

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

David Velasco Villamizar

**APLICAÇÕES DO *QUANTUM SPEED LIMIT* EM SISTEMAS
QUÂNTICOS RELATIVÍSTICOS E NÃO RELATIVÍSTICOS**

Florianópolis(SC)
2016

David Velasco Villamizar

APLICAÇÕES DO *QUANTUM SPEED LIMIT* EM SISTEMAS QUÂNTICOS RELATIVÍSTICOS E NÃO RELATIVÍSTICOS

Tese submetida ao Programa de pós-graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Doutor em Física.
Orientador: Prof. Dr. Eduardo Inacio Duzzioni.

Florianópolis(SC)
2016

Dedico esse trabalho a minha família,
a meu amor, a meus colegas, a todos
meus amigos e a meu orientador pela
grande parceria criada entre nós.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo estudar as aplicações do mínimo tempo de evolução em sistemas quânticos não relativísticos e relativísticos. Inicialmente, analisa-se a dinâmica de um elétron em um campo magnético uniforme, encontrando uma relação entre a transição de tais estados e o deslocamento espacial médio do elétron. Utilizando uma descrição relativística através da equação de Dirac verifica-se que o deslocamento espacial do elétron nunca se dá a velocidades maiores que a velocidade da luz no vácuo no menor intervalo de tempo que caracteriza a transição entre os estados inicial e ortogonal. Enquanto que utilizando uma descrição não relativística do sistema através do Hamiltoniano de Pauli, o elétron pode atingir velocidades maiores que a velocidade da luz no vácuo para campos magnéticos muito intensos. Tal resultado permite que seja estabelecida uma conexão entre o espaço abstrato de Hilbert e o espaço das coordenadas espaço-temporais, além de delimitar a teoria mais adequada para o tratamento deste sistema físico. Na segunda parte desse trabalho, utiliza-se o QSL de uma maneira diferente da usual, buscando prever o tempo real da evolução de um processo físico, a partir do critério de Mandelstam-Tamm estendido para estados puros de sistemas dependentes do tempo e de dinâmica unitária. Propõe-se um método baseado na ação de uma transformação unitária que permite descrever o sistema quântico em outro referencial onde a incerteza de energia é menor, e portanto, a rapidez da evolução é mais lenta. Por conseguinte, a aplicação do critério Mandelstam-Tamm estendido no novo referencial permite obter previsões mais próximas do tempo real da evolução. A fim de testar a validade do método proposto, compara-se o seu poder de previsão com o tempo de evolução do spin nuclear $1/2$ de um átomo de Fósforo da molécula ácido o-fosfórico e do spin nuclear $3/2$ de um átomo de sódio da molécula dodecil sulfato de sódio. Em geral, este tipo de sistema é descrito por hamiltonianos altamente oscilantes no referencial do laboratório de modo que no referencial girante esse é descrito por um hamiltoniano independente do tempo. Nos exemplos aqui delineados, as previsões obtidas para um determinado estado inicial puderam ser melhoradas até quatro ordens de grandeza.

Palavras-chave: Mecânica Quântica, Informação Quântica, Quantum Speed Limit.

ABSTRACT

This work aims to study the application of the minimum evolution time in quantum systems not relativistic and relativistic. Initially, we analyze the dynamics of an electron in a uniform magnetic field, finding a relationship between the transition of these states and the average spatial displacement of the electron. By using a relativistic description by Dirac equation it can be seen that the spatial displacement electron never occurs at speeds greater than the speed of light in vacuum in the shortest time interval that characterizes the transition between the initial and orthogonal states. While using a non-relativistic description of the system through the Hamiltonian Pauli, the electron can achieve greater velocities than the speed of light in vacuum for strong magnetic fields. This result allows a connection to be established between the abstract Hilbert space and the space of space-time coordinates, and define the most suitable theory for the treatment of this physical system. In the second part of this work, we use the QSL in a different way from usual, trying to predict the real-time evolution of a physical process, from Mandelstam-Tamm extended bound to pure states of time-dependent and dynamic systems unit. We propose a method based on the action of a processing unit that allows describing the quantum system into another frame in which the uncertainty of energy is smaller, and hence the speed of change is slower. Therefore, the application of Mandelstam-Tamm extended bound in the new framework allows for closer to the real-time evolution forecasts. In order to test the validity of the proposed method, compares their predictive power with the time evolution of the nuclear spin $1/2$ of a phosphorus atom of the phosphoric acid molecule and the nuclear spin $3/2$ of an atom of sodium dodecyl sulphate molecule. In general, this type of system is described by highly oscillating Hamiltonian in the reference laboratory so that the rotating frame that is described by a time-independent Hamiltonian. In the examples outlined here, the predictions obtained for a given initial state might be improved by up to four orders of magnitude.

Keywords: Quantum Mechanics, Quantum Information, Quantum Speed Limit.

Conteúdo

Nomenclatura	vii
Resumo	ix
Abstract	xi
1 Introdução	1
2 Teoria de Dirac	11
2.1 Partícula livre	15
2.2 Spin e Helicidade	18
3 Elétron em um Campo Magnético	23
3.1 Interação spin-campo magnético	23
3.2 Elétron em movimento em campo magnético uniforme: descrição não relativística	25
3.3 Equação de Dirac para o elétron em campo magnético	36
4 Análise do Mínimo Tempo de Evolução	41
4.1 Elétron não relativístico	42
4.1.1 CASO 1	42
4.1.2 CASO 2	47
4.1.3 CASO 3	51
4.2 Elétron relativístico	54
4.2.1 CASO 1	54
4.2.2 Caso geral	69
4.3 Estado inicial de superposição formado por autoestados com sinal de energia diferentes	76
4.3.1 Orientação de spin oposta	86

5	Estimativa do Tempo Real de Evolução	89
5.1	Transformação Unitária e Método Transcendente	90
5.2	Breve Introdução à Ressonância Magnética Nuclear	94
5.2.1	Interações	94
5.2.2	Processos de medida	95
5.3	Spin 1/2 em RMN	98
5.3.1	Problema do mínimo tempo de evolução quântico	104
5.4	Spin 3/2 em Ressonância Magnética Nuclear	108
5.4.1	Problema do mínimo tempo de evolução quântico	115
6	Conclusões e Perspectivas	119
A	CrITÉRIOS DO MÍNIMO TEMPO DE EVOLUÇÃO QUÂNTICO	123
A.1	CrITÉRIO DE MANDELSTAM-TAMM	123
A.2	CrITÉRIO DE MARGOLUS-LEVITIN	126
A.3	CrITÉRIO DE MANDELSTAM-TAMM ESTENDIDO	128
B	Posição Quadrática Média	131
C	Unidades Naturais	135
D	Resultados Numéricos	137
E	Pacote de Onda Relativístico	141
F	Pacote de Onda Gaussiano	145
	Bibliografia	157

Capítulo 1

Introdução

O computador é uma máquina eletrônica que faz parte de nosso dia a dia, capaz de realizar um sem número de propósitos dada a possibilidade de poder ser programado para resolver processos lógicos de maneira automática. Esse acha-se constituído por diferentes peças externas e internas, sendo duas dessas peças as mais importantes por demarcar o poder da máquina: a unidade de armazenamento de dados (memória) e a unidade de processamento (processador). Naturalmente, sabe-se que o funcionamento de todas as classes de máquinas e dispositivos estão diretamente relacionado às leis da Física, pois essa atua como um órgão legislador que determina o que se pode realizar e o que não se pode.

Por exemplo, sabe-se pela tecnologia atual que a quantidade de dados digitais que pode ser armazenada na superfície dos discos magnéticos por unidade de área, acha-se limitada pela sensibilidade magnética do próprio disco e da precisão da cabeça magnética para organizar as orientações dos domínios magnéticos associados a uma unidade de informação, um bit. Por um lado, a máxima densidade de informação que se pode armazenar nos sistemas físicos estaria limitada pela entropia ou pelo critério de Bekenstein [1]. Esse estabelece um limite superior para a entropia S , ou para a informação I , que pode estar contida dentro de uma determinada região finita do espaço, que tem uma quantidade finita de energia.

Além disso, a capacidade de processamento da informação mediante o uso das unidades de processamento (CPU), tem mostrado um aumento de desempenho ao longo dos anos, apresentando um comportamento de crescimento exponencial desde 1978, como pode ser visto

na Figura (1.1). Do mesmo modo, tem-se visto um aumento da capacidade de armazenamento da informação por unidade de área. Esses dois fatos de performance tecnológica aconteceram em um período médio de dezoito meses, onde se evidenciou um aumento do poder computacional em um fator de dois. Tal fenômeno é conhecido como *Lei de Moore*. Por essa razão, de continuar esse mesmo comportamento, não haveria motivo algum pelo qual a lei de Moore não pudesse continuar vigente sem preocupação alguma, pois essa é uma lei da genialidade humana e não propriamente da natureza. Portanto, existirá algum momento onde essa lei falhará? E quando isso acontecerá?

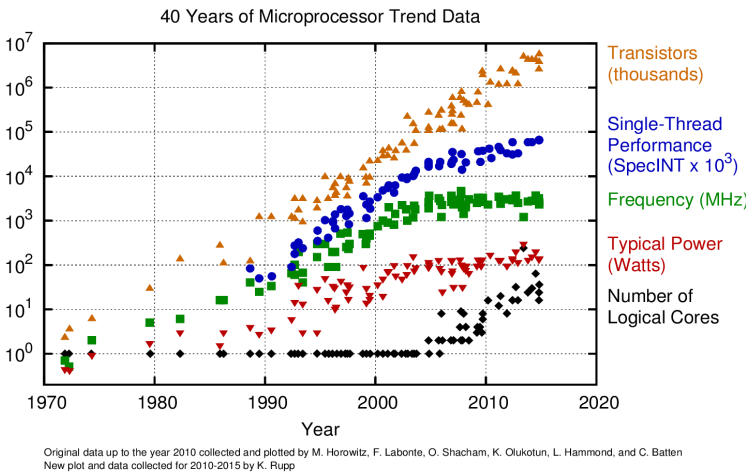


Figura 1.1: Comportamento do poder de processamento de informação nos CPUs, em relação ao número de transistores, encadeamento simples de execução, frequência de processamento, potência típica e núcleos lógicos.

Efetivamente, as respostas para essas perguntas poderão ser achadas por meio da aplicação das leis da Física nos processos da computação [2–6]. Se continuar o comportamento de crescimento exponencial das unidades de processamento, nas próximas duas décadas ou mais, resultará um computador com a capacidade de processamento equivalente à escala atômica individual. Na atualidade existem alguns protótipos de computadores quânticos capazes de armazenar e processar a informação sob alguns poucos átomos individuais [7–17], sendo esses átomos tratados como unidades fundamentais de processamento,

comumente conhecidas na Física quântica como *q-bits*¹. Por enquanto, tudo parece indicar que não há nada proibido nas leis da física para a construção de um computador nessa escala capaz de operar com um número cada vez maior de átomos [18].

Recentemente surgiu um grande interesse em determinar quais são as leis da Física que delimitam o poder da computação. Imagina-se que os limites físicos da computação estejam relacionados essencialmente às constantes fundamentais: a velocidade da luz no vácuo, $c = 2,9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$; a constante reduzida de Planck, $\hbar = h/2\pi = 1,0545 \times 10^{-34} \text{ J s}$; a constante gravitacional, $G = 6,673 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$; e a constante de Boltzmann, $k_B = 1,3805 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$. Achar e compreender os limitantes físicos, fornecerá um maior entendimento da capacidade de armazenamento e da taxa de processamento da informação. Do mesmo modo, na física quântica cada um desses limites é interpretado da seguinte maneira: o primeiro, como o número de estados ortogonais que possui um sistema quântico sujeito a qualquer classe de vínculo físico. O segundo, com o número máximo de estados ortogonais que o sistema quântico pode atingir por unidade de tempo, ou em outras palavras, o mínimo tempo necessário por um sistema quântico evoluir entre dois estados distinguíveis.

Uma primeira abordagem quântica para tentar calcular o limite físico da taxa do processamento de informação veio da relação de incerteza de Heisenberg [19] entre o tempo e a energia, inicialmente discutida por Bohr [20] usando a analogia clássica da análise de Fourier de tempo-frequência. Essa relação de incerteza foi interpretada em termos de duração de um processo de perturbação ou preparação e a incerteza correspondente na energia do sistema. Essa interpretação não apresentou grande interesse, pelo fato do tempo ser um parâmetro e não uma variável dinâmica que caracteriza a evolução do sistema quântico em relação a sua energia.

Tentando responder melhor o significado dessa relação de incerteza em particular, Leonid Mandelstam e Igor Tamm em 1954 [21], acabaram por abordar o problema da máxima taxa de processamento de informação. Eles generalizaram a relação de incerteza de Heisenberg entre o hamiltoniano \hat{H} e um operador hermitiano \hat{R} qualquer,

$$\Delta H \Delta R \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\partial \langle \hat{R} \rangle}{\partial t} \right|, \quad \Delta O = \sqrt{\langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2}, \quad (1.1)$$

onde $\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ é o valor esperado do observável \hat{O} . Redefiniu-se

¹Abreviação do inglês *quantum bits*.

o conceito físico da grandeza Δt na relação de incerteza ao associá-la ao mínimo tempo necessário para que o valor médio da grandeza física representada pelo operador \hat{R} evolua até apresentar uma mudança no seu valor esperado equivalente a sua própria incerteza, ver apêndice A.1. No caso particular onde o operador hermitiano é o operador projeção, e calculando o tempo de transição de um estado quântico com uma incerteza de energia definida para um outro estado, eles definiram a grandeza Δt como o mínimo tempo necessário para que um sistema quântico fechado com incerteza da energia definida, possa evoluir do seu estado inicial até um estado ortogonal e assim distinguir um estado do outro perfeitamente. Este pode ser considerado como o primeiro critério do mínimo tempo de evolução quântico, em inglês *Quantum Speed Limit* (QSL),

$$T_{\text{mín}}^{(MT)} \geq \frac{\pi \hbar}{2\Delta H}. \quad (1.2)$$

Com o passar dos anos, alguns outros trabalhos surgiram com o propósito de oferecer uma maior compreensão do mínimo tempo de evolução quântico [22–26]. Sendo em 1990 Jeeva Anadan e Yakir Aharonov [27] propuseram, mediante fundamentos geométricos, a descrição do mínimo tempo de evolução de estados que apresentam uma dinâmica unitária gerada pelo hamiltoniano de um sistemas quântico dependentes do tempo, ver apêndice A.3. Eles obtiveram uma generalização do critério MT nessa classe de sistemas quânticos, onde o estado inicial evolui até atingir um determinado valor de fidelidade quântica,

$$T_{MT} \geq \frac{\hbar \arccos(\sqrt{F_t})}{\Delta H_t}, \quad \Delta H_t = \frac{1}{t} \int_0^t \Delta H_{t'} dt', \quad (1.3)$$

onde $F_t = |\langle \psi_0 | \psi_t \rangle|^2$ é a fidelidade entre estados puros. O critério MT estendido tem recebido² uma grande aceitação devido ao significado geométrico apresentado pelas grandezas físicas envolvidas [28–31], pois segundo a métrica de Fubini-Study definida para estados puros no espaço de Hilbert, o numerador corresponde à curva geodésica que liga o estado inicial com o estado evoluído [32]. Além disso, a incerteza da energia pode ser interpretada como sendo a rapidez instantânea apresentada pela evolução do estado, assim, o denominador do critério interpreta-se como a rapidez média da evolução. Segundo esse critério, a saturação da desigualdade implica que a dinâmica acontece ao longo

²Usa-se a noção de *estendido* no sentido de abranger estados quânticos que não são perfeitamente distinguíveis, apresentando uma fidelidade diferente de zero.

do menor caminho possível, em consequência, o tempo previsto pelo critério é equivalente ao gasto pelo estado segundo a dinâmica quântica. Na maioria das vezes o tempo previsto é menor que o tempo requerido pela evolução do estado quântico para atingir um determinado valor de fidelidade, sendo esse tempo tão menor quanto maior for a incerteza da energia apresentada pelo estado do sistema.

Entretanto, quase meio século depois de ter surgido o critério MT, em 1998 Norman Margolus e Lev B. Levitin [33], ao analisar a taxa de leitura de bits na comunicação, notaram que um sistema quântico fechado pode exibir ΔH suficientemente grande mas com o valor fixo de energia média $\langle \hat{H} \rangle$. Então acharam mais um critério do mínimo tempo necessário para um sistema evolua do seu estado inicial até um outro estado ortogonal, ver apêndice A.2, sendo esse tempo inversamente proporcional à energia média do sistema menos o valor da energia do estado fundamental E_0 ,

$$T_{\text{mín}}^{(ML)} \geq \frac{\pi \hbar}{2(\langle \hat{H} \rangle - E_0)}. \quad (1.4)$$

Devido à definição dos dois critérios anteriores para o mínimo tempo de evolução em um sistema quântico fechado, atualmente esses dois critérios são considerados fundamentais para a mecânica quântica, com aplicações em metrologia quântica [34], na formulação dos limites físicos dos sistemas computacionais [35], no desenvolvimento de algoritmos quânticos através do controle ótimo [36], desempenhando um papel fundamental na termodinâmica quântica [37]. Portanto, o mínimo tempo de evolução para uma dinâmica quântica unitária entre estado ortogonais, escreve-se de maneira resumida na literatura como sendo [38],

$$T_{\text{mín}} = \max \left\{ \frac{\pi \hbar}{2\Delta H}, \frac{\pi \hbar}{2(\langle \hat{H} \rangle - E_0)} \right\}. \quad (1.5)$$

Segundo a expressão anterior o critério de Mandelstam-Tamm (MT) é assumido quando $(\langle \hat{H} \rangle - E_0) > \Delta H$, e o critério de Margolus-Levitin (ML) no caso contrário [39]. Além disso, quando o estado quântico for definido através de uma superposição homogênea entre dois autoestados do hamiltoniano [40], haverá uma equivalência entre ambos critérios devido a $\langle \hat{H} \rangle - E_0 = \Delta H$.

A maioria dos estudos anteriores se concentraram na dinâmica unitárias de sistemas quânticos isolados, enquanto, todos os sistemas estão inevitavelmente acoplado a seus ambientes. Portanto, torna-se necessário determinar o mínimo tempo de evolução para sistemas abertos. Recentemente, Taddei et al. [30] desenvolveram um método para

investigar o problema do mínimo tempo de evolução em sistemas abertos descritos por mapas não unitários positivos através da utilização da informação quântica de Fisher para a estimativa do tempo. Logo depois, del Campo et al. [41] empregaram o conceito de pureza relativa para derivar um critério analítico e computável para sistemas abertos submetidos a uma evolução positiva que preserve o traço, podendo ser vinculado facilmente a dinâmica não-markoviana. Recentemente, Deffer e Lutz [42] formularam um critério para o mínimo tempo de evolução para um sistema quântico aberto, e mostraram que efeitos não-markovianos podem acelerar a evolução quântica. No entanto, o critério obtido não pode ser aplicado diretamente quando o estado inicial do sistema for um estado misto. Portanto, motivados pelos estudos anteriores, Zhang et al. [43] através da definição alternativa de fidelidade, propuseram um critério computável que pode facilmente explicar as situações em que os estados iniciais são mistos. Através de uma abordagem inteiramente geométrica, Pires et al. [31], obtiveram uma generalização para o critério do mínimo tempo de evolução dependendo da métrica no espaço de estados do sistema, o qual se aplica para estados iniciais mistos e sistemas quânticos abertos.

A maior parte dessas generalizações obtidas do problema do mínimo tempo de evolução concorda que a expressão correta no caso de evoluções unitárias e estados iniciais puros seja dada pela eq.(1.3). Diante desse resultado, optou-se por estudar duas aplicações do QSL. Na primeira delas, procura-se investigar efeitos relativísticos no QSL. Na segunda aplicação, apresenta-se um método para melhorar a previsão do tempo de evolução entre dois estados com fidelidade definida F , uma vez que quando utilizado com este significado, a eq.(1.3) pode fornecer previsões bastante inferiores ao tempo real da evolução.

Para abordar os problemas mencionados acima, inicia-se no capítulo 2 apresenta-se a dedução da teoria de Dirac e a exploração de algumas das suas propriedades. No capítulo 3, apresentam-se inicialmente a descrição da dinâmica de um elétron em um campo magnético uniforme segundo a descrição não relativística da mecânica quântica de Schrödinger e a relativística da teoria de Dirac. Em virtude da noção obtida pelos critérios do mínimo tempo de evolução quântico, no capítulo 4 determina-se o mínimo tempo de evolução quando o estado do elétron é definido como uma superposição entre dois de seus autoestados com a mesma probabilidade. Com base nesses resultados, analisa-se a rapidez média com que o elétron se desloca espacialmente entre as posições médias definidas pelos estados inicial e final, sendo esse último caso uma maneira de poder relacionar duas classes de espaços

físicos próprio a cada sistema quântico em particular: o espaço de Hilbert e o espaço das coordenadas espaço-temporal.

Depois de se ter estudado vários autoestados em superposição, notou-se que não é qualquer classe de superposição que fornece uma mudança da distância radial média do elétron, somente a classe das superposições onde os dois autoestados possuem o mesmo momento angular e a mesma orientação de spin. Deste modo, apresenta-se a análise não relativísticas de três casos diferentes de superposição, seguida de uma análise relativística do primeiro caso, observando especificamente que a descrição relativística é a mais propícia quando o elétron se encontra em um campo magnético extremamente forte. Pois este não poderá apresentar um deslocamento da sua posição radial média mais rápido entre dois pontos do espaço que a velocidade da luz no vácuo.

Posteriormente, observa-se que os estados quânticos iniciais formados através da superposição de dois autoestados com rótulos quânticos vizinhos e momento angular nulo, são os que fornecem a maior rapidez média da variação da distância radial média do elétron. Por causa disso, analisa-se numericamente vários casos do estado inicial em superposição segundo a equação de Dirac quando o campo magnético externo for extremamente forte, conseguindo-se assim uma estimativa da máxima rapidez possível em que a distância radial média do elétron pode mudar.

Além disso, propõe-se a análise de um caso de superposição cujo estado inicial está associado diretamente à mecânica quântica relativística, pois esse envolve dois autoestados desse ente, correspondentes a níveis energéticos de sinal diferente. Desejando estimar a máxima rapidez possível com que a posição radial média do um elétron pode se deslocar na direção perpendicular ao campo magnético externo, analisa-se analiticamente e de maneira geral a superposição entre quaisquer dois autoestados, achando assim, que a maior rapidez apresentada pela variação da distância radial média do elétron acontece por autoestados com rótulos quânticos vizinhos, momento angular nulo e mesma orientação de spin. Ademais, observa-se que o máxima variação da distância radial média para essa classe de superposição, acontece quando o momento linear do elétron na direção do campo é da mesma ordem que a raiz quadrada do campo magnético, sendo essas duas grandezas físicas muito maiores em relação à massa de repouso do elétron [44].

No capítulo 5 apresenta-se uma maneira de se poder fazer previsões do tempo de evolução de um processo para sistemas quânticos dependentes do tempo sob uma dinâmica unitária, mediante o uso

do critério de Mandelstam-Tamm generalizado. Através da implementação de uma transformação unitária a ser achada, descreve-se o sistema quântico em um novo referencial, onde a incerteza da energia seja menor em relação a sua contrapartida no referencial do laboratório. Devido à importância que apresenta a incerteza da energia para o critério MT estendido e segundo seu significado geométrico, a implementação de uma transformação unitária sobre essa condição permitiria uma dinâmica quântica menos rápida, e portanto, a razão entre a distância geodésica e a rapidez média do critério MT estendido não seria tão pequena. Com base nesse raciocínio, propõe-se o seguinte método quando for analisado o critério MT estendido no novo referencial, estimando a fidelidade do estado quântico nesse referencial em função da fidelidade apresentada pelo estado no referencial do laboratório. Além disso, estabelecendo a saturação da desigualdade do critério MT estendido no novo referencial, e transformando-o em uma equação transcendente, tem-se que as diferentes raízes denotam os instantes nos quais a dinâmica do estado quântico cruza a geodésica que liga o estado inicial com o estado ortogonal. Considerando as primeiras raízes cronológicas em relação à fidelidade quântica do estado no referencial do laboratório, poder-se-á obter uma previsão do tempo de evolução mais próxima ao tempo real da evolução do estado do sistema quântico, em relação aquela obtida segundo o critério MT estendido.

Aplicando o método proposto no contexto de ressonância magnética nuclear (RMN) no caso de spin $1/2$ e $3/2$, obtém-se um sistema quântico de dois e quatro níveis, respetivamente. Devido a uma grande mudança apresentada pelo hamiltoniano com respeito a diferentes instantes, nesse contexto, implementa-se uma transformação unitária de rotação ao longo do eixo de simetria do campo magnético externo, e dessa forma, consegue-se um referencial girante onde a incerteza da energia apresentada pelo estado quântico torna-se menor que sua contrapartida no referencial do laboratório. Além disso, estima-se a fidelidade quântica do estado evoluído nesse referencial em função da fidelidade que apresenta o estado do sistema no referencial do laboratório.

