{\omega}^2}{2} X_1^2, \\ &= \frac{\epsilon m}{\tilde{\omega}^2} \dot{x} \ddot{x} - \frac{\epsilon m}{2\tilde{\omega}^2} \ddot{x}^2 + \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m\tilde{\omega}^2}{2} x^2. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Por sua vez, ao empregarmos a equação para $x(t)$, equação (1.61), e suas derivadas, verificamos que essa hamiltoniana pode ser expressa, também, em termos das constantes A_1 , A_2 , B_1 e B_2 :

$$H = \frac{m}{2}\sqrt{1 - 4\epsilon\omega_1^2}(A_1^2 + B_1^2) - \frac{m}{2}\sqrt{1 - 4\epsilon\omega_2^2}(A_2^2 + B_2^2). \quad (1.70)$$

Nessa última forma, fica evidente que a hamiltoniana H apresenta dois tipos de modos: modos “+” carregam energia positiva e modos “-” carregam energia negativa. Esse é o problema dos modos de energia negativos comentado anteriormente.

1.2.4 Generalização para derivadas de ordem N

Passemos, agora, para a situação geral em que a lagrangeana $L = L(x, \dot{x}, \ddot{x}, \dots, x^{(N)})$, isto é, é função das primeiras N derivadas de $x(t)$, $x^{(i)} = \frac{d^i x}{dt^i}$. Nesse caso, a equação de Euler-Lagrange é

$$\sum_{i=0}^N \left(-\frac{d}{dt}\right)^i \frac{\partial L}{\partial x^{(i)}} = 0 \quad (1.71)$$

Se essa lagrangeana depende não-degenerativamente da N -ésima derivada $x^{(N)}$,

$$\frac{\partial L}{\partial x^{(N)}} \neq 0, \quad (1.72)$$

então a equação de Euler-Lagrange é linear na $2N$ -ésima derivada $x^{(2N)}$.

Nesse contexto geral, o espaço de fase canônico deve possuir, portanto, $2N$ coordenadas. Ostrogradsky escolheu as variáveis canônicas como

$$X_i \equiv x^{(i-1)}, \quad P_i \equiv \sum_{j=i}^N \left(-\frac{d}{dt}\right)^{(j-i)} \frac{\partial L}{\partial x^{(j)}}. \quad (1.73)$$

A condição de não-degenerescência, equação (1.72), implica é possível escrever $x^{(N)}$ em termos de P_N e dos X_i 's. Dito de outra forma, pode-se considerar uma função $A(X_1, \dots, X_N, P_N)$ tal que

$$\left. \frac{\partial L}{\partial x^{(N)}} \right|_{x^{(i-1)}=X_i, x^{(N)}=A} = P_N. \quad (1.74)$$

Nesse cenário, a hamiltoniana de Ostrogradsky é expressa como

$$H \equiv \sum_{i=1}^N P_i x^{(i)} - L, \quad (1.75)$$

ou seja,

$$H = P_1 X_2 + P_2 X_3 + \dots + P_{N-1} X_N + P_N A - L(X_1, \dots, X_N, A). \quad (1.76)$$

Para confirmar que essa hamiltoniana é a apropriada para o sistema, precisamos demonstrar que (1.76) gera a evolução temporal e, no caso da não-dependência explícita no tempo, H é uma quantidade conservada (a “energia” do sistema). No entanto, antes de nos direcionarmos a isso, gostaríamos de chamar a atenção para o fato de que H é linear nas $N - 1$ entradas, $P_1, P_2, P_3, \dots, P_{N-1}$, o que implica o mesmo problema observado no caso de derivada temporal de segunda ordem. Como existirão tanto modos de energia negativa quanto modos de energia positivo, só pode haver mínimo em relação a P_N . Isso não será demonstrado aqui, mas podemos afirmar que a instabilidade piora⁵ conforme N cresce⁶.

Voltando ao problema da evolução temporal do sistema, as equações de evolução são

$$\dot{X}_i \equiv \frac{\partial H}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i \equiv -\frac{\partial H}{\partial X_i}. \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (1.77)$$

As primeiras $N - 1$ equações para X_i são triviais, pois são a definição de X_{i+1} , isto é,

$$i = 1, \dots, (N - 1) \quad \implies \quad \dot{X}_i = X_{i+1}. \quad (1.78)$$

A evolução para X_N é análoga ao que discutimos para os casos de $N = 1$ e $N = 2$:

$$\dot{X}_N = A + P_N \frac{\partial A}{\partial P_N} - \frac{\partial L}{\partial x^{(N)}} \frac{\partial A}{\partial P_N} = A. \quad (1.79)$$

As equações para P_i , com $i = 2, 3, \dots, N$, conduzem à definição de P_{i-1} :

$$\dot{P}_i = -P_{i-1} - P_N \frac{\partial A}{\partial X_i} + \frac{\partial L}{\partial x^{(i-1)}} + \frac{\partial L}{\partial x^{(N)}} \frac{\partial A}{\partial X_i} = -P_{i-1} + \frac{\partial L}{\partial x^{(i-1)}}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.80)$$

Finalmente, cabe observar que a evolução para P_1 está diretamente ligada à equação de Euler-Lagrange:

$$\dot{P}_1 = -P_N \frac{\partial A}{\partial X_1} + \frac{\partial L}{\partial x} + \frac{\partial L}{\partial x^{(N)}} \frac{\partial A}{\partial X_1} = \frac{\partial L}{\partial x}. \quad (1.81)$$

Assim, a hamiltoniana H escolhida (1.76) gera a evolução temporal desejada do sistema. No caso em que não há dependência explícita do tempo, H coincide com a energia do sistema, no sentido de ser uma grandeza conservada. Concluimos, portanto, que também há instabilidade no caso de derivadas de ordem N . Resta-nos agora discutir sobre a natureza dessa instabilidade para finalizarmos essa seção sobre o formalismo de Ostrogradsky.

⁵ Na próxima seção, explicaremos mais detidamente o que queremos dizer com piorar ou melhorar.

⁶ De qualquer forma, isso pode ser visto intuitivamente: falando de uma maneira bastante informal, como temos mais “entradas” lineares na hamiltoniana teremos, portanto, mais “chances” de valores negativos no espectro de energia.

1.2.5 Algumas implicações da instabilidade de Ostrogradsky

Como acabamos de explicar, a construção de Ostrogradsky conduz a um hamiltoniana de uma teoria de derivada superior não-degenerada que não é limitada inferiormente, ou seja, é instável. Nesta subseção, discutiremos algumas características da instabilidade e implicações para a teoria fundamental. Nesse sentido, transcrevendo a referência [32], há seis pontos principais a serem apresentados:

1. A instabilidade leva a variável dinâmica a uma dependência temporal especial, não a um valor numérico específico.
2. A mesma variável de Ostrogradsky carrega operadores positivos e negativos de criação e aniquilação.
3. Se o sistema instável interagir, então o vácuo físico pode decair numa coleção de excitações positivas e negativas.
4. Se o sistema instável for uma teoria de campo contínuo, a vasta entropia no limite de momento grande vai fazer esse decaimento ser instantâneo.
5. Para sistemas instáveis e interagentes, graus de liberdade com momentos grandes não se desacoplam da física de baixa energia.
6. A imposição de um único vínculo global no funcional de energia não melhora a instabilidade.

Todos esses pontos são importantes mas, como certa vez afirmou Orwell⁷ “todos os animais são iguais, mas alguns são mais iguais que os outros”. Os pontos 2 – 4 serão considerados no tratamento quântico do formalismo de Ostrogradsky. Para a discussão a seguir, vamos nos dedicar aos pontos 1, 5 e 6.

Vamos ao primeiro ponto: instabilidade cinética, considerando a equação (1.69). Para quaisquer valores constantes de $x(t)$, H é limitada inferiormente. No entanto, podemos conseguir energias negativas ao fazer $\dot{x}(t)$ grande e/ou ao fazer $\ddot{x}(t)$ grande, desde que mantenhamos a combinação

$$\frac{1}{2}\dot{x}(t) + \frac{\epsilon}{\tilde{\omega}^2}\ddot{x}(t) \tag{1.82}$$

⁷ A Revolução dos Bichos, 1945.

constante. Isso implica que a instabilidade de Ostrogradsky é um problema cinético, diferente do que estamos acostumados ao resolver problemas relacionados à da energia potencial. Nesse caso, a energia diminui ou aumenta conforme a variável dinâmica se aproxima de um valor especial, em geral quando $x(t)$ é um mínimo ou máximo. Dito de outra forma, não queremos minimizar ou maximizar em relação a $x(t)$ (um problema potencial) e, sim, queremos minimizar ou maximizar em relação às derivadas de $x(t)$ (um problema cinético) sujeitas a certos vínculos como, por exemplo, (1.82).

Vale a pena nos alongarmos um pouco mais no quinto ponto: em geral, não estamos interessados em modos de altas energias em um dado sistema. O motivo disso é que, em geral, tratamos problemas que não dependem explicitamente do tempo, ou seja, H é a energia do sistema e uma constante global que pode ser denotada por H_0 . Agora, tomemos um conjunto de osciladores harmônicos no espaço de fase q,p . Se o i -ésimo oscilador (q_i, p_i) é de energia alta, isso significa que $|p_i|$ deve ser grande em relação aos outros p 's. No entanto, existe um vínculo global para a energia nesse caso, $H = H_0$. Isso significa que, para um determinado oscilador ter alta energia, os outros osciladores devem perder energia. Entretanto, tal arranjo de concentração de energia em alguns osciladores é bastante improvável e, dessa forma, ignoramos os modos de alta energia na maioria dos casos.

O problema é que essa justificativa para o *cutoff* de estados de alta energia não funciona para um sistema com instabilidade de Ostrogradsky, pois podemos excitar os modos de energia negativa para contrabalancear os modos de alta energia (positiva). Pior ainda, contrariamente ao esperado, esses modos de alta energia não se torna irrelevantes, eles tendem a influenciar mais fortemente conforme p se torna maior. De fato, há mais possibilidades de contrabalancear essas energias altas excitando modos com energias suficientemente negativas.

Esse fato tem uma implicação muito profunda para a teoria de Ostrogradsky: esta teria que ser válida em todas as escalas de momento. Assim como em uma teoria clássica tradicional, na qual podemos trabalhar com uma escala de energia mesoscópica e alguns resultados precisam ser explorados na vertente quântica, uma teoria de Ostrogradsky deve ser quantizável para a construção fazer sentido⁸.

Finalmente, tratamos do sexto ponto. Um problema físico com teorias de derivadas

⁸ É claro que a instabilidade deve existir para que possamos excitar modos de energia de sinal oposto, ou seja, a lagrangeana deve ser não-degenerada. Também, isso se refere apenas à construção lógica do formalismo de Ostrogradsky: é uma necessidade lógica que a construção seja válida em todas as escalas de momento. Se isso faz sentido físico ou não, discutiremos mais adiante.

superiores é que a energia de setores do sistema pode decair arbitrariamente para valores muito negativos (a energia total é conservada em muitos casos, como, por exemplo, nas equações (1.69) e (1.70)). Isso reflete o que acabamos de discutir sobre o quinto ponto com respeito aos modos de alta energia. Impor um vínculo global, como, por exemplo, $H = H_0$, não quer dizer que se consiga garantir que a energia seja bem comportada em todos os pontos, mesmo que ela seja conservada globalmente. Portanto, impor um vínculo, quando for o caso, não é suficiente para garantir que a energia seja bem comportada em todo o intervalo.

Assim, terminamos nossa discussão sobre o formalismo de Ostrogradsky clássico. Voltaremos a ele no capítulo 2, quando tentaremos quantizar o formalismo desenvolvido aqui e tratar, também, dos pontos 2 – 4 mencionados anteriormente. A seguir, voltaremos a nos dedicar ao estudo clássico do oscilador PU. Vamos investigar esse problema considerando o formalismo de Ostrogradsky e seguindo a linha de raciocínio presente na referência [34].

1.3 O tratamento clássico para osciladores acoplados

1.3.1 O oscilador de Pais-Uhlenbeck de quarta ordem

Consideremos, agora, a equação de movimento de quarta ordem dada por

$$\ddot{x} + \alpha\dot{x} + \beta x = 0, \quad (1.83)$$

com $x = x(t)$ uma função real. α e β são parâmetros positivos e relacionados a um par de frequências ω_1 e ω_2 . Note que esses ω_1 e ω_2 correspondem às frequências dos osciladores acoplados quando comparamos com os resultados da seção 1.1, em particular a equação (1.12), dadas por

$$\alpha \equiv \omega_1^2 + \omega_2^2, \quad \beta \equiv \omega_1^2 \omega_2^2. \quad (1.84)$$

Além disso, tem-se

$$\alpha = \frac{\omega^2}{\epsilon}, \quad \beta = \frac{\tilde{\omega}^4}{\epsilon}, \quad (1.85)$$

ao compararmos com o exposto na subseção 1.2.3, especialmente equações (1.53) e (1.55). No segundo capítulo, tentaremos obter um sistema quântico unitário e estável⁹, cujo limite clássico é o oscilador PU.

⁹ Isto é, queremos que a hamiltoniana quântica seja hermitiana e limitada inferiormente.

Consistentemente com as equações (1.52), (1.53) e (1.85), sabe-se que a equação de movimento (1.83) pode ser obtida de uma lagrangeana da forma [1,33]

$$L = \frac{\mu}{2}(\ddot{x}^2 - \alpha\dot{x}^2 + \beta x^2), \quad (1.86)$$

em que μ é um parâmetro positivo com dimensão de massa. Poderíamos introduzir uma nova variável y via o vínculo $y = \dot{x}$ e transformar a lagrangeana em uma teoria de derivada de primeira ordem em x e y . Em seguida, aplicar o procedimento de quantização de Dirac para sistemas vinculados [33] e encontrar uma descrição hamiltoniana do oscilador PU. No entanto, como demonstrado na referência [19], a hamiltoniana gerará uma teoria instável ou não-unitária. Vamos voltar a esse ponto no capítulo 2, mas, por ora, discutiremos uma formulação hamiltoniana diferente, partindo da premissa de que existem hamiltonianas diferentes que geram a mesma equação de movimento. Para isso, utilizaremos a argumentação presente na referência [34].