Conjuntamente, implementou-se a dinâmica experimental de um estado quântico inicial de spin nuclear $1/2$ e $3/2$ no contexto de ressonância magnética, com o intuito de comparar a dinâmica de um sistema quântico real e a dinâmica obtida mediante a solução da equação de Schrödinger. Usar-se-á o conhecimento da incerteza da energia no referencial do laboratório com o objetivo de realizar uma comparativa justa entre o método proposto, a equação transcendente, e o critério

MT estendido. Resolvendo numericamente a equação transcendente do método proposto quando forem assumidas as primeiras raízes cronológicas para os valor de fidelidade do estado no referencial do laboratório, obtém-se uma melhor previsão³ do tempo de evolução para a dinâmica quântica do estado, em relação das previsões tão prematuras obtidas segundo o critério MT estendido.

Finalmente, no capítulo 6 são apresentadas as conclusões e perspectivas desse trabalho.

³Nesse contexto, a *previsão* faz alusão ao tempo que deve ser esperado para que o estado do sistema quântico evolua até atingir uma determinada fidelidade.

Capítulo 2

Teoria de Dirac

Sabe-se que na mecânica quântica não relativística de estados puros, a dinâmica das partículas são descritas pela equação de Schrödinger. Não obstante, a generalização da equação de Schrödinger veio mediante a introdução dos operadores quânticos na relação de energia relativística de uma partícula livre, obtendo primeiramente uma equação responsável pela descrição de algumas partículas fundamentais da física, caracterizadas por possuir spin nulo. Essa equação é chamada de equação de *Klein-Gordon*. Embora, muita das partículas envolvidas nos fenômenos do dia a dia possuem spin diferente de zero, sendo as mais comuns, o nêutron, o próton e o elétron. Essas três partículas apresentam uma característica em comum, o spin fracionado $1/2$. Portanto, nesse capítulo será apresentada a dedução da equação de Dirac e a exploração de algumas das suas propriedades. Como primeira tentativa, parte-se da relação energia e momento relativístico,

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (2.1)$$

Substituindo a energia e o momento linear pelos operadores da mecânica quântica $\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ e $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ e introduzindo a função de onda ψ associada a uma partícula tem-se,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + m_0^2 c^4 \psi, \quad \text{ou} \quad \left[\square^2 - \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0. \quad (2.2)$$

Obtém-se assim a equação de Klein-Gordon para uma partícula livre de spin zero. De forma compacta a equação poderá ser expressa mediante o uso do operador escalar d'Alembertiano \square^2 , valendo a pena ser

ressaltado nessa equação a segunda derivada no tempo e no espaço, isso é mostra da equivalência existente entre o espaço e o tempo na relatividade. Esse fato é a principal diferença com a equação de Schrödinger onde só há uma primeira derivada temporal, além do termo de massa de repouso. Introduzindo a notação relativística do quadrivetor momento linear,

$$p_\mu = (E/c, -\vec{p}) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right), \quad (2.3)$$

pode-se escrevê-lo de maneira compacta como,

$$p_\mu = i\hbar \partial_\mu, \quad \text{sendo} \quad \partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_1 = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \partial_2 = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_3 = \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.4)$$

Então a equação de Klein-Gordon pode ser reescrita como,

$$(p^\mu p_\mu - m_0^2 c^2) \psi = 0. \quad (2.5)$$

A idéia básica proposta por Dirac foi fatorar a equação de Klein-Gordon, reduzindo assim a ordem da derivada temporal e espacial com objetivo de obter uma melhor interpretação da estatística¹ da função de onda ψ .

$$\begin{aligned} p^\mu p_\mu - m_0^2 c^2 &= (\eta^\nu p_\nu + m_0 c)(\gamma^\lambda p_\lambda - m_0 c), \\ &= (\eta^0 p_0 - \eta^1 p_1 - \eta^2 p_2 - \eta^3 p_3 + m_0 c) \\ &\quad \times (\gamma^0 p_0 - \gamma^1 p_1 - \gamma^2 p_2 - \gamma^3 p_3 - m_0 c), \\ &= \eta^\nu \gamma^\lambda p_\nu p_\lambda - m_0 c (\eta^\nu - \gamma^\nu) p_\nu - m_0^2 c^2. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Precisa-se anular o termo linear para manter a igualdade anterior, implicando assim $\eta^\nu = \gamma^\nu$,

$$p^\mu p_\mu = \gamma^\nu \gamma^\lambda p_\nu p_\lambda. \quad (2.7)$$

¹O principal dificuldade de interpretação da equação de Klein-Gordon é o carácter imaginário apresentado pela densidade de probabilidade, definida positivamente e as soluções de energia negativa. A reinterpretção feita por W. Pauli e V. Weisskopf (1934) tratando a equação como uma equação de campo quantizado segundo o formalismo da teoria quântica de campos, definiu a equação de Klein-Gordon como a equação relativística das partículas de spin nulo, sendo os estados de energia negativa interpretados como antipartículas.

Expandindo a expressão toda,

$$\begin{aligned}
 & (p^0)^2 - (p^1)^2 - (p^2)^2 - (p^3)^2 \\
 &= (\gamma^0)^2 (p_0)^2 + (\gamma^1)^2 (p_1)^2 + (\gamma^2)^2 (p_2)^2 + (\gamma^3)^2 (p_3)^2 \\
 &\quad + (\gamma^0 \gamma^1 + \gamma^1 \gamma^0) p_0 p_1 + (\gamma^0 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^0) p_0 p_2 \\
 &\quad + (\gamma^0 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^0) p_0 p_3 + (\gamma^1 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^1) p_1 p_2 \\
 &\quad + (\gamma^1 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^1) p_1 p_3 + (\gamma^2 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^2) p_2 p_3.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Implicando $(\gamma^0 = 1)$ e $(\gamma^1 = \gamma^2 = \gamma^3 = i)$, mesmo assim isso não é suficiente para anular os termos cruzados. Em alternativa Dirac teve a brilhante idéia em assumir cada γ como se fossem matrizes que não comutam e satisfazem as seguintes condições,

$$\begin{aligned}
 & (\gamma^0)^2 = 1, \quad (\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = -1, \\
 & \gamma^\mu \gamma^\lambda + \gamma^\lambda \gamma^\mu = 0, \quad \text{para } \mu \neq \lambda
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Mostrando que a menor dimensão matricial possível é 4×4 , sendo essa consistente com a dimensão do espaço-tempo. Será usada a convenção de Bjorken e Drell na qual uma matriz 4×4 que obedece a condição (2.9) pode ser constituídas por blocos de matrizes base de dimensão 2×2 ,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \hat{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\hat{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.10}$$

onde $\hat{\sigma}_i$ são as matrizes de Pauli,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.11}$$

Dessa maneira a fatorização da equação de Klein-Gordon resulta ser,

$$(p^\mu p_\mu - m_0^2 c^2) = (\gamma^\nu p_\nu + m_0 c)(\gamma^\lambda p_\lambda - m_0 c) = 0. \tag{2.12}$$

A priori qualquer dos dois termos pode ser nulo, por convenção é escolhido o termo com o sinal negativo na massa, sendo esse similar à expressão compacta apresentada na eq.(2.2). Indiferentemente da eleição do fator, a análise resultará a mesma.

$$\gamma^\mu p_\mu - m_0 c = 0. \tag{2.13}$$

Atuando sob uma função de onda ψ e fazendo uso de $p_\mu = i\hbar\partial_\mu$, obtém-se a equação de Dirac,

$$i\hbar c\gamma^\mu \partial_\mu \psi - m_0 c^2 \psi = 0. \quad (2.14)$$

O estado do sistema estará representado através de um vetor de quatro componentes chamado espinor de Dirac, onde as suas duas primeiras componentes estão associadas à autofunções da partícula de energia positiva e as últimas duas à autofunções da partícula de energia negativa. Dessa maneira observa-se que o espinor descreve em si mesmo uma superposição de partículas com energia de sinal diferente,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Resumindo a escrita do espinor a só duas componentes com sinal de energia diferente tem-se,

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - m_0 c^2 & -c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0, \quad (2.16)$$

$$\psi_A = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_B = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Mudando o sinal da primeira linha sem alterar o resultado e multiplicando a expressão toda pela velocidade da luz no vácuo tem-se,

$$\begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + m_0 c^2 & c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0. \quad (2.17)$$

Nota-se que o operador energia agora acha-se multiplicado pela matriz identidade. Em virtude àquilo, reescreve-se a equação de Dirac da seguinte maneira,

$$i\hbar \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 & c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & -m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Portanto o hamiltoniano de Dirac para uma partícula livre resulta ser,

$$\hat{H}_D = c\alpha \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m_0 c^2, \quad (2.19)$$

onde α e β são duas matrizes hermitianas que satisfazem $(\alpha_x)^2 = (\alpha_y)^2 = (\alpha_z)^2 = \beta^2 = \mathbb{1}_{4 \times 4}$,

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Em síntese, a equação de Klein-Gordon e a equação de Dirac admitem soluções de energia negativa. Em 1930, Dirac propôs uma maneira para superar a dificuldade da interpretação dos autoestados de energia negativa. Ele interpretou esses estados como um mar cheio só de elétrons de energia negativa. Segundo o princípio de exclusão de Pauli, cada um dos elétrons pode ocupar de maneira individual cada estado. Uma transição de um estado de energia negativa para um estado de energia positiva é possível mediante a interação eletromagnética com energia superior a $2m_0c^2$, deixando no mar de elétrons uma ausência de carga elétrica negativa, podendo ser vista como uma partícula de carga positiva e de energia positiva. Isso foi interpretado como uma partícula chamada *pósitron*. Por causa dessa interpretação Dirac predisse a existência da antipartícula do elétron, posteriormente sendo descoberta em 1933 por C. D. Anderson. Certamente, isso é considerado um dos grandes triunfos dessa teoria quântica relativística.

2.1 Partícula livre

Partindo da equação de Dirac (2.18), e notando a independência na posição \vec{r} e no tempo t do hamiltoniano de Dirac, pode-se procurar uma autofunção que seja comum ao operador energia e o operador momento linear de maneira simultânea. Essa classe de solução é chamada de onda plana, sendo expressa de maneira geral como,

$$\psi(\vec{r}, t) = A U \exp [i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar], \quad (2.21)$$

onde A é uma constante e U é o espinor quadridimensional independente do espaço e do tempo,

$$U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

A ação do operador energia e de momento linear sobre essa solução resulta no autovalor de cada operador respetivamente,

$$\begin{aligned}\hat{E} &= i\hbar\partial_t \quad \rightarrow \quad E = \hbar\omega, \\ \hat{p} &= -i\hbar\nabla \quad \rightarrow \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}.\end{aligned}\tag{2.23}$$

Ao substituir a função (2.21) na equação de Dirac resulta em,

$$(c\alpha\cdot\vec{p} + \beta m_0 c^2)U = E U.\tag{2.24}$$

Para o caso no qual a partícula não apresenta movimento algum ($\vec{p}=0$), a equação de Dirac fica,

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 \hat{\mathbb{1}}_{2\times 2} & 0 \\ 0 & -m_0 c^2 \hat{\mathbb{1}}_{2\times 2} \end{pmatrix} U = E U,\tag{2.25}$$

apresentado os autovalores $E_+ = m_0 c^2$ e $E_- = -m_0 c^2$, ambos sendo duplamente degenerados. Além disso, quatro espinores linearmente independentes,

$$U^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},\tag{2.26}$$

sendo os dois primeiros associados à partícula de energia positiva e os outros dois à partícula de energia negativa. Por outro lado, o caso de maior interesse é aquele donde a partícula apresenta movimento ($\vec{p}\neq 0$). Nesse caso é realmente útil rescrever o espinor de maneira reduzida a só duas componentes,

$$U = \begin{pmatrix} U^{(+)} \\ U^{(-)} \end{pmatrix}, \quad \text{onde} \quad U^{(+)} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad U^{(-)} = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}.\tag{2.27}$$

Dessa maneira a equação de Dirac (2.24), escrita de maneira matricial fica,

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 \hat{\mathbb{1}}_{2\times 2} & c\hat{\sigma}\cdot\hat{p} \\ c\hat{\sigma}\cdot\hat{p} & -m_0 c^2 \hat{\mathbb{1}}_{2\times 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^{(+)} \\ U^{(-)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U^{(+)} \\ U^{(-)} \end{pmatrix}.\tag{2.28}$$

obtendo duas equações,

$$m_0 c^2 U^{(+)} + c\hat{\sigma}\cdot\hat{p}U^{(-)} = E U^{(+)},\tag{2.29a}$$

$$c\hat{\sigma}\cdot\hat{p}U^{(+)} - m_0 c^2 U^{(-)} = E U^{(-)}.\tag{2.29b}$$

Isolando $U^{(+)}$ da eq.(2.29a) e $U^{(-)}$ da eq.(2.29b), obtém-se,

$$U^{(+)} = \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E - m_0c^2}U^{(-)}, \quad U^{(-)} = \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E + m_0c^2}U^{(+)}. \quad (2.30)$$

Portanto,

$$U^{(+)} = \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E - m_0c^2} \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E + m_0c^2}U^{(+)}. \quad (2.31)$$

Simplificando e organizando os termos,

$$c^2(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}})^2 = E^2 - m_0^2c^4, \quad (2.32)$$

onde,

$$(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}})(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}) = \hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}} + i\hat{\sigma}\cdot(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{p}}) = p^2, \quad (2.33)$$

obtém-se as energias associadas à partícula, sendo cada uma delas duplamente degeneradas,

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}. \quad (2.34)$$

Com base nas duas energias obtidas, as duas primeiras componentes dos espinores dos autoestados de energia positiva podem ser expressos na base das orientações do spin², obtém-se,

$$U^{(1)} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\hat{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_+ + m_0c^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(2)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{c\hat{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_+ + m_0c^2} \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Onde N é a constante de normalização. Similarmente, representa-se os espinores correspondentes à partícula de energia negativa,

$$U^{(3)} = N \begin{pmatrix} \frac{c\hat{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_- - m_0c^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(4)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{c\hat{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_- - m_0c^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

²O estado de uma partícula de spin 1/2 é representada através da combinação linear de $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

A seguir se exemplifica a ortogonalidade dos espinores,

$$\begin{aligned}
 U^{(1)\dagger}U^{(3)} &= N^2 \left(\alpha^2 \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E_- - m_0c^2} + \alpha^2 \frac{c\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}}{E_+ + m_0c^2} \right), \\
 &= N^2 \alpha^2 c(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}) \left(\frac{1}{E_- - m_0c^2} + \frac{1}{E_+ + m_0c^2} \right), \quad \begin{array}{l} E_+ = +|E| \\ E_- = -|E| \end{array} \\
 &= N^2 \alpha^2 c(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}) \left(\frac{E_+ + m_0c^2 + E_- - m_0c^2}{E_-E_+ - m_0^2c^4 + E_-m_0c^2 - E_+m_0c^2} \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

2.2 Spin e Helicidade

Com base nos resultados anteriormente obtidos, nota-se que cada valor de energia está associada a dois espinores, porém cada nível energético é duplamente degenerado. Esse fato implica na existência de mais uma grandeza física representada por um operador capaz de comutar com o hamiltoniano de Dirac, onde seus autovalores são os responsáveis de fornecer mais uma características associada a cada um dos espinores. Com o fim de achar esse operador, em primeira instância se introduz o operador spin quadridimensional,

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix}. \tag{2.38}$$

De maneira geral o operador $\hat{\Sigma}$ é a representação quadridimensional de cada uma das matrizes de Pauli $\hat{\Sigma} \equiv (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$, com as mesmas propriedades. Por exemplo: a relação de comutação e anticomutação, além do quadrado das matrizes ser igual à identidade. A ação do operador spin quadridimensional em um certo estado quântico ψ resulta ser,

$$\hat{S}^2 \psi = s(s+1)\hbar^2 \psi, \quad s = \frac{1}{2}. \tag{2.39}$$

Analisando a comutação do operador spin quadridimensional com o hamiltoniano de Dirac de uma partícula livre tem-se,

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}, \hat{S}] &= \frac{\hbar}{2} [c\hat{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + \beta m_0c^2, \hat{\Sigma}] = \frac{\hbar c}{2} [\hat{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}}, \hat{\Sigma}], \\
 &= \frac{\hbar c}{2} \begin{pmatrix} 0 & [(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}), (\hat{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{1}}_{2\times 2})] \\ [(\hat{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}), (\hat{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{1}}_{2\times 2})] & 0 \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

onde,

$$\left. \begin{aligned} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2}) &= \hat{p} \cdot \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} + i\hat{\sigma} \cdot (\hat{p} \times \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2}), \\ (\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2})(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) &= \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \cdot \hat{p} + i\hat{\sigma} \cdot (\hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \times \hat{p}), \end{aligned} \right\} \rightarrow [(\hat{\sigma}\hat{p}), (\hat{\sigma}\hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2})] = 2i\hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2}(\hat{\sigma} \times \hat{p}). \quad (2.41)$$

Obtém-se finalmente,

$$[\hat{H}, \hat{S}] = i\hbar c \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \cdot (\hat{\sigma} \times \hat{p}) \\ \hat{\mathbb{1}}_{2 \times 2} \cdot (\hat{\sigma} \times \hat{p}) & 0 \end{pmatrix} = i\hbar c(\hat{\alpha} \times \hat{p}). \quad (2.42)$$

Esse resultado mostra que o operador \hat{S} não é uma constante de movimento. Ainda sendo o caso no qual o spin acha-se orientado em uma direção privilegiada, mostra-se que a relação de comutação continua sendo diferente de zero,

$$[\hat{H}, \hat{n} \cdot \hat{S}] = -i\hbar c \hat{\alpha} \cdot (\hat{n} \times \hat{p}). \quad (2.43)$$

Significando assim que as autofunções de \hat{H} em geral não são autofunções de $S_n = \hat{n} \cdot \hat{S}$. Além disso, os autovalores de \hat{S} dependem da orientação espacial (θ, φ) . Voltando na equação anterior e orientando o operador spin na mesma direção do momento linear \hat{e}_p , nesse caso a relação de comutação resulta ser nula, pois $\hat{e}_p \times \hat{p} = 0$,

$$[\hat{H}, \hat{e}_p \cdot \hat{S}] = 0. \quad (2.44)$$

Obtém-se dessa maneira uma constante de movimento, nesse caso o operador $\hat{e}_p \cdot \hat{S}$ é chamado de *operador helicidade*. Facilmente se pode mostrar que a comutação anterior é satisfeita no caso de uma partícula livre, implicando assim a comutação entre $\hat{e}_p \cdot \hat{S}$ com $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. Por outro lado, os autovalores do operador helicidade estão dados por $\lambda\hbar$, sendo λ um número quântico conhecido como *helicidade*. No caso particular quando $\lambda = +1/2$ diz-se que o elétron tem uma helicidade positiva e $\lambda = -1/2$ uma helicidade negativa. Portanto, para qualquer momento linear do elétron, existem dois espinores associados a caracterizar os autoestados de energia positiva e dois para os autoestados de energia negativa, sendo cada um desses correspondente a uma helicidade diferente.

Em particular e sem perda de generalidade, há um caso de grande interesse, esse é quando o momento linear possui uma componente $\vec{p} = (0, 0, p)$. Obtendo como consequência os quatro espinores

seguintes,

$$U^{(1)} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{E_+ + m_0c^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(2)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{E_+ + m_0c^2} \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

$$U^{(3)} = N \begin{pmatrix} \frac{cp}{E_- - m_0c^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad U^{(4)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ -cp \\ \frac{-cp}{E_- - m_0c^2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

Expressando a energia positiva e negativa como $E_{\pm} = \pm|E|$, a constante de normalização dos espinores resulta ser $N = \sqrt{\frac{|E| + m_0c^2}{2|E|}}$. A ação do operador helicidade nos espinores fornece o seguinte resultado,

$$(\hat{e}_p \cdot \hat{S}) U^{(r)} = \lambda \hbar U^{(r)}, \quad \lambda = \begin{cases} +1/2, & r = 1, 3. \\ -1/2, & r = 2, 4. \end{cases} \quad (2.47)$$

Com base na análise anterior, deseja-se examinar o mínimo tempo de evolução quântica para a definição do estado inicial do elétron como uma superposição de dois autoestados de energias diferentes, dessa forma não haverá uma discussão sobre qual dos dois critérios é o melhor, pois ambos se toram equivalentes. Dessa forma, tem-se

$$\psi(z, t) = \frac{A}{\sqrt{2}} \left[U^{(1)} \exp[i(p_z z - E_+ t)/\hbar] + U^{(4)} \exp[i(p_z z - E_- t)/\hbar] \right]. \quad (2.48)$$

Calcula-se as gradezas necessárias para a análise dos critérios,

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2} (E_+ + E_-) = 0, \quad (2.49a)$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{1}{2} (E_+^2 + E_-^2) = m_0^2 c^4 + c^2 p^2, \quad (2.49b)$$

$$\Delta H = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}, \quad (\langle \hat{H} \rangle - E_0) = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}. \quad (2.49c)$$

Portanto o mínimo tempo de evolução necessário para realizar a transição do estado inicial até o estado final é,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi \hbar}{2 \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}}. \quad (2.50)$$

Fazendo uso das unidades naturais, ver apêndice C, as grandezas físicas podem ser expressadas como, $c = \hbar = 1$, a massa do elétron é ($m_0 = 0,5110\text{MeV}$), o tempo possui unidades de ($1\text{eV}^{-1} = 6,5823 \times 10^{-16}\text{s}$), isso é feito com o fim de simplificar de simplificar as contas numéricas,

$$T_{\text{mín}}(p_z) = \frac{\pi}{2\sqrt{m_0^2 + p_z^2}}[\text{eV}^{-1}]. \quad (2.51)$$

Na figura (2.1) à direita, visualiza-se o comportamento apresentado por $T_{\text{mín}}$ em função do momento linear. Nota-se que o mínimo tempo de transição é indiferente ao valor da helicidade do estado inicial e do estado final do elétron livre. Isso deve-se ao fato que a helicidade é uma característica da orientação do spin em relação à direção do momento linear, sendo similar à projeção de spin em um campo magnético uniforme, pois a diferença principal se encontra no fato que a helicidade não está associadas a níveis energéticos diferente, contrariamente à projeção do spin em um campo magnético uniforme.

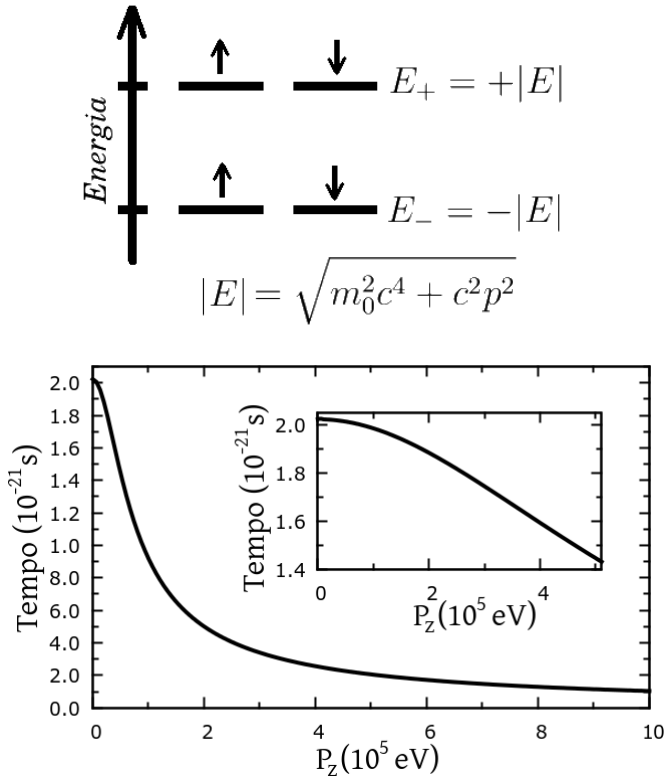


Figura 2.1: Mínimo tempo de evolução para o elétron relativístico com momento linear p_z .

Capítulo 3

Dinâmica de um elétron em um campo magnético uniforme

Com o objetivo de aplicar de maneira concreta os critérios do mínimo tempo de evolução de MT e ML a um estado quântico simples, define-se o estado inicial do sistema como uma superposição de igual probabilidade entre dois autoestados do hamiltoniano. A interação do spin com o campo magnético uniforme seria o candidato mais simples em ser analisado. Mas as autofunções que caracterizam os dois autoestados só apresentam grau de liberdade de spin e não espaciais. Por outro lado, se o elétron apresenta movimento na presença de um campo magnético uniforme, evidencia-se como consequência que os autoestados estão descritos por componentes tanto espaciais como de spin. Nesse capítulo se apresenta inicialmente a descrição da interação do spin com o campo magnético, seguida de uma descrição completa da mecânica quântica não relativística para o elétron em movimento na presença de um campo magnético uniforme. Com base nessa descrição, finalmente se realiza a descrição relativística de Dirac para mesmo sistema quântico anterior.

3.1 Interação spin-campo magnético

Considera-se o caso do elétron em repouso na presença de um campo magnético externo uniforme. Desprezando qualquer força externa, o hamiltoniano que descreve o elétron fica em função só da interação do

momento magnético do elétron $\vec{\mu}$ com o campo magnético externo \vec{B} ,

$$\vec{\mu} = - \left(\frac{e}{m_0} \right) \hat{S}, \quad (3.1)$$

onde \hat{S} é o operador de spin e o módulo da carga elétrica fundamental ($e = 1,6021 \times 10^{-19} \text{C}$). O hamiltoniano da interação se expressa como,

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m_0} \vec{B} \cdot \vec{S}. \quad (3.2)$$

Por simplicidade será assumido o campo magnético orientado ao longo da direção \hat{z} ,

$$\hat{H} = \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{B} \cdot \hat{\sigma} = \frac{e\hbar}{2m_0} B \hat{\sigma}_z = \frac{e\hbar}{2m_0} B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Os autovalores são,

$$E_{\pm} = \pm \hbar\omega, \quad \omega = \frac{eB}{2m_0} \text{ (Frequência de Larmor)}, \quad (3.4)$$

e os autovetores são,

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Com base nesses resultados e desejando analisar o mínimo tempo de evolução para esse sistema, define-se o estado do elétron como a superposição entre os dois autoestados,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle). \quad (3.6)$$

As grandezas físicas precisadas para o cálculo de cada um dos critérios do mínimo tempo de evolução quântica são,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= 0, & \langle H^2 \rangle &= \hbar^2 \omega^2. \\ \Delta H &= \hbar\omega, & (\langle H \rangle - E_0) &= \hbar\omega. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Nota-se que os dois critérios resultam ser equivalentes para essa superposição em particular,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi m_0}{eB}. \quad (3.8)$$

A demonstração da equivalência entre o critérios de MT e ML para essa classe de superposição é apresentada no apêndice A. Quando se tem um campo magnético cuja intensidade é ($B = 10 \text{T}$), a massa do elétron ($m_0 = 9,1 \times 10^{-31} \text{kg}$) e a carga elétrica ($e = 1,6021 \times 10^{-19} \text{C}$), obtém-se o mínimo tempo igual a ($T_{\text{mín}} = 1.784 \times 10^{-12} \text{s} = 1.784 \text{ps}$).

3.2 Elétron em movimento em campo magnético uniforme: descrição não relativística

Seja um elétron em movimento localizado em uma região onde há um campo magnético externo uniforme \vec{B} . Assumindo as transformações de gauge¹ de Landau², expressa-se o potencial vetor da seguinte maneira,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}). \quad (3.9)$$

Escrevendo o operador momento linear segundo a transformação canônica ($\hat{p} \rightarrow \hat{p} - q\vec{A}$), a carga do elétron ($q = -e$), o hamiltoniano do sistema resulta ser,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_0}(\hat{p} + e\vec{A})^2 + \frac{e}{m_0}\vec{B} \cdot \vec{S}, \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + \frac{e^2 A^2}{2m_0} - \frac{ie\hbar}{2m_0}(\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla) + \frac{e}{m_0}\vec{B} \cdot \vec{S}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

O segundo termo do hamiltoniano é dado por,

$$\frac{e^2 A^2}{2m_0} = \frac{e^2}{8m_0}(\vec{B} \times \vec{r})^2 = \frac{e^2}{8m_0}B^2 r^2 \sin^2(\theta_{Br}) = \frac{e^2}{8m_0}(B^2 r^2 - (\vec{B} \cdot \vec{r})^2), \quad (3.11)$$

usando a definição de θ_{Br} como sendo o ângulo entre o campo magnético e o vetor posição do elétron, obtém-se o resultado anterior. Os termos cruzados serão calculados com ajuda de uma função escalar ϕ ,

$$\nabla \cdot (\vec{A}\phi) = (\nabla \cdot \vec{A})\phi + \vec{A} \cdot \nabla\phi. \quad (3.12)$$

O primeiro termo da expressão anterior é,

$$(\nabla \cdot \vec{A})\phi = \frac{1}{2}\nabla \cdot (\vec{B} \times \vec{r})\phi = \frac{1}{2}(\nabla \times \vec{B}) \cdot \vec{r}\phi - \frac{1}{2}(\nabla \times \vec{r}) \cdot \vec{B}\phi = 0. \quad (3.13)$$

¹Usualmente denominado em português como *calibre*.

²O gauge de Landau fornece a simetria evidenciada classicamente quando o elétron no campo magnético homogêneo realiza uma trajetória helicoidal.

Esse resultado mostra que o gauge de Landau satisfaz o gauge de Coulomb. Prosseguindo o cálculo de maneira similar para o segundo termo,

$$\begin{aligned}
 \vec{A} \cdot \nabla \phi &= \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \nabla \phi, \\
 &= \frac{1}{2} (zB_y - yB_z, xB_z - zB_x, yB_x - xB_y) \cdot \nabla \phi, \\
 &= \frac{1}{2} [zB_y \partial_x - yB_z \partial_x + xB_z \partial_y - zB_x \partial_y + yB_x \partial_z - xB_y \partial_z] \phi, \\
 &= \frac{1}{2} [B_x (y \partial_z - z \partial_y) + B_y (z \partial_x - x \partial_z) + B_z (x \partial_y - y \partial_x)] \phi, \\
 &= \frac{1}{2} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \nabla) = \frac{i}{2\hbar} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \hat{P}) \phi = \frac{i}{2\hbar} \vec{B} \cdot \hat{L} \phi.
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Eliminando a função ϕ dos resultados anteriores, tem-se que o hamiltoniano (3.10) fica,

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{e^2}{8m_0} (B^2 r^2 - (\vec{B} \cdot \vec{r})^2) + \frac{e}{2m_0} \vec{B} \cdot (\hat{L} + 2\hat{S}). \tag{3.15}$$

Por simplicidade, supõe-se que o campo magnético esteja ao longo do eixo \hat{z} . Em consequência o hamiltoniano fica,

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{e^2 B^2}{8m_0} (x^2 + y^2) + \frac{eB}{2m_0} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z), \\
 &= \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m_0} (x^2 + y^2) + \frac{eB}{2m_0} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z).
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Resultando fácil notar as três naturezas diferentes dos termos do hamiltoniano, partícula livre na direção \hat{z} , oscilador harmônico bidimensional isotrópico no plano $(x-y)$ e finalmente a interação do momento angular orbital e de spin com o campo magnético. Seja $\psi(\vec{r}, \sigma)$ a função de onda associada ao sistema, a equação de Schrödinger fica escrita como,

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m_0} (x^2 + y^2) \right. \\
 \left. + \frac{eB}{2m_0} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right] \psi(\vec{r}, \sigma) = E \psi(\vec{r}, \sigma).
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Pode-se expressar a função de onda como o produto de funções segundo a natureza própria de cada uma delas,

$$\psi(\vec{r}, \sigma) = F(x, y) \exp(ip_z z / \hbar) \Gamma, \quad \Gamma = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & m_s = +1/2 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & m_s = -1/2 \end{cases}. \quad (3.18)$$

Dessa maneira, analisa-se isoladamente o movimento bidimensional que acontece em volta do eixo \hat{z} , obtém-se assim a equação de Schrödinger correspondente ao oscilador harmônicos bidimensional,

$$\underbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 (x^2 + y^2) \right]}_{H'_{xy}} F(x, y) = E' F(x, y), \quad (3.19)$$

onde $\omega = \frac{eB}{2m_0}$. A priori, sabe-se que a energia do oscilador harmônico quântico é,

$$E' = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) = \hbar\omega(n + 1), \quad n \geq 0. \quad (3.20)$$

Nota-se que cada um dos níveis de energia E'_n , acha-se associados $(n+1)$ autoestados degenerados,

$$F_{n_x=n, n_y=0}, F_{n_x=n-1, n_y=1}, \dots, F_{n_x=0, n_y=n}, \quad (n+1 \text{ vezes}). \quad (3.21)$$

Em visto à degenerescência evidenciada, procura-se mais uma grandeza física capaz de caracterizar melhor cada uma dos estados pertencentes a certo nível de energia. Notando a simetria do potencial harmônico bi-dimensional sob rotações entorno ao eixo \hat{z} , introduz-se \hat{L}_z como sendo a componente do operador momento angular orbital orientada no eixo \hat{z} ,

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (3.22)$$

Sejam os respectivos operadores algébricos de *aniquilação* e *criação*, para cada uma das coordenada cartesianas, que satisfazem a seguinte relação de comutação $[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = [\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = 1$,

$$\begin{aligned} \hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{x}\beta + i\frac{\hat{P}_x}{\beta\hbar} \right), & \hat{a}_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{x}\beta - i\frac{\hat{P}_x}{\beta\hbar} \right), & \beta &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \\ \hat{a}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{y}\beta + i\frac{\hat{P}_y}{\beta\hbar} \right), & \hat{a}_y^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{y}\beta - i\frac{\hat{P}_y}{\beta\hbar} \right), \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde β é a constante recíproca ao comprimento do oscilador. Expressa-se \hat{x} , \hat{y} , \hat{p}_x , \hat{p}_y , em função dos operadores algébricos,

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \frac{1}{\beta\sqrt{2}}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger), & \hat{P}_x &= -i\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger), \\ \hat{y} &= \frac{1}{\beta\sqrt{2}}(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger), & \hat{P}_y &= -i\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2}}(\hat{a}_y - \hat{a}_y^\dagger).\end{aligned}\quad (3.24)$$

O operador momento angular fica reescrito como,

$$\hat{L}_z = i\hbar(\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y). \quad (3.25)$$

Igualmente o hamiltoniano do oscilador,

$$\hat{H}'_{xy} = \hbar\omega(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y + 1). \quad (3.26)$$

Calculando a comutação entre o momento angular com o hamiltoniano,

$$\begin{aligned}[\hat{H}'_{xy}, \hat{L}_z] &= \left[\hbar\omega(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y + 1), i\hbar(\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y) \right], \\ &= i\hbar^2\omega \left([\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x, \hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y] + [\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y, \hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y] \right), \\ &= i\hbar^2\omega(-\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x - \hat{a}_y\hat{a}_x^\dagger) = 0,\end{aligned}\quad (3.27)$$

mostra-se dessa maneira que \hat{L}_z é uma constante de movimento, a qual possui um conjunto de autofunções que são comuns com \hat{H}'_{xy} . Por tal motivo, deseja-se expressar o fenômeno em relação à simetria axial evidenciada no sistema. Certamente, as coordenadas cilíndricas são as mais adequada para caracterizar o sistema. Introduzindo o conceito de operadores quânticos algébricos circular à direita \hat{a}_R , e circular à esquerda \hat{a}_L , definidos³ como,

$$\hat{a}_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - i\hat{a}_y), \quad \hat{a}_L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x + i\hat{a}_y), \quad (3.28)$$

a ação dos operadores \hat{a}_R (ou \hat{a}_L) sob o estado F_{n_x, n_y} , gera um estado quântico que é uma combinação linear de F_{n_x-1, n_y} e F_{n_x, n_y-1} , obtendo assim, um estado estacionário de um quantum $\hbar\omega$ de energia menor.

³A esfera de Poincaré é a maneira geométrica de representar a polarização da luz por meio dos vetores de Jones, com base na polarização circular definem-se os operadores quânticos algébricos circulares.

Contrariamente, a ação de \hat{a}_R^\dagger (ou \hat{a}_L^\dagger) geram um estado quântico de um quantum de energia maior. A atuação dos operadores algébricos circulares sobre o autoestado F_{n_x, n_y} é interpretada como a destruição ou criação de um *quantum circular* à direita ou à esquerda, respectivamente.

A relação de comutação entre os operadores $(\hat{a}_R, \hat{a}_L, \hat{a}_R^\dagger, \hat{a}_L^\dagger)$, é:

$$[\hat{a}_R, \hat{a}_R^\dagger] = [\hat{a}_L, \hat{a}_L^\dagger] = 1. \quad (3.29)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R &= \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + i(\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y)), \\ \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L &= \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y - i(\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y)). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Com base nisso, \hat{H}'_{xy} e \hat{L}_z podem ser expressos,

$$\hat{H}'_{xy} = \hbar\omega(\hat{N}_R + \hat{N}_L + 1), \quad \hat{L}_z = \hbar(\hat{N}_R - \hat{N}_L), \quad (3.31)$$

onde $\hat{N}_R = \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R$, e $\hat{N}_L = \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L$ são os operadores número de quanta à direita e esquerda respectivamente. Quando eles atuarem no estado F_{n_x, n_y} fornecerão os números quânticos (n_R, n_L) , valores inteiros maiores ou igual a zero que caracterizam melhor o sistema ao levar em conta o nível de energia e o momento angular próprio a cada estado degenerado. Definindo o estado fundamental $F_{0,0}$ como aquele estado que apresenta ausência de quanta circulares, com base nesse estado será possível expressar qualquer autoestado através da ação consecutiva dos operadores de criação de um quantum circular,

$$F_{n_R, n_L} = \frac{1}{\sqrt{(n_R)!(n_L)!}} (\hat{a}_R^\dagger)^{n_R} (\hat{a}_L^\dagger)^{n_L} F_{0,0}, \quad (3.32)$$

onde F_{n_R, n_L} é uma autofunção tanto do \hat{H}'_{xy} como do \hat{L}_z , fornecendo os autovalores $\hbar\omega(n+1)$ e $m_l \hbar$, respectivamente. Dessa maneira o par de números quânticos (n, m_l) será definido em função do par (n_R, n_L) ,

$$n = n_R + n_L, \quad m_l = n_R - n_L. \quad (3.33)$$

Dado que n_R e n_L são números inteiros maiores ou iguais a zero, há $(n+1)$ estados degenerados para cada valor de energia como foi mostrado

na eq.(3.21), apresentando a seguinte relação,

$$\begin{aligned} n_R = n & & ; n_L = 0 \\ n_R = n - 1 & & ; n_L = 1, \\ & \vdots & \\ n_R = 0 & & ; n_L = n. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Observando no caso particular ($n=0, 1$), os autovalores da componente do momento angular na direção \hat{z} , $m_l \hbar$,

$$\begin{aligned} n = 0 & \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} n_R = 0, n_L = 0 \rightarrow m_l = 0 \\ n_R = 1, n_L = 0 \rightarrow m_l = +1 \\ n_R = 0, n_L = 1 \rightarrow m_l = -1 \end{array} \right. \quad (3.35) \end{aligned}$$

De maneira geral para um valor n fixo, há um conjunto de valores de m_l ,

$$m_l = n, n - 2, n - 4, \dots, -n + 2, -n. \quad (3.36)$$

Expressando o autoestado F_{n_R, n_L} através do par (n_R, n_L) , tem-se,

$$F_{n_R = \frac{n+m_l}{2}, n_L = \frac{n-m_l}{2}}. \quad (3.37)$$

Dado que o oscilador harmônico bidimensional no plano $(x-y)$ apresenta simetria de rotação entorno do eixo \hat{z} , faz-se uso das coordenadas polares para realizar uma descrição mais propícia do fenômeno que está acontecendo. Seja,

$$\begin{aligned} x &= \varrho \cos \varphi, \\ y &= \varrho \sin \varphi, \end{aligned} \quad \varrho \geq 0, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (3.38)$$

Em relação à mudança de coordenadas, precisa-se expressar os operadores \hat{a}_R e \hat{a}_L em função das coordenadas polares, para fazê-lo se inicia decompondo \hat{a}_R ,

$$\begin{aligned} \hat{a}_R &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - i\hat{a}_y), \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(\hat{x}\beta + i\frac{P_x}{\beta\hbar} \right) - i \left(\hat{y}\beta + i\frac{P_y}{\beta\hbar} \right) \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[\beta(\hat{x} - i\hat{y}) + \frac{i}{\hbar\beta}(\hat{P}_x - i\hat{P}_y) \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[\beta(x - iy) + \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.39)$$

3.2. ELÉTRON EM MOVIMENTO EM CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME: I

Em relação à definição das coordenadas polares $\varrho = \sqrt{x^2 + y^2}$ e $\varphi = \arctan(y/x)$, verifica-se que,

$$(x - iy) = \varrho(\cos \varphi - i \sin \varphi) = \varrho e^{-i\varphi}. \quad (3.40)$$

e os diferenciais ficam expressos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{1}{\varrho} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial \varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{1}{\varrho} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) &= (\cos \varphi - i \sin \varphi) \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{1}{\varrho} (\sin \varphi + i \cos \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ &= e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{i}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Finalmente o operador \hat{a}_R e \hat{a}_R^\dagger ficam expressados da seguinte maneira,

$$\hat{a}_R = \frac{e^{-i\varphi}}{2} \left[\beta \varrho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{i}{\beta \varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad \hat{a}_R^\dagger = \frac{e^{i\varphi}}{2} \left[\beta \varrho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{i}{\beta \varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (3.43)$$

Pode-se obter da mesma maneira,

$$\hat{a}_L = \frac{e^{i\varphi}}{2} \left[\beta \varrho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{i}{\beta \varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad \hat{a}_L^\dagger = \frac{e^{-i\varphi}}{2} \left[\beta \varrho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{i}{\beta \varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (3.44)$$

A ação de \hat{a}_R ou \hat{a}_L sobre o estado fundamental do oscilador $F_{n_R=0, n_L=0}$, ($n = m_l = 0$), resulta em,

$$\hat{a}_R F_{0,0} = \frac{e^{-i\varphi}}{2} \left[\beta \varrho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{i}{\beta \varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] F_{0,0} = 0. \quad (3.45)$$

Portanto o estado fundamental ($n_R = 0, n_L = 0$) normalizado é,

$$F_{0,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2}. \quad (3.46)$$

Ao aplicar n_R -vezes o operador \hat{a}_R^\dagger sob o estado $F_{0,0}(\varrho, \varphi)$, está-se criando n_R *quanta* à direita sob o estado fundamental resultando assim,

$$F_{n_R,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(n_R)!}} (\beta \varrho)^{n_R} e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2} e^{in_R \varphi}. \quad (3.47)$$

Analogamente, a ação de n_L -vezes o operador \hat{a}_L^\dagger sob $F_{0,0}(\varrho, \varphi)$ resulta,

$$F_{0,n_L}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(n_L)!}} (\beta\varrho)^{n_L} e^{-\beta^2\varrho^2/2} e^{-im_R\varphi}. \quad (3.48)$$

Para um determinado nível de energia $E_n = \hbar\omega(n+1)$, a função (3.47) corresponde ao valor máximo da projeção do momento angular na direção \hat{z} $m_l = n$, e a função (3.48) corresponde ao valor mínimo $m_l = -n$.

A ação consecutiva do operador \hat{a}_L^\dagger n_L -vezes sobre a auto-função $F_{n_R,0}$ ou \hat{a}_R^\dagger n_R -vezes sobre a autofunção F_{0,n_L} permite obter a função $F_{n_R,n_L}(\varrho, \varphi)$ para qualquer par de valores n_R, n_L . Após de ter calculado uma grande quantidade de funções pela ação dos dois operadores de criação, observou-se que as funções obtidas são proporcionais aos polinômios de Laguerre generalizados denotados por $L_n^{(\alpha)}(x)$ [45, 46]. De maneira geral qualquer função de onda associada ao estado quântico ($n = n_R + n_L$) com momento angular ($m_l = n_R - n_L$) é escrita da seguinte maneira,

$$F_{n,m_l}(\varrho, \varphi) = \frac{(-1)^{\binom{n-|m_l|}{2}} \left(\frac{n-|m_l|}{2}\right)!}{\sqrt{\pi \left(\frac{n+|m_l|}{2}\right)! \left(\frac{n-|m_l|}{2}\right)!}} \beta (\beta\varrho)^{|m_l|} \times L_{\binom{n-|m_l|}{2}}^{|m_l|}(\beta^2\varrho^2) e^{-\beta^2\varrho^2/2} e^{im_l\varphi}, \quad (3.49)$$

onde os polinômios de Laguerre generalizados são,

$$L_{\binom{n-|m_l|}{2}}^{|m_l|}(\beta^2\varrho^2) = \sum_{i=0}^{\binom{n-|m_l|}{2}} (-1)^i \binom{\binom{n-|m_l|}{2} + |m_l|}{\binom{n-|m_l|}{2} - i} \frac{(\beta\varrho)^{2i}}{i!}. \quad (3.50)$$

Na tabela (3.1) apresenta-se as funções de onda do oscilador harmônico quântico bidimensional para os seis primeiros níveis de energia n . Uma vez obtidas as autofunções $F_{n,m_l}(\varrho, \varphi)$, volta-se para a equação de Schrödinger (3.17) com motivo de expressá-la em coordenadas cilíndricas⁴ (ϱ, φ, z) ,

$$\left[\hat{H}'_{\rho\varphi} + \frac{p_z^2}{2m_0} + \hbar\omega(L_z + 2S_z) \right] F_{n,m_l}(\rho, \varphi) \exp(ip_z z/\hbar) \Gamma = E F_{n,m_l}(\rho, \varphi) \exp(ip_z z/\hbar) \Gamma. \quad (3.51)$$

⁴ A particularização das coordenadas cilíndricas a um plano com simetria axial é equivalente às coordenadas polares.

n	m_l	$F_{n,m_l}(\rho, \varphi)$
0	0	$F_{0,0} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$
1	± 1	$F_{1,1} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} (\beta \rho) e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i \varphi}$
2	± 2	$F_{2,2} = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} (\beta \rho)^2 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 2 \varphi}$
	0	$F_{2,0} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} [(\beta \rho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$
3	± 3	$F_{3,3} = \frac{\beta}{\sqrt{6\pi}} (\beta \rho)^3 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 3 \varphi}$
	± 1	$F_{3,1} = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} [(\beta \rho)^3 - 2(\beta \rho)] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i \varphi}$
4	± 4	$F_{4,4} = \frac{\beta}{2\sqrt{6\pi}} (\beta \rho)^4 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 4 \varphi}$
	± 2	$F_{4,2} = \frac{\beta}{\sqrt{6\pi}} [(\beta \rho)^4 - 3(\beta \rho)^2] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 2 \varphi}$
	0	$F_{4,0} = \frac{\beta}{\sqrt{4\pi}} [(\beta \rho)^4 - 4(\beta \rho)^2 + 2] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$
5	± 5	$F_{5,5} = \frac{\beta}{2\sqrt{30\pi}} (\beta \rho)^5 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 5 \varphi}$
	± 3	$F_{5,3} = \frac{\beta}{2\sqrt{6\pi}} [(\beta \rho)^5 - 4(\beta \rho)^3] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i 3 \varphi}$
	± 1	$F_{5,1} = \frac{\beta}{\sqrt{12\pi}} [(\beta \rho)^5 - 6(\beta \rho)^3 + 6(\beta \rho)] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{\pm i \varphi}$

Tabela 3.1: Autofunções do oscilador harmônico quântico bidimensional isotrópico.

A energia total resulta ser,

$$E = \frac{p_z^2}{2m_0} + \hbar\omega(n + m_l + 2m_s + 1), \quad \omega = \frac{eB}{2m_0}. \quad (3.52)$$

Considera-se importante notar que as energias assumem valores $E \geq 0$, sendo nulas quando o elétron apresenta momento linear nulo e se encontra no estado n com a mínima projeção do momento angular na direção \hat{z} e a orientação de spin oposta ao campo magnético. Além disso dada a paridade do estado em questão n , os possíveis valores de momento angular m_l serão de mesma paridade, ou seja, a soma desses dois sempre será um número *par* indiferente da paridade do autoestado.

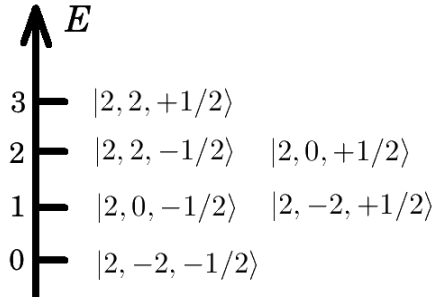


Figura 3.1: Componente discreta da energia dos autoestados em múltiplos de $(eB\hbar/m_0)$, dado o número quântico principal $n=2$.