No contexto da referência [34], começa-se com a introdução de uma nova variável w , dada por

$$w \equiv \tau^2(\ddot{x} + \lambda x). \quad (1.87)$$

Por sua vez, τ e λ são parâmetros livres diferentes de zero que poderão ser convenientemente fixados. Para que w e x tenham a mesma dimensão, as dimensões de τ e λ devem ser tempo² e tempo⁻², respectivamente. Podemos usar (1.87) para isolar \ddot{x} e substituir em (1.83) para obtermos um sistema de duas equações de segunda ordem

$$\ddot{x} = \tau^{-2}w - \lambda x \quad (1.88)$$

e

$$\ddot{w} = (\lambda - \alpha)w - \tau^2(\lambda^2 - \alpha\lambda + \beta)x. \quad (1.89)$$

Podemos interpretar (1.88) e (1.89) como as equações de movimento de Newton para um sistema com dois graus de liberdade. Podemos aqui imaginar, por exemplo, um sistema com dois osciladores unidimensionais acoplados. De fato, ao compararmos as equações (1.88) e (1.89) com (1.7), verificamos mais uma vez a conexão entre o oscilador PU com dois osciladores acoplados, após uma identificação de parâmetros. Agora, vamos na direção de obter a formulação hamiltoniana do sistema dinâmico descrito por (1.88) e (1.89). Para isso, vamos impor condições aos parâmetros livres τ e λ e introduziremos parâmetros de massa para cada um dos osciladores, μ_w e μ_x . Ao pensarmos no sistema de equações como as equações de Newton, nas quais os osciladores são sujeitos a forças conservativas, $F = -\nabla V$, deve ser verdade que (1.88)

e (1.89) podem ser escritas como

$$\mu_w \ddot{w} = -\partial_w V \quad (1.90)$$

e

$$\mu_x \ddot{x} = -\partial_x V. \quad (1.91)$$

Procedendo dessa forma, a condição de integrabilidade, $\partial_w \partial_x V = \partial_x \partial_w V$, deve valer. Sabendo quanto vale $\partial_x V$ e $\partial_w V$ das equações (1.90) e (1.91), multiplicamos a equação (1.88) por μ_x e a equação (1.89) por μ_w . A seguir, usando a condição de integrabilidade, podemos encontrar uma equação algébrica de segunda ordem para o parâmetro livre λ :

$$\lambda^2 - \alpha\lambda + \beta + \frac{\mu_x}{\mu_w \tau^4} = 0. \quad (1.92)$$

Ainda seguindo a referência [34], introduziremos dois novos parâmetros:

$$\Omega \equiv \tau^{-1}(4\mu_w^{-1}\mu_x)^{1/4}, \quad \delta \equiv \alpha^2 - 4\beta - \Omega^4 = (\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 - \Omega^4, \quad (1.93)$$

que também serão empregados no capítulo 2. Com isso, podemos escrever as soluções de (1.92) como

$$\lambda = \frac{\alpha \pm \sqrt{\delta}}{2}. \quad (1.94)$$

Devemos sempre ter alguma noção do papel das constantes que estão nessas últimas equações. Podemos empregar, por exemplo, o limite $\mu_x \rightarrow 0$. Nesse caso, teremos $\Omega = 0$ e λ igual a ω_1 ou ω_2 , ou seja, o limite faz sentido físico. Esses “testes de sanidade” são importantes quando lidamos com tantas substituições de variáveis.

A partir dessas duas possibilidades para λ , conseguimos encontrar o potencial V . Realmente, usando as variáveis de momento $p_w \equiv \mu_w \dot{w}$ e $p_x \equiv \mu_x \dot{x}$, conseguimos chegar a uma família de hamiltonianas clássicas:

$$H_\delta = \frac{p_w^2}{2\mu_w} + \frac{p_x^2}{2\mu_x} + \frac{\mu_w}{4}(\alpha \mp \sqrt{\delta})w^2 + \frac{\mu_x}{4}(\alpha \pm \sqrt{\delta})x^2 - \frac{1}{2}\sqrt{\mu_x \mu_w (\alpha^2 - 4\beta - \delta)}wx, \quad (1.95)$$

que, em última instância, é rotulado por τ . Note-se que temos dois termos cinéticos (os termos de momento p ao quadrado), dois termos potenciais (os termos com parâmetro de massa multiplicando w^2 e x^2) e, finalmente, um termo misto, relacionado ao acoplamento dos dois osciladores. Vemos, também, que como não escolhemos o valor de τ , não fixamos Ω e nem o parâmetro δ . Deve estar claro, portanto, que as equações de Hamilton correspondentes aos H_δ 's são, em última análise, equivalentes à equação (1.83) do oscilador PU.

Uma pergunta bastante pertinente seria: existem valores de δ para os quais a quantização de H_δ nos daria um sistema quântico estável e unitário? Essa pergunta será discutida no próximo capítulo, mas adiantamos que teremos de tratar de dois casos distintos, a saber, o caso degenerado ($\omega_1 = \omega_2$) e o caso não-degenerado ($\omega_1 \neq \omega_2$).

1.3.2 O oscilador de Pais-Uhlenbeck de ordem $2N$

Apesar da discussão central dessa dissertação ser de um oscilador PU de quarta ordem, vamos aqui fazer uma breve apresentação do caso de ordem $2N$, com $N = 1, 2, 3, \dots$. Para tal, seguiremos a linha de exposição da referência [1]. A apresentação que se segue será de cunho mais formal e menos detalhada que as seções anteriores. Caso o leitor não tenha interesse nos detalhes da apresentação, sugerimos que vá direto ao comentário posterior à equação (1.113).

Um oscilador PU para derivadas de ordem $2N$ pode ser escrito como

$$F(D)x = 0, \quad D = \frac{d}{dt}, \quad (1.96)$$

em que $F(D)$ é um polinômio de ordem $2N$. Por sua vez, a lagrangeana L correspondente pode ser escolhida como

$$L = -x F(D)x. \quad (1.97)$$

Cabe ressaltar que F é uma função par em relação a seus argumentos. Isso ocorre para que seja garantida a simetria $t \rightarrow -t$, isto é, simetria por inversão temporal. Fato que não ocorre, por exemplo, no caso de um oscilador harmônico amortecido. Em geral, empregaremos $F(D)$ como um polinômio que contém somente potências pares de D . O procedimento para obter a hamiltoniana é, em linhas gerais, aquele discutido anteriormente na seção 1.2. Tal procedimento, em última instância, se reduz a definir as quantidades X_i e P_i que satisfaçam

$$X_i = D^{i-1}x \quad (1.98)$$

e

$$P_i = \frac{\delta S}{\delta(D^i x)}, \quad (1.99)$$

em que $i = 1, 2, \dots, N$, $D^N q$ é a maior derivada de q que ocorre em L e $\frac{\delta S}{\delta x}$ denota a derivada variacional

$$\frac{\delta S}{\delta x} = \frac{\partial L}{\partial x} - D \frac{\partial L}{\partial(Dx)} + D^2 \frac{\partial L}{\partial(D^2x)} - \dots (-1)^N D^N \frac{\partial L}{\partial(D^N x)}. \quad (1.100)$$

Seguindo a equação (1.76), a hamiltoniana é dada por

$$H = P_1 X_2 + P_2 X_3 + \cdots + P_{N-1} X_N + P_N (DX_N) - L. \quad (1.101)$$

Note que DX_N deve ser expresso em termos dos P_i, X_i a partir da equação (1.99) para P_N .

Como estamos considerando em $F(D)$ polinômios finitos (mesmo que N seja muito grande) e apenas potências pares de D , podemos escrever

$$F = \prod_{i=1}^N \left(1 + \frac{D^2}{\omega_i^2}\right), \quad (1.102)$$

em que se considera $\omega_i \neq 0$ para todo i . A seguir, vamos nos restringir apenas ao caso com todas frequências reais e distintas. Na referência [1], define-se as N coordenadas canônicas, X_i , como

$$X_i = \prod_{j=1}^N \left(1 + \frac{D^2}{\omega_j^2}\right) x, \quad (1.103)$$

em que escrevemos Π' representa o produto que exclui o fator $1 + D^2/\omega_i^2$. Tendo em vista que $F(D)$ pode ser escrito na forma (1.102), X_i é dado por (1.103) e o oscilador PU define-se em (1.96), segue que

$$(D^2 + \omega_i^2)X_i = 0. \quad (1.104)$$

Como não há vínculos entre os X_i 's, o número de X_i 's equivale ao número de soluções independentes (dividido por dois) da equação (1.96).

Consideremos, agora, outra lagrangeana alternativa \bar{L} dada por

$$\bar{L} = - \sum_{j=1}^N n_j X_j (D^2 + \omega_j^2) X_j, \quad (1.105)$$

em que os n_j 's são N constantes. Por exemplo, somos livres para fazer essa escolha desde que consigamos fixar as N constantes n_j de tal forma que \bar{L} seja igual a L (equação (1.97)), pois sabemos que duas lagrangeanas são equivalentes se elas diferem por, no máximo, uma derivada temporal de uma função de x e das derivadas de x de ordem menor que a máxima da lagrangeana.

Usando (1.102) e (1.103), podemos escrever

$$\bar{L} = -x \left[\sum_k^N n_k \left\{ \prod_j^N \left(1 + \frac{D^2}{\omega_j^2}\right) \right\}^2 (D^2 + \omega_k^2) \right] x = -x F^2(D) \sum_k^N \frac{n_k \omega_k^2}{1 + \frac{D^2}{\omega_k^2}} x. \quad (1.106)$$

Vemos, portanto, que a igualdade entre \bar{L} a L ocorre desde que

$$\frac{1}{F(D)} = \sum_k^N \frac{n_k \omega_k^2}{1 + \frac{D^2}{\omega_k^2}}. \quad (1.107)$$

Como estamos considerando que as raízes de F são simples¹⁰ e finitas ($\omega_i^2 \neq \omega_j^2$ se $i \neq j$), podemos fazer uma decomposição em frações parciais de F^{-1} com numeradores constantes¹¹.

Dessa forma, temos¹²

$$n_k = \frac{1}{\omega_k^4 F'(-\omega_k^2)}, \quad (1.108)$$

em que

$$F'(-\omega_k^2) = \left. \frac{dF}{dD^2} \right|_{D^2 = -\omega_k^2} \quad (1.109)$$

e, dessa forma, \bar{L} é dinamicamente equivalente a L .

Colocando \bar{L} na forma

$$\bar{L} = \sum n_j [(DX_j)^2 - \omega_j^2 X_j^2], \quad (1.110)$$

conseguimos escrever a hamiltoniana de imediato

$$H = \sum_j \left(\frac{P_j^2}{4n_j} + n_j \omega_j^2 X_j^2 \right). \quad (1.111)$$

Realizando as transformações canônicas

$$P_j \rightarrow P_j (2|n_j|)^{\frac{1}{2}}, \quad X_j \rightarrow X_j (2|n_j|)^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.112)$$

a hamiltoniana pode ser reescrita, finalmente, como

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (-1)^{j-1} (P_j^2 + \omega_j^2 X_j^2). \quad (1.113)$$

Portanto, o oscilador PU de ordem $2N$ pode ser escrito como uma combinação linear de osciladores harmônicos, alguns com energia positiva definida (j ímpar) e alguns com energia negativa definida (j par), mesmo no caso mais simples de raízes finitas, distintas e enumeráveis. Assim, o problema do oscilador de Pais-Uhlenbeck apresentar energia negativa, o qual será também estudado no segundo capítulo, surge até no formalismo clássico.

¹⁰ No sentido de ter apenas multiplicidade $n = 1$. Considere como exemplo $f(z) = (z-1)(z-2)$. $f(z)$ tem uma raiz simples em $z_0 = 1$, mas $g(z) = (z-1)^2$ tem uma raiz de multiplicidade 2 em $z_0 = 1$.

¹¹ Por exemplo (caso $N = 2$), se $F(D) = \left(1 + \frac{D^2}{\omega_1^2}\right) \left(1 + \frac{D^2}{\omega_2^2}\right)$, então, via decomposição em frações parciais, obtemos $\frac{1}{F(D)} = (1 - \omega_1^2/\omega_2^2)^{-1} (1 + D^2/\omega_1^2)^{-1} + (1 - \omega_2^2/\omega_1^2)^{-1} (1 + D^2/\omega_2^2)^{-1}$

¹² Seguindo o exemplo da nota de rodapé anterior e comparando com (1.107), tem-se $n_1 = \frac{1}{\omega_2^2(1-\omega_1^2/\omega_2^2)}$ e $n_2 = \frac{1}{\omega_2^2(1-\omega_2^2/\omega_1^2)}$. Por outro lado, $\frac{1}{\omega_1^4 F'(-\omega_1^2)} = \frac{1}{\omega_1^2(1-\omega_1^2/\omega_2^2)}$ e $\frac{1}{\omega_2^4 F'(-\omega_2^2)} = \frac{1}{\omega_2^2(1-\omega_2^2/\omega_1^2)}$, também fornecem n_1 e n_2 , respectivamente.

2 O formalismo quântico e a quantização do oscilador de Pais-Uhlebenck

Neste capítulo, vamos nos dedicar ao estudo do formalismo quântico do problema do oscilador PU. No capítulo anterior, vimos o formalismo de Ostrogradsky para três casos distintos: derivadas temporais de primeira ordem, derivadas temporais de segunda ordem e a generalização para derivadas de ordem N . Seguiremos um processo similar neste capítulo, no qual tentaremos realizar a quantização canônica da hamiltoniana de Ostrogradsky¹. No entanto, como uma quantização canônica do sistema encontra dificuldades, estas também serão discutidos no capítulo. Na tentativa de construir um trabalho o mais auto-contido possível, começaremos com uma rápida revisão da mecânica quântica de um oscilador harmônico simples, utilizando os operadores de criação e aniquilação.

2.1 A mecânica quântica de um oscilador harmônico simples

Começaremos escrevendo o operador Hamiltoniano de um oscilador harmônico simples:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (2.1)$$

em que m é a massa da partícula, ω é a frequência angular e $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ é o operador momento. Definimos, em seguida, dois operadores não-hermitianos a e a^\dagger :

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right), \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Alternativamente, em termos desses operadores, podemos representar o operador posição e o operador momento:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a), \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a^\dagger - a). \end{aligned} \quad (2.3)$$

¹ Lembramos ao leitor que, no capítulo anterior, discutimos quando a hamiltoniana resultante do formalismo de Ostrogradsky é uma grandeza conservada. Usualmente, identificaremos essa hamiltoniana com a energia. Portanto, pelo menos *a priori*, esperamos poder quantizar canonicamente o sistema.

Os operadores a e a^\dagger , quando aplicados sobre os autoestados de energia, $|n\rangle$, resultam em

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Portanto, a^\dagger adiciona um *quantum* de energia ao sistema, enquanto a remove um *quantum* de energia. Por essa razão, chamamos esses operadores de operadores de criação e aniquilação².

Definimos um operador número N com as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} N &= a^\dagger a, \\ N|n\rangle &= n|n\rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

e podemos escrever as relações de comutação para a , a^\dagger e N :

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a. \quad (2.6)$$

O operador Hamiltoniano, (2.1), pode ser reescrito em termos do operador número:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (2.7)$$

o que implica que os autoestados de \hat{H} são também os autoestados de N . Nesse contexto, para o mínimo no espectro de autovalores da energia (o que equivale a dizer que existe um estado de mínima energia), podemos escrever

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle. \quad (2.8)$$

Além disso, os possíveis valores de n seguem dessa estrutura algébrica e, consistentemente, produzimos um conjunto infinito de autoestados de energia ($n = 0, 1, 2, \dots$) tal que

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (2.9)$$

Para finalizar esta seção, demonstraremos que autoestados arbitrários de energia podem ser expressos em termos de $|0\rangle$:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (2.10)$$

Começamos calculando o valor esperado de aa^\dagger :

$$\langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|([a, a^\dagger] + a^\dagger a)|n\rangle, \quad (2.11)$$

² Enquanto na mecânica quântica não-relativística, geralmente interpretamos esses operadores como levantando ou abaixando estados, no contexto de teorias de campo, é mais útil pensar em criação e aniquilação de partículas.

mas $[a, a^\dagger] = 1$ e $a^\dagger a = N$. Portanto,

$$\langle n | a a^\dagger | n \rangle = \langle n | (N + 1) | n \rangle = n + 1. \quad (2.12)$$

Sabemos, entretanto, que

$$a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n + 1} | n + 1 \rangle \quad (2.13)$$

e, dessa forma, podemos escrever $| n \rangle$ em função de $n - 1$, $n - 1$ em função de $n - 2$ etc.:

$$| n \rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}} | n - 1 \rangle = \frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{n(n-1)}} | n - 2 \rangle = \dots = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} | 0 \rangle. \quad (2.14)$$

Cabe ressaltar ainda que, se tivéssemos um sistema com vários osciladores, poderíamos nos deparar com a hamiltoniana

$$H = \sum_j \left(\frac{\hat{P}_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 \hat{x}_j^2 \right) = \sum_j \hbar \omega_j \left(\hat{N}_j + \frac{1}{2} \right). \quad (2.15)$$

Aqui, $\hat{N}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$ e \hat{a}_j^\dagger e \hat{a}_j são os respectivos operadores de criação e aniquilação do j -ésimo oscilador harmônico que compõe o sistema. Os autovalores e autovetores correspondentes à equação (2.15) são

$$E_{\{n_j\}} = \sum_j \hbar \omega_j \left(n_j + \frac{1}{2} \right) \quad (2.16)$$

com $n_j = 0, 1, 2, \dots$ e

$$|\{n_j\}\rangle = \prod_j |n_j\rangle \quad (2.17)$$

em que $|n_j\rangle = \frac{(a_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} |0\rangle_j$ e $|0\rangle_j$ correspondendo ao estado fundamental do j -ésimo oscilador harmônico.