Portanto,

$$n + m_l + 2m_s + 1 = 2r, \quad r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.53)$$

Dessa maneira se faz a introdução de mais um número quântico, r , chamado de *nível de Landau*. Vale a pena ser ressaltado que o nível de Landau é um ótimo número quântico para caracterizar os níveis de energia de um sistema quântico degenerado, mas não é o melhor para distinguir os autoestados que pertencem a cada nível de energia,

$$E = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega(2r), \quad r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.54)$$

Com certeza é importante fazer menção dos níveis de Landau, embora r não seja um bom rótulo quântico para distinguir os diferentes autoestados pertencentes a cada nível de energia. Por exemplo, na figura (3.1) se visualiza os níveis de energia para o caso $n=2$, expressando as autofunções através da notação de Dirac $|n, m_l, m_s\rangle$, observa-se a existência de dois níveis de energia duplamente degenerados correspondendo a $r=1, 2$. Por esse motivo, decide-se voltar à expressão de energia (3.52) para poder distinguir a energia pertencente a cada autoestado. Na tabela (3.2) se mostra para cada valor de n , o número de níveis de energia em relação a m_l e $m_s = \pm 1/2$,

Por outro lado, apresenta-se o cálculo da posição radial média do elétron em relação a origem do sistema de coordenadas para cada uns dos autoestados em função do campo magnético externo,

$$\langle \varrho \rangle_{n, m_l} = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} F_{n, m_l}^* \varrho F_{n, m_l} \varrho \, d\varrho \, d\varphi. \quad (3.55)$$

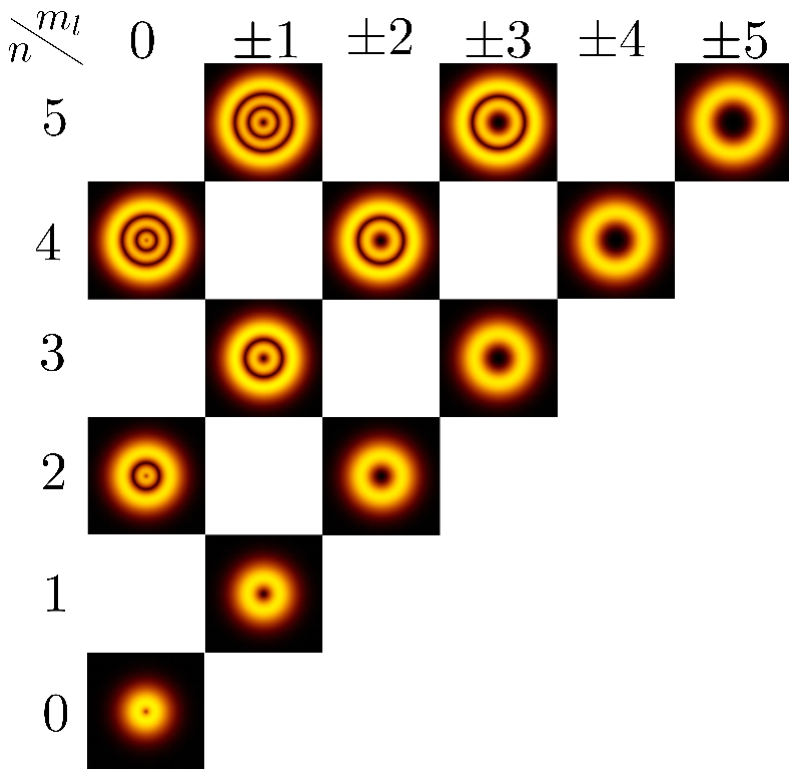


Figura 3.2: Densidade de probabilidade radial do elétron do estado fundamental e dos cinco primeiro estados em relação ao número quântico principal n .

n	m_l	Energia [$\hbar\omega$]	$\#_n$
0	0	2,0	2
1	-1,1	4,2,2,0	3
2	-2,0,2	6,4,4,2,2,0	4
3	-3,-1,1,3	8,6,6,4,4,2,2,0	5
4	-4,-2,0,2,4	10,8,8,6,6,4,4,2,2,0	6
5	-5,-3,-1,1,3,5	12,10,10,8,8,6,6,4,4,2,2,0	7

Tabela 3.2: Dado o número quântico n , o número de níveis de energia $\#_n$ associados a esse rótulo quântico.

Nota-se que a integração apresenta um comportamento padrão quando se faz a substituição de variáveis $\beta = \sqrt{eB/2}$ e $x = \beta\rho$,

$$\frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} x^n e^{-x^2} dx = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2\beta}. \quad (3.56)$$

A densidade de probabilidade radial pertencente ao autoestado n, m_l é,

$$D_{n, m_l}(\rho) = 2\pi\rho |F_{n, m_l}(\rho, \varphi)|^2. \quad (3.57)$$

Na figura (3.2) visualiza-se as distribuições radiais dos seis primeiros estados quântico em relação ao número quântico principal n .

3.3 Equação de Dirac para o elétron em campo magnético

Nessa seção se analisará a equação de Dirac para um elétron na presença de um campo magnético uniforme \vec{B} . Seja o espinor $\psi(\vec{r}, t)$ associado ao elétron, a equação de Dirac fica escrita,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = (c\hat{\alpha} \cdot \hat{\Pi} + \beta m_0 c^2) \psi(\vec{r}, t), \quad \hat{\Pi} = \hat{p} + e\vec{A}, \quad (3.58)$$

onde $\hat{\Pi}$ é o momento linear do elétron sobre a ação do vetor potencial magnético \vec{A} . Dada a independência temporal do hamiltoniano de Dirac, o espinor do elétron no tempo t pode ser expresso como,

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \exp[-iEt/\hbar], \quad (3.59)$$

onde ϕ e χ são duas funções que representam as duas primeiras e as duas últimas componentes do espinor, associadas à energia positiva e negativa, respectivamente. Substituindo a função (3.59) na eq.(3.58), e usado a notação matricial tem-se,

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 \hat{1}_{2 \times 2} & c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + e\vec{A}) \\ c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + e\vec{A}) & -m_0 c^2 \hat{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Obtém-se assim duas equações,

$$m_0 c^2 \phi + c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + e\vec{A})\chi = E\phi \quad (3.61a)$$

$$c\hat{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla + e\vec{A})\phi - m_0 c^2 \chi = E\chi. \quad (3.61b)$$

Ao isolar ϕ de (3.61a) e χ de (3.61b) se obtém, respectivamente,

$$\phi = \frac{c\hat{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})}{E - m_0c^2}\chi, \quad \chi = \frac{c\hat{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})}{E + m_0c^2}\phi. \quad (3.62)$$

Substituindo χ em ϕ ou vice-versa resulta em,

$$\begin{aligned} (E^2 - m_0^2c^4)\phi &= c^2[\hat{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})][\hat{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})]\phi, \\ &= c^2[(-i\hbar\nabla + e\vec{A})\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})]\phi \\ &\quad + i\hat{\sigma}\cdot[(-i\hbar\nabla + e\vec{A})\times(-i\hbar\nabla + e\vec{A})]\phi. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Sendo o primeiro termo do lado direito da eq.(3.63) é igual a,

$$[(-i\hbar\nabla + e\vec{A})\cdot(-i\hbar\nabla + e\vec{A})]\phi = -\hbar^2\nabla^2\phi + e^2A^2\phi - ie\hbar(\nabla\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\nabla)\phi. \quad (3.64)$$

O segundo termo do lado direito da eq.(3.63) é igual a,

$$i\hat{\sigma}\cdot[(-i\hbar\nabla + e\vec{A})\times(-i\hbar\nabla + e\vec{A})]\phi = e\hbar\hat{\sigma}\cdot[(\nabla\times\vec{A}) + (\vec{A}\times\nabla)]\phi, \quad (3.65)$$

onde,

$$\begin{aligned} (\nabla\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\nabla)\phi &= (\nabla\cdot\vec{A})\phi + \vec{A}\cdot\nabla\phi + \vec{A}\cdot\nabla\phi = [2\vec{A}\cdot\nabla]\phi, \\ [(\nabla\times\vec{A}) + (\vec{A}\times\nabla)]\phi &= (\nabla\times\vec{A})\phi - \vec{A}\times(\nabla\phi) + \vec{A}\times(\nabla\phi) = (\nabla\times\vec{A})\phi. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Com base nos resultados (3.64-3.66) a eq.(3.63) fica,

$$(E^2 - m_0^2c^4)\phi = c^2[-\hbar^2\nabla^2 + e^2A^2 - 2i\hbar e(\vec{A}\cdot\nabla) + e\hbar\hat{\sigma}\cdot(\nabla\times\vec{A})]\phi, \quad (3.67)$$

onde foi utilizado o gauge de Coulomb $\nabla\cdot\vec{A}=0$ e $\nabla\times\vec{A}=\vec{B}$. Fazendo a seguinte simplificação sem ter perda de generalidade física, assume-se o campo magnético na direção \hat{z} no referencial do laboratório, e expressa-se o vetor potencial magnético através do gauge de Landau,

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r} = \frac{1}{2}(-yB, xB, 0). \quad (3.68)$$

Substituindo o vetor potencial (3.68) na eq.(3.67) e dividindo por $2m_0c^2$ tem-se,

$$\begin{aligned} &\left(\frac{E^2 - m_0^2c^4}{2m_0c^2}\right)\phi \\ &= \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + \frac{e^2B^2}{8m_0}(x^2 + y^2) - \frac{i\hbar eB}{2m_0}\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \frac{eB\hbar}{2m_0}\hat{\sigma}_z\right]\phi, \\ &= \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{e^2B^2}{8m_0}(x^2 + y^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{eB}{2m_0}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\right]\phi. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Observa-se que os dois primeiros termos da direita correspondem ao hamiltoniano do oscilador harmônico simples bidimensional, o terceiro ao hamiltoniano de uma partícula livre na direção \hat{z} . Portanto, a função de onda espacial pode ser expressa através do produto das autofunções do oscilador harmônico bidimensional obtidas na seção anterior, vezes a função de onda de uma partícula livre na direção \hat{z} ,

$$\phi(\vec{r}) = F_{m_s}(x, y) \exp[ip_z z / \hbar]. \quad (3.70)$$

Sabe-se que o operador de spin \hat{S}_z na eq.(3.69) fornece duas soluções independentes, cada uma delas associada a uma orientação do spin diferente ($m_s = \pm 1/2$). Do mesmo modo, como foi discutido no capítulo anterior, as duas primeiras componentes do espinor do elétron estão associadas a orientações de spin diferentes,

$$F_+(x, y) = \begin{pmatrix} F(x, y) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad F_-(x, y) = \begin{pmatrix} 0 \\ F(x, y) \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

A ação do operador de spin nas componentes de energia positiva do espinor resulta em,

$$\hat{S}_z F_+(y) = +\frac{\hbar}{2} F_+(y), \quad \hat{S}_z F_-(y) = -\frac{\hbar}{2} F_-(y). \quad (3.72)$$

Reescrevendo de maneira resumida,

$$\hat{S}_z F_{m_s}(y) = \hbar m_s F_{m_s}(y), \quad m_s = \begin{cases} +1/2 \\ -1/2 \end{cases}. \quad (3.73)$$

Segundo a definição do operador spin, nesse caso, nota-se que o hamiltoniano do oscilador bidimensional comuta com a projeção do momento angular na direção \hat{z} , \hat{L}_z , autofunções do oscilador harmônico bidimensional resultam ser as mesmas para a projeção do momento angular L_z . Portanto,

$$\hat{L}_z F_{m_s}(x, y) = \hbar m_l F_{m_s}(x, y), \quad (3.74)$$

onde m_l é o número quântico da projeção do momento angular na direção \hat{z} , ver eq.(3.36). Ao substituir (3.70) na eq.(3.69) resulta,

$$\begin{aligned} \left(\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} \right) F_{m_s}(x, y) = & \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 (x^2 + y^2) \right. \\ & \left. + \frac{p_z^2}{2m_0} + \hbar \omega (m_l + 2m_s) \right] F_{m_s}(x, y). \end{aligned} \quad (3.75)$$

Reorganizando a equação anterior, obtém-se,

$$\begin{aligned} & \left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} m_0 \omega^2 (x^2 + y^2) \right] F_{m_s}(x, y) \\ & = \left[\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} - \frac{p_z^2}{2m_0} - \hbar \omega (m_l + 2m_s) \right] F_{m_s}(x, y), \end{aligned} \quad (3.76)$$

onde $\omega = eB/2m_0$ é a frequência do oscilador. Observa-se que o Hamiltoniano da esquerda corresponde ao oscilador harmônico bidimensional, então o termo da direita deverá ser igual a sua autoenergia,

$$\left[\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{2m_0 c^2} - \frac{p_z^2}{2m_0} - \hbar \omega (m_l + 2m_s) \right] = \hbar \omega (n_x + n_y + 1). \quad (3.77)$$

Isolando a energia total da expressão anterior tem-se,

$$\begin{aligned} E & = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + p_z^2 c^2 + eB \hbar c^2 (n + m_l + 2m_s + 1)}, \\ & \begin{cases} n = n_x + n_y. \\ m_l = n, n-2, n-4, \dots, -n+2, -n. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.78)$$

Nota-se que os valores positivos e negativos da energia como foi discutido no capítulo anterior, a energia positiva correspondem ao elétron e a negativa à antipartícula do elétron ou pósitron.

Descrevendo o processo quântico nas coordenadas cilíndricas as autofunções serão as mesmas obtidas na expressão (3.49), a principal diferença que surge está dada pela teoria de Dirac mediante a noção do espinor (3.59). Se inicialmente é estabelecido a partícula de energia positiva ou negativa, então se terá conhecimento de duas das quatro componentes do espinor onde cada uma dessas está associada a uma orientação de spin diferente (3.71). Portanto, precisar-se-á da relação (3.62) para obter o espinor completo associado a determinado estado quântico.

Capítulo 4

Análise do Mínimo Tempo de Evolução

Nesse capítulo apresenta-se duas classes de análises realizadas para um elétron em um campo magnético uniforme segundo as duas descrições da mecânica quântica expostas no capítulo anterior. Com o intuito de não discutir qual dos critérios do QSL é o melhor, apresenta-se uma primeira análise, a qual consiste em determinar o mínimo tempo de evolução para o elétron no estado inicial, definido como uma superposição de dois autoestados do hamiltoniano com igual probabilidade e correspondentes a níveis de energia diferentes, para chegar a um estado ortogonal respeito ao estado inicial. Para essa definição particular do estado do elétron, o critério de MT resulta ser equivalente ao critério de ML. A segunda análise está relacionada com a rapidez média com que o elétron se desloca espacialmente do estado inicial até o estado ortogonal¹.

Depois de se ter estudado vários autoestados em superposição, notou-se que não é qualquer classe de superposição que fornece um deslocamento espacial radial médio entre os estados inicial e final, mas somente a classe das superposições onde os dois autoestados possuem a mesma projeção de momento angular e a mesma orientação de spin. Deste modo, apresenta-se as análises não relativísticas de três casos diferentes de superposição de dois autoestados que são vizinhos próximos, possuem orientação do spin positiva, e a projeção do momento angular

¹Continuar-se-á utilizando a expressão MT para o caso relativístico, uma vez que a estrutura da equação de Schrödinger é equiparável a da equação de Dirac. Contudo, agora o gerador da dinâmica é o hamiltoniano de Dirac.

orbital na direção \hat{z} dada por: *i*) $m_l=0$, *ii*) $m_l=1$ e *iii*) $m_l=9$. Nota-se em cada um desses casos que a rapidez média com que o elétron se desloca radialmente é diretamente proporcional à raiz quadrada do campo magnético, assim esse pode atingir uma rapidez média igual ou superior à velocidade da luz no vácuo. Tendo em vista a esse resultado, apresenta-se uma análise relativística do primeiro caso de superposição, observando especificamente que a descrição relativística é a mais propícia quando o elétron se encontra em um campo magnético extremamente forte.

Posteriormente na descrição relativística, ao procurar por superposições iniciais que forneçam uma maior rapidez no deslocamento espacial do elétron entre os estados inicial e final, observa-se que as superposições de autoestados vizinhos com momento angular nulo são as que fornecem a maior rapidez média. Com base nesse resultado, analisa-se numericamente vários casos de superposição segundo, conseguindo-se assim uma estimativa da variação máxima possível em um campo magnético extremamente forte. Finalmente, propõe-se a análise de um caso de superposição de dois autoestados com sinal de energia diferente. Após ter-se estudado diferentes autoestados em superposição, notou-se que as mesmas condições limitantes anteriores devem ser satisfeitas pelos autoestados para a estimativa da máxima rapidez média com que o elétron nessa superposição pode se deslocar.

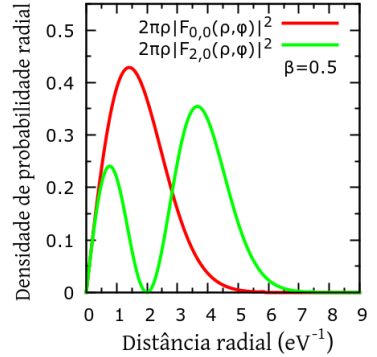
4.1 Elétron não relativístico

4.1.1 CASO 1

Nesse primeiro caso de superposição se define o estado do elétron no tempo inicial $t=0$, como uma superposição de dois autoestados de igual probabilidade, próximos energeticamente, mesma projeção do momento angular na direção \hat{z} , m_l e igual orientação de spin $m_s=1/2$. Com essas condições garante-se que o elétron mudará sua posição média ao ir do estado inicial para o estado final. A análise e discussão que será apresentada nesse capítulo, será feita mediante o uso das unidades naturais para simplificar os dados numéricos e facilitar a sua interpretação. Inicia-se a análise com a escrita das autofunções associadas com o confinamento harmônico bidimensional de cada autoestado da superposição e de sua correspondente distribuição de densidade de probabilidade radial, onde $\beta = \sqrt{m_0\omega} = \sqrt{eB/2}$ [eV],

$$F_{0,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \varrho^2/2}. \quad (4.1)$$

$$F_{2,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \left[(\beta\varrho)^2 - 1 \right] e^{-\beta^2 \varrho^2/2}. \quad (4.2)$$



Para simplificar a escrita das autofunções durante a análise toda, opta-se por denotar os autoestados através da sua correspondente autofunção espacial associada ao confinamento harmônico bidimensional, dessa maneira a superposição no tempo inicial fica escrita como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[F_{0,0}(\varrho, \varphi) + F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.3)$$

As energias dos respectivos autoestados são,

$$E_{0,0,1/2} = \frac{eB}{m_0} \text{ [eV]}, \quad E_{2,0,1/2} = 2 \frac{eB}{m_0} \text{ [eV]}. \quad (4.4)$$

As grandezas necessárias para calcular cada um dos dois critérios do mínimo tempo de evolução quântica são,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{3}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) \text{ [eV]}, & \langle H^2 \rangle &= \frac{5}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right)^2 \text{ [eV}^2\text{]}. \\ \Delta H &= \frac{1}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) \text{ [eV]}, & (\langle H \rangle - E_0) &= \frac{1}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) \text{ [eV]}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nesse caso particular de superposição o mínimo tempo de evolução resulta ser,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi m_0}{eB} \text{ [eV}^{-1}\text{]}. \quad (4.6)$$

A seguir prossegue o cálculo da distância radial média no instante inicial $t=0$ e posteriormente no instante $T_{\text{mín}}$. Repare-se que os autoestados envolvidos na análise apresentam o mesmo valor de momento angular com o propósito de garantir o deslocamento espacial do elétron, de tal forma que o termo cruzado no cálculo será diferente de zero,

$$\langle \varrho \rangle_0 = \frac{1}{2} \left[\langle 0, 0 | \varrho | 0, 0 \rangle + \langle 2, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle + 2 \langle 0, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle \right]. \quad (4.7)$$

Fazendo uso da integração da eq.(3.56), calcula-se cada um dos termos da expressão anterior,

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | \varrho | 0, 0 \rangle &= \frac{2\pi}{\pi} \int_0^{\infty} (\beta \varrho)^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\Gamma(3/2)}{\beta} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \langle 2, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle &= \frac{2\pi}{\pi} \int_0^{\infty} (\beta \varrho)^2 [(\beta \varrho)^2 - 1]^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho \\ &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} (x^6 - 2x^4 + x^2) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{\beta} [\Gamma(7/2) - 2\Gamma(5/2) + \Gamma(3/2)] = \frac{7\sqrt{\pi}}{8\beta}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle &= \frac{2\pi}{\pi} \int_0^{\infty} (\beta \varrho)^2 [(\beta \varrho)^2 - 1] d\varrho, \\ &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} (x^4 - x^2) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{\beta} [\Gamma(5/2) - \Gamma(3/2)] = \frac{\sqrt{\pi}}{4\beta}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Obtém-se assim a distância radial média do elétron no instante inicial com relação à origem do sistema de coordenadas,

$$\langle \varrho \rangle_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{11}{8} + \frac{1}{2} \right] = \frac{1.6616}{\beta} [\text{eV}^{-1}]. \quad (4.11)$$

De acordo com a independência temporal do Hamiltoniano e segundo a representação de Schrödinger, o estado inicial evolui até um tempo posterior t sobre a ação de uma dinâmica unitária expressa da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= e^{-i\hat{H}t} \psi(\vec{r}, 0), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[F_{0,0}(\varrho, \varphi) e^{-i\mathcal{E}t} + F_{2,0}(\varrho, \varphi) e^{-i2\mathcal{E}t} \right], \quad \mathcal{E} = \frac{eB}{m_0}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Com esse resultado, pode-se calcular a distância radial média do elétron em relação à origem do sistema de coordenadas para qualquer instante de tempo,

$$\begin{aligned} \langle \varrho \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[\langle 0, 0 | \varrho | 0, 0 \rangle + \langle 2, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle + \langle 0, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle e^{-i\mathcal{E}t} + \langle 2, 0 | \varrho | 0, 0 \rangle e^{i\mathcal{E}t} \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[\langle 0, 0 | \varrho | 0, 0 \rangle + \langle 2, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle + 2 \langle 0, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle \cos(\mathcal{E}t) \right], \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{11}{8} + \frac{1}{2} \cos(\mathcal{E}t) \right]. \end{aligned} \quad (4.13)$$

No instante $T_{\text{mín}}$ a distância média do elétron resulta ser,

$$\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{11}{8} - \frac{1}{2} \right] = \frac{0.7754}{\beta}. \quad (4.14)$$

Calcula-se o módulo do deslocamento médio do elétron do instante inicial até o tempo $T_{\text{mín}}$ em relação à origem do sistema de coordenadas,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0| = 2 \left| \langle 0, 0 | \varrho | 2, 0 \rangle \right| = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta}. \quad (4.15)$$

Portanto, a rapidez média com que o elétron se desloca nesse intervalo de tempo resulta ser,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\text{mín}}} = \frac{\beta}{m_0 \sqrt{\pi}} = \frac{1}{m_0} \sqrt{\frac{eB}{2\pi}} [c]. \quad (4.16)$$

Nota-se que a rapidez é diretamente proporcional à raiz quadrada do campo magnético, porém existirá algum campo magnético suficientemente forte que forneça uma rapidez igual à velocidade da luz. Isso acontece quando,

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_0} \sqrt{\frac{eB}{2\pi}} = 1, \quad \rightarrow \quad B &= 2\pi m_0^2 \sqrt{137}, \\ &= 1.920 \times 10^{13} [\text{eV}^2], \\ &= 2,772 \times 10^{10} \text{Tesla}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Vale a pena reparar que o elétron, por ser uma partícula massiva, não poderia viajar com velocidade maior ou igual a c . Por outro lado,

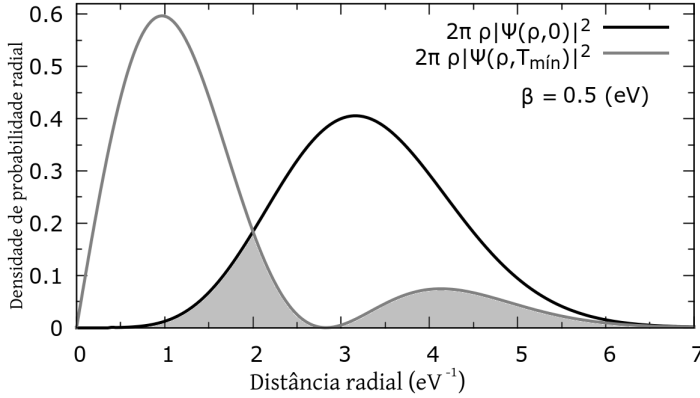


Figura 4.1: Densidade de probabilidade radial correspondente à superposição de estados $F_{0,0}$ e $F_{2,0}$, no tempo inicial $t = 0$ e no tempo $T_{\text{mín}}$. A área cinza mostra o quão superpostas estão estas densidades de probabilidade, correspondendo a 26.42% do valor total.

calcula-se as distribuições de probabilidade radial do elétron no tempo $t=0$ e $T_{\text{mín}}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\varrho, 0) &= \frac{2\pi\varrho}{2} \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 + 2F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right], \\ &= \beta^2\varrho(\beta\varrho)^4 e^{-\beta^2\varrho^2}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\varrho, T_{\text{mín}}) &= \frac{2\pi\varrho}{2} \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 - 2F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right], \\ &= \beta^2\varrho \left[(\beta\varrho)^4 - 4(\beta\varrho)^2 + 4 \right] e^{-\beta^2\varrho^2}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

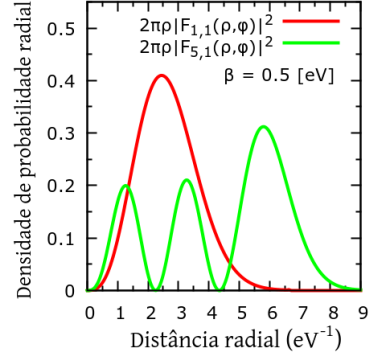
A priori, sabe-se que as distribuições de densidade de probabilidade radial do elétron são normalizadas, portanto, calcular a área em superposição da distribuição no tempo $T_{\text{mín}}$ em relação a distribuição no tempo inicial, quantifica a similaridade das distribuições radiais de probabilidade, que é de 26.42% correspondendo a área cinza da figura (4.1).

4.1.2 CASO 2

Do mesmo modo que a análise anterior, define-se no instante inicial o estado de superposição de dois autoestados que não sejam tão próximos energeticamente, de mesmo momento angular $m_l = 1$ e igual orientação de spin $m_s = 1/2$. As funções dos autoestados relacionadas ao confinamento parabólico são,

$$F_{1,1}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} (\beta\varrho) e^{-\beta^2 \varrho^2/2} e^{i\varphi}. \quad (4.20)$$

$$F_{5,1}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{12\pi}} \left[(\beta\varrho)^5 - 6(\beta\varrho)^3 + 6(\beta\varrho) \right] e^{i\varphi}. \quad (4.21)$$



Define-se o estado de superposição no instante inicial,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[F_{1,1}(\varrho, \varphi) + F_{5,1}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.22)$$

As energias dos respectivos autoestados são,

$$E_{1,1,1/2} = 2 \frac{eB}{m_0} [\text{eV}], \quad E_{5,1,1/2} = 4 \frac{eB}{m_0} [\text{eV}]. \quad (4.23)$$

Calculando as duas grandezas necessárias para a análise de cada um dos critérios,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= 3 \frac{eB}{m_0} [\text{eV}], & \langle H^2 \rangle &= 10 \frac{e^2 B^2}{m_0^2} [\text{eV}^2], \\ \Delta H &= \frac{eB}{m_0} [\text{eV}], & (\langle H \rangle - E_0) &= \frac{eB}{m_0} [\text{eV}]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

O mínimo tempo de evolução quântica resultam ser,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi m_0}{2eB} [\text{eV}^{-1}]. \quad (4.25)$$

Calcula-se a distância média do elétron no instante inicial e no instante $T_{\text{mín}}$. Dado ao fato que os autoestados envolvidos na análise apresentam a mesma projeção de momento angular, tem-se que $\langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle =$

$\langle 5, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle$, dessa maneira,

$$\langle \varrho \rangle_0 = \frac{1}{2} \left[\langle 1, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle + \langle 5, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle + 2 \langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle \right]. \quad (4.26)$$

Fazendo uso da integral eq.(3.56), calcula-se cada um dos termos da expressão anterior,

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle &= \frac{2\pi}{\pi} \int_0^{\infty} \beta^2 \varrho^2 (\beta \varrho)^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} x^4 e^{-x^2} dx = \frac{\Gamma(5/2)}{\beta} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\beta}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle &= \frac{2\pi}{\sqrt{12}\pi} \int_0^{\infty} \beta^2 \varrho^2 (\beta \varrho) \left[(\beta \varrho)^5 - 6(\beta \varrho)^3 + (\beta \varrho) \right] e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{2}{\sqrt{12}\beta} \int_0^{\infty} (x^8 - 6x^6 + 6x^4) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{\sqrt{12}\beta} [\Gamma(9/2) - 6\Gamma(7/2) + 6\Gamma(5/2)] = -\frac{\sqrt{3\pi}}{32\beta}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} \langle 5, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle &= \frac{2\pi}{12\pi} \int_0^{\infty} \beta^2 \varrho^2 \left[(\beta \varrho)^5 - 6(\beta \varrho)^3 + (\beta \varrho) \right]^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{1}{6\beta} \int_0^{\infty} (x^{12} - 12x^{10} + 48x^8 - 72x^6 + 36x^4) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{12\beta} [\Gamma(13/2) - 12\Gamma(11/2) + 48\Gamma(9/2) - 72\Gamma(7/2) + 36\Gamma(5/2)], \\ &= \frac{321\sqrt{\pi}}{256\beta}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

A distância radial média do elétron no instante inicial em relação à origem do sistema de coordenadas é,

$$\begin{aligned} \langle \varrho \rangle_0 &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{513}{256} - \frac{\sqrt{3}}{4} \right], \\ &= \frac{1.6799}{\beta}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

O estado inicial do elétron evoluirá até um tempo posterior t através de uma dinâmica unitária da seguinte maneira,

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= e^{-i\hat{H}t}\psi(\vec{r}, 0), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[F_{1,1}(\varrho, \varphi) e^{-i2\mathcal{E}t} + F_{5,1}(\varrho, \varphi) e^{-i4\mathcal{E}t} \right], \quad \mathcal{E} = \frac{eB}{m_0}.\end{aligned}\tag{4.31}$$

O valor da distância radial média do elétron em relação à origem do sistema de coordenadas no tempo t é,

$$\begin{aligned}\langle \varrho \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[\langle 1, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle + \langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle e^{-i2\mathcal{E}t} + \langle 5, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle e^{i2\mathcal{E}t} + \langle 5, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[\langle 1, 1 | \varrho | 1, 1 \rangle + 2 \langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle \cos(2\mathcal{E}t) + \langle 5, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle \right], \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{513}{256} - \frac{\sqrt{3}}{16} \cos(2\mathcal{E}t) \right].\end{aligned}\tag{4.32}$$

A distância radial média do elétron em relação à origem do sistema de coordenadas no tempo mínimo em T_{\min} é,

$$\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \left[\frac{513}{256} + \frac{\sqrt{3}}{16} \right] = \frac{1.87185}{\beta}.\tag{4.33}$$

Calculando o módulo do deslocamento do instante inicial até o tempo T_{\min} ,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0| = \left| \langle 1, 1 | \varrho | 5, 1 \rangle (\cos(2\mathcal{E}T_{\min}) - 1) \right| = \frac{\sqrt{3}\pi}{16\beta}.\tag{4.34}$$

Seguindo com a análise, calcula-se a rapidez média com que o elétron se desloca,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\min}} = \frac{\sqrt{6eB}}{8m_0\sqrt{\pi}} [c].\tag{4.35}$$

Analogamente ao caso anterior, calcula-se quão forte deve ser o campo magnético para se obter uma rapidez igual à velocidade da luz,

$$\begin{aligned}\frac{\sqrt{6eB}}{8m_0\sqrt{\pi}} = 1, \quad \Rightarrow \quad B &= \frac{32m_0^2\pi\sqrt{137}}{3} [\text{eV}^2], \\ &= 9,80 \times 10^8 [\text{eV}^2], \\ &= 1,42 \times 10^{11} [\text{Tesla}].\end{aligned}\tag{4.36}$$

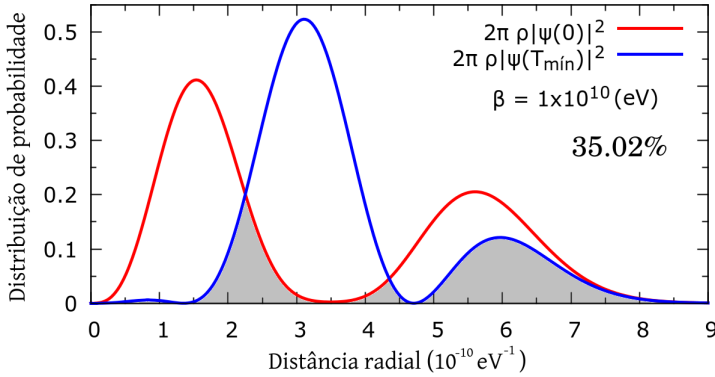


Figura 4.2: Densidade de probabilidade radial do elétron correspondente à superposição de estados $F_{1,1}$ e $F_{5,1}$, no tempo inicial e no tempo de ortogonalidade. A área cinza mostra o quão superpostos estão estas densidades de probabilidade, correspondendo a 35.02% do valor total.

Finalmente, calcula-se as distribuições de probabilidade radial do elétron tempo $t=0$ e $T_{\text{mín}}$.

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}(\varrho, 0) \\
 &= \frac{2\pi\varrho}{2} \left[|F_{1,1}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{5,1}(\varrho, \varphi)|^2 + 2F_{1,1}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{5,1}(\varrho, \varphi) \right], \\
 &= \beta^2\varrho \left[(\beta\varrho)^2 + \frac{1}{12} [(\beta\varrho)^5 - 6(\beta\varrho)^3 + 6(\beta\varrho)]^2 \right. \\
 & \quad \left. + \frac{2}{\sqrt{12}} [(\beta\varrho)^6 - (\beta\varrho)^4 + (\beta\varrho)^2] \right] e^{-\beta^2\varrho^2}.
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}(\varrho, T_{\text{mín}}) \\
 &= \frac{2\pi\varrho}{2} \left[|F_{1,1}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{5,1}(\varrho, \varphi)|^2 \right. \\
 & \quad \left. + 2F_{1,1}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{5,1}(\varrho, \varphi) \cos(2\mathcal{E}T_{\text{mín}}) \right], \\
 &= \beta^2\varrho \left[(\beta\varrho)^2 + \frac{1}{12} [(\beta\varrho)^5 - 6(\beta\varrho)^3 + 6(\beta\varrho)]^2 \right. \\
 & \quad \left. - \frac{2}{\sqrt{12}} [(\beta\varrho)^6 - (\beta\varrho)^4 + (\beta\varrho)^2] \right] e^{-\beta^2\varrho^2}.
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

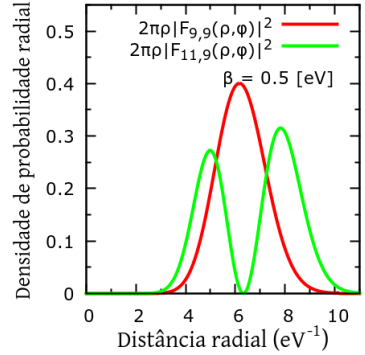
Na figura (4.2) mostra-se o gráfico de $D(\varrho, 0)$ e $D(\varrho, T_{\min})$ e compara-se o quão superpostas estão estas distribuições de probabilidade, correspondendo ao valor de 35.02% do total.

4.1.3 CASO 3

Nesse terceiro caso de análise, são escolhidos dois autoestados energeticamente próximos, com o máximo valor de momento angular possível para ambos e mesma orientação de spin $+1/2$. As duas funções relacionadas ao confinamento parabólico dos autoestados escolhidos são,

$$F_{9,9}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{9!\pi}} (\beta\varrho)^9 e^{-\beta^2\varrho^2/2} e^{i9\varphi}. \quad (4.39)$$

$$F_{11,9}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{10!\pi}} \left[(\beta\varrho)^{11} - 10(\beta\varrho)^9 \right] e^{-\beta^2\varrho^2/2} e^{i9\varphi}. \quad (4.40)$$



Define-se o estado de superposição no instante inicial,

$$\psi_0(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[F_{9,9}(\varrho, \varphi) + F_{11,9}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.41)$$

As energias dos respectivos autoestados são,

$$E_{9,9,1/2} = 10 \frac{eB}{m_0} [\text{eV}], \quad E_{11,9,1/2} = 11 \frac{eB}{m_0} [\text{eV}]. \quad (4.42)$$

Calculando as grandezas necessárias para a análise do mínimo tempo de evolução,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{21}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) [\text{eV}], & \langle H^2 \rangle &= \frac{221}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right)^2 [\text{eV}^2], \\ \Delta H &= \frac{1}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) [\text{eV}], & (\langle H \rangle - E_0) &= \frac{1}{2} \left(\frac{eB}{m_0} \right) [\text{eV}]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

O mínimo tempo de evolução resulta ser ,

$$T_{\min} = \frac{\pi m_0}{eB} [\text{eV}^{-1}]. \quad (4.44)$$

No cálculo da distância radial média do elétron em relação à origem do sistema de coordenadas no instante inicial, observa-se que os termos cruzados são simétricos $\langle 9, 9|\varrho|11, 9\rangle = \langle 11, 9|\varrho|9, 9\rangle$, resultando em,

$$\langle \varrho \rangle_0 = \frac{1}{2} \left[\langle 9, 9|\varrho|9, 9\rangle + 2\langle 9, 9|\varrho|11, 9\rangle + \langle 11, 9|\varrho|11, 9\rangle \right]. \quad (4.45)$$

Fazendo uso da integral (3.56), calcula-se cada um dos três termos anteriores,

$$\begin{aligned} \langle 9, 9|\varrho|9, 9\rangle &= \frac{2\pi}{9!\pi} \int_0^\infty \beta^2 \varrho^2 (\beta\varrho)^{18} e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{2}{9!\beta} \int_0^\infty x^{20} e^{-x^2} dx = \frac{\Gamma(21/2)}{9!\beta} = \frac{3.1230}{\beta}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \langle 9, 9|\varrho|11, 9\rangle &= \frac{2\pi}{\pi\sqrt{9!10!}} \int_0^\infty \beta^2 \varrho^2 (\beta\varrho)^9 \left[(\beta\varrho)^{11} - 10(\beta\varrho)^9 \right] d\varrho, \\ &= \frac{2}{\sqrt{9!10!}\beta} \int_0^\infty (x^{22} - 10x^{20}) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{\sqrt{9!10!}\beta} [\Gamma(23/2) - 10\Gamma(21/2)] = \frac{0.4938}{\beta}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} \langle 11, 9|\varrho|11, 9\rangle &= \frac{2\pi}{10!\pi} \int_0^\infty \beta^2 \varrho^2 \left[(\beta\varrho)^{11} - 10(\beta\varrho)^9 \right]^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\ &= \frac{2}{10!\beta} \int_0^\infty (x^{24} - 20x^{22} + 100x^{20}) e^{-x^2} dx, \\ &= \frac{1}{10!\beta} [\Gamma(25/2) - 20\Gamma(23/2) + 100\Gamma(21/2)] = \frac{3.3572}{\beta}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

A distância radial média do elétron no instante inicial $t=0$ é,

$$\langle \varrho \rangle_0 = \frac{3.7339}{\beta}. \quad (4.49)$$

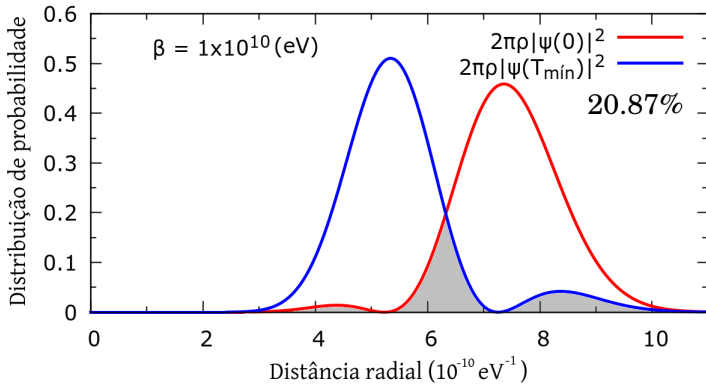


Figura 4.3: Distribuições de densidade de probabilidade radial do elétron correspondente à superposição de estados $F_{9,9}$ e $F_{11,9}$, no tempo inicial e no tempo de ortogonalidade. A área cinza mostra o quão superpostos estão estas densidades de probabilidade, correspondendo a 20.87% do valor total.

A função de onda no tempo t posterior é expressa como,

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t}|\psi_0\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-i10\mathcal{E}t}|9,9\rangle + e^{-i11\mathcal{E}t}|11,9\rangle \right], \quad \mathcal{E} = \frac{eB}{m_0}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

A distância radial média do elétron no tempo t é,

$$\begin{aligned} \langle \varrho \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[\langle 9,9|\varrho|9,9\rangle + \langle 9,9|\varrho|11,9\rangle e^{-i\mathcal{E}t} + \langle 11,9|\varrho|9,9\rangle e^{i\mathcal{E}t} + \langle 11,9|\varrho|11,9\rangle \right], \\ &= \frac{1}{2} \left[\langle 9,9|\varrho|9,9\rangle + 2\langle 9,9|\varrho|11,9\rangle \cos(\mathcal{E}t) + \langle 11,9|\varrho|11,9\rangle \right], \\ &= \frac{1}{\beta} \left[3.2401 + 0.4938 \cos(\mathcal{E}t) \right]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

O módulo do deslocamento médio do elétron durante o intervalo de tempo $t=0$ até T_{\min} é,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0| = \left| \langle 9,9|\varrho|11,9\rangle [\cos(\mathcal{E}T_{\min}) - 1] \right| = \frac{0.9876}{\beta}. \quad (4.52)$$

A rapidez média com que o elétron se desloca radialmente no intervalo de tempo $t=0$ até T_{\min} é,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\min}} = \frac{0.6287\beta}{m_0}, \quad \beta = \sqrt{\frac{eB}{2}} [\text{eV}]. \quad (4.53)$$

Para obter uma rapidez média igual à velocidade da luz, o valor do campo magnético deve ser,

$$\begin{aligned} \frac{0.6287\beta}{m_0} = 1, \quad \Rightarrow \quad B &= \frac{2m_0^2\sqrt{137}}{0.6287^2} [\text{eV}^2], \\ &= 1,28 \times 10^{13} [\text{eV}^2], \\ &= 2,13 \times 10^{10} [\text{Tesla}]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Na figura (4.3) se visualiza as densidade radias de probabilidade do elétron no tempo inicial e no tempo $T_{\text{mín}}$, correspondendo a 20.87% de superposição destas duas distribuições.

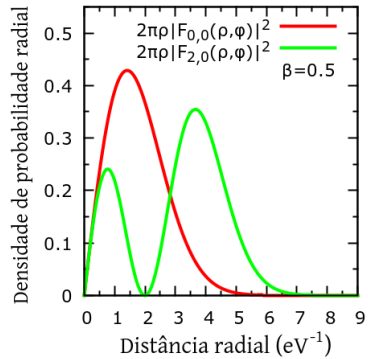
4.2 Elétron relativístico

4.2.1 CASO 1

O primeiro caso de superposição a ser analisado através da mecânica quântica relativística de Dirac é baseado nos resultados obtidos no primeiro caso de superposição anterior. Sejam as funções associadas com o confinamento parabólico pertencentes aos respectivos autoestados,

$$F_{0,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2}, \quad \beta = \sqrt{\frac{eB}{2}} [e] \quad (4.55)$$

$$F_{2,0}(\varrho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} [(\beta \varrho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2}. \quad (4.56)$$



Desejando simplificar a escrita referente aos autoestados do hamiltoniano de Dirac, usa-se as funções anteriores, visto que essas descrevem o comportamento radial e angular do elétron, importante para a análise que será apresentada. Define-se o estado inicial como a superposição de dois autoestados de igual probabilidade,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [U_{0,0}(\varrho, \varphi) + U_{2,0}(\varrho, \varphi)]. \quad (4.57)$$

Seja a massa em repouso do elétron $m_0 = 0,5110[\text{MeV}]$, as expressões das autoenergias são,

$$\begin{aligned} E_{0,0,1/2} &= \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2}[\text{eV}], \\ E_{2,0,1/2} &= \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2}[\text{eV}], \quad \beta^2 = \frac{eB}{2}[\text{eV}^2]. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Calculando as grandezas requeridas para efetuar a análise dos critérios,

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \left[\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2} + \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2} \right] [\text{eV}], \quad (4.59a)$$

$$\langle H^2 \rangle = \left[m_0^2 + p_z^2 + 6\beta^2 \right] [\text{eV}^2], \quad (4.59b)$$

$$\Delta H = \sqrt{\frac{m_0^2}{2} + \frac{p_z^2}{2} + 3\beta^2} - \frac{1}{2} \sqrt{(m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2)(m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2)} [\text{eV}]. \quad (4.59c)$$

$$\Delta H = \frac{1}{2} \left[\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2} - \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2} \right] = (\langle H \rangle - E_0). \quad (4.60)$$

Por causa da equivalência entre as grandezas calculadas para os dois critérios para o mínimo tempo de evolução, obtém-se,

$$T_{\min} = \frac{\pi}{\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2} - \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2}} [\text{eV}^{-1}]. \quad (4.61)$$

Observa-se que o mínimo tempo de evolução na abordagem relativística é inversamente proporcional à raiz quadrada do campo magnético, $T_{\min} \sim 1/\sqrt{B}$ e não inversamente proporcional ao campo magnético, como foi o caso não relativístico. Por outra parte, as funções associadas com o confinamento parabólico do elétron correspondente a cada autoestado, serão usadas para construir o espinor próprio a cada autoestado. Devido ao carácter positivo das energias, pois se deseja descrever um elétron, as duas primeiras componentes dos espinores são as mais fáceis de serem expressas,

$$U_{0,0}^{(+)}(\varrho, \varphi) = \begin{pmatrix} F_{0,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z}, \quad U_{2,0}^{(+)}(\varrho, \varphi) = \begin{pmatrix} F_{2,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z}. \quad (4.62)$$

Segundo a teoria de Dirac, as outras duas componentes do espinor associada à partícula de energia negativa ou “antipartícula” são obtidas

em função das componentes de energia positiva da seguinte maneira,

$$U^{(-)} = \frac{\hat{\sigma} \cdot [-i\nabla + e\vec{A}]}{E + m_0} U^{(+)} \quad (4.63)$$

Implementando as coordenadas cilíndricas na expressão anterior devido à simetria evidenciada no sistema, primeiramente será construído o espinor pertencente ao estado ($n = 0, m_l = 0$). Sendo assim, a relação entre os versores das coordenadas cartesianas e polares está dada por,

$$\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\varrho} \\ \hat{\varphi} \\ \hat{z} \end{pmatrix}. \quad (4.64)$$

Portanto, o vetor potencial do campo magnético fica expresso da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \frac{B}{2}(-y, x, 0), \\ &= \frac{B}{2} \left(-\varrho \sin \varphi (\hat{\varrho} \cos \varphi - \hat{\varphi} \sin \varphi) + \varrho \cos \varphi (\hat{\varrho} \sin \varphi + \hat{\varphi} \cos \varphi) \right), \\ &= \frac{B\varrho}{2} \hat{\varphi}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

O laplaciano em coordenadas cilíndricas é,

$$\nabla = \hat{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{\hat{\varphi}}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.66)$$

O vetor das matrizes de Pauli fica,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} &= \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}, \\ &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \hat{\varrho} + \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \hat{\varphi} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{z}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Dessa maneira o termo da eq.(4.63) usado para calcular as componentes espinoriais associadas à partícula de energia negativa fica expresso

como,

$$\begin{aligned}
 & \frac{\hat{\sigma} \cdot \left(-i\nabla + \frac{eB\varrho}{2} \hat{\varphi} \right)}{E+m_0} \\
 &= \frac{1}{E+m_0} \left(\begin{array}{cc} -i \frac{\partial}{\partial z} & -ie^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \varrho} - \frac{i}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eB\varrho}{2} \right) \\ -ie^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{i}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{eB\varrho}{2} \right) & i \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right), \\
 &= \frac{1}{E+m_0} \left(\begin{array}{cc} -i \frac{\partial}{\partial z} & -2i\beta \hat{a}_R \\ 2i\beta \hat{a}_R^\dagger & i \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right), \tag{4.68}
 \end{aligned}$$

onde \hat{a}_R^\dagger e \hat{a}_R são os operadores de criação e aniquilação de um *quantum circular* à direita (3.43). Por conseguinte, as duas componentes espinoriais correspondentes à energia negativa para o estado caracterizado pelos números quânticos ($n=0, m_l=0$) são,

$$\begin{aligned}
 U^{(-)}(\vec{r}) &= \frac{1}{E+m_0} \left(\begin{array}{cc} -i \frac{\partial}{\partial z} & -2i\beta \hat{a}_R \\ 2i\beta \hat{a}_R^\dagger & i \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} F_{0,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{array} \right) e^{ip_z z}, \\
 &= \frac{1}{E+m_0} \left(\begin{array}{c} p_z F_{0,0}(\varrho, \varphi) \\ 2i\beta F_{1,1}(\varrho, \varphi) \end{array} \right) e^{ip_z z}. \tag{4.69}
 \end{aligned}$$

Com base na eq.(4.62) e o resultado da eq.(4.69), obtém-se o espinor de forma completa,

$$\begin{aligned}
 U_{0,0}(\vec{r}) &= N_{0,0} \left(\begin{array}{c} F_{0,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \\ \frac{p_z F_{0,0}(\varrho, \varphi)}{(E_{0,0}+m_0)} \\ \frac{2i\beta F_{1,1}(\varrho, \varphi)}{(E_{0,0}+m_0)} \end{array} \right) e^{ip_z z}, \\
 N_{0,0} &= \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_{0,0}+m_0)^2} + \frac{4\beta^2}{(E_{0,0}+m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \tag{4.70}
 \end{aligned}$$

onde $N_{0,0}$ é a constante de normalização do espinor. Dado o resultado anterior, calcula-se a densidade de probabilidade radial do elétron nesse

autoestado,

$$D_{0,0}(\varrho) = 2\pi\varrho N_{0,0}^2 \left[\left(1 + \frac{p_z^2}{(E_{0,0} + m_0)^2} \right) |F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + \frac{4\beta^2}{(E_{0,0} + m_0)^2} |F_{1,1}(\varrho, \varphi)|^2 \right]. \quad (4.71)$$

Efetuando o mesmo procedimento anterior para o estado denotado por $(n=2, m_l=0)$, obtém-se o seguinte espinor,

$$U_{2,0}(\vec{r}) = N_{2,0} \begin{pmatrix} F_{2,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \\ \frac{p_z F_{2,0}(\varrho, \varphi)}{(E_{2,0} + m_0)} \\ \frac{2i\beta\sqrt{2}F_{3,1}(\varrho, \varphi)}{(E_{2,0} + m_0)} \end{pmatrix} e^{ip_z z}, \quad (4.72)$$

$$N_{2,0} = \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} + \frac{8\beta^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

Sendo a densidade de probabilidade radial do elétron desse autoestado,

$$D_{2,0}(\varrho) = 2\pi\varrho N_{2,0}^2 \left[\left(1 + \frac{p_z^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} \right) |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 + \frac{8\beta^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} |F_{3,1}(\varrho, \varphi)|^2 \right]. \quad (4.73)$$

Segundo a mecânica quântica relativística, o estado de superposição no instante inicial (4.57) resulta ser,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{0,0}(\varrho, \varphi) + U_{2,0}(\varrho, \varphi) \right] e^{ip_z z}. \quad (4.74)$$

A seguir, mostra-se que os dois espinores (4.70) e (4.72) são ortogonais,

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} U_{0,0}^{\dagger}(\varrho, \varphi) U_{2,0}(\varrho, \varphi) \varrho d\varrho d\varphi \\
 &= 2\pi N_{0,0} N_{2,0} \left(1 + \frac{p_z^2}{(E_{0,0} + m_0)(E_{2,0} + m_0)} \right) \underbrace{\int_0^{\infty} F_{0,0}^{\dagger}(\varrho, \varphi) F_{2,0}(\varrho, \varphi) \varrho d\varrho}_{=0} \\
 &+ \frac{8\sqrt{2}\pi\beta^2 N_{0,0} N_{2,0}}{(E_{0,0} + m_0)(E_{2,0} + m_0)} \underbrace{\int_0^{\infty} F_{1,1}^{\dagger}(\varrho, \varphi) F_{3,1}(\varrho, \varphi) \varrho d\varrho}_{=0} = 0.
 \end{aligned} \tag{4.75}$$

A densidade de probabilidade radial do estado de superposição (4.74) é,

$$\mathcal{D}(\varrho, 0) = \int_0^{2\pi} \varrho |\psi(\vec{r}, 0)|^2 d\varphi = \frac{2\pi\varrho}{2} \left(|U_{0,0}|^2 + |U_{2,0}|^2 + 2U_{0,0}^{\dagger} U_{2,0} \right). \tag{4.76}$$

Com esse resultado, nota-se uma vez mais a importância de ter assumido o mesmo momento angular para os dois estados que compõem a superposição, pois se fossem diferentes, o terceiro termo da distribuição seria nulo pela integração da função sinusoidal em um ciclo completo. Sabe-se que os dois primeiros termos equivalem às expressões (4.71) e (4.73), respectivamente, o terceiro termo é,

$$\begin{aligned}
 D_S(\varrho) &= 2\pi\varrho U_{0,0}^{\dagger}(\varrho, \varphi) U_{2,0}(\varrho, \varphi), \\
 &= 2\pi\varrho N_{0,0} N_{2,0} \left[\left(1 + \frac{p_z^2}{(E_{0,0} + m_0)(E_{2,0} + m_0)} \right) F_{0,0}^{\dagger}(\varrho, \varphi) F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{4\sqrt{2}\beta^2}{(E_{0,0} + m_0)(E_{2,0} + m_0)} F_{1,1}^{\dagger}(\varrho, \varphi) F_{3,1}(\varrho, \varphi) \right].
 \end{aligned} \tag{4.77}$$

Dessa maneira a densidade de probabilidade radial do elétron eq.(4.76) fica,

$$\mathcal{D}(\varrho, 0) = \frac{1}{2} \left[D_{0,0}(\varrho) + D_{2,0}(\varrho) + 2D_S(\varrho) \right]. \tag{4.78}$$

Dada a independência temporal do hamiltoniano do elétron, pode-se expressar o estado de superposição para um tempo posterior t qualquer como,

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{0,0}(\varrho, \varphi) e^{-iE_0 t} + U_{2,0}(\varrho, \varphi) e^{-iE_2 t} \right], \quad (4.79)$$

onde E_0 e E_2 são as energias (4.58) dos respectivos autoestados.