2.2 A quantização canônica do oscilador de Pais-Uhlenbeck com derivada de segunda ordem

Para realizarmos a quantização canônica e investigar algumas implicações físicas, seguimos as refs. [12], [32] e [34]. Nesse contexto, vamos retornar à equação (1.59). Quando discutimos a instabilidade de Ostrogradsky no capítulo anterior, mostramos que não pode existir um estado fundamental na presença de uma instabilidade. No entanto, podemos definir uma função de onda do vácuo, $\Omega(X_1, X_2)$. Devido à instabilidade, pode haver excitação mínima tanto nos modos de energia positiva quanto nos modos de energia negativa em relação ao vácuo

Ω . Para isso, precisamos identificar os operadores de criação e aniquilação, α_{\pm} , em que $+$ ($-$) refere-se a modos de energias positivas (negativas). A seguir, resolver as equações

$$\alpha_{\pm}|\Omega\rangle = 0. \quad (2.18)$$

Assim, escrevemos a solução geral (1.61) em termos de exponenciais:

$$\begin{aligned} x(t) = & \frac{1}{2}(A_1 + iB_1)e^{-i\omega_1 t} + \frac{1}{2}(A_1 - iB_1)e^{i\omega_1 t} + \\ & + \frac{1}{2}(A_2 + iB_2)e^{-i\omega_2 t} + \frac{1}{2}(A_2 - iB_2)e^{i\omega_2 t}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Aqui, o subíndice 1 (2) está conectado a $+$ ($-$) e, portanto, a modos de energia positiva (negativa).

Como guia para indicar os operadores de criação e aniquilação, notemos que se os modos ω_1 portam energia positiva, então o operador de aniquilação deve estar conectado a $e^{-\omega_1 t}$. Nesse sentido, devemos ter

$$\alpha_+ \sim A_1 + iB_1, \quad (2.20)$$

$$\alpha_+ \sim \frac{m\omega_1}{2}(1 + \sqrt{1 - 4\epsilon})X_1 + iP_1 - \omega_1 P_2 - \frac{im}{2}(1 - \sqrt{1 - 4\epsilon})X_2, \quad (2.21)$$

em que \sim é empregado para dizer que o lado esquerdo quântico está relacionado (vinculado) ao lado direito, indicado pela solução clássica. Analogamente, os modos ω_2 dizem respeito à energia negativa e, para o correspondente operador de aniquilação, deve-se ter

$$\alpha_- \sim A_2 - iB_2, \quad (2.22)$$

$$\alpha_- \sim \frac{m\omega_2}{2}(1 - \sqrt{1 - 4\epsilon})X_1 - iP_1 - \omega_2 P_2 + \frac{im}{2}(1 + \sqrt{1 - 4\epsilon})X_2. \quad (2.23)$$

Para obtermos $|\Omega\rangle$, vamos empregar a representação das coordenadas, isto é, usaremos $p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X_j}$ ($j = 1, 2$). Assim, ao empregarmos os operadores (2.19) e (2.21) em Ω , a exemplo do caso de um único oscilador, teremos uma estrutura gaussiana para Ω . Mais precisamente, obteremos

$$\Omega(X_1, X_2) = N \exp \left[-\frac{m\sqrt{1 - 4\epsilon}}{2\hbar(\omega_1 + \omega_2)}(\omega_1\omega_2 X_1^2 + X_2^2) - \frac{i\sqrt{\epsilon}m}{\hbar}X_1 X_2 \right], \quad (2.24)$$

em que N é um fator de normalização. Deve ser notado que essa gaussiana representa uma função localizada (normalizável) no plano $X_1 X_2$. Além disso, a partir de Ω , podemos formar

uma base completa de vetores de estado via aplicação de operadores de criação. São eles:

$$|N_1, N_2\rangle = \frac{(\alpha_+^\dagger)^{N_1} (\alpha_-^\dagger)^{N_2}}{\sqrt{N_1!} \sqrt{N_2!}} |\Omega\rangle. \quad (2.25)$$

Com isso, o operador Hamiltoniano aplicado nesses estados fornece

$$H|N_1, N_2\rangle = \hbar(N_1\omega_1 - N_2\omega_2)|N_1, N_2\rangle, \quad (2.26)$$

consistentemente com a possibilidade de energias positivas e negativas classicamente.

Além de uma teoria com um operador Hamiltoniano sem limite inferior sofrer da instabilidade de Ostrogradsky, podemos, também, discutir se uma teoria quantizada dessa forma mantém a unitariedade³. Para isso, vamos imaginar que o operador de aniquilação de energia positiva seja um operador de criação para energia negativa. Dito de outra forma, definimos um estado “fundamental” $|\bar{\Omega}\rangle$ que obedeça às equações

$$\alpha_+ |\bar{\Omega}\rangle = 0 = \alpha_-^\dagger |\bar{\Omega}\rangle. \quad (2.27)$$

Uma função de onda que satisfaz essas equações é dada por

$$\bar{\Omega} = \bar{N} \exp \left[-\frac{m\sqrt{1-4\epsilon}}{2\hbar(\omega_2 + \omega_1)} (\omega_1\omega_2 X_1^2 - X_2^2) + \frac{i\sqrt{\epsilon}m}{\hbar} X_1 X_2 \right], \quad (2.28)$$

em que \bar{N} é um fator de proporcionalidade.

Como essa função de onda não é normalizável, ela não corresponde a um estado do sistema quântico [35]. No entanto, podemos tentar seguir adiante e definir um “espaço de estados” formal que seja gerado por $|\bar{\Omega}\rangle$:

$$|\overline{N_1}, \overline{N_2}\rangle = \frac{(\alpha_+^\dagger)^{N_1} (\alpha_-)^{N_2}}{\sqrt{N_1!} \sqrt{N_2!}} |\bar{\Omega}\rangle. \quad (2.29)$$

Por sua vez, cabe ressaltar que esses estados correspondem a energias positivas:

$$H|\overline{N_+}, \overline{N_-}\rangle = \hbar(N_+k_+ + N_-k_-)|\overline{N_+}, \overline{N_-}\rangle. \quad (2.30)$$

Esse resultado mostra que o preço pago para se obter energias positivas é ter estados não normalizáveis. Nesse contexto, o problema da unitariedade surge porque $|\bar{\Omega}\rangle$ é definido como se tivesse norma igual a um, mas as relações de comutação permanecem as mesmas,

$$[\alpha_+, \alpha_+^\dagger] = 1 = [\alpha_-, \alpha_-^\dagger], \quad (2.31)$$

³ No contexto da mecânica quântica, unitariedade é uma restrição na evolução (principalmente temporal) do sistema que garante que a soma de probabilidades sempre seja igual à unidade. É uma maneira de checar a consistência da teoria em questão. Falando de uma maneira mais informal, unitariedade garante que a partícula (ou o sistema) está, em um determinado instante, em algum lugar do espaço e, portanto, quando realizarmos uma medida, encontraremos a partícula em algum estado bem definido.

e conduzem a uma inconsistência. Essa inconsistência está relacionada com o fato de que a norma de qualquer estado com um número ímpar de N_2 ser negativa. Por exemplo, o primeiro desses estados de norma negativa é

$$\langle \overline{0}, \overline{1} | \overline{0}, \overline{1} \rangle = \langle \overline{\Omega} | \alpha_-^\dagger \alpha_- | \overline{\Omega} \rangle = -\langle \overline{\Omega} | \overline{\Omega} \rangle. \quad (2.32)$$

Para preservar a interpretação probabilística da mecânica quântica, não podemos permitir estados de norma negativa. No entanto, em um contexto amplo, sabemos que um processo de espalhamento inevitavelmente mistura estados de norma positiva e de norma negativa, assim como a teoria corretamente quantizada permite processos de mistura de partículas de energia positiva com partículas de energia negativa. Assim, mesmo que pudéssemos remover os estados de norma negativa, a matriz S resultante seria não unitária. Ou seja, nosso processo de quantização canônica violaria a unitariedade e não resolveria o problema de H , que estamos identificando como a energia do sistema, não ser limitada inferiormente. Dessa forma, buscaremos uma alternativa à quantização canônica usual. Antes, voltaremos à discussão do capítulo anterior sobre a natureza da instabilidade de Ostrogradsky e comentaremos os três pontos que restaram. Como no capítulo anterior, seguiremos a discussão presente na referência [32].

Quando comentamos a natureza da instabilidade, deixamos para este capítulo as seguintes três implicações:

1. A mesma variável de Ostrogradsky carrega operadores de criação e aniquilação positivos e negativos.
2. Se o sistema instável interagir, então o vácuo físico pode decair para uma coleção de excitações positivas e negativas.
3. Se o sistema instável for uma teoria de campo contínua, a vasta entropia no limite do momento vai fazer esse decaimento ser instantâneo.

Vamos começar com o primeiro item. Em geral, estamos acostumados a escrever variáveis dinâmicas linearizadas em operadores de criação e aniquilação. Para um oscilador harmônico, como, por exemplo, em (1.2), temos, quando consideramos a equação (2.19), usamos a relação de Euler para identificar o operador de aniquilação com o termo associado a $e^{-i\omega t}$ e o operador de criação com o termo associado a $e^{i\omega t}$:

$$x_0 \cos \omega t + \frac{\dot{x}_0}{\omega} \sin \omega t = \frac{1}{2} \left[x_0 + \frac{i}{\omega} \dot{x}_0 \right] e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} \left[x_0 - \frac{i}{\omega} \dot{x}_0 \right] e^{i\omega t}, \quad (2.33)$$

em que $(x_0 + i\dot{x}_0/\omega)/2$ [$(x_0 - i\dot{x}_0/\omega)/2$] fará o papel do operador de aniquilação [criação].

Em geral, cada variável dinâmica se relaciona a um conjunto de operadores de criação e aniquilação. No entanto, com base na expressão (1.61) e no que discutimos ao obtermos $\Omega(X_1, X_2)$, percebemos que a mesma variável dinâmica de ordem superior carrega tanto operadores de aniquilação e criação de energia positiva quanto operadores de energia negativa. Assim, interações locais deverão acoplar os setores de energia. Dito de outra forma, teremos estados mistos, com operadores pertencendo aos dois “tipos” de energia.

Passando para o segundo item, consideremos brevemente agora uma situação que envolva vários graus de liberdade, apesar de não ser o foco de nosso texto. Por exemplo, vamos supor uma teoria de campo interagente que possua a instabilidade de Ostrogradsky. Como é sabido, partículas podem ser vistas como excitações elementares de campos e, portanto, diretamente relacionadas aos operadores de criação e aniquilação. Por sua vez, se isso ocorrer em uma teoria com derivadas de ordem superior, é possível aumentar (diminuir) energia tanto criando quanto aniquilando partículas. De fato, tal cenário configura-se, como vimos, devido a hamiltoniana ser linear em todos os momentos conjugados, salvo por um. Caso a teoria seja interagente, como se espera de uma teoria de campos típica, haverá interações entre as partículas. Em particular, a depender da forma da interação, decaimentos poderão ocorrer tanto de partículas com energias positivas quanto negativas.

Finalmente, também de maneira breve, comentaremos o terceiro item. Para isso, precisamos nos lembrar do motivo pelo qual estados excitados de átomos decaem na natureza. Embora estejamos acostumados com o fato de que um átomo decai de um estado excitado para reduzir a energia total do sistema, isso nem sempre é a forma mais precisa de expressar o evento. Em alguns casos, o decaimento ocorre mesmo que a energia total seja constante. Nesse caso, o decaimento acontece redistribuindo essa energia total constante em um grande número possível de estados. Finalmente, também de maneira breve, comentaremos o terceiro item. Para isso, precisamos nos lembrar do motivo pelo qual estados excitados de átomos decaem na natureza. Embora estejamos acostumados com o fato de que um átomo decai de um estado excitado para reduzir a energia total do sistema, isso nem sempre é a forma mais precisa de expressar o evento. Em alguns casos, o decaimento ocorre mesmo que a energia total seja constante. Nesse caso, o decaimento acontece redistribuindo essa energia total constante em um grande número possível de estados. De fato, em decaimentos atômicos, a diferença de energia entre dois estados pode, em geral, se dividir de várias maneiras que dependem das direções das partes resultantes, basi-

camente limitadas apenas por leis de conservação bem gerais como a do momento linear. Além disso, no caso de uma teoria de campos com derivadas de ordem superior, há a possibilidade de estados com energias arbitrariamente negativas e positivas⁴. Assim, nesse tipo de teoria, são incontáveis (incontroláveis) as possibilidades de decaimentos e, portanto, favorecendo fortemente a rapidez dos decaimentos, essencialmente tornando-os instantâneos⁵.

De uma maneira geral e de um ponto de vista estatístico, esse decaimento é favorecido por uma entropia bem grande. Vemos, portanto, que esse cenário não é compatível com o que entendemos por um universo estável.

Agora que descrevemos a natureza da instabilidade e realizamos a quantização canônica tradicional, percebemos que não conseguimos obter uma teoria quântica unitária e estável. Há problemas nessa formulação que parecem insolúveis, particularmente o fato de que não é fácil recuperar a interpretação probabilística da mecânica quântica. Ao quantizarmos dessa forma, teremos estados com norma negativa misturando-se com estados de norma positiva e a matriz de espalhamento não seria unitária. Assim, desistimos de realizar a quantização canônica “tradicional” e buscaremos uma formulação hamiltoniana alternativa.

2.3 Alternativas à quantização canônica do oscilador de Pais-Uhlenbeck

Nosso ponto de partida para tentar encontrar uma formulação hamiltoniana alternativa, cuja quantização mantenha a unitariedade, é a hamiltoniana H_δ descrita pela equação (1.95). Dessa equação, notamos que H_δ é uma função real desde que $\delta \geq 0$, ou seja⁶, $\sqrt{|\omega_1^2 - \omega_2^2|} \geq \Omega$. Mas $\Omega > 0$, então, essa condição só é válida no caso não-degenerado onde $\omega_1 \neq \omega_2$. A discussão dessa seção será baseada na referência [34] e nas referências encontradas nela.

Usando as equações (1.84) e (1.93), podemos deduzir que $\alpha \pm \sqrt{\delta} > 0$ e, seguindo a referência [34], introduzimos dois parâmetros reais e positivos

$$\nu_w = \frac{1}{2} \sqrt{\mu_w(\alpha \mp \sqrt{\delta})}, \quad \nu_x = \frac{1}{2} \sqrt{\mu_x(\alpha \pm \sqrt{\delta})}. \quad (2.34)$$

⁴ Lembramos ao leitor que já discutimos a possibilidade de excitar arbitrariamente o modo linear no momento conjugado, desde que excitássemos adequadamente os outros modos. A energia total é uma constante, mas podemos “particioná-la” de diversas formas, positivas e negativas.

⁵ Há a tentativa de se introduzir um *cutoff* nesse imenso espaço de possibilidades de decaimento. Entretanto, a taxa de decaimento é dependente desse *cutoff*, fazendo com que não se veja uma maneira de se resolver o problema [36].

⁶ Aqui seguimos a notação utilizada no capítulo anterior, em que Ω era uma constante definida em (1.93). Não está associada ao estado de vácuo Ω da seção anterior. Note também que, nesta seção, utilizamos a mesma notação da equação (1.95) por consistência. Dessa forma, $\tilde{\omega}$ é uma variável do sistema.

Com esses dois parâmetros, podemos reescrever a equação (1.95) como

$$H_\delta = \frac{p_w^2}{2\mu_w} + \frac{p_x^2}{2\mu_x} + \nu_w^2 \tilde{\omega}^2 + \nu_x^2 x^2 - \frac{2\nu_w \nu_x \Omega^2 w x}{\sqrt{\alpha^2 - \delta}}. \quad (2.35)$$

Por sua vez, completando o quadrado, verificamos que

$$H_\delta = \frac{p_w^2}{2\mu_w} + \frac{p_x^2}{2\mu_x} + \left(\nu_w w - \frac{\nu_x \Omega^2 x}{\sqrt{\alpha^2 - \delta}} \right)^2 + \frac{4\beta \nu_x^2 x^2}{\alpha^2 - \delta}. \quad (2.36)$$

Agora, seguimos o esquema da quantização canônica: $(\tilde{\omega}, x, p_{\tilde{\omega}}, p_x) \rightarrow (\hat{\tilde{\omega}}, \hat{x}, \hat{p}_{\tilde{\omega}}, \hat{p}_x)$. Nesse processo, usando a representação de coordenadas para esses operadores, temos

$$\begin{aligned} \hat{w}\psi(w, x) &= w\psi(w, x), & \hat{x}\psi(w, x) &= x\psi(w, x), \\ \hat{p}_w\psi(w, x) &= -i\hbar \frac{\partial\psi(w, x)}{\partial w}, & \hat{p}_x\psi(w, x) &= -i\hbar \frac{\partial\psi(w, x)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Por sua vez, o operador Hamiltoniano correspondente à hamiltoniana (2.36) é

$$\hat{H}_\delta = \frac{\hat{p}_w^2}{2\mu_w} + \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu_x} + \left(\nu_w \hat{w} - \frac{\nu_x \Omega^2 \hat{x}}{\sqrt{\alpha^2 - \delta}} \right)^2 + \frac{4\beta \nu_x^2 \hat{x}^2}{\alpha^2 - \delta}. \quad (2.38)$$

Deve estar claro, portanto, que esse operador \hat{H}_δ é Hermitiano e positivo definido. Ademais, a dinâmica clássica correspondente é a que já discutimos, veja a equação (1.83). O Hamiltoniano é também diagonalizável por uma transformação canônica linear. Realmente, a hamiltoniana (2.36) é quadrática em \hat{p}_x , \hat{p}_w , \hat{x} e \hat{w} , representando dois osciladores harmônicos acoplados⁷.

É digno de nota que esse resultado só é válido no caso não-degenerado. Vamos agora nos dedicar ao problema degenerado, com $\omega_1 = \omega_2 = \tilde{\omega}$. Nesse caso, as variáveis definidas no capítulo anterior, α , δ , λ e τ (equações (1.84) e (1.93)), se reduzem a:

$$\alpha = 2\tilde{\omega}^2, \quad \delta = -\Omega^4, \quad \lambda = \tilde{\omega}^2 \pm \frac{i\Omega^2}{2}, \quad \tau = \frac{\sqrt{2}}{\Omega}. \quad (2.39)$$

Usando esses parâmetros, a hamiltoniana descrita por (1.95) torna-se

$$H_{-\Omega^4} = \frac{p_w^2}{2\mu_w} + \frac{p_x^2}{2\mu_x} + \frac{\mu_w}{4}(2w^2 \mp i\Omega^2)w^2 + \frac{\mu_x}{4}(2w^2 \pm i\Omega^2)x^2 - \frac{1}{2}\sqrt{\mu_w \mu_x} \Omega^2 w x. \quad (2.40)$$

A equação de movimento (1.83) não fixa os valores dos parâmetros de massa; portanto, podemos escolher $\mu_w = \mu_x = \mu$ por simplicidade. Com isso, a hamiltoniana (2.40) assume a forma:

$$H_{-\Omega^4} = \frac{1}{2\mu}(p_w^2 + p_x^2) + \frac{\mu}{4}[(2w^2 \mp i\Omega^2)w^2 + (2w^2 \pm i\Omega^2)x^2] - \frac{\mu\Omega^2 w x}{2}. \quad (2.41)$$

⁷ Escolhendo convenientemente nossas coordenadas, que são combinação linear das antigas, a hamiltoniana (2.36) passa a representar dois osciladores harmônicos desacoplados. Por sua vez, os autovalores de \hat{H}_δ se resumem a soma de autovalores de cada oscilador; os autovetores correspondentes de \hat{H}_δ são produto dos autovetores da hamiltoniana de cada um dos dois osciladores. Esse procedimento é detalhado no apêndice da referência [34].

Podemos quantizar $H_{-\Omega^4}$ usando o esquema de quantização descrito anteriormente na equação (2.37). Obteremos, assim, o operador Hamiltoniano $\hat{H}_{-\Omega^4}$:

$$\hat{H}_{-\Omega^4} = \frac{1}{2\mu}(\hat{p}_w^2 + \hat{p}_x^2) + \frac{\mu}{4}[(2w^2 \mp i\Omega^2)\hat{w}^2 + (2w^2 \pm i\Omega^2)\hat{x}^2] - \frac{\mu\Omega^2\hat{w}\hat{x}}{2}. \quad (2.42)$$

Esse operador não é Hermitiano, o que em si é um problema, pois queremos que a energia do sistema seja um observável. O Hamiltoniano $\hat{H}_{-\Omega^4}$ dado em (2.42) faz parte da classe de Hamiltonianos da forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}[\hat{p}_\mu^2 + \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}(e + i\epsilon)\hat{w}^2 + \frac{1}{2}(e - i\epsilon)\hat{x}^2 + b\hat{w}\hat{x}], \quad (2.43)$$

investigada nas referências [38, 39]. Como apontado nessas referências, esse \hat{H} tem um conjunto completo de autovetores com autovalores reais desde que $|\epsilon| < |b|$. Comparando as equações (2.42) e (2.43), vemos que o Hamiltoniano (2.42) consiste na escolha $e = 2\mu^2w^2$, $\epsilon = \mp\mu^2\Omega^2$ e $b = -\mu^2\Omega^2$, ou seja, neste caso, temos $|\epsilon| = |b|$ e não $|\epsilon| < |b|$. Esse resultado indica, portanto, que a hamiltoniana descrita por (2.42) não é diagonalizável.

Vale ressaltar que, em razão de (2.39) e de (1.87), o parâmetro λ e a variável w podem tomar valores complexos. Essa observação revela uma deficiência sutil, mas importante, no nosso esquema de quantização, envolvendo $w \rightarrow \hat{w}$, porque w é uma variável complexa e \hat{w} , definido em (2.37), tem espectro real⁸. Conseguimos obter um operador Hamiltoniano com esse esquema de quantização; no entanto, mesmo que esse operador fosse diagonalizável, o limite clássico não poderia ser o oscilador PU clássico. Esse é um problema encontrado também na referência [19].

Temos um grande problema em mãos. Partimos do oscilador clássico PU e em um primeiro momento, tentamos quantizar ingenuamente. O operador Hamiltoniano resultante não é limitado inferiormente e o sistema quântico não é unitário e, portanto, não podemos manter a interpretação probabilística da mecânica quântica. Buscamos uma forma alternativa de quantização para o oscilador PU e, no caso não-degenerado, obtivemos um bom resultado. No entanto, não só o Hamiltoniano obtido no caso degenerado é não-Hermitiano e pode não ser diagonalizável, sendo que o limite clássico desse sistema não retorna ao ponto de partida – o oscilador PU.

Para finalizar o capítulo, gostaríamos de mencionar uma possível alternativa recente de quantizar o oscilador PU. Esta alternativa é a quantização baseada em sistemas vinculados

⁸ Isso parece ser um problema comum em sistemas PT -simétricos. O leitor interessado pode encontrar outro exemplo disso na referência [40].

e é utilizada para verificar se o campo emergente do oscilador PU é fisicamente consistente. Adiantamos que, de fato, a teoria é consistente mas não satisfatória porque o operador Hamiltoniano obtido continua sendo não limitado inferiormente. O leitor interessado pode encontrar uma discussão detalhada na referência [41] e, paralelamente, caso não esteja familiarizado com a quantização de sistemas vinculados, pode encontrar um bom embasamento teórico nas referências [42-52].

3 Considerações sobre uma mecânica estatística do oscilador de Pais-Uhlenbeck

Neste capítulo, consideraremos a possibilidade de um formalismo mecânico-estatístico de três sistemas, a saber, de um oscilador harmônico simples, de dois osciladores harmônicos acoplados e do oscilador PU. Verificaremos que dificuldades, a exemplo das encontradas nos capítulos anteriores, também se manifestarão no cenário mecânico-estatístico. Estudaremos um regime de quase equilíbrio e, para isso, usaremos equações de Langevin e de Fokker-Planck. Discutiremos a possibilidade de aplicação dessas equações ao sistema de dois osciladores acoplados e ao oscilador PU. Antes de passarmos a essa discussão, haverá uma seção introdutória visando fixar a notação e alguns conceitos acerca da equação de Langevin e da equação de Fokker-Planck que utilizaremos no decorrer deste capítulo.

3.1 Equações de Langevin e de Fokker-Planck

Sabemos, da mecânica estatística[56], que a probabilidade P de um sistema se encontrar em um estado de equilíbrio termo-estatístico é, em geral, proporcional a $e^{-\beta H}$,

$$P \propto e^{-\beta H}, \quad (3.1)$$

em que $\beta = 1/k_B T$, T é a temperatura, k_B é a constante de Boltzmann e H a hamiltoniana do sistema estudado. Da discussão dos capítulos anteriores, fica claro que essa formulação encontrará problemas quando aplicada ao oscilador PU, já que a hamiltoniana (1.76) não é limitada inferiormente. Visando aprofundar nesse tipo de discussão, focaremos com uma investigação do sistema acoplado a partir da equação de Langevin para, logo em seguida, nos direcionarmos à equação de Fokker-Planck associada.

Antes de começarmos com a investigação do sistema de osciladores acoplados, discutiremos o caso de uma partícula de massa m imersa em um líquido. Podemos observar que essa partícula está sujeita, além de a uma força externa, a uma força viscosa, que modelaremos como proporcional à velocidade da partícula em relação ao meio, e a uma força de caráter aleatório, devido a impactos aleatórios de moléculas do líquido[55, 56] com a partícula. Deve estar claro nesse cenário que as forças de atrito e aleatória estão diretamente conectadas. Por exemplo, se

há força aleatória é porque há partículas do meio colidindo com a de massa m e essas partículas são também as responsáveis pela força de atrito viscoso. Essa última força surge basicamente das colisões sistemáticas da partícula de massa m ao se movimentar em um meio que já contenha outras partículas.

Por simplicidade de notação, consideraremos apenas o movimento unidimensional ao longo do eixo x . A equação de movimento é, portanto,

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_e + F(t), \quad (3.2)$$

em que

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (3.3)$$

é a velocidade e x a posição da partícula. Como salientado, a parte que depende de v no lado direito da equação (3.2) é a força viscosa (a constante α depende das propriedades intrínsecas do meio e da partícula), F_e é a força externa e $F(t)$ é a força aleatória. Para $F(t)$, as seguintes propriedades são válidas:

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (3.4)$$

já que, em média, a força devido às moléculas é nula¹, e

$$\langle F(t)F(t') \rangle = B\delta(t - t'), \quad (3.5)$$

pois consideramos que os impactos sejam independentes em tempos distintos. A equação (3.2), com as equações (3.4) e (3.5), é um exemplo de equação de Langevin. Cabe ressaltar que a média $\langle \dots \rangle$ é considerada sobre um conjunto (ensemble) de sistemas.

Se considerarmos o caso sem força externa, $F_e = 0$, e dividirmos por m os dois lados da equação (3.2), obtemos

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (3.6)$$

em que $\gamma = \alpha/m$ e $\zeta = F(t)/m$. O ruído $\zeta(t)$, também chamado de variável estocástica por ser uma variável aleatória dependente do tempo, tem as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad (3.7)$$

¹ Ao leitor desacomodado com esse argumento, atentamos para o fato que (3.4) nada mais é que uma forma alternativa de enunciar a isotropia e homogeneidade do espaço: como o líquido está acima do zero absoluto, as moléculas se movem aleatoriamente (movimento térmico). Se a partícula está momentaneamente em repouso, em um intervalo de tempo Δt , imaginamos que uma colisão vinda da esquerda seja tão provável quanto uma colisão vinda da direita (ou equivalentemente, uma colisão vinda de cima é tão provável quanto uma vinda de baixo). Ao tomarmos a média de F sobre todos os *ensembles* preparados igualmente, ela deve ser nula.

e

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (3.8)$$

em que $\Gamma = B/m^2$.

De posse da equação de Langevin (3.6), poderíamos obter vários resultados, entretanto, partiremos de imediato para mais um exemplo da equação de Langevin em uma dimensão. Se empregarmos a equação (3.2) desconsiderando o termo mdv/dt , constatamos que

$$\frac{dx}{dt} = f + \eta(t), \quad (3.9)$$

em que $f = F_e/\alpha$ e $\eta(t) = F(t)/\alpha$. Portanto,

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad (3.10)$$

e

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \Gamma'\delta(t - t'), \quad (3.11)$$

com $\Gamma' = B/\alpha^2$. Empregar a equação (3.9) se justifica se mdv/dt for muito menor, em módulo, que αv , isto é, usar uma dinâmica com grande amortecimento. Formalmente, isso equivale a dizer que tem-se o limite $m \rightarrow 0$. Note ainda que f representa a força (salvo por um fator multiplicativo).

Para um sistema de equações de Langevin com N variáveis, x_1, x_2, \dots, x_N , temos

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_1(t), \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_2(t), \\ &\vdots \\ \frac{dx_N}{dt} &= f_N(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_N(t), \end{aligned} \quad (3.12)$$

em que as variáveis estocásticas $\zeta_1(t), \zeta_2(t), \dots, \zeta_N(t)$ possuem as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0 \quad (3.13)$$

e

$$\langle \zeta_i(t)\zeta_j(t') \rangle = \Gamma_i\delta(t - t'), \quad (3.14)$$

em que $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$ são constantes. Essas equações de Langevin formam um sistema de equações estocásticas no caso em que o ruído é aditivo. Exemplos da equação de Langevin com

apenas uma variável são as equações (3.6), com $x_1 = v$, e (3.9), com $x_1 = x$. Um exemplo com duas variáveis corresponde às equações (3.2) e (3.3), com $x_1 = x$ e $x_2 = v$.