Regime 1: Baixas velocidades e campo magnético fraco

Não sendo fácil analisar a distribuição de probabilidade radial, eq. (4.78), devido à dependência do momento linear e do campo magnético, decide-se em primeira instância estudar seu comportamento no regime de baixas velocidades e campo magnético fraco. Em outras palavras, a massa de repouso do elétron será a grandeza física característica do fenômeno. Nesse caso se expandem as expressões das energias através da série de Taylor², como,

$$\begin{aligned} E_{0,0,1/2} &= \sqrt{m_0^2 + 4\beta^2} = m_0 \sqrt{1 + \frac{4\beta^2}{m_0^2}} \approx m_0 \left(1 + \frac{2\beta^2}{m_0^2} \right) = m_0 + \frac{2\beta^2}{m_0}, \\ E_{2,0,1/2} &= \sqrt{m_0^2 + 8\beta^2} = m_0 \sqrt{1 + \frac{8\beta^2}{m_0^2}} \approx m_0 \left(1 + \frac{4\beta^2}{m_0^2} \right) = m_0 + \frac{4\beta^2}{m_0}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Observa-se que o segundo termo da aproximação anterior é (eB/m_0) , equivalente à energia de cada autoestado obtido na análise não relativística. Com base no resultado anterior, as constantes de normalização de cada espinor ficam reduzidas,

$$N_{0,0} \approx \left[1 + \frac{4\beta^2 m_0^2}{(2m_0^2 + 2\beta^2)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \approx 1, \quad N_{2,0} \approx \left[1 + \frac{8\beta^2 m_0^2}{(2m_0^2 + 4\beta^2)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \approx 1. \quad (4.81)$$

²Seja a expansão em série de Taylor $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots$, para $x \rightarrow 0$.

Dessa maneira a densidade de probabilidade de cada autoestado torna-se,

$$\begin{aligned} D_{0,0}(\varrho) &\approx 2\pi\varrho \left(1 + \frac{4\beta^2 m_0^2}{(2m_0^2 + 2\beta^2)^2} \right) |F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 \approx 2\pi\varrho |F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2, \\ D_{2,0}(\varrho) &\approx 2\pi\varrho \left(1 + \frac{8\beta^2 m_0^2}{(2m_0^2 + 4\beta^2)^2} \right) |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 \approx 2\pi\varrho |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Nesse regime de análise as distribuições de probabilidade de cada autoestado resultam ser as mesmas do caso não relativístico. Realizando a mesma sequência de aproximações sob a função D_S , chega-se à mesma distribuição de probabilidade não relativística no tempo inicial ($t=0$),

$$\mathcal{D}(\varrho, 0) = \pi\varrho \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 + 2F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.83)$$

Para um tempo t posterior,

$$\mathcal{D}(\varrho, t) = \pi\varrho \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 + 2F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) \cos((E_2 - E_0)t) \right]. \quad (4.84)$$

Nesse regime de análise, o mínimo tempo evolução resulta ser,

$$\begin{aligned} \lim_{p_z \rightarrow 0} T_{\min} &= \frac{\pi}{m_0 \sqrt{1 + 8\beta^2/m_0^2} - m_0 \sqrt{1 + 4\beta^2/m_0^2}}, \\ &\approx \frac{\pi/m_0}{(1 + 4\beta^2/m_0^2) - (1 + 2\beta^2/m_0^2)} = \frac{\pi m_0}{eB}. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Obtendo a mesma expressão para o mínimo tempo de evolução em relação à análise não relativística, eq.(4.6). A distribuição de probabilidade no tempo T_{\min} é,

$$\mathcal{D}(\varrho, T_{\min}) = \pi\varrho \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 - 2F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.86)$$

Com base nas distribuições de densidade de probabilidade no tempo inicial e no tempo de ortogonalidade, pode-se calcular facilmente as duas distâncias médias do elétron ϱ e obter o máximo deslocamento espacial médio entre o estado inicial e final do elétron nesse caso de

superposição,

$$\begin{aligned}
 |\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0| &= \left| 2\pi \int_0^\infty \varrho^2 F_{0,0}^\dagger F_{2,0} d\varrho \left[\cos((E_2 - E_0)T_{\min}) - 1 \right] \right| \equiv 2 \left| \int_0^\infty \varrho D_S(\varrho) d\varrho \right|, \\
 &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\beta^2 \varrho^2}{\pi} [(\beta\varrho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho = \frac{2}{\beta} \left[\Gamma(5/2) - \Gamma(3/2) \right] = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta}.
 \end{aligned} \tag{4.87}$$

Portanto, a rapidez média com que o elétron desloca-se da sua posição inicial até a posição final resulta ser,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\min}} = \frac{\beta}{m_0 \pi} = \frac{1}{m_0} \sqrt{\frac{eB}{2\pi}} [c]. \tag{4.88}$$

Esse resultado recupera o caso não relativístico analisado anteriormente.

Regime 2: Campo magnético extremamente forte

Nesse segundo regime de análise relativística, deseja-se calcular se há algum valor de campo magnético capaz de fazer o elétron se deslocar com uma rapidez média maior que c . Então, assume-se o campo magnético como sendo a grandeza física dominante do sistema ($\beta \gg p_z, m_0$). Em consequência, as energias dos autoestados podem ser expressas como,

$$\begin{aligned}
 E_{2,0} &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2} = 2\sqrt{2}\beta \sqrt{1 + \frac{p_z^2}{8\beta^2}} \sqrt{1 + \frac{m_0^2}{(p_z^2 + 8\beta^2)}}, \\
 &\approx 2\sqrt{2}\beta \left(1 + \frac{p_z^2}{16\beta^2} \right) \left(1 + \frac{m_0^2}{2(p_z^2 + 8\beta^2)} \right) \approx 2\sqrt{2}\beta.
 \end{aligned} \tag{4.89}$$

$$\begin{aligned}
 E_{0,0} &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2} = 2\beta \sqrt{1 + \frac{p_z^2}{4\beta^2}} \sqrt{1 + \frac{m_0^2}{(p_z^2 + 4\beta^2)}}, \\
 &\approx 2\beta \left(1 + \frac{p_z^2}{8\beta^2} \right) \left(1 + \frac{m_0^2}{2(p_z^2 + 4\beta^2)} \right) \approx 2\beta.
 \end{aligned} \tag{4.90}$$

O mínimo tempo de evolução nesse regime de análise resulta ser,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} T_{\min} \approx \frac{\pi}{2(\sqrt{2} - 1)\beta}. \tag{4.91}$$

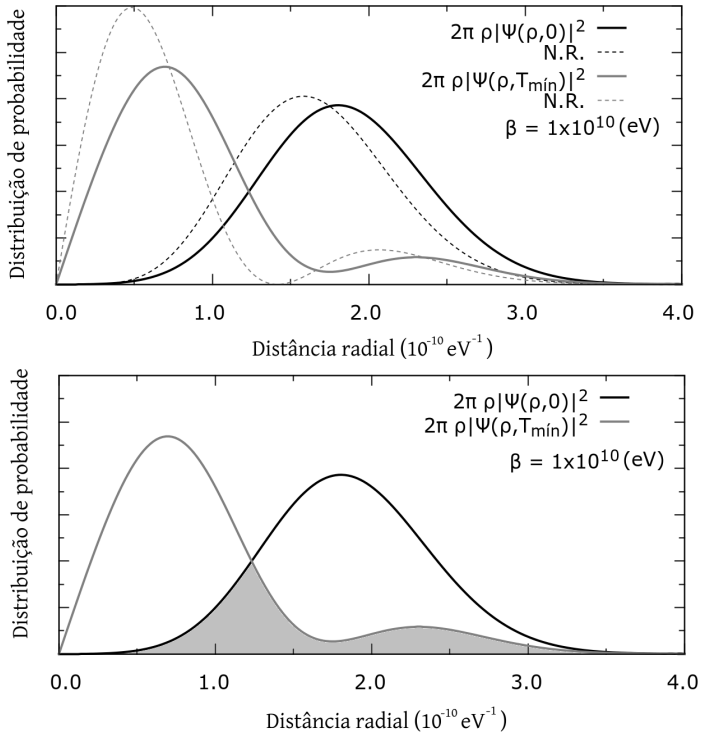


Figura 4.4: Densidade radial de probabilidade do elétron no regime ($\beta \rightarrow \infty$). No gráfico da esquerda observa-se a diferença entre as distribuições relativísticas e não relativística (N.R.). À direita, a área de cor cinza representa a máxima superposição entre as duas distribuições.

Por outro lado, as constantes de normalização dos espinores nesse regime ficam,

$$\begin{aligned}
 N_{0,0} &= \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_{0,0} + m_0)^2} + \frac{4\beta^2}{(E_{0,0} + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
 &\approx \left[1 + \frac{p_z^2}{4\beta^2} + \frac{4\beta^2}{4\beta^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
 &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{4.92}$$

$$\begin{aligned}
N_{2,0} &= \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} + \frac{8\beta^2}{(E_{2,0} + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
&\approx \left[1 + \frac{p_z^2}{4\beta^2} + \frac{8\beta^2}{8\beta^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
&\approx \frac{1}{\sqrt{2}}.
\end{aligned} \tag{4.93}$$

Consequentemente a densidade de probabilidade radial do elétron nos autoestados e a função D_S resultam ser,

$$D_{0,0}(\varrho) \approx \pi\varrho \left[|F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{1,1}(\varrho, \varphi)|^2 \right], \tag{4.94a}$$

$$D_{2,0}(\varrho) \approx \pi\varrho \left[|F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2 + |F_{3,1}(\varrho, \varphi)|^2 \right], \tag{4.94b}$$

$$D_S(\varrho) \approx \pi\varrho \left[F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{2,0}(\varrho, \varphi) + F_{1,1}^\dagger(\varrho, \varphi)F_{3,1}(\varrho, \varphi) \right]. \tag{4.94c}$$

Nota-se que as distribuições de probabilidade de cada autoestado e a função D_S apresentam um termo a mais relacionado a um autoestado excitado. Isso é uma consequência direta do forte confinamento efetuado pelo campo magnético sob o elétron mediante o potencial harmônico bidimensional, localizando dessa maneira o elétron em uma região da mesma ordem que seu comprimento de onda de Compton. Em virtude disso, um dos dois termos associados à partícula de energia negativa no espinor de cada autoestado, torna-se relevante para a descrição, resultando em uma mistura entre duas partículas de sinal de energia diferente e estados diferentes no mesmo espinor. Para um melhor entendimento, ver apêndice E.

Segundo os resultados anteriores, apresenta-se na figura (4.4) as densidades de probabilidade radial no tempo inicial $t=0$ e no tempo $T_{\text{mín}}$. Observando um aumento da superposição para 31.02% entre a distribuição final em relação à inicial, em comparação com a descrição não relativística que é de 26.42% conforme mostra a figura (4.1).

Calculando o máximo deslocamento espacial médio experi-

mentado pelo elétron no intervalo de tempo $t=0$ até $T_{\text{mín}}$, tem-se,

$$\begin{aligned}
 |\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0| &= 2 \left| \int_0^{\infty} \varrho D_S(\varrho) d\varrho \right|, \\
 &= \underbrace{\left| 2\pi \int_0^{\infty} \varrho^2 F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{2,0}(\varrho, \varphi) d\varrho \right|}_{I_1(\beta)} \\
 &\quad + \underbrace{\left| 2\pi \int_0^{\infty} \varrho^2 F_{1,1}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{3,1}(\varrho, \varphi) d\varrho \right|}_{I_2(\beta)}. \tag{4.95}
 \end{aligned}$$

Calculando isoladamente cada integração,

$$\begin{aligned}
 I_1(\beta) &= 2\pi \int_0^{\infty} \frac{\beta^2 \varrho^2}{\pi} [(\beta\varrho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\
 &= \frac{1}{\beta} [\Gamma(5/2) - \Gamma(3/2)], \\
 &= \frac{\sqrt{\pi}}{4\beta}. \tag{4.96}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2(\beta) &= 2\pi \int_0^{\infty} \frac{\beta^2 \varrho^2}{\pi\sqrt{2}} [(\beta\varrho)^4 - 2(\beta\varrho)^2] e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}\beta} [\Gamma(7/2) - 2\Gamma(5/2)], \\
 &= \frac{3\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}\beta}, \tag{4.97}
 \end{aligned}$$

obtém-se,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0| = \frac{\sqrt{\pi}}{4\beta} \left(1 + \frac{3}{2\sqrt{2}} \right). \tag{4.98}$$

Dessa maneira a rapidez média com que o elétron se desloca é,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\text{mín}}} = \frac{(\sqrt{2}-1)}{2\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{3}{2\sqrt{2}} \right) = 0,240782965 \dots [c]. \tag{4.99}$$

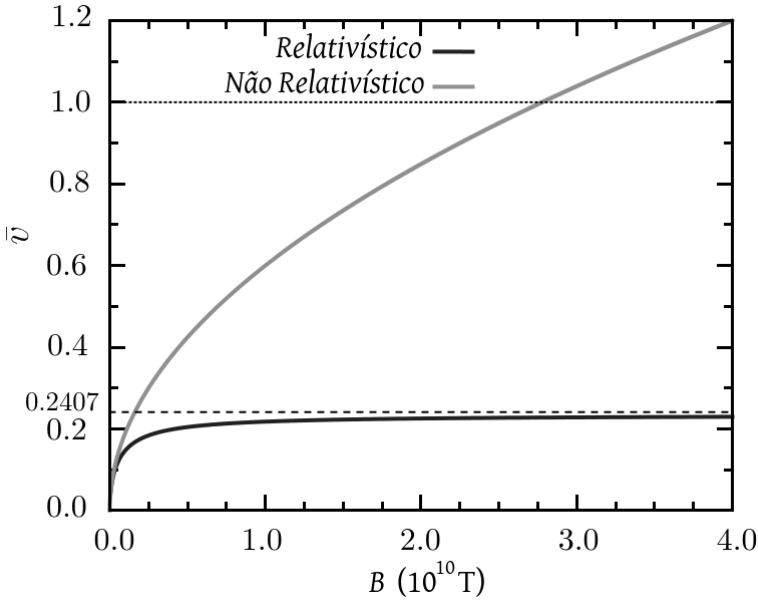


Figura 4.5: Comparação da rapidez média da distância média do elétron segundo as duas descrições quânticas, observando o valor limite descrito pela teoria de Dirac.

Esse resultado mostra que uma descrição relativística do elétron sob o efeito de campos magnéticos extremamente intensos prevê o seu deslocamento radial com uma rapidez média inferior a c durante a transição entre os estados inicial e final, mostrando assim a principal diferença entre as duas descrições quânticas. Na figura (4.5) visualiza-se os dois comportamentos da rapidez média segundo as duas descrições quânticas em função do campo magnético sem realizar aproximação alguma.

Regime 3: Altas velocidades e campo magnético fraco

Esse último regime de análise é caracterizado por não possuir uma contrapartida na mecânica quântica não relativística, devido à alta velocidade do elétron na direção \hat{z} , sendo essa muito próxima da velocidade da luz, ou seja ($p_z \rightarrow \infty$) o momento linear é a grandeza física dominante nessa situação. A seguir são apresentadas as expressões para a

energias aproximadas segundo esse regime de análise,

$$E_{0,0} = \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 4\beta^2} = p_z \sqrt{1 + \frac{m_0^2 + 4\beta^2}{p_z^2}} \approx p_z + \frac{m_0^2 + 4\beta^2}{2p_z}, \quad (4.100a)$$

$$E_{2,0} = \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 8\beta^2} = p_z \sqrt{1 + \frac{m_0^2 + 8\beta^2}{p_z^2}} \approx p_z + \frac{m_0^2 + 8\beta^2}{2p_z}. \quad (4.100b)$$

Dessa maneira o mínimo tempo de evolução resulta ser,

$$T_{\text{mín}} \approx \frac{\pi p_z}{2\beta^2}. \quad (4.101)$$

Nesse regime de análise onde o valor do momento linear do elétron na direção \hat{z} é muito grande, tem-se, em consequência $T_{\text{mín}} \rightarrow \infty$. Vale a pena mencionar que esse intervalo de tempo é medido por um observador localizado em um referência em repouso ou laboratório. Para entender o porquê da tendência ao infinito de $T_{\text{mín}}$, apresenta-se uma análise heurística na seção (4.3), com a qual se entenderá a necessidade de um tempo infinito para evidenciar a transição entre os estados do elétron na superposição.

Segundo as aproximação realizadas, as constantes de normalização pertencentes ao espinor de cada autoestado ficam,

$$N_{0,0} = N_{2,0} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (4.102)$$

Cada um dos termos pertencentes à densidade do elétron da superposição resultam ser,

$$\begin{aligned} D_{0,0}(\varrho) &\approx 2\pi\varrho |F_{0,0}(\varrho, \varphi)|^2, \\ D_{2,0}(\varrho) &\approx 2\pi\varrho |F_{2,0}(\varrho, \varphi)|^2, \\ D_S(\varrho) &\approx 2\pi\varrho F_{0,0}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{2,0}(\varrho, \varphi), \end{aligned} \quad (4.103)$$

obtendo a mesma densidade de probabilidade radial em relação à análise não relativística, ver eq.(4.18) e eq.(4.19). Para entender o porquê disso, vale a pena reparar que, na descrição relativística, além do espinor de cada autoestado descrever o próprio elétron de energia positiva,

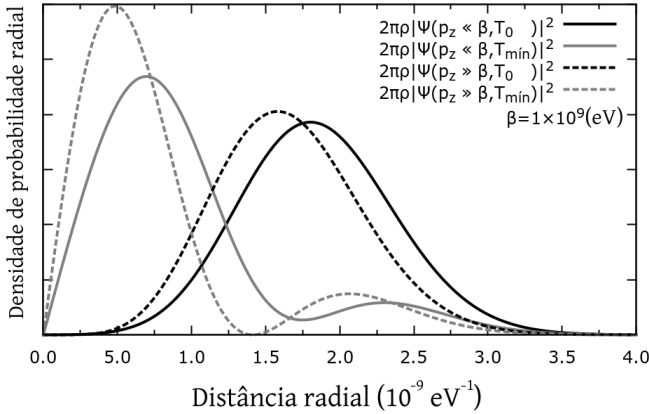


Figura 4.6: Distribuições de probabilidade do elétron no tempo T_0 e T_{\min} no caso de forte confinamento do campo magnético com pequeno e grande momento linear.

também descreve o elétron de energia negativa nos seus últimos dois termos, sendo esses dois termos cruciais para a descrição quântica em dois casos particulares. O primeiro desses é: quando há um forte confinamento sob o elétron, dessa maneira a partícula de energia negativa é descrita por um autoestado excitado, tal como foi apresentado no regime anterior. O segundo desses é: quando o momento linear do elétron é uma grandeza física da mesma ordem ou superior a massa em repouso do elétron, resultando na descrição da partícula de energia negativa no mesmo autoestado.

Na figura (4.6) visualizam-se as distribuições de probabilidade no tempo inicial e T_{\min} , segundo os dois casos discutidos anteriormente, representados de acordo com as desigualdades entre o momento linear e β . Finalmente, a rapidez média com que o elétron percorre a distância radial entre os estados inicial e final resulta ser,

$$\bar{V} = \frac{\sqrt{\pi}/2\beta}{\pi p_z/2\beta^2} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}p_z} \rightarrow 0. \quad (4.104)$$

Significando assim a ausência da rapidez média com que o elétron se desloca espacialmente do estado inicial até o final nessa superposição, como consequência da grande velocidade de deslocamento do elétron na direção \hat{z} ser muito próxima da velocidade da luz do vácuo, o tempo necessário para realizar a transição torna-se infinito.