Uma maneira alternativa de investigar um sistema de equações de Langevin é por meio de uma equação de Fokker-Planck. Nesse caso, ao invés de se considerar soluções em termos de funções aleatórias, emprega-se uma densidade de probabilidade. A equação de Fokker-Planck correspondente às equações (3.12), (3.13) e (3.14) é

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Gamma_i \frac{\partial^2 P}{\partial x_i^2} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (f_i P), \quad (3.15)$$

com $P = P(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$. Maiores detalhes sobre a conexão entre as equações de Langevin e a equação de Fokker-Planck podem ser vistos no apêndice A.

Um primeiro exemplo de equação de Fokker-Planck é aquele que corresponde à equação (3.6), que é

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} + \gamma \frac{\partial (vP)}{\partial v}, \quad (3.16)$$

com $x_1 = v$, $P = P(v, t)$ e $f(v) = -\gamma v$. No limite de tempos longos, chegamos à solução estacionária, $\partial P / \partial t = 0$, dessa equação, ou seja, verificamos que

$$P(v) = N e^{-\beta \frac{mv^2}{2}}, \quad (3.17)$$

em que N é uma constante de normalização e $\beta = 2\gamma/m\Gamma$. Se compararmos esse β com $\beta = 1/k_B T$, obtemos a relação entre Γ , γ e T .

Outro exemplo de equação de Fokker-Planck vem da equação (3.9), que conduz a

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\Gamma'}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (fP). \quad (3.18)$$

Se f for confinante, essa equação tem uma solução estacionária ($\partial P / \partial t = 0$):

$$P(x) = \tilde{N} e^{-\beta V(x)}, \quad (3.19)$$

em que \tilde{N} é uma constante de normalização, $\beta = 2/\Gamma'$ e $V(x) = -\int_0^x f(x') dx'$ é a energia potencial correspondente a f .

Um terceiro exemplo vem do sistema de equações (3.2) e (3.3): começamos escrevendo essas equações como

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, \\ \frac{dv}{dt} &= -\frac{\alpha v}{m} + \frac{F_e(x)}{m} + \frac{F(t)}{m}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dessa forma, temos um sistema de duas equações de Langevin sendo que na primeira não há ruído. A seguir, visando comparar com o sistema de equações (3.12), usamos: $x_1 = x$, $x_2 = v$, $f_1(x, v) = v$, $f_2(x, v) = [F_e(x) - \alpha v]/m$ e fazemos as identificações: $\Gamma_1 = 0$ e $\Gamma_2 = \Gamma = B/m^2$. Consequentemente, via equação (3.15), a equação para a distribuição de probabilidades $P = P(x, v, t)$ é

$$\frac{\partial}{\partial t}P = -v \frac{\partial}{\partial x}P - \frac{1}{m}F_e(x) \frac{\partial}{\partial v}P + \frac{\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial v}(vP) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2}P. \quad (3.21)$$

Essa equação de Fokker-Planck é usualmente denominada equação de Kramers. No caso de uma força externa elástica, $F_e(x) = -kx$, a equação se torna

$$\frac{\partial}{\partial t}P = -v \frac{\partial}{\partial x}P + \omega^2 x \frac{\partial}{\partial v}P + \gamma \frac{\partial}{\partial v}(vP) + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2}P, \quad (3.22)$$

em que $\omega^2 = k/m$ e $\gamma = \alpha/m$. Igualmente à equação (3.16), podemos obter a solução estacionária, $\partial P/\partial t = 0$, da equação (3.22). Essa solução é

$$P(x, v) = N' e^{-\beta E}, \quad (3.23)$$

em que N' é uma constante de normalização, $\beta = 2\gamma/m\Gamma$ e

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{kx^2}{2} \quad (3.24)$$

é a energia do oscilador harmônico simples.

3.2 Dois osciladores acoplados

Passaremos agora ao estudo de dois osciladores acoplados no contexto das equações de Langevin e de Fokker-Planck. Começamos reescrevendo o sistema (1.6) mas substituindo x_1 por x e x_2 por y no sistema original:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -\frac{(k_1 + k)}{m_1}x + \frac{k}{m_1}y, \\ \ddot{y} &= -\frac{(k_2 + k)}{m_2}y + \frac{k}{m_2}x. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Notamos, a seguir, que esse sistema de duas equações de segunda ordem é equivalente a um sistema de quatro equações de primeira ordem, a saber

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x, & \frac{dv_x}{dt} &= -\alpha_1 x + \beta_1 y, \\ \frac{dy}{dt} &= v_y, & \frac{dv_y}{dt} &= -\alpha_2 y + \beta_2 x, \end{aligned} \quad (3.26)$$

em que empregamos $\alpha_1 = (k_1 + k)/m_1$, $\alpha_2 = (k_2 + k)/m_2$, $\beta_1 = k/m_1$ e $\beta_2 = k/m_2$.

Assim como no caso de uma partícula imersa em um líquido (equação (3.2)), suporemos os dois osciladores sob a ação de um meio. Portanto, deveremos considerar a existência de forças de atrito viscoso e de forças aleatórias. Por esse motivo, passamos a focar o sistema de equações de Langevin

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x, & \frac{dv_x}{dt} &= -\alpha_1 x + \beta_1 y - \gamma_1 v_x + \zeta_1(t), \\ \frac{dy}{dt} &= v_y, & \frac{dv_y}{dt} &= -\alpha_2 y + \beta_2 x - \gamma_2 v_y + \zeta_2(t), \end{aligned} \quad (3.27)$$

ao invés das equações (3.26). Além do que, $\zeta_1(t)$ e $\zeta_2(t)$ possuem as seguintes propriedades

$$\begin{aligned} \langle \zeta_1(t) \rangle &= 0, & \langle \zeta_2(t) \rangle &= 0, \\ \langle \zeta_1(t) \zeta_2(t') \rangle &= 0, & \langle \zeta_1(t) \zeta_1(t') \rangle &= \Gamma_1 \delta(t - t'), & \langle \zeta_2(t) \zeta_2(t') \rangle &= \Gamma_2 \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Se identificarmos $f_1(x, v_x, y, v_y) = -\alpha_1 x + \beta_1 y - \gamma_1 v_x$ e $f_2(y, v_y, x, v_x) = -\alpha_2 y + \beta_2 x - \gamma_2 v_y$, obtemos a equação de Fokker-Planck para a distribuição $P = P(x, v_x, y, v_y, t)$ no caso de dois osciladores acoplados:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\Gamma_1}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v_x^2} + \frac{\Gamma_2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v_y^2} - v_x \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial v_x} \left[\left(-\left(\frac{k_1 + k}{m_1} \right) x + \frac{k}{m_1} y - \gamma_1 v_x \right) P \right] \\ &\quad - v_y \frac{\partial P}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial v_y} \left[\left(-\left(\frac{k_2 + k}{m_2} \right) y + \frac{k}{m_2} x - \gamma_2 v_y \right) P \right]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Usando $\partial P / \partial t = 0$ nessa equação, obtemos a equação para a solução estacionária. Como pode ser verificado nesse caso,

$$P(x, y, v_x, v_y) = \tilde{N} e^{-\beta E_{12}}, \quad (3.30)$$

em que \tilde{N} é uma constante de normalização,

$$E_{12} = \frac{m_1 v_x^2}{2} + \frac{m_2 v_y^2}{2} + \frac{k_1 x^2}{2} + \frac{k_2 y^2}{2} + \frac{k(x - y)^2}{2} \quad (3.31)$$

é a energia dos dois osciladores acoplados e $\beta = 2\gamma_1/m_1\Gamma_1 = 2\gamma_2/m_2\Gamma_2$. Como deveria ser esperado, a exemplo das equações (3.17), (3.19) e (3.23), a (3.30) tem exatamente a estrutura da distribuição de equilíbrio (3.1). Por outro lado, se $k = 0$, $\tilde{\beta}_1 = 2\gamma_1/m_1\Gamma_1$ e $\tilde{\beta}_2 = 2\gamma_2/m_2\Gamma_2$, a solução estacionária seria

$$P(x, y, v_x, v_y) = \tilde{N}' e^{-\tilde{\beta}_1 E_1 - \tilde{\beta}_2 E_2}, \quad (3.32)$$

em que \tilde{N}' é uma constante de normalização, $E_1 = m v_x^2/2 + k_1 x^2/2$ e $E_2 = m v_y^2/2 + k_2 y^2/2$.

Cabe ressaltar que foi necessário impor uma relação entre Γ_1 , Γ_2 , γ_1 , γ_2 , m_1 e m_2 . Caso contrário, não teríamos uma solução como a equação (3.30), ela seria ainda gaussiana, porém os coeficientes de x^2 , xy , v_x^2 etc seriam diferentes. Esses coeficientes estão diretamente relacionados com os valores médios de $\langle x^2 \rangle$, $\langle xy \rangle$, $\langle v_x^2 \rangle$ etc. Nesse sentido, partiremos para as equações que regem a evolução desses valores médios. Para tal, empregaremos as equações

$$\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \langle f_i \rangle \quad (3.33)$$

e

$$\frac{d\langle x_i x_j \rangle}{dt} = \langle x_i f_j \rangle + \langle x_j f_i \rangle + \Gamma_i \delta_{ij}, \quad (3.34)$$

discutidas no apêndice (A.3), equações (A.19) e (A.20).

Inicialmente, usando (3.33), temos as equações para $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$, $\langle v_x \rangle$ e $\langle v_y \rangle$. São elas

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle v_x \rangle, \quad \frac{d\langle y \rangle}{dt} = \langle v_y \rangle, \quad (3.35)$$

$$\frac{d\langle v_x \rangle}{dt} = -\frac{a_1}{m_1} \langle v_x \rangle - \frac{k_1 + k}{m_1} \langle x \rangle + \frac{k}{m_1} \langle y \rangle, \quad (3.36)$$

$$\frac{d\langle v_y \rangle}{dt} = -\frac{a_2}{m_2} \langle v_y \rangle - \frac{k_2 + k}{m_2} \langle y \rangle + \frac{k}{m_2} \langle x \rangle. \quad (3.37)$$

Vemos que a soluções estacionária ($t \rightarrow \infty$) desse sistema de equações, consistente com os valores médios de x , y , v_x e v_y constantes, são

$$\langle v_x \rangle = \langle v_y \rangle = 0, \quad \langle x \rangle = \langle y \rangle = 0. \quad (3.38)$$

Por sua vez, as equações para $\langle x^2 \rangle$, $\langle xy \rangle$ etc, empregando (3.34), são

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = 2\langle xv_x \rangle, \quad (3.39)$$

$$\frac{d\langle y^2 \rangle}{dt} = 2\langle yv_y \rangle, \quad (3.40)$$

$$\frac{d\langle xy \rangle}{dt} = \langle xv_y \rangle + \langle yv_x \rangle, \quad (3.41)$$

$$\frac{d\langle xv_x \rangle}{dt} = \langle v_x^2 \rangle - \frac{a_1}{m_1} \langle xv_x \rangle - \frac{k_1 + k}{m_1} \langle x^2 \rangle + \frac{k}{m_1} \langle xy \rangle, \quad (3.42)$$

$$\frac{d\langle yv_y \rangle}{dt} = \langle v_y^2 \rangle - \frac{a_2}{m_2} \langle yv_y \rangle - \frac{k_2 + k}{m_2} \langle y^2 \rangle + \frac{k}{m_2} \langle xy \rangle, \quad (3.43)$$

$$\frac{d\langle v_x^2 \rangle}{dt} = -\frac{2a_1}{m_1} \langle v_x^2 \rangle - 2\frac{k_1 + k}{m_1} \langle xv_x \rangle + \frac{2k}{m_1} \langle yv_x \rangle + \Gamma_1, \quad (3.44)$$

$$\frac{d\langle v_y^2 \rangle}{dt} = -\frac{2a_2}{m_2} \langle v_y^2 \rangle - 2\frac{k_2 + k}{m_2} \langle yv_y \rangle + \frac{2k}{m_2} \langle xv_y \rangle + \Gamma_2, \quad (3.45)$$

$$\frac{d\langle xv_y \rangle}{dt} = -\frac{a_2}{m_2} \langle xv_y \rangle - \frac{k_2 + k}{m_2} \langle xy \rangle + \frac{k}{m_2} \langle x^2 \rangle + \langle v_x v_y \rangle, \quad (3.46)$$

$$\frac{d\langle yv_x \rangle}{dt} = -\frac{a_1}{m_1} \langle yv_x \rangle - \frac{k_1 + k}{m_1} \langle xy \rangle + \frac{k}{m_1} \langle y^2 \rangle + \langle v_x v_y \rangle, \quad (3.47)$$

$$\frac{d\langle v_x v_y \rangle}{dt} = -\left(\frac{a_1}{m_1} + \frac{a_2}{m_2}\right) \langle v_x v_y \rangle - \frac{k_2 + k}{m_2} \langle yv_x \rangle - \frac{k_1 + k}{m_1} \langle xv_y \rangle - \frac{k}{m_2} \langle xv_x \rangle - \frac{k}{m_1} \langle yv_y \rangle. \quad (3.48)$$

Poderíamos investigar as soluções dependentes do tempo desse sistema de equações. Isso, entretanto, conduziria a expressões muito extensas. Sendo assim, nos limitaremos em focar somente a solução estacionária ($t \rightarrow \infty$) desse sistema de equações. Isso quer dizer que nos concentraremos em supor que $\langle x^2 \rangle$, $\langle xy \rangle$ etc são constantes. Assim, as equações (3.39) e (3.40) nos levam imediatamente a

$$\langle xv_x \rangle = 0, \langle yv_y \rangle = 0. \quad (3.49)$$

Além disso, no regime estacionário, as equações (3.41)-(3.48) ficam reduzidas ao sistema de

equações algébricas

$$\begin{aligned}
\langle xv_y \rangle + \langle yv_x \rangle &= 0, \\
\langle v_x^2 \rangle - \frac{a_1}{m_1} \langle xv_x \rangle - \frac{k_1 + k}{m_1} \langle x^2 \rangle + \frac{k}{m_1} \langle xy \rangle &= 0, \\
\langle v_y^2 \rangle - \frac{a_2}{m_2} \langle yv_y \rangle - \frac{k_2 + k}{m_2} \langle y^2 \rangle + \frac{k}{m_2} \langle xy \rangle &= 0, \\
\frac{2a_1}{m_1} \langle v_x^2 \rangle + 2\frac{k_1 + k}{m_1} \langle xv_x \rangle - \frac{2k}{m_1} \langle yv_x \rangle - \Gamma_1 &= 0, \\
\frac{2a_2}{m_2} \langle v_y^2 \rangle + 2\frac{k_2 + k}{m_2} \langle yv_y \rangle - \frac{2k}{m_2} \langle xv_y \rangle - \Gamma_2 &= 0, \\
\frac{a_2}{m_2} \langle xv_y \rangle + \frac{k_2 + k}{m_2} \langle xy \rangle - \frac{k}{m_2} \langle x^2 \rangle - \langle v_x v_y \rangle &= 0, \\
\frac{a_1}{m_1} \langle yv_x \rangle + \frac{k_1 + k}{m_1} \langle xy \rangle - \frac{k}{m_1} \langle y^2 \rangle - \langle v_x v_y \rangle &= 0, \\
\left(\frac{a_1}{m_1} + \frac{a_2}{m_2} \right) \langle v_x v_y \rangle + \frac{k_2 + k}{m_2} \langle yv_x \rangle + \frac{k_1 + k}{m_1} \langle xv_y \rangle + \frac{k}{m_2} \langle xv_x \rangle + \frac{k}{m_1} \langle yv_y \rangle &= 0.
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Para resolver esse sistema de equações, usamos um programa de manipulação algébrica, o *Mathematica*[57]. O resultado pode ser escrito como

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{R(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}{G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.51}$$

$$\langle v_y^2 \rangle = \frac{R(m_2, m_1, k_2, k_1, k, a_2, a_1, \Gamma_2, \Gamma_1)}{G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.52}$$

$$\langle v_x v_y \rangle = \frac{k [(k + k_2) m_1 - (k + k_1) m_2] (a_2 \Gamma_1 m_1^2 - a_1 \Gamma_2 m_2^2)}{G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.53}$$

$$\langle yv_x \rangle = \frac{-k (a_2 m_1 + a_1 m_2) (a_2 \Gamma_1 m_1^2 - a_1 \Gamma_2 m_2^2)}{G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.54}$$

$$\langle xv_y \rangle = \frac{k (a_2 m_1 + a_1 m_2) (a_2 \Gamma_1 m_1^2 - a_1 \Gamma_2 m_2^2)}{G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.55}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{Q(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}{[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2] G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.56}$$

$$\langle y^2 \rangle = \frac{Q(m_2, m_1, k_2, k_1, k, a_2, a_1, \Gamma_2, \Gamma_1)}{[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2] G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.57}$$

$$\langle xy \rangle = \frac{Z(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}{[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2] G(m_1, m_2, k_1, k_2, k, a_1, a_2, \Gamma_1, \Gamma_2)}, \tag{3.58}$$

em que

$$\begin{aligned}
G = & a_1 \{ \Gamma_1 m_1 (a_2^2 [(k + k_2)m_1 + (k + k_1)m_2] + k^2 m_2^2) + \Gamma_2 k^2 m_2^3 \} + \\
& + a_2 m_1 \{ \Gamma_1 (a_2^2 (k + k_1)m_1 + (k + k_2)^2 m_1^2 + (k + k_1)^2 m_2^2 - [k(k + 2k_1) + 2(k + k_1)k_2] m_1 m_2) + \\
& + \Gamma_2 k^2 m_2^2 \} + a_2 a_1^2 \Gamma_1 (k + k_2) m_1 m_2,
\end{aligned} \tag{3.59}$$

$$\begin{aligned}
R = & \Gamma_2 k^2 m_2^2 (a_2 m_1 + a_1 m_2) + a_2 \Gamma_1 m_1 \{ -[k^2 + 2(k_1 + k_2)k + 2k_1 k_2] m_2 m_1 + \\
& + (k + k_2)^2 m_1^2 + (k + k_1)^2 m_2^2 \} + \Gamma_1 m_1 \{ a_1 k^2 m_2^2 + a_2^3 (k + k_1) m_1 + \\
& + a_1 a_2^2 [(k + k_2)m_1 + (k + k_1)m_2] + a_1^2 a_2 (k + k_2) m_2 \},
\end{aligned} \tag{3.60}$$

$$\begin{aligned}
Q = & a_1 a_2^2 \{ \Gamma_2 k^2 m_1 m_2^2 + \Gamma_1 m_1 [(k + k_2)^2 m_1^2 + [k_1 k_2 + k(k_1 + k_2)] m_2 m_1] \} + \\
& + a_2 \{ \Gamma_2 k^2 (k + k_2) m_2^2 m_1^2 + \Gamma_1 m_1^2 [(k + k_2)^3 m_1^2 - 2[k_1 k_2 + k(k_1 + k_2)] (k + k_2) m_1 m_2 + \\
& + (k + k_1) [k_1 k_2 + k(k_1 + k_2)] m_2^2] \} + a_1^2 a_2 (\Gamma_2 k^2 m_2^3 + \Gamma_1 (k + k_2)^2 m_1^2 m_2) + \\
& + a_1 (\Gamma_2 k^2 (k + k_1) m_2^4 + \Gamma_1 k^2 (k + k_2) m_1^2 m_2^2) + a_2^3 \Gamma_1 [k_1 k_2 + k(k_1 + k_2)] m_1^3,
\end{aligned} \tag{3.61}$$

$$\begin{aligned}
Z = & a_1 k m_2^2 \{ \Gamma_1 k^2 m_1^2 + \Gamma_2 m_2 [(k + k_1)^2 m_2 + (-k_1 k_2 - k(k_1 + k_2)) m_1] \} + a_2 k m_1^2 (\Gamma_2 k^2 m_2^2) + \\
& + \Gamma_1 m_1 \{ (k + k_2)^2 m_1 + [-k_1 k_2 - k(k_1 + k_2)] m_2 \} + \\
& + a_2 a_1^2 k m_2 [\Gamma_1 (k + k_2) m_1^2 + \Gamma_2 (k + k_1) m_2^2] + a_2^2 a_1 k m_1 [\Gamma_1 (k + k_2) m_1^2 + \Gamma_2 (k + k_1) m_2^2].
\end{aligned} \tag{3.62}$$

O sistema de dois osciladores acoplados apresenta uma simetria pela troca de um oscilador pelo outro. Essa simetria manifesta-se nos resultados para $\langle x^2 \rangle$, $\langle xy \rangle$ etc. De fato, G , Z e o numerador de $\langle v_x v_y \rangle$ são invariantes pela troca dos índices 1 por 2 e vice-versa; os numeradores de $\langle x v_y \rangle$ e $\langle y v_x \rangle$, de $\langle x^2 \rangle$ e $\langle y^2 \rangle$ e de $\langle v_x^2 \rangle$ e $\langle v_y^2 \rangle$ vão de um para o outro com $1 \leftrightarrow 2$, respectivamente. Além disso, observamos que $\langle v_x v_y \rangle$, $\langle x v_y \rangle$ e $\langle y v_x \rangle$ não são nulos, apesar da hamiltoniana de partida não apresentar termos que envolvam diretamente os produtos $v_x v_y$, $x v_y$ e $y v_x$.

Visualizar aspectos do sistema de dois osciladores acoplados a partir das soluções que acabamos de ver, em geral, torna-se difícil, pois elas são extensas. Entretanto, em alguns casos limites, as soluções são bem menores. A seguir, como exemplo, consideraremos três desses

casos. No primeiro deles, usamos $\beta = 2a_1/m_1^2\Gamma_1 = 2a_2/m_2^2\Gamma_2$ nas equações (3.51)-(3.62) para obtermos

$$\begin{aligned}
 \langle v_x^2 \rangle &= \frac{1}{m_1\beta}, & \langle v_y^2 \rangle &= \frac{1}{m_2\beta}, & \langle v_x v_y \rangle &= 0, \\
 \langle y v_x \rangle &= \langle x v_y \rangle &= 0, \\
 \langle x^2 \rangle &= \frac{k + k_2}{k(k_1 + k_2) + k_1 k_2} \frac{1}{\beta}, \\
 \langle y^2 \rangle &= \frac{k + k_1}{k(k_1 + k_2) + k_1 k_2} \frac{1}{\beta}, \\
 \langle xy \rangle &= \frac{k}{k(k_1 + k_2) + k_1 k_2} \frac{1}{\beta}.
 \end{aligned} \tag{3.63}$$

Cabe ressaltar que esses valores médios são aqueles que se obteria diretamente da equação (3.30).

Um segundo caso limite é aquele em que não há força de atrito nem força aleatória para um dos osciladores. Por exemplo, se $a_1 = 0$ e $\Gamma_1 = 0$, as equações (3.51)-(3.62) reduzem-se a

$$\begin{aligned}
 \langle v_x^2 \rangle &= \frac{m_2^2 \Gamma_2}{2m_1 a_2}, & \langle v_y^2 \rangle &= \frac{m_2 \Gamma_2}{2a_2}, \\
 \langle v_x v_y \rangle &= 0, & \langle y v_x \rangle &= \langle x v_y \rangle = 0, \\
 \langle x^2 \rangle &= \frac{(k + k_2)m_2^2 \Gamma_2}{2a_2[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2]}, \\
 \langle y^2 \rangle &= \frac{(k + k_1)m_2^2 \Gamma_2}{2a_2[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2]}, \\
 \langle xy \rangle &= \frac{k m_2^2 \Gamma_2}{2a_2[k(k_1 + k_2) + k_1 k_2]}.
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

Note-se que, a exemplo do caso particular anterior, $\langle v_x v_y \rangle$, $\langle y v_x \rangle$ e $\langle x v_y \rangle$ são nulos.

No terceiro caso limite, o de dois osciladores desacoplados ($k = 0$), as soluções estacionárias ficam ainda mais simples. Elas reduzem-se a de osciladores simples, isto é,

$$\begin{aligned}
 \langle v_x^2 \rangle &= \frac{1}{m_1 \tilde{\beta}_1}, & \langle v_y^2 \rangle &= \frac{1}{m_2 \tilde{\beta}_2}, \\
 \langle v_x v_y \rangle &= 0, & \langle y v_x \rangle &= \langle x v_y \rangle = 0, \\
 \langle x^2 \rangle &= \frac{1}{k_1 \tilde{\beta}_1}, & \langle y^2 \rangle &= \frac{1}{k_2 \tilde{\beta}_2}, & \langle xy \rangle &= 0,
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

em que $\tilde{\beta}_1 = 2a_1/m_1^2\Gamma_1$ e $\tilde{\beta}_2 = 2a_2/m_2^2\Gamma_2$. Nota-se que esses valores médios são exatamente aqueles que advém da equação (3.32).

3.3 O oscilador de Pais-Uhlenbeck

Como deve estar claro da primeira seção do capítulo 1, um próximo passo é a comparação entre o sistema de osciladores acoplados (3.27) e o correspondente para o oscilador PU. Para tal, devemos transformar o sistema de osciladores acoplados em um oscilador com derivada quártica na presença de atrito viscoso e de forças estocásticas. Nessa direção, no intuito de simplificar discussões e consistentemente com a equação (3.27), consideraremos a presença de duas forças externas dependentes do tempo $F_1(t)$ e $F_2(t)$, representando as forças aleatórias. Dessa forma, o sistema de equações (3.27) passa a ser escrito como

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x} &= -(k_1 + k)x + ky + F_1 - a_1 \dot{x}, \\ m_2 \ddot{y} &= -(k_2 + k)y + kx + F_2 - a_2 \dot{y}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

em que $F_1 = F_1(t)$, $F_2 = F_2(t)$ e a_1 e a_2 são os coeficientes de atrito viscoso. Para que as equações (3.66) sejam iguais à (3.27), devemos ter $\gamma_1 = a_1/m_1$, $\gamma_2 = a_2/m_2$, $\zeta_1(t) = F_1(t)/m_1$ e $\zeta_2(t) = F_2(t)/m_2$.

Procedendo de maneira análoga à apresentada no capítulo 1, equações (1.19)-(1.22), obtemos

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\ddot{x}} &= - \left(a_1 + a_2 \frac{m_1}{m_2} \right) \ddot{\ddot{x}} - \left[(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2} + \frac{a_2 a_1}{m_2} \right] \ddot{x} - \\ &\quad - \left[(k_2 + k) \frac{a_1}{m_2} + (k_1 + k) \frac{a_2}{m_2} \right] \dot{x} - \left[\frac{(k_1 + k)(k_2 + k)}{m_2} - \frac{k^2}{m_2} \right] x + \\ &\quad + \frac{k_2 + k}{m_2} F_1(t) + \ddot{F}_1(t) + \frac{k}{m_2} F_2(t) + \frac{a_2}{m_2} \dot{F}_1, \end{aligned} \quad (3.67)$$

que deve ser considerada em conjunto com as seguintes condições iniciais:

$$x(0),$$

$$\dot{x}(0),$$

$$\ddot{x}(0) = -\frac{k_1 + k}{m_1} x(0) - \frac{a_1 \dot{x}(0)}{m_1} + \frac{F_1(0)}{m_1} + \frac{k}{m_1} y(0),$$

$$\ddot{\ddot{x}}(0) = - \left[\frac{k_1 + k}{m_1} - \frac{a_1^2}{m_1^2} \right] \dot{x}(0) + \frac{k}{m_1} \dot{y}(0) + \frac{a_1(k_1 + k)}{m_1^2} x(0) - \frac{a_1 k}{m_1^2} y(0) + \frac{\dot{F}_1(0)}{m_1} - \frac{a_1}{m_1^2} F_1(0). \quad (3.68)$$

Essas condições iniciais são extensão das equações (1.27) quando incorpora-se forças de atrito proporcionais à velocidade e forças externas. Podemos ainda dividir por m_1 a equação (3.67) e renomear cada coeficiente:

$$\alpha = \frac{\left(a_1 + a_2 \frac{m_1}{m_2} \right)}{m_1}, \quad (3.69)$$

$$\beta = \frac{\left[(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2} + \frac{a_2 a_1}{m_2} \right]}{m_1}, \quad (3.70)$$

$$\gamma = \frac{\left[(k_2 + k) \frac{a_1}{m_2} + (k_1 + k) \frac{a_2}{m_2} \right]}{m_1}, \quad (3.71)$$

$$\delta = \frac{\left[\frac{(k_1 + k)(k_2 + k)}{m_2} - \frac{k^2}{m_2} \right]}{m_1} \quad (3.72)$$

para escrever a equação (3.67) como

$$\ddot{x} + \alpha \dot{x} + \beta \ddot{x} + \gamma \dot{x} + \delta x = \frac{k_2 + k}{m_2} F_1(t) + \ddot{F}_1(t) + \frac{k}{m_2} F_2(t) + \frac{a_2}{m_2} \dot{F}_1, \quad (3.73)$$

que lembra a forma da equação (1.83).

A exemplo de quando obtivemos a equação de Langevin (3.9), podemos supor grandes amortecimentos, por exemplo para dois osciladores acoplados. Nesse caso, também vamos formalmente tomar o limite de massa nula, isto é, $m_1 \rightarrow 0$ e $m_2 \rightarrow 0$. Esse procedimento faz com que o sistema de equações (3.66) se reduza a

$$\begin{aligned} \dot{x} &= - \left(\frac{k_1 + k}{a_1} \right) x + \frac{k}{a_1} y + \frac{F_1}{a_1}, \\ \dot{y} &= - \left(\frac{k_2 + k}{a_2} \right) y + \frac{k}{a_2} x + \frac{F_2}{a_2}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Uma dinâmica com foco exclusivo em x pode ser obtida desse sistema de equações derivando a primeira delas em relação ao tempo e eliminando as dependências em \dot{y} e y . Ao realizar esse procedimento, tem-se

$$\ddot{x} = - \left[\frac{k_1 + k}{a_1} + \frac{k_2 + k}{a_2} \right] \dot{x} - \left[\frac{(k_1 + k)(k_2 + k) - k^2}{a_1 a_2} \right] x + \frac{k_2 + k}{a_1 a_2} F_1 + \frac{k}{a_1 a_2} F_2 + \frac{\dot{F}_1}{a_1}. \quad (3.75)$$

É interessante perceber que, se levarmos em conta apenas termos proporcionais a $a_1 a_2$, a_1/m_2 , a_2/m_2 da equação (3.67), reobtemos a equação (3.75). Por sua vez, as condições iniciais para a equação (3.75) são (correspondentes à equação (3.68))

$$x(0), \quad \dot{x}(0) = - \frac{k_1 + k}{a_1} x(0) + \frac{k}{a_1} y(0) + \frac{F_1(0)}{a_1}. \quad (3.76)$$

Após essa breve discussão com $m_1 \rightarrow 0$ e $m_2 \rightarrow 0$, retornemos ao caso não aproximado. A exemplo do caso sem as forças F_1 e F_2 ($F_1 = F_2 = 0$) e sem atrito ($a_1 = a_2 = 0$), a dinâmica para x pode ser obtida indistintamente das equações (3.66) ou (3.67), com as condições iniciais (3.68). Ou seja, as dinâmicas para $x(t)$ via as equações (3.66) ou (3.67) são equivalentes.