4.2.2 Caso geral

A seguir se apresenta de maneira geral a análise do tempo mínimo de evolução quântica segundo a teoria de Dirac, quando o estado do elétron é definido como uma superposição de dois autoestados de igual probabilidade, mesmo momento angular m_l e mesma orientação de spin $m_s = 1/2$. A energia relativísticas de cada um dos autoestados é dada por,

$$E_i = \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_i + m_l + 2)}, \quad \text{onde} \quad \begin{cases} i=1, 2 \\ E_1 < E_2, \quad n_1 < n_2 \end{cases}. \quad (4.105)$$

Nesse caso o mínimo tempo de evolução quântica escreve-se como,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi}{E_2 - E_1}. \quad (4.106)$$

O espinor de cada um dos autoestados quânticos na descrição relativística da teoria de Dirac são,

$$U_{n_i, m_l}(\vec{r}) = N_{n_i, m_l} \left(\begin{array}{c} F_{n_i, m_l} \\ 0 \\ \frac{p_z}{E_i + m_0} F_{n_i, m_l} \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_i + m_l}{2} + 1}}{E_i + m_0} F_{n_i + 1, m_l + 1} \end{array} \right) e^{ip_z z}, \quad (4.107)$$

$$N_{n_i, m_l} = \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_i + m_0)^2} + \frac{2\beta^2(n_i + m_l + 2)}{(E_i + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}},$$

$$i = 1, 2$$

onde F_{n_i, m_l} são as autofunções do oscilador harmônico bidimensional, sendo expressas por meio dos polinômios de Laguerre (3.49). No instante inicial o estado de superposição é escrito como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{n_1, m_l}(\vec{r}) + U_{n_2, m_l}(\vec{r}) \right] e^{ip_z z}. \quad (4.108)$$

As densidades radiais de probabilidade no instante inicial e no tempo $T_{\text{mín}}$ são,

$$D(\varrho, 0) = \frac{1}{2} \left[D_{n_1, m_l}(\varrho) + D_{n_2, m_l}(\varrho) + 2D_S(\varrho) \right]. \quad (4.109a)$$

$$D(\varrho, T_{\text{mín}}) = \frac{1}{2} \left[D_{n_1, m_l}(\varrho) + D_{n_2, m_l}(\varrho) - 2D_S(\varrho) \right], \quad (4.109b)$$

onde a distribuição de probabilidade própria a cada autoestado e a função D_S são,

$$D_{n_i, m_l}(\varrho) = 2\pi\varrho N_{n_i, m_l}^2 \left[\left(1 + \frac{p_z^2}{(E_i + m_0)^2} \right) |F_{n_i, m_l}|^2 + \frac{2\beta^2(n_i + m_l + 2)}{(E_i + m_0)^2} |F_{n_i+1, m_l+1}|^2 \right], \quad i=1, 2. \quad (4.110)$$

$$D_S(\varrho) = 2\pi\varrho N_{n_1, m_l} N_{n_2, m_l} \left[\left(1 + \frac{p_z^2}{(E_1 + m_0)(E_2 + m_0)} \right) F_{n_1, m_l}^\dagger F_{n_2, m_l} + \frac{2\beta^2\sqrt{n_1 + m_l + 2}\sqrt{n_2 + m_l + 2}}{(E_1 + m_0)(E_2 + m_0)} F_{n_1+1, m_l+1}^\dagger F_{n_2+1, m_l+1} \right]. \quad (4.111)$$

O máximo deslocamento espacial na direção radial sentido pelo elétron desde o instante inicial até o tempo $T_{\text{mín}}$ é,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0| = 2 \left| \int_0^\infty \varrho D_S(\varrho) d\varrho \right|. \quad (4.112)$$

Com base nas expressões gerais que descrevem o fenômeno físico de interesse, poder-se-á analisar qualquer par de autoestados e superposição no regime desejado. Então inicia-se realizando as aproximações pertinentes ao regime de campo magnético extremamente forte ($\beta \rightarrow \infty$), uma vez que nesse regime evidenciou-se o maior deslocamento radial médio na direção radial do elétron. Prossegue as respectivas aproximações das energia relativísticas de cada autoestado,

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \gg p_z} E_i &= \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_i + m_l + 2)}, \\ &= \sqrt{2(n_i + m_l + 2)}\beta \sqrt{1 + \frac{m_0^2 + p_z^2}{2\beta^2(n_i + m_l + 2)}}, \\ &\approx \sqrt{2(n_i + m_l + 2)}\beta \left(1 + \frac{m_0^2 + p_z^2}{4\beta^2(n_i + m_l + 2)} \right) \\ &\approx \sqrt{2(n_i + m_l + 2)}\beta, \quad i=1, 2. \end{aligned} \quad (4.113)$$

Portanto, o mínimo tempo de evolução quântica é,

$$T_{\text{mín}} \approx \frac{\pi}{[\sqrt{n_2 + m_l + 2} - \sqrt{n_1 + m_l + 2}] \sqrt{2}\beta}. \quad (4.114)$$

m_l	n_1	n_2	Distância(β^{-1})	$T_{\min}(\beta^{-1})$	Rapidez(c)	S.Estados(%)	S.Tempo(%)
0	0	2	0.913106	3.792238	0.240783	54.6736	31.0247
	2	4	1.253738	4.942141	0.253683	62.0343	27.4695
	4	6	1.517319	5.862292	0.258827	64.9082	28.0117
	6	8	1.740446	6.654000	0.261564	66.4786	27.4867
	8	10	1.937563	7.360057	0.263254	67.4816	27.4448
	10	12	2.116129	8.003586	0.264398	68.1836	27.4654
	12	14	2.280592	8.598819	0.265222	68.7054	27.3626
	14	16	2.433861	9.155272	0.265843	69.1100	27.4167
	16	18	2.577962	9.679683	0.266327	69.4291	27.3466
	18	20	2.714372	10.177036	0.266715	69.6390	27.2546
20	22	2.844210	10.651140	0.267033	69.4574	26.9811	
1	1	3	0.949677	4.942141	0.192159	54.6750	26.6979
	3	5	1.305385	5.862292	0.222675	60.2857	26.7999
	5	7	1.572565	6.654000	0.236334	63.0648	26.6826
	7	9	1.796126	7.360057	0.244037	64.7658	26.6826
	9	11	1.992547	8.003586	0.248957	65.9258	26.8734
	11	13	2.169982	8.598819	0.252358	66.7723	26.8399
	13	15	2.333160	9.155272	0.254843	67.4197	26.9368
	15	17	2.485113	9.679683	0.256735	67.9311	26.9509
	17	19	2.627923	10.177036	0.258221	68.3303	26.9321
	19	21	2.763093	10.651140	0.259418	68.5218	26.8289
2	2	4	0.964340	5.862292	0.164499	53.9749	24.8623
	4	6	1.331446	6.654000	0.200097	59.0380	25.6530
	6	8	1.604641	7.360057	0.218020	61.7325	25.7571
	8	10	1.831476	8.003586	0.228832	63.4726	26.1390
	10	12	2.029690	8.598819	0.236043	64.7059	26.2276
	12	14	2.208068	9.155272	0.241180	65.6318	26.3712
	14	16	2.371676	9.679683	0.245016	66.3552	26.4915
	16	18	2.523739	10.177036	0.247984	66.9330	26.5344
	18	20	2.666455	10.651140	0.250345	67.3611	26.5605

Tabela 4.1: Resultado do cálculo numérico de diferentes autoestados em superposição. As últimas duas colunas representam a porcentagem de superposição entre as densidades de probabilidade radial de cada uma das autofunções e do estado em superposição no tempo T_{\min} em relação com o instante inicial, respectivamente.

Consequentemente a constante de normalização de cada espinor fica,

$$\begin{aligned}
N_{n_i, m_l} &= \lim_{\beta \gg p_z} \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_i + m_0)^2} + \frac{2\beta^2(n_i + m_l + 2)}{(E_i + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}, \\
&\approx \left[1 + \frac{p_z^2}{2\beta^2(n_i + m_l + 2)} + \frac{2\beta^2(n_i + m_l + 2)}{2\beta^2(n_i + m_l + 2)} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (4.115) \\
&\approx \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad i = 1, 2.
\end{aligned}$$

De maneira similar, a densidade radial de probabilidade de cada autoestado e a função D_S resultam ser,

$$D_{n_i, m_i}(\varrho) \approx \pi \varrho \left[|F_{n_i, m_i}|^2 + |F_{n_i+1, m_i+1}|^2 \right], \quad i=1, 2. \quad (4.116a)$$

$$D_S(\varrho) \approx \pi \varrho \left[F_{n_1, m_1}^\dagger F_{n_2, m_1} + F_{n_1+1, m_1+1}^\dagger F_{n_2+1, m_1+1} \right]. \quad (4.116b)$$

O máximo deslocamento médio do elétron na direção radial é,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0| = 2 \left| \int_0^\infty \varrho D_S(\varrho) d\varrho \right|. \quad (4.117)$$

Realizou-se o cálculo numérico de três conjuntos diferentes de estados iniciais que possuem a projeção do momento angular na direção \hat{z} , a saber, $m_l=0, 1, 2$ e projeção de spin $\hbar/2$ no referencial do laboratório. Tais estados iniciais são formados pela superposição de autoestados que são vizinhos próximos com respeito aos rótulos quânticos. Com os dados obtido na tabela (4.1), observou-se uma maior rapidez média do deslocamento radial do elétron quando o momento angular dos autoestados da superposição é nulo. Em virtude disso, estende-se essa análise para descobrir quais são os estados iniciais de superposição que fornecem um deslocamento radial do elétron mais rápido.

As superposições mais rápidas

Seja inicialmente o estado do sistema uma superposição entre dois autoestados próximos em relação ao número quântico principal n de carácter *par*, momento angular ($m_l=0$) e mesma orientação de spin $1/2$. Portanto, o estado inicial do elétron em superposição é definido como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{n,0}(\varrho, \varphi) + U_{n+2,0}(\varrho, \varphi) \right] e^{ip_z z}, \quad (4.118)$$

onde $U_{n,0}$ e $U_{n+2,0}$ são os espinores descritos na eq.(4.107). Considerando a análise apresentada anteriormente para valores muito grande de campo magnético e as aproximações realizadas, expressa-se o mínimo tempo de evolução e a função D_S como,

$$T_{\min} \approx \frac{\pi}{[\sqrt{n+4} - \sqrt{n+2}] \sqrt{2}\beta}, \quad (4.119)$$

$$D_S(\varrho) \approx \pi \varrho \left[F_{n,0}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{n+2,0}(\varrho, \varphi) + F_{n+1,1}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{n+3,1}(\varrho, \varphi) \right]. \quad (4.120)$$

O máximo deslocamento médio do elétron na direção radial eq.(4.95) é,

$$\begin{aligned}
 |\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0| &= 2 \left| \int_0^\infty \varrho D_S(\varrho) d\varrho \right|, \\
 &= \underbrace{\left| 2\pi \int_0^\infty \varrho^2 F_{n,0}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{n+2,0}(\varrho, \varphi) d\varrho \right|}_{I_1(\beta)} \\
 &\quad + \underbrace{\left| 2\pi \int_0^\infty \varrho^2 F_{n+1,1}^\dagger(\varrho, \varphi) F_{n+3,1}(\varrho, \varphi) d\varrho \right|}_{I_2(\beta)}.
 \end{aligned} \tag{4.121}$$

Dada a expressão geral do espinor U_{n,m_l} com orientação de spin 1/2 fornecida pelas expressões (3.49), (3.50) e (4.107), resolve-se cada integral isoladamente, sendo a primeira dessas igual a,

$$\begin{aligned}
 I_1(\beta) &= \frac{2\pi(-1)^{\frac{n}{2}}(-1)^{\frac{n+2}{2}}\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n+2}{2}\right)!}{\pi\sqrt{\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n+2}{2}\right)!\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n+2}{2}\right)!}} \\
 &\quad \times \int_0^\infty (\beta\varrho)^2 e^{-(\beta\varrho)^2} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \binom{\frac{n}{2}}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}}{\frac{n+2}{2}-j} \\
 &\quad \times (\beta\varphi)^{2(i+j)} d\varrho.
 \end{aligned} \tag{4.122}$$

Após certas simplificações e saber que a integral de um polinômio é igual que a soma das integrais de cada um dos monômios então,

$$\begin{aligned}
 I_1(\beta) &= \\
 &= 2(-1)^{n+1} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \binom{\frac{n}{2}}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}}{\frac{n+2}{2}-j} \int_0^\infty (\beta\varphi)^{2(i+j+1)} e^{-(\beta\varphi)^2} d\varrho, \\
 &= \frac{(-1)^{n+1}}{\beta} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \binom{\frac{n}{2}}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}}{\frac{n+2}{2}-j} \Gamma\left(i+j+1+\frac{1}{2}\right).
 \end{aligned} \tag{4.123}$$

Fazendo o mesmo procedimento para a segunda integração obtém-se,

$$I_2(\beta) = \frac{2\pi(-1)^{\frac{n}{2}}(-1)^{\frac{n+2}{2}}\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n+2}{2}\right)!}{\pi\sqrt{\left(\frac{n+2}{2}\right)!\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n+4}{2}\right)!\left(\frac{n+2}{2}\right)!}} \times \int_0^\infty (\beta\rho)^4 e^{-(\beta\rho)^2} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \binom{\frac{n}{2}+1}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}+1}{\frac{n+2}{2}-j} (\beta\varphi)^{2(i+j)} d\rho. \quad (4.124)$$

$$I_2(\beta) = \frac{(-1)^{n+1}}{\beta\sqrt{\left(\frac{n}{2}+2\right)\left(\frac{n}{2}+1\right)}} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \binom{\frac{n}{2}+1}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}+1}{\frac{n+2}{2}-j} \Gamma\left(i+j+2+\frac{1}{2}\right) \quad (4.125)$$

Portanto, o deslocamento radial máximo apresentado pelo elétron durante o intervalo $t=0$ até $T_{\text{mín}}$ resulta ser,

$$|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0| = \frac{1}{\beta} \sum_{i=0}^{\left(\frac{n}{2}\right)} \sum_{j=0}^{\left(\frac{n+2}{2}\right)} \frac{(-1)^{i+j}}{i!j!} \left[\binom{\frac{n}{2}}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}}{\frac{n+2}{2}-j} \Gamma\left(i+j+1+\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{n}{2}+2\right)\left(\frac{n}{2}+1\right)}} \binom{\frac{n}{2}+1}{\frac{n}{2}-i} \binom{\frac{n+2}{2}+1}{\frac{n+2}{2}-j} \Gamma\left(i+j+2+\frac{1}{2}\right) \right]. \quad (4.126)$$

Dadas as expressões obtidas anteriormente eq.(4.119) e eq.(4.126), calcule-se a rapidez média com que o elétron se desloca entre os estado inicial e final,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\text{mín}}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T_{\text{mín}}}. \quad (4.127)$$

Dada a enorme dificuldade de poder avaliar a expressão anterior de maneira analítica para os diferentes casos, decidiu-se implementar um cálculo numérico que permitisse realizar os respectivos cálculos, com o objetivo de analisar mais casos de superposição e generalizar o comportamento assintótico da rapidez quântica apresentada anteriormente. Por razões de exigência numérica somente conseguiu-se calcular até a superposição entre os dois autoestados ($n = 132, m_l = 0$) e ($n = 134, m_l = 0$) com projeção de spin $\hbar/2$. Para a realização do cálculo numérico, usou-se a eq.(4.121) para calcular a máximo deslocamento radial do elétron distância percorrida pela distância média do elétron,

embora precisa-se calcular numericamente a integral, isso oferece menos exigência na computação em comparação à expressão analítica eq.(4.126).

Na figura (4.7) mostram-se todos os casos de superposição analisados, observando um comportamento assintótico da rapidez máxima a medida que se aumenta a energia dos autoestados envolvidos na superposição. Aplicando uma regressão de decaimento exponencial para os dados obtidos, estima-se a máxima rapidez média com que o elétron pode se deslocar radialmente em um campo magnético externo muito forte. A expressão implementada para regressão numérica e os respectivos valores são,

$$y = A_1 \exp\left(\frac{-x}{B_1}\right) + A_2 \exp\left(\frac{-x}{B_2}\right) + A_3 \exp\left(\frac{-x}{B_3}\right) + y_0. \quad (4.128)$$

$A_1 = -0.01483338$	$A_2 = -0.00281596$	$A_3 = -0.00804731$	$y_0 = 0.26981491$
$B_1 = 2.59634329$	$B_2 = 44.10952840$	$B_3 = 9.61065822$	

Tabela 4.2: Coeficientes da regressão.

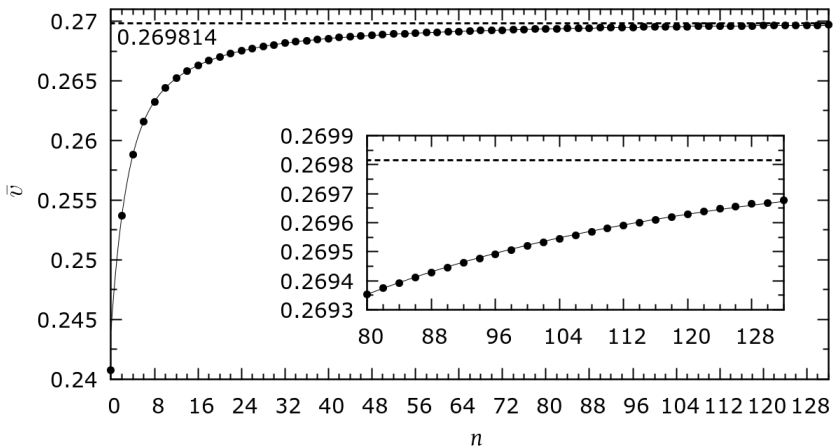


Figura 4.7: Limite assintótico da rapidez com que o elétron se desloca na direção radial. O estado inicial é uma superposição igual de dois autoestados vizinhos próximos em relação aos rótulos quânticos, de energias positivas e de projeção de momento angular nulo.

4.3 Estado inicial de superposição formado por autoestados com sinal de energia diferentes

Nessa seção é definido o estado inicial de um sistema como uma superposição puramente relativística, onde os dois autoestados envolvidos apresentam o sinal energia diferente. Essa seção possui fins puramente matemáticos, sem qualquer interpretação física. Adicionalmente, assume-se que a mesma orientação de spin $m_s = 1/2$ para ambos autoestados,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{n_1, m_{l_1}} + U_{n_2, m_{l_2}} \right]. \quad (4.129)$$

Daqui para frente, usa-se o rotulo 1 para o autoestado de energia negativa e o 2 para o autoestado de energia positiva. A energia de cada autoestado é,

$$\begin{aligned} E_1 &= -\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_1 + m_{l_1} + 2)}, \\ E_2 &= \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_2 + m_{l_2} + 2)}. \end{aligned} \quad (4.130)$$

De maneira geral, o espinor de energia negativa com a projeção de spin $\hbar/2$, é construído a partir das duas componentes do espinor associadas à energia negativa,

$$U_{\uparrow}^{(-)}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z}. \quad (4.131)$$

As duas correspondente componentes associadas à partícula de energia positiva dos espinores serão calculadas segundo a seguinte relação,

$$U^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{E_1 - m_0} \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial z} & -2i\beta\hat{a}_R \\ 2i\beta\hat{a}_R^\dagger & i \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} U^{(-)}(\vec{r}). \quad (4.132)$$

Obtendo assim,

$$U_{n_1, m_{l_1}}(\vec{r}) = N_{n_1, m_{l_1}} \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E_1 - m_0} F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_1 + m_{l_1}}{2} + 1}}{E_1 - m_0} F_{n_1 + 1, m_{l_1} + 1}(\varrho, \varphi) \\ F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z}. \quad (4.133)$$

4.3. ESTADO INICIAL DE SUPERPOSIÇÃO FORMADO POR AUTOESTADOS

onde E_1 é a energia negativa e $N_{n_1, m_{l_1}}$ é a constante de normalização do espinor,

$$\begin{aligned} E_1 &= -\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_1 + m_{l_1} + 2)}, \\ N_{n_1, m_{l_1}} &= \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_1 - m_0)^2} + \frac{2\beta^2(n_1 + m_{l_1} + 2)}{(E_1 - m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.134)$$

O espinor associado ao estado de energia positiva com a orientação de spin (+1/2) é,

$$\begin{aligned} U_{n_2, m_{l_2}}(\vec{r}) &= N_{n_2, m_{l_2}} \begin{pmatrix} F_{n_2, m_{l_2}} \\ 0 \\ \frac{p_z}{E_2 + m_0} F_{n_2, m_{l_2}} \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_2 + m_{l_2}}{2} + 1}}{E_2 + m_0} F_{n_2 + 1, m_{l_2} + 1} \end{pmatrix} e^{ip_z z}, \\ N_{n_2, m_{l_2}} &= \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_2 + m_0)^2} + \frac{2\beta^2(n_2 + m_{l_2} + 2)}{(E_2 + m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.135)$$

A densidade de probabilidade radial para a superposição no instante inicial é,

$$\begin{aligned} D(\varrho, 0) &= \int_0^{2\pi} |\psi(\vec{r}, 0)|^2 \varrho \, d\varphi, \\ &= \frac{\varrho}{2} \int_0^{2\pi} \left[|U_{n_1, m_{l_1}}|^2 + |U_{n_2, m_{l_2}}|^2 + U_{n_1, m_{l_1}}^\dagger U_{n_2, m_{l_2}} + U_{n_1, m_{l_1}} U_{n_2, m_{l_2}}^\dagger \right] d\varphi, \\ &= \frac{1}{2} \left[D_1(\varrho) + D_2(\varrho) + \varrho \int_0^{2\pi} (U_{n_1, m_{l_1}}^\dagger U_{n_2, m_{l_2}} + U_{n_1, m_{l_1}} U_{n_2, m_{l_2}}^\dagger) d\varphi \right], \end{aligned} \quad (4.136)$$

onde $D_1(\varrho)$ e $D_2(\varrho)$ são as densidades de probabilidade radial pertencentes aos autoestados de energia negativa e positiva, respectivamente. O terceiro termo da distribuição é denotado por $2D_S(\varrho)$ ³, e representa

³O fator 2 usa-se simplesmente para levar a mesma sequência algébrica da análise realizada nos diferentes casos anteriores.

os termos cruzados,

$$D_S(\varrho) = \varrho N_{n_1, m_{l_1}}^\dagger N_{n_2, m_{l_2}} p_z \left[\frac{1}{E_1 - m_0} + \frac{1}{E_2 + m_0} \right] \int_0^{2\pi} F_{n_1, m_{l_1}}^\dagger F_{n_2, m_{l_2}} d\varphi. \quad (4.137)$$

Devido à importância da função D_S no cálculo do máximo deslocamento espacial médio do ente do sistema na direção radial entre o estado inicial e final, estabelece-se a condição $m_{l_1} = m_{l_2}$, implicando fisicamente uma transição que não seja capaz de realizar mudança alguma da projeção do momento angular na direção \hat{z} , sendo matematicamente equivalente dizer que a integral da eq.(4.137) seja diferente de zero. Nota-se que o número quântico principal dos autoestados têm que ser diferentes $n_1 \neq n_2$, do contrário o termo entre colchetes será nulo. Da mesma maneira que a análise anterior, nota-se que o maior deslocamento espacial médio desse ente acontece quando o rótulo quântico dos autoestados apresentam a relação ($n_2 = n_1 + 2$), além da projeção do momento angular na direção \hat{z} ser nula.

$$D_S(\varrho) = 2\pi \varrho N_{n_1, 0}^\dagger N_{n_1+2, 0} p_z \left[\frac{1}{E_1 - m_0} + \frac{1}{E_2 + m_0} \right] F_{n_1, 0}^\dagger F_{n_1+2, 0}. \quad (4.138)$$

Por causa da grande dificuldade de poder analisar a densidade de probabilidade e mais exatamente a função D_S , a seguir apresenta-se três diferentes regimes de análise para o cálculo da rapidez média com que o ente do sistema se desloca espacialmente do estado inicial até o estado ortogonal, nessa classe de superposição.

Regime 1: Baixas velocidade $v_z \rightarrow 0$ e campo magnético fraco

Nesse primeiro regime de análise assume-se a massa de repouso do ente como a grandeza física que caracteriza o sistema, dessa maneira a energia dos autoestados fica aproximadamente,

$$\begin{aligned} E &= \pm \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n+2m_s+1)}, \\ &= \pm m_0 \sqrt{1 + \frac{p_z^2 + 2\beta^2(n+2m_s+1)}{m_0^2}}, \\ &\approx \pm m_0 \left(1 + \frac{p_z^2}{2m_0^2} + \frac{2\beta^2}{2m_0^2}(n+2m_s+1) \right) = \pm m_0. \end{aligned} \quad (4.139)$$

Com base nas energias dos autoestados, calcula-se $\Delta H \equiv (\langle H \rangle - E_0) = \frac{1}{2}(E_2 - E_1)$, assim o mínimo tempo de evolução é,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi}{2\Delta H} = \frac{\pi}{2m_0} = 3,07396 \times 10^{-6} \text{ eV} = 2,02337 \times 10^{-21} \text{ s}. \quad (4.140)$$

Observa-se que o mínimo tempo de evolução é π vezes aquele obtido a partir da relação de incerteza de Heisenberg. Além disso, a função D_S é nula, implicando que o ente não se deslocará entre os estados inicial e final.

Regime 2: Campo magnético extremamente forte

Quando o campo magnético é extremamente forte temos $\beta \rightarrow \infty$, como consequência, o ente por causa do potencial harmônico bidimensional, acha-se fortemente confinado em uma região da mesma ordem que o seu comprimento de onda de Compton. Nesse regime de análise as energias de cada autoestado são aproximadamente dadas por,

$$E_1 = -\sqrt{2\beta^2(n_1 + 2)}, \quad E_2 = +\sqrt{2\beta^2(n_1 + 4)}, \quad (4.141)$$

e o mínimo tempo de evolução resulta ser,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi}{\sqrt{2\beta^2(n_1 + 4)} + \sqrt{2\beta^2(n_1 + 2)}}. \quad (4.142)$$

Os correspondentes espinores dos autoestados serão aproximados por,

$$U_{n_1,0}(\vec{r}) = \frac{e^{ip_z z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_1}{2}+1}}{E_1 - m_0} F_{n_1+1,1} \\ F_{n_1,0} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.143)$$

$$U_{n_1+2,0}(\vec{r}) = \frac{e^{ip_z z}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} F_{n_2,0}(\varrho, \varphi) \\ 0 \\ 0 \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_1}{2}+2}}{E_2 + m_0} F_{n_1+3,1} \end{pmatrix}.$$

Nesse caso a função D_S resulta ser nula. Portanto, a rapidez média com que o ente do sistema se desloca espacialmente é nula. Para tentar entender o porquê da rapidez ser nula nesse regime de análise, a seguir apresenta-se uma análise geral desse caso de superposição, assumindo as contribuições do momento linear p_z e do termo β maiores que a energia de repouso.

Regime 3: Casos geral

Sem impor regime algum sob o sistema físico, se poderá observar de maneira mais detalhada a dependência da função D_S que descreve a rapidez radial média com respeito às grandezas β e p_z respeito ao referencial do laboratório. Quando for assumido qualquer valor de beta e de momento linear muito maiores que a energia da massa de repouso ($p_z \sim \beta \gg m_0$). Dessa maneira, para a superposição $[U_{0,0} + U_{2,0}]/\sqrt{2}$ com projeção de spin $\hbar/2$, pode-se evidenciar uma rapidez radial média do ente atingindo o seu máximo valor quando o valor do momento linear é da mesma ordem que o termo β , como pode ser visto na figura (4.8). As curvas que iniciam da origem são as correspondentes à rapidez radial média na superposição de autoestados com sinal energético diferente. As outras três curvas superiores são as correspondentes à superposição de autoestados de energia positiva. O valor máximos dessas três últimas curvas mencionadas corresponde à máxima rapidez obtida anteriormente na eq.(4.99).