A seguir, empregando essa equivalência, traçaremos um paralelo entre as equações de Langevin (3.27) para dois osciladores acoplados e a equação tipo Langevin para o oscilador quártico correspondente (3.67).

Para iniciarmos essa discussão, notemos que no caso de um único oscilador (oscilador usual),

$$m_1\ddot{x} = -a_1\dot{x} - k_1x + F(t), \quad (3.77)$$

o termo de atrito, $-a_1\dot{x}$, não é invariante por reversão temporal em contraposição ao termo $m\ddot{x}$. Fato esse característico de uma direção privilegiada no tempo, ou seja, aquela que indica o sentido do tempo em processos dissipativos. Por sua vez, no caso de dois osciladores acoplados, a equação para x (3.67) tem os termos com \ddot{x} e \dot{x} que não são invariantes por inversão temporal. Esses termos são aqueles proporcionais a a_1 e a_2 em contraste com aqueles proporcionais a \ddot{x} e \ddot{x} .

Do exposto para dois osciladores acoplados, vemos que possíveis candidatos a forças de atrito em um oscilador PU são termos que violam inversão temporal. Assim, no caso do oscilador PU com derivadas temporais de ordem máxima igual a quatro, os candidatos são termos proporcionais a \ddot{x} e \dot{x} . De uma maneira geral, ao partir de uma lagrangeana, $L = L(x^{(N)}, x^{(N-1)}, \dots, x^{(1)})$ com $x^{(n)} = d^n x/dt^n$, tem-se uma equação de movimento com um termo proporcional a $x^{(2N)}$. Nesse caso, candidatos a possíveis forças de atrito, a serem incluídas nas equações de movimento, são aquelas proporcionais a $x^{(n)}$ com n ímpar e menor que $2N$.

Passemos agora a discutir o papel de $F_1(t)$ e $F_2(t)$ em uma possível conexão com o oscilador PU. Se $F_1(t)$ e $F_2(t)$ forem vistos como ruídos, a equação (3.27) é um sistema de equações de Langevin que, quando resolvido, fornece $x(t)$. Por outro lado, a equação (3.73) (ou equação (3.67)) pode ser vista como algum tipo de equação de Langevin para $x(t)$, porém diferente das situações usuais. Diferente no sentido de ter presente mais de um tipo de força aleatória e derivadas de forças aleatórias. Salvo por algum tipo de sutileza oriunda das naturezas estocásticas dos ruídos $F_1(t)$ e $F_2(t)$, espera-se que as dinâmicas estocásticas ditadas pelas equações (3.27) e (3.73) (com as equações (3.68)) sejam as mesmas. Em particular, assim como no limite de tempo longo (caso estacionário), a distribuição de probabilidade de equilíbrio (3.30) é obtida a partir da equação (3.27) via a correspondente equação de Fokker-Planck (3.29), espera-se que haja uma correspondente distribuição de probabilidade de equilíbrio oriunda diretamente da equação (3.73). Nesse sentido, a consistência desses dois cenários deveria implicar em uma

mesma distribuição de probabilidade para a variável x . Em particular, isso equivale a dizer que (usando a equação (3.30))

$$P(x) = \int P(x, y, v_x, v_y) dy dv_x dv_y = \tilde{N} \exp \left[-\frac{\beta}{2} \left(\frac{k(k_1 + k_2) + k_1 k_2}{k + k_2} \right) x^2 \right] \quad (3.78)$$

deve ser obtido no equilíbrio independentemente do ponto de partida ser a equação (3.27) ou (3.73). Conclusão semelhante, também, deveria ser verificada quando discutido os resultados que se originam do sistema (3.74) ou da equação (3.75).

Nesse cenário de possível equivalência, já temos a equação de Fokker-Planck (3.29), que corresponde à dinâmica de Langevin (3.27). Entretanto, não temos a equação de Fokker-Planck generalizada correspondente à equação (3.73). Empregamos o termo generalizada para indicar o nosso desconhecimento de qual seria o tipo de equação de Fokker-Planck que surgiria, se possível, ao partirmos de uma equação de Langevin que contenha dois ruídos e derivadas de ruídos. Essa dificuldade com derivadas de ruídos desaparecia se considerássemos o caso em que $F_1(t) = 0$. Poderíamos, nesse caso, também empregar $a_1 = 0$, como feito para obter a equação (3.64). Portanto, usando $F_1(t) = 0$ e $a_1 = 0$, a equação (3.67) e (3.68) se reduzem a

$$m_1 \ddot{x} = a_2 \frac{m_1}{m_2} \ddot{x} - \left[(k_1 + k) + (k_2 + k) \frac{m_1}{m_2} \right] \ddot{x} - (k_1 + k) \frac{a_2}{m_2} \dot{x} - \left[\frac{(k_1 + k)(k_2 + k)}{m_2} - \frac{k^2}{m_2} \right] x + \frac{k}{m_2} F_2(t) \quad (3.79)$$

e

$$\begin{aligned} x(0), \quad \dot{x}(0), \\ \ddot{x}(0) = -\frac{k_1 + k}{m_1} x(0) + \frac{k}{m_1} y(0), \quad \ddot{x}(0) = -\frac{k_1 + k}{m_1} \dot{x}(0) + \frac{k}{m_1} \dot{y}(0). \end{aligned} \quad (3.80)$$

Em tal caso, esperaríamos verificar, supondo consonância com a equação (3.64), que

$$\begin{aligned} \langle v_x^2 \rangle &= \frac{m_2^2 \Gamma_2}{2m_1 a_2}, \\ \langle x^2 \rangle &= \frac{(k + k_2) m_2^2 \Gamma_2}{2a_2 [k(k_1 + k_2) + k_1 k_2]}. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Com esse resultado, questionaremos se ele poderia ser mapeado em um oscilador PU estocástico.

De uma maneira geral, apesar de estarmos fazendo um paralelo entre o oscilador PU e o sistema de dois osciladores acoplados, resta ainda a dúvida de qual seria a melhor maneira (ou a mais consistente) para introduzir uma dinâmica estocástica para o oscilador PU. Temos a dúvida, por exemplo, se seria suficiente considerar apenas um tipo de ruído (sem o outro tipo e sem derivadas). No oscilador PU quártico, deveria haver apenas um termo que viola inversão temporal (\dot{x} ou \ddot{x}) ou seriam necessários ambos? Entendemos, ainda, que para cada candidato

à equação de Langevin para o oscilador PU seria de interesse obter uma equação tipo Fokker-Planck. Por fim, nesse cenário, caberia ainda identificar o possível papel da instabilidade de Ostrogradsky.

4 Conclusão

Neste trabalho, revemos vários aspectos relacionados ao oscilador de Pais-Uhlenbeck. Após a introdução desse oscilador na literatura de física em 1950[1], há um crescente interesse em sistemas que apresentam derivadas de ordem superior a dois. A grande maioria desses estudos é motivada por propostas de teoria de campo, notadamente relacionadas a teorias fundamentais, como teoria de cordas[3], gravitação quântica[15] e geometria não comutativa[16]. Nesse contexto, existem dificuldades na construção e aplicação do formalismo que se baseia no de lagrangeanas com até derivadas de primeira ordem. Assim, pode-se perguntar se há um modelo mínimo, com derivadas de ordem superior, que exhibe, em alguma proporção, a problemática relacionada a essa classe de teorias. A resposta é positiva e esse sistema mínimo é o oscilador de Pais-Uhlenbeck(PU).

Visando fornecer uma motivação para introduzir o oscilador PU, começamos nossa discussão com dois osciladores acoplados. No contexto da mecânica clássica, verificamos uma equivalência entre esses osciladores e o oscilador PU, mesmo no caso limite no qual os dois osciladores se desacoplam. No entanto, essa equivalência somente ocorre quando as condições iniciais são escolhidas apropriadamente.

A seguir, com o objetivo de generalizar o formalismo Hamiltoniano da mecânica clássica, fomos conduzidos ao formalismo de Ostrogradsky. Assim como no caso usual, empregamos transformadas de Legendre. Para uma lagrangeana com derivada temporal máxima igual a N , temos N momentos canônicos conjugados e N transformadas de Legendre. A partir da hamiltoniana desse formalismo, constatamos que as respectivas equações de Hamilton são equivalentes à correspondente equação de Euler-Lagrange. Além disso, a hamiltoniana obtida é interpretada como energia do sistema, que é uma constante do movimento se a lagrangeana não depender explicitamente do tempo. Em contraste com todas as semelhanças com o caso usual (lagrangeanas que dependam das coordenadas e de suas derivadas de primeira ordem), surge uma instabilidade quando derivadas de ordem superior à primeira estão presentes. Essa instabilidade surge da presença de pelo menos um termo linear em um dos momentos canônicos, porque esse momento pode ser desmedidamente negativo. Esse fato, por sua vez, mostra que mesmo que a energia seja conservada, o momento conservado em questão pode ser tão negativo quanto se queira.

Além do mais, enumeramos seis aspectos e discutimos três aspectos da instabilidade de Ostrogradsky, em que, em particular, mostramos que a imposição de um único vínculo global no funcional de energia não melhora a instabilidade. Isso implica que, de fato, mesmo que a energia seja conservada globalmente, ainda teríamos que lidar com setores com energia arbitrariamente negativos. Aplicamos o formalismo de Ostrogradsky ao oscilador PU. Com isso, percebemos que a hamiltoniana, apesar de se conservar, não é limitada inferiormente. Ademais, verificamos que a hamiltoniana se decompõe na de dois osciladores usuais, porém um com energia positiva definida e outro com energia negativa definida, mostrando explicitamente a não existência de um limite inferior. Esses resultados foram estendidos para o oscilador PU de ordem $2N$, no caso em que as frequências características são reais e distintas.

Após esse estudo clássico, partimos para a vertente quântica. Como primeira etapa desse novo cenário, fizemos a quantização canônica usual, isto é, partindo da hamiltoniana e dos comutadores canônicos entre coordenadas e momentos. Consistentemente com a hamiltoniana clássica não limitada inferiormente, vimos que o espectro quântico contém energias ilimitadas negativa e positivamente. Além disso, no caso degenerado (dois osciladores usuais com a mesma frequência), percebemos que o operador Hamiltoniano pode não ser diagonalizável. Ademais, nos deparamos com estados de norma negativa, refletindo, mais uma vez, as dificuldades de um formalismo para o oscilador PU. Além disso, examinamos os três últimos pontos enumerados no capítulo 1, em particular, notamos que, se o sistema instável interagir, então o vácuo físico pode decair numa coleção de excitações positivas e negativas, que mostra que o vácuo físico conectado com o oscilador PU pode ser, geralmente, sensível à adição de termos de interação na lagrangeana original.

Na direção de contornar essas dificuldades, introduzimos novos parâmetros para refazer a quantização canônica. Com isso, obtivemos um operador Hamiltoniano diagonalizável e com espectro não negativo, porém, no caso degenerado, o Hamiltoniano resultante não é hermitiano, o que implica que ele não é um observável e que o limite clássico não pôde ser recuperado. Por fim, apontamos sobre a tentativa de se usar a quantização de sistemas vinculados para o oscilador PU.

Um último contexto no qual discutimos o oscilador PU foi no da mecânica estatística. Primeiramente, percebemos que a distribuição de probabilidades do tipo Boltzmann-Gibbs não é bem comportada. Isso decorre do fato de que a hamiltoniana, não sendo limitada inferiormente, não conduz a um peso estatístico normalizável. Sabendo desse obstáculo, enveredamos

na investigação da dinâmica nas vizinhanças do equilíbrio termo-estatístico, isto é, consideramos equações de Langevin e de Fokker-Planck. Nesse caso, após uma sucinta revisão dessas equações, as aplicamos ao caso de dois osciladores acoplados. Contudo, na tentativa de estender esse procedimento para o oscilador PU, deparamo-nos com algumas dificuldades. Ao aplicarmos as equações de Langevin e Fokker-Planck para dois osciladores acoplados, obtivemos um rico cenário a depender de seus parâmetros. A partir do sistema de equações, verificamos a equação de Langevin correspondente para somente uma variável. Essa equação, que é de quarta ordem, contém dois termos que violam a inversão temporal (proporcionais a \dot{x} e a \ddot{x}) e ruídos que, em geral, dependem de derivadas. Os termos que violam a inversão temporal são aqueles relacionados às forças de atrito. Por sua vez, os ruídos conduzem a dificuldades para se chegar a uma equação tipo Fokker-Planck. Verificamos que esse cenário, transposto para o oscilador PU, indica que uma equação de Langevin para ele poderia apresentar termos de atrito consistentes com a violação de inversão temporal e forças aleatórias com eventuais derivadas de ruído. Apesar dessas dificuldades, os resultados obtidos valorizam o papel de dois osciladores acoplados na discussão de uma possível mecânica estatística para o oscilador PU.

Todos resultados aqui discutidos indicam que mais investigações são necessárias para fornecer um cenário mais claro sobre o oscilador de Pais-Uhlenbeck nas suas diversas vertentes: clássica, quântica e termo-estatística.

5 Referências

1. A. Pais, G. E. Uhlenbeck, *On fields with non-localized action*. Physical Review 79, 145 (1950).
2. K. S. Stelle, *Renormalization of higher derivative quantum gravity*. Physical Review D 16, 953 (1977).
3. I. G. Avramidi, *Covariant methods for the calculation of the effective action in quantum field theory and investigation of higher derivative quantum gravity*. Tese de Doutorado apresentada à Moscow State University (1986).
4. D.A. Eliezer, R. P. Woodard, *The problem of nonlocality in string theory*, Nuclear Physics B 325, 389 (1989).
5. A. V. Smilga, *Benign vs malicious ghosts in higher-derivative theories*, Nuclear Physics B 706, 598 (2005).
6. A. V. Smilga, *Ghost-free higher-derivative theory*, Physics Letters B 632, 433 (2006).
7. A. V. Smilga, *Comments on the dynamics of the Pais-Uhlenbeck oscillator*. SIGMA 5, 17 (2009).
8. M. Pavsic, *Stable self-interacting Pais-Uhlenbeck oscillator*. Modern Physics Letter A 28, 1350165 (2013).
9. G. Rabuffo, *Local cohomology, master equation and renormalization of higher-derivative and nonlocal quantum gravity*. Tese de Doutorado, University of Pisa (2014).
10. A. Salvio, A. Strumia, *Quantum mechanics of 4-derivative theories*. European Physical Journal C 76, 227 (2016).
11. B. Holdom, J. Ren, *A QCD analogy for quantum gravity*. Physical Review D 93, 124030 (2016).
12. S. Ketov, G. Michiaki, T. Yumibayashi, *Quantizing with a higher time derivative*. Advances in Quantum Field Theory, Estados Unidos (2012).

13. J. Lopez-Sarrion, C. M. Reyes, *Myers-Pospelov model as an ensemble of Pais-Uhlenbeck oscillators: unitarity and Lorentz invariance violation*. European Physical Journal C 73, 2391 (2013).
14. W. Thirring, *Regularization as a consequence of higher order equations*. Physical Review 77, 570 (1950).
15. E. T. Tomboulis, *Unitarity in higher-derivative quantum gravity*, Physical Review Letters 52, 1173 (1984).
16. Z. Guralnik et al., *Testing non-commutative QED, constructing non-commutative MHD*, Physics Letters B 517, 450 (2001).
17. M. V. Ostrogradsky, *Mémoires sur les équations différentielles, relatives au problème des isopérimètres*. Mem. Acad. Imper. Sci. St. Petersburg 6 (1850).
18. C. M. Bender, P. D. Mannheim, *No-ghost theorem for the fourth-order derivative Pais-Uhlenbeck oscillator model*, Physical Review Letters 100, 110402 (2008).
19. M.C. Nucci, P.G.L. Leach, *An algebraic approach to laying a ghost to rest*, Physica Scripta 81, 5 (2010).
20. J. Maldacena, *Einstein gravity from conformal gravity*. arXiv:1105.5632 (2011).
21. R. P. Feynman, *Negative probabilities in quantum mechanics*. Routledge, Londres (1987).
22. M. Raidal, H. Veermäe, *On the quantisation of complex higher derivative theories and avoiding the Ostrogradsky ghost*. arXiv:1611.03498 (2016).
23. S. Ryu, T. Takayanagi, *Holographic derivation of entanglement entropy from the anti-de Sitter space/conformal field theory correspondence*. Physical Review Letters 96, 181602(2006).
24. H. Dimov, S. Mladenov, R. C. Rashkov, T. Vetsov, *Quantum entanglement of Pais-Uhlenbeck oscillators*. arXiv:1607.07807v2 (2016).
25. K. Nakagawa, *Entanglement entropies of coupled harmonic oscillators*. arXiv:1601.03584 (2016).
26. T. Nishioka, S. Ryu, T. Takayanagi, *Holographic entanglement entropy: an overview*. Journal of Physics A 42, 504008 (2009).

27. C. de Rham, L. Heisenberg, R. H. Ribeiro, *Ghosts and matter couplings in massive (bi- and multi-)gravity*. Physical Review D 90, 124042 (2014).
28. S. Weinberg, *Effective field theory for inflation*. Physical Review D 77, 123541 (2008).
29. N. Lobachevsky, *Pangeometry*. Editado e comentado por A. Papadopoulos. European Society of Mathematics, Suíça (2010).
30. P. Spezzati, *Teorie di ordine superiore, instabilità e lagrangiane degeneri*. Tesi di laurea triennale presentata all'Università degli Studi di Padova (2015).
31. H. Motohashi, T. Suyama, *Third-order equations of motion and the Ostrogradsky instability*, Physical Review D 91, 085009 (2015).
32. R. P. Woodard, *Ostrogradsky's theorem on Hamiltonian instability*, Scholarpedia 10, 32243 (2015).
33. P. D. Mannheim, A. Davidson, *Dirac quantization of the Pais-Uhlenbeck fourth order oscillator*, Physical Review A 71, 042110 (2005).
34. A. Mostafazadeh, *A Hamiltonian formulation of the Pais-Uhlenbeck oscillator that yields a stable and unitary quantum system*, Physics Letters A 375, 93 (2010).
35. S. W. Hawking, T. Hertog, *Living with ghosts*, Physical Review D 65, 103515 (2002).
36. J. M. Cline, S. Jeon, G. D. Moore, *The phantom menaced: constraints on low-energy effective ghosts*, Physical Review D 70, 043543 (2004).
37. D. Bourilkov, *Search for TeV strings and new phenomena in Bhabha scattering at LEP2*, Physical Review D 62, 076005 (2000).
38. D. S. Kaparulin, S. L. Lyakhovich, A. A. Sharapov, *Classical and quantum stability of higher-derivative dynamics*, The European Physical Journal C 74, 3072 (2014).
39. E. Caliceti, F. Cannata, S. Graffi, *PT symmetric Schrödinger operators: reality of the perturbed eigenvalues*, SIGMA 6, 009 (2010).
40. A. Mostafazadeh, *Real description of classical Hamiltonian dynamics generated by a complex potential*, Physics Letter A 357, 177 (2006).
41. A. Das, *Field theory: a path integral approach*, World Scientific, Singapura (1993).

42. R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw–Hill, Estados Unidos (1965).
43. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Classical theory of fields*, Pergamon Press, Grã-Bretanha (1971).
44. J. Barcelos-Neto, A. Das, W. Scherer, *Canonical quantization of constrained systems*. Acta Physica Polonica B 18, 270 (1987).
45. H. O. Girotti, *Classical and quantum dynamics of constrained systems em Field theory and particle physics*. V Jorge André Swieca Summer School, Brasil (1989).
46. J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarendon Press, Estados Unidos (1996).
47. J. R. Klauder, *Quantization of constrained systems*. Notas de aula disponíveis em arXiv:hep-th/0003297 (2001).
48. K. Andrzejewski, J. Gonera, P. Maslanka, *Euclidean path integral and higher-derivative Theories*, Progress of Theoretical Physics 125, 247 (2011).
49. C. Fräßdorf, *Quantization of singular systems in canonical formalism*. Tese de Bacharelado apresentada à Freie Universität, Berlim (2011).
50. T. Lancaster, S.J. Blundell, *Quantum field theory for the gifted amateur*. Oxford University Press, Estados Unidos (2014).
51. H. Murayama, *221A lecture notes - path integral*. Disponível em <http://hitoshi.berkeley.edu/221a/pathintegral.pdf>. Acessado em 25 de Agosto, 2016.
52. K. Schulten, *PHYS 480 lecture notes - chapter 2: path integral formulation of quantum mechanics*. Disponível em http://www.ks.uiuc.edu/Services/Class/PHYS480/qm_PDF/chp2.pdf. Acessado em 25 de Agosto, 2016.
53. J. Ellenber, *Lectures notes on linear algebra*. Disponível em <http://www.math.wisc.edu/~ellenber/Math204Lects/Week10.pdf>. Acessado em 14 de Setembro, 2016.
54. G. Parisi, Y. S. Wu, *Perturbation theory without gauge fixing*. Scientia Sinica 24, 483 (1981).

-
55. T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. Editora da Universidade de São Paulo (EDUSP), Brasil (2001).
 56. K. R. Pathria, P. D. Beale, *Statistical Mechanics*. Elsevier, Inglaterra (2011).
 57. Wolfram Research, Inc., *Mathematica*, Versão 11.1, Estados Unidos (2017).

APÊNDICE A – Introdução às equações de Langevin e Fokker-Planck

No espírito de manter o trabalho o mais auto-contido possível, neste apêndice apresentaremos a conexão entre as equações de Langevin e a equação de Fokker-Planck, baseando-nos na referência [55].

A.1 A função característica da equação de Langevin e a equação de Fokker-Planck

Seja $P_n(x_n)$ a distribuição de probabilidade da variável x_n e $g_n(k)$ a correspondente função característica, dada por

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} P_n(x_n) dx_n. \quad (\text{A.1})$$

Consequentemente,

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n) + \tau \zeta_n]} \rangle, \quad (\text{A.2})$$

em que empregou-se

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n) + \tau \zeta_n, \quad (\text{A.3})$$

uma discretização da equação de Langevin

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t). \quad (\text{A.4})$$

Tendo em vista que x_n e ζ_n são independentes, podemos escrever

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n)]} \rangle \langle e^{ik\tau \zeta_n} \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Em seguida, obtemos a expansão de $g_{n+1}(k)$ até termos de primeira ordem em τ . O primeiro termo do produto nos dá

$$\langle e^{ikx_n} [1 + ik\tau f(x_n)] \rangle = \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle f(x_n) e^{ikx_n} \rangle \quad (\text{A.6})$$

e o segundo

$$\langle e^{ik\tau\zeta_n} \rangle = 1 + ik\tau\langle\zeta_n\rangle - \frac{1}{2}k^2\tau^2\langle\zeta_n^2\rangle = 1 - \frac{1}{2}k^2\tau\Gamma, \quad (\text{A.7})$$

em que usamos as propriedades $\langle\zeta_n\rangle = 0$ e $\langle\zeta_n^2\rangle = \Gamma/\tau$, que correspondem à discretização de

$$\langle\zeta(t)\rangle = 0 \quad (\text{A.8})$$

e

$$\langle\zeta(t)\zeta(t')\rangle = \Gamma\delta(t-t'). \quad (\text{A.9})$$

Logo, preservando somente termos até a primeira ordem de τ , obtemos

$$g_{n+1}(k) = g_n(k) + \tau\{ik\langle f(x_n)e^{ikx_n} \rangle - \frac{\Gamma}{2}k^2\langle e^{ikx_n} \rangle\}. \quad (\text{A.10})$$

Usamos agora as seguintes propriedades

$$ik\langle f(x)e^{ikx} \rangle = \langle f(x)\frac{d}{dx}e^{ikx} \rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{d}{dx}[f(x)P_n(x)]dx \quad (\text{A.11})$$

e

$$-k^2\langle e^{ikx} \rangle = \langle \frac{d^2}{dx^2}e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{d^2}{dx^2}P_n(x)dx \quad (\text{A.12})$$

na equação (A.10) para concluir que

$$P_{n+1}(x) - P_n(x) = -\tau\frac{d}{dx}[f(x)P_n(x)] + \tau\frac{\Gamma}{2}\frac{d^2}{dx^2}P_n(x). \quad (\text{A.13})$$

Dividindo os dois lados por τ e tomando o limite $\tau \rightarrow 0$, chegamos a

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)] + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \quad (\text{A.14})$$

que é a equação de evolução temporal da distribuição de probabilidade $P(x,t)$. Essa equação é denominada equação de Fokker-Planck e o caso para N variáveis será exposto na próxima seção.

A.2 A equação de Fokker-Planck com N variáveis

Suponha que o sistema seja descrito por um conjunto de N variáveis x_1, x_2, \dots, x_N .

Nesse caso, a generalização da equação (A.4) é o sistema de equações de Langevin dado por

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_1(t), \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_2(t), \\ &\vdots \\ \frac{dx_N}{dt} &= f_N(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_N(t), \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

em que as variáveis estocásticas $\zeta_1(t), \zeta_2(t), \dots, \zeta_N(t)$ possuem as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0 \quad (\text{A.16})$$

e

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \Gamma_i \delta(t - t') \quad (\text{A.17})$$

em que $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \dots$ são constantes.

Usando procedimento análogo ao utilizado para o caso de uma variável, podemos obter a equação para a distribuição de probabilidades $P = P(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$, que corresponde à dinâmica de Langevin para as variáveis estocásticas x_1, x_2, \dots, x_N . Isso feito, verificamos que

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Gamma_i \frac{\partial^2 P}{\partial x_i^2} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (x_i P), \quad (\text{A.18})$$

denominada equação de Fokker-Planck com N variáveis.

A.3 Dinâmica de momentos

Em muitos casos, resolver um sistema de equações de Langevin como (A.15) ou a equação de Fokker-Planck associada pode ser uma tarefa formidável. Assim, em determinados casos, podemos nos limitar a obter alguma informação mais simplificada. Esse é o caso, por exemplo, de usarmos as equações de Langevin (A.15) para obter equações para alguns momentos das coordenadas. Usando um procedimento de discretização como o que conduziu à equação (A.3), pode-se mostrar, por exemplo, que[55]

$$\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \langle f_i \rangle, \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{d\langle x_i x_j \rangle}{dt} = \langle x_i f_j \rangle + \langle x_j f_i \rangle + \Gamma_i \delta_{ij}. \quad (\text{A.20})$$

Faremos agora dois exemplos que servem de comparativos com o apresentado no capítulo 3. O primeiro desses exemplos é o de uma força restauradora $f(x) = -\kappa x$ nas equações (3.9), (3.10) e (3.11)¹. Escrevendo essa equação de Langevin, temos

$$\frac{dx}{dt} = -\kappa x + \eta. \quad (\text{A.21})$$

¹ Usaremos κ para evitar confusão com os diversos k 's introduzidos na dissertação.

Tomando a média sobre *ensembles* e usando as propriedades de η , obtemos a evolução temporal do primeiro momento (A.19):

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\kappa \langle x \rangle \rightarrow \langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle e^{-\kappa t}. \quad (\text{A.22})$$

Percebemos que, se $t \rightarrow \infty$, $\langle x \rangle \rightarrow 0$. De forma análoga, podemos chegar ao segundo momento (A.20):

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = -2\kappa \langle x^2 \rangle + \Gamma' \rightarrow \langle x(t)^2 \rangle = \frac{\Gamma'}{2\kappa} + \left(\langle x(0)^2 \rangle - \frac{\Gamma'}{2\kappa} \right) e^{-2\kappa t}, \quad (\text{A.23})$$

e, no limite de $t \rightarrow \infty$, $\langle x^2 \rangle \rightarrow \Gamma'/2\kappa$.

O segundo exemplo a ser estudado também é o de um único oscilador harmônico, porém sem desconsiderar o termo de aceleração. Nesse caso, o sistema de equações de Langevin é dado por (veja equação (3.20))

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v, \\ \frac{dv}{dt} &= -\gamma v - \tilde{k}x + \zeta_v, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

em que $\tilde{k} = k/m$, $\gamma = \alpha/m$ e $\zeta_v = F(t)/m$. Calculando os primeiros momentos das duas equações (A.24), escrevemos

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= v, \\ \frac{d\langle v \rangle}{dt} &= -\gamma \langle v \rangle - \tilde{k} \langle x \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Como o potencial é confinante, o sistema chega a um regime estacionário e, no limite de $t \rightarrow \infty$, $\langle x \rangle \rightarrow c_1$ e $\langle v \rangle \rightarrow c_2$, em que c_1 e c_2 são constantes. Nesse regime, o sistema de equações (A.25) nos conduz a

$$\langle v \rangle = 0, \quad \langle x \rangle = 0. \quad (\text{A.26})$$

Os segundos momentos (A.20) são tais que

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} &= 2\langle xv \rangle, \\ \frac{d\langle xv \rangle}{dt} &= \langle v^2 \rangle - \tilde{k} \langle x^2 \rangle - \gamma \langle xv \rangle, \\ \frac{d\langle v^2 \rangle}{dt} &= -\gamma \langle v^2 \rangle - \tilde{k} \langle xv \rangle + \Gamma. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

No mesmo limite de $t \rightarrow \infty$ e empregando $\langle x^2 \rangle$, $\langle xv \rangle$ e $\langle v^2 \rangle$ constantes, obtemos

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{\gamma}, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{\Gamma}{\gamma \tilde{k}}, \quad \langle xv \rangle = 0. \quad (\text{A.28})$$

Resultado esse que é consistente com o $\beta = 2\gamma/m\Gamma$ presente na equação (3.23).