Observando o comportamento decrescente da rapidez radial média em relação ao aumento do momento linear axial na superposição de estados positivos, a seguir apresenta-se uma explicação não rigorosa para esse fenômeno mediante a noção da dilatação temporal. O momento linear do elétron na direção \hat{z} visto por um observador no referencial de laboratório e o intervalo temporal de qualquer evento que acontece no plano $x'-y'$ que viaja no referencial onde o elétron está em repouso é⁴,

$$p_z = \frac{m_0 v_z}{\sqrt{1 - v_z^2}}, \quad \Delta t = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - v_z^2}}, \quad (4.144)$$

onde $\Delta t'$ é o intervalo de tempo próprio medido por um observador no plano $x'-y'$ do elétron e v_z é a velocidade do elétron na direção axial com relação à origem do sistema de coordenadas. Expressando a velocidade em função do momento linear,

$$v_z = \frac{p_z}{\sqrt{p_z^2 + m_0^2}}, \quad (4.145)$$

pode-se expressar o tempo medido por um observador no referencial do laboratório em função do momento linear axial,

$$\Delta t = \Delta t' \left[1 - \frac{p_z^2}{m_0^2 + p_z^2} \right]^{-1/2}. \quad (4.146)$$

⁴No plano $x'-y'$ o elétron se comporta como um oscilador harmônico bidimensional, cujas velocidades médias ao longo dos eixos x' e y' são nulas.

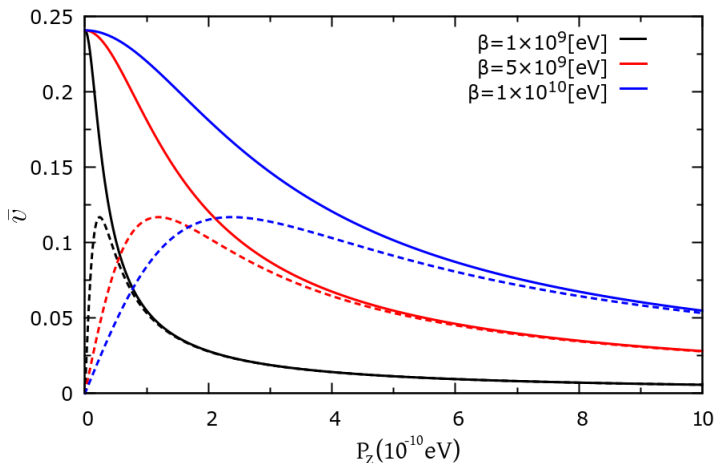


Figura 4.8: Comparação da rapidez com que o ente se desloca radialmente considerando como estado inicial de superposição dois autoestados de energia positiva-positiva (linha sólida) e o ente do sistema, superposição negativa-positiva (linha tracejada).

Isso significa que o elétron realiza transição do estado inicial ao final no seu próprio referencial em um intervalo de tempo igual a $\Delta t' = T'_{\min}$, mas para o observador em repouso no referencial de laboratório, o tempo de transição (T_{\min}) estará dilatado como mostra a eq.(4.146), onde o tempo T'_{\min} é aquele calculado na eq.(4.106) quando $p_z = 0$. Não só se considera a dilatação temporal como a responsável da diminuição da rapidez radial média, também se levará em conta mas com menos relevância as mudanças da densidade de probabilidade radial do elétron no estado inicial e final quando esse apresenta o momento linear p_z maior ou menor que o valor de β , pois essas densidades mudam seus formatos como pode ser visto na figura (4.6). De maneira geral o máximo deslocamento espacial médio do elétron apresenta dependência com o valor do campo magnético e com o momento linear p_z . Portanto, a rapidez média com que o elétron se desloca radialmente com respeito à origem do sistema de coordenadas é,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T'_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T'_{\min}} \sqrt{1 - \frac{p_z^2}{m_0^2 + p_z^2}}. \quad (4.147)$$

Em face a esse resultado, será apresentada uma expressão heurística

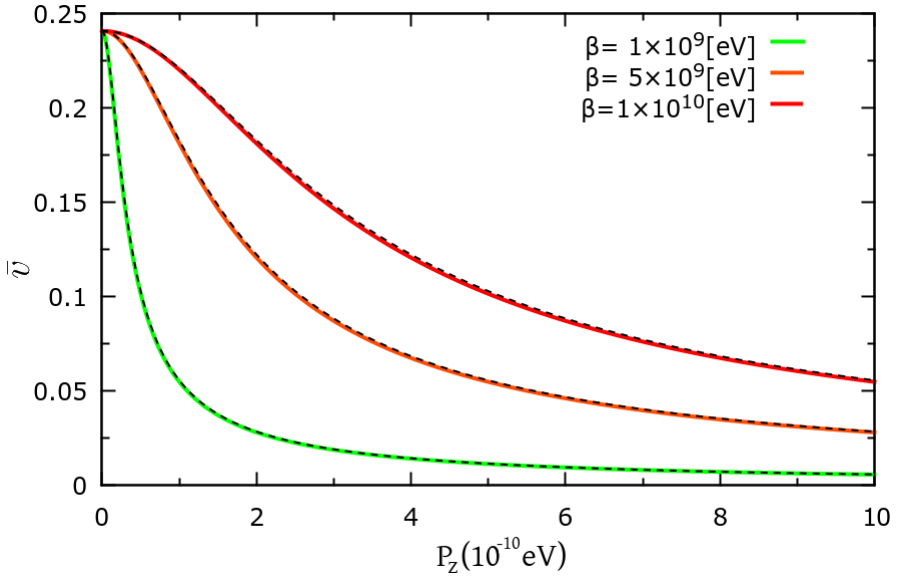


Figura 4.9: As linhas tracejadas mais finas representam a aproximação heurística que reproduz razoavelmente bem o comportamento da rapidez na superposição de estado de energia positiva.

que inclui a dependência do campo magnético externo no estado em superposição, parecendo ser uma ótima aproximação do comportamento da descrição do comportamento apresentado pela rapidez média como consequência da dilatação temporal,

$$\bar{v} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{T_{\min}} - \langle \varrho \rangle_0|}{T'_{\min}} \sqrt{1 - \frac{p_z^2}{(E_{0,0}^2 + E_{2,0}^2)/2}}, \quad \frac{E_{0,0}^2 + E_{2,0}^2}{2} = m_0^2 + p_z^2 + 6\beta^2. \quad (4.148)$$

O que está se fazendo ao introduzir essa correção heurística é expressar o fator gama da teoria da relatividade restrita em função da energia quadrática média do sistema, que por sua vez depende do campo magnético. Embora não haja uma dedução rigorosamente física para a expressão anterior, essa fornece uma explicação plausível ao comportamento da rapidez média com que o elétron se desloca espacialmente do estado inicial até o ortogonal na superposição de autoestados de energia positiva visto na figura (4.9). Embora a análise heurística apresentada anteriormente corresponde à descrição do elétron livre no eixo axial

mediante uma onda plana com momento linear bem definido, essa descrição faz com que o elétron não apresente uma localização definida em uma região finita do espaço, já que esse possui igual probabilidade de ser achado em qualquer lugar do espaço dentro do cone de luz. Devido a esse importante argumento, se considera que isto não corresponde a uma análise rigorosamente física ao dizer que o elétron está se deslocando no eixo axial no plano $x' - y'$ com momento linear p_z . Ou seja, o problema é a noção de localização do elétron no eixo axial. Não obstante, a maneira mais simples de poder aplicar a análise heurística e considerar a localização espacial do elétron no eixo axial é realizar a descrição do elétron livre mediante um pacote de onda de perfil gaussiano, definindo assim a densidade de probabilidade axial a uma região finita. No apêndice F se realiza a análise completa do elétron livre com perfil gaussiano através da mecânica quântica não relativística e relativística, mostrando assim a validade da expressão heurística ao reproduzir razoavelmente o comportamento relativístico da velocidade axial do pacote em função do momento linear axial no caso quando o elétron é descrito pelo estado em superposição, obtendo a mesma expressão para o fator γ da relatividade restrita modificado para o estado em superposição e responsável por reproduzir a diminuição da rapidez radial média do elétron para grandes valores de momento linear axial médio do pacote gaussiano explicado através da noção da dilatação temporal do observador no laboratório em relação ao grande momento linear axial médio apresentado pelo elétron.

Voltando para a superposição entre estados de sinal energético diferente, sabe-se que o espinor é um vetor de funções de quatro componentes, duas dessas componentes estão associadas à partícula de energia positiva e as outras duas à partícula de energia negativa. Por exemplo, o espinor do elétron de energia positiva e projeção de spin $\hbar/2$, quando esse se acha confinado o termo $\beta \gg m_0$ ou apresentando altas velocidades de deslocamento, $p_z \gg m_0$, as duas componentes do espinor associadas à partícula de energia negativa, tornam-se relevantes para a descrição, gerando assim uma superposição entre a partícula e a antipartícula no mesmo espinor [47–50]. Igualmente acontece com o espinor que descreve o ente de energia negativa e seus termos associados à partícula de energia positiva. Dessa maneira se analisa os seguintes

casos limites,

$$\lim_{p_z \ll \beta} U_{n_1, m_{l_1}}^\uparrow(\vec{r}) \rightarrow N_{n_1, m_{l_1}}^\uparrow \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n_1+m_{l_1}}{2}+1}}{E_1-m_0} F_{n_1+1, m_{l_1}+1}(\varrho, \varphi) \\ F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z},$$

$$\lim_{p_z \gg \beta} U_{n_1, m_{l_1}}^\uparrow(\vec{r}) \rightarrow N_{n_1, m_{l_1}}^\uparrow \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E_1-m_0} F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ 0 \\ F_{n_1, m_{l_1}}(\varrho, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z}.$$

(4.149)

Na figura (4.10) visualiza-se as distribuições de probabilidade para os casos anteriores. Quando o momento linear da partícula é realmente grande ($p_z \gg \beta$) a função D_S apresentará o seguinte comportamento assintótico dado pelo termo,

$$\lim_{p_z \rightarrow \infty} p_z \left[\frac{1}{E_1-m_0} + \frac{1}{E_2+m_0} \right] \rightarrow 0, \quad |E_1| \approx E_2. \quad (4.150)$$

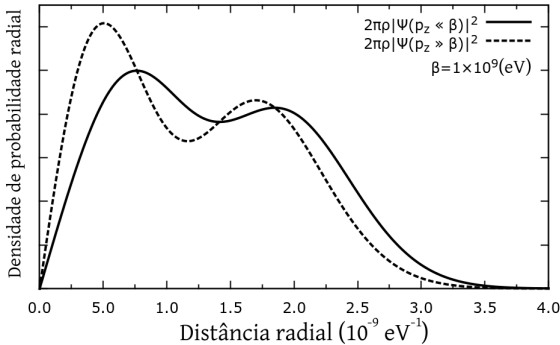


Figura 4.10: Densidade de probabilidade radial do ente no caso de forte confinamento do campo magnético com pequeno e grande momento linear. Em ambos casos as densidade de probabilidade nos tempos T_0 e $T_{\text{mín}}$ são iguais, dessa maneira o deslocamento da distância radial média do ente é nula.

Com base no comportamento apresentado pela rapidez nesse caso de

superposição, evidencia-se um valor máximo quando o momento linear é comparável ao valor de β , como pode ser visto na figura (4.8). Assumindo que p_z e β são grandezas maiores que a massa em repouso do elétron, enxerga-se com mais clareza as mudanças estabelecidas pela teoria relativística de Dirac nas distribuições de probabilidade. Desejando analisar mais casos de superposição entre autoestados com sinal energético diferente, implementa-se numericamente o cálculo do máximo deslocamento radial do ente nessa classe superposição. Adicionalmente observa-se que a maior distância percorrida acontece quando os autoestados são vizinhos próximos e apresentam o momento angular nulo⁵. Na figura (4.11) observa-se que os resultados numéricos têm o mesmo comportamento assintótico evidenciado na análise anterior. Repara-se que a principal diferença está no valor do momento linear p_z , sendo esse comparável com β para poder apreciar o máximo deslocamento espacial do ente na direção radial durante o intervalo de tempo $T_{\text{mín}}$.

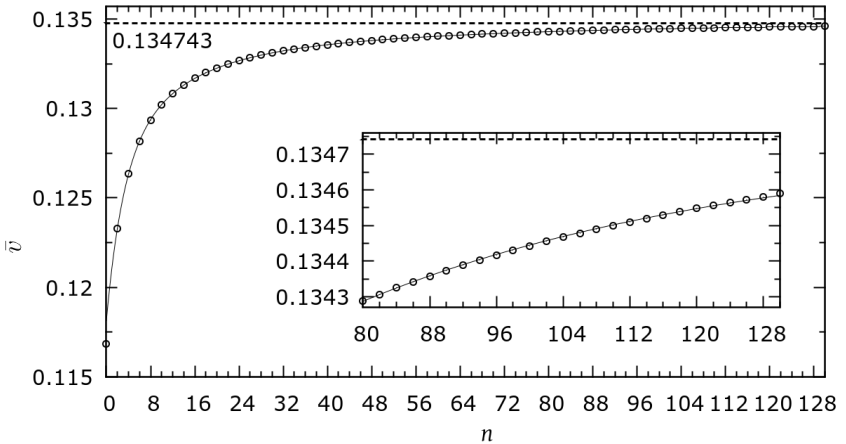


Figura 4.11: Comportamento assintótico do deslocamento espacial médio apresentado pela superposição de estados pares com sinal energético diferente. A linha fina é a curva da regressão.

A causa do comportamento apresentado pela rapidez média nesse caso de superposição é devido à competição existente entre o

⁵Como foi analisado no caso de superposição de estados positivos, aqueles estados que apresentam um maior deslocamento da distância radial média do ente na superposição, são os autoestados com $m_l = 0$.

forte confinamento parabólico e a alta velocidade do deslocamento do ente no eixo \hat{z} , ambas grandezas fazem com que os termos associados à antipartícula no espinor sejam relevantes para a descrição. No entanto, quando há um forte confinamento a autofunção associada à antipartícula é uma unidade superior em ambos números quânticos (n, m_l) . Isso significa que a antipartícula acha-se descrita por um autoestado excitado, implicando uma distribuição espacial mais aberta ou menos confinada, pois as autofunções do oscilador harmônico isotrópico apresentam uma maior probabilidade de achar as partículas nas bordas do oscilador na medida que aumenta a energia do autoestado.

Pelo contrário, quando há um alto momento linear, a antipartícula acha-se descrita pela mesma autofunção da partícula, consequentemente a distribuição de probabilidade continua sendo a mesma segundo a descrição não relativística. Só que quando o valor de $p_z \sim \beta$ há uma contribuição relevante dos dois termos da antipartícula no espinor, obtendo dessa maneira o máximo valor da função D_S , resultado assim no máximo deslocamento radial do ente e portanto a máxima rapidez média.

4.3.1 Orientação de spin oposta

Finalmente, apresenta-se uma análise quando o estado do ente é definido como a superposição de dois autoestados de sinal energético diferente e orientações de spin diferentes. O espinor de energia negativa e projeção de spin $-\hbar/2$ é,

$$U_{n_1, m_{l_1}}(\vec{r}) = N_{n_1, m_{l_1}} \begin{pmatrix} \frac{-2i\beta\sqrt{\frac{n_1+m_{l_1}}{2}}}{E_1-m_0} F_{n_1-1, m_{l_1}-1} \\ \frac{-p_z}{E_1-m_0} F_{n_1, m_{l_1}} \\ 0 \\ F_{n_1, m_{l_1}} \end{pmatrix} e^{ip_z z}, \quad (4.151)$$

onde o coeficiente de normalização é,

$$N_{n_1, m_{l_1}} = \left[1 + \frac{p_z^2}{(E_1-m_0)^2} + \frac{2\beta^2(n_1+m_{l_1})}{(E_1-m_0)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (4.152)$$

O estado em superposição no instante inicial $t=0$ é definido como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{n_1, m_{l_1}} + U_{n_2, m_{l_2}} \right]. \quad (4.153)$$

4.3. ESTADO INICIAL DE SUPERPOSIÇÃO FORMADO POR AUTOESTADOS

A energias de cada autoestados são,

$$E_1 = -\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_1 + m_{l_1})}, \quad E_2 = \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_2 + m_{l_2} + 2)}. \quad (4.154)$$

O mínimo tempo de evolução nesse caso de superposição é,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi}{\sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_2 + m_{l_2} + 2)} + \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n_1 + m_{l_1})}}. \quad (4.155)$$

Mostra-se que nesse caso o valor de $T_{\text{mín}}$ é muito menor em comparação à análise anterior eq.(4.106). A causa disso é a maior diferença de energia existente entre os dois autoestados nessa classe de superposição. A densidade de probabilidade radial do ente no instante inicial é,

$$D(\varrho, 0) = \frac{1}{2} \left[D_1(\varrho) + D_2(\varrho) + \varrho \int_0^{2\pi} (U_{n_1, m_{l_1}}^\dagger U_{n_2, m_{l_2}} + U_{n_1, m_{l_1}} U_{n_2, m_{l_2}}^\dagger) d\varphi \right], \quad (4.156)$$

onde $D_1(\varrho)$ e $D_2(\varrho)$ são as densidades de probabilidade pertencente ao autoestado de energia negativa e positiva, respectivamente. Denotando o terceiro termo por $D_S(\varrho)$, tem-se,

$$\begin{aligned} D_S(\varrho) = & N_{n_1, m_{l_1}} N_{n_2, m_{l_2}} \varrho \\ & \times \int_0^{2\pi} \left[\frac{2i\beta \sqrt{\frac{n_1 + m_{l_1}}{2}}}{E_1 - m_0} F_{n_1 - 1, m_{l_1} - 1}^\dagger F_{n_2, m_{l_2}} \right. \\ & + \frac{2i\beta \sqrt{\frac{n_2 + m_{l_2}}{2} + 1}}{E_2 + m_0} F_{n_1, m_{l_1}}^\dagger F_{n_2 + 1, m_{l_2} + 1} \\ & - \frac{2i\beta \sqrt{\frac{n_1 + m_{l_1}}{2}}}{E_1 - m_0} F_{n_1 - 1, m_{l_1} - 1}^\dagger F_{n_2, m_{l_2}}^\dagger \\ & \left. - \frac{2i\beta \sqrt{\frac{n_2 + m_{l_2}}{2} + 1}}{E_2 + m_0} F_{n_1, m_{l_1}}^\dagger F_{n_2 + 1, m_{l_2} + 1}^\dagger \right] d\varphi. \end{aligned} \quad (4.157)$$

Nesse caso a função $D_S(\varrho) = 0$ sem importar os rótulos quânticos dos autoestados envolvidos na superposição. Em consequência, o deslocamento médio do ente na direção radial é nulo, de modo que esse caso de superposição é insignificante para a análise da rapidez do deslocamento espacial.

Capítulo 5

Estimativa do tempo real de evolução entre dois estados puros via transformações unitárias

Inicialmente, a pergunta do problema do mínimo tempo de evolução (QSL), foi respondida por Mandelstam e Tamm (MT) ao analisar a relação de incerteza entre o tempo e a energia para sistemas quânticos independentes do tempo, obtendo um critério capaz de prever o mínimo tempo necessário para que um estado quântico inicial evolua até se transformar em um estado ortogonal em relação ao estado inicial. Posteriormente, alguns trabalhos propuseram mediante fundamentos geométricos, uma extensão do critério MT para estados puros de sistemas quânticos dependentes do tempo, evoluindo unitariamente até atingir um determinado valor de fidelidade quântica. Assim, o critério MT estendido tem recebido uma grande aceitação devido ao significado geométrico apresentado pelas grandezas físicas envolvidas, pois o numerador corresponde à curva geodésica que liga o estado quântico inicial com o estado evoluído e a incerteza da energia pode ser interpretada como sendo a rapidez instantânea apresentada pela evolução do estado quântico. A saturação da desigualdade implica uma dinâmica do estado quântico ao longo do menor caminho possível, em consequência, o tempo previsto pelo critério é equivalente ao tempo gasto pelo estado segundo a dinâmica quântica. Na maioria das vezes o tempo obtido é menor que

o tempo requerido pela evolução do estado quântico para atingir um determinado valor de fidelidade, sendo esse tempo tão menor quanto maior for a incerteza da energia apresentada pelo estado do sistema.

Certamente, tem-se usado os critérios do QSL com o intuito de obter o menor tempo de evolução entre dois estados distinguíveis, embora esses resultados não necessariamente têm que ser próximos quando forem comparados com o tempo real da evolução quântica. Recentemente, tem havido uma tendência na procura por expressões do QSL que sejam mais justa, estreitas ou em inglês “*tight*”, segundo as referências [34, 35, 37, 39, 42, 60]. Portanto, nesse trabalho se considera importante a obtenção de previsões de tempo mais justas em situações particulares, por exemplo, para estimar o tempo de computação de um sistema físico dado o estado inicial, o hamiltoniano e a fidelidade que deseja ser atingida com o estado final.

Por esse motivo, nesse capítulo apresenta-se um método para melhorar as previsões fornecidas pelo critério MT estendido mediante a ação de uma transformação unitária sobre o sistema quântico, fornecendo a descrição do sistema em um novo referencial onde a incerteza da energia do estado quântico resulte ser menor. Isso implica na diminuição da rapidez com que evolui o estado quântico nesse novo referencial.

5.1 Transformação Unitária e Método Transcendente

Suponha-se que no referencial do laboratório exista um sistema quântico descrito pelo hamiltoniano dependente do tempo \hat{H}_t , atuando no espaço de Hilbert de dimensão n . A equação de Schrödinger dependente do tempo nesse referencial é,

$$i\hbar|\dot{\psi}_t\rangle = \hat{H}_t|\psi_t\rangle. \quad (5.1)$$

Quando for aplicado sobre o sistema uma transformação unitária¹ $\hat{U}_R(t)$, o estado quântico será expresso como,

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_R(t)|\phi_t\rangle, \quad (5.2)$$

de modo que $|\psi_0\rangle = |\phi_0\rangle$. Sendo $|\phi_t\rangle$ o estado do sistema quântico expresso em um novo referencial. Em consequência, a equação de

¹Sendo o subíndice R associado a uma transformação de rotação, como será explicado posteriormente nesse trabalho.

Schrödinger dependente do tempo nesse referencial é,

$$i\hbar|\dot{\phi}_t\rangle = \hat{H}_G|\phi_t\rangle, \quad \hat{H}_G = \hat{U}_R^\dagger(t)\hat{H}_t\hat{U}_R(t) - i\hbar\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t), \quad (5.3)$$

onde \hat{H}_G é o hamiltoniano do sistema quântico no novo referencial². De acordo com algumas razões que serão explicadas posteriormente, esse novo referencial é nomeado referencial girante. O objetivo é encontrar um novo hamiltoniano \hat{H}_G cuja variância seja menor que a de \hat{H}_t . Para mostrar esse fato, calcular-se-á a variância da energia apresentada pelo estado quântico no referencial do laboratório, e compara-se com sua contrapartida no referencial girante. Assim, o valor médio da energia no referencial do laboratório escrito em termos das grandezas no referencial girante é,

$$\langle\psi_t|\hat{H}_t|\psi_t\rangle = \langle\phi_t|\hat{H}_G|\phi_t\rangle + i\hbar\langle\phi_t|\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t)|\phi_t\rangle. \quad (5.4)$$

Adicionalmente, a energia quadrática média é dada por,

$$\begin{aligned} \langle\psi_t|\hat{H}_t^2|\psi_t\rangle &= \langle\phi_t|\hat{H}_G^2|\phi_t\rangle - \hbar^2\langle\phi_t|(\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t))^2|\phi_t\rangle \\ &+ i\hbar\langle\phi_t|\{\hat{H}_G, \hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t)\}|\phi_t\rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Portanto, a variância da energia do estado quântico no referencial do laboratório pode ser expressa como,

$$\begin{aligned} \Delta H_t^2 &= \Delta H_G^2 - \hbar^2(\Delta\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t))^2 \\ &+ i\hbar\langle\phi_t|\{\hat{H}_G, \hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t)\}|\phi_t\rangle - 2i\hbar\langle\phi_t|\hat{H}_G|\phi_t\rangle\langle\phi_t|\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t)|\phi_t\rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Vale a pena ser mencionado que os primeiros termos representam a variância da energia do estado quântico no referencial girante e a variância do produto $i\hbar\hat{U}_R^\dagger(t)\dot{\hat{U}}_R(t)$, respectivamente. Além disso, o significado físico dos outros termos poderá ser compreendido quando essa análise for aplicada em um sistema quântico em particular. Por exemplo, no caso de ressonância magnética nuclear de um spin 1/2, pode ser mostrado através da transformação unitária de rotação em torno do eixo \hat{z} , que a incerteza da energia do estado quântico no referencial girante torna-se menor que sua contrapartida no referencial do laboratório. Em consequência, a dinâmica apresentada pelo estado desse sistema

²Sendo o subíndice G associado ao referencial girante, sendo esse obtido posteriormente nesse trabalho.

quântico no referencial girante acontece com uma menor rapidez³ em relação à dinâmica do estado no referencial do laboratório.

Além disso, considera-se a relevância que apresenta a incerteza da energia como grandeza física chave na abordagem geométrica do problema do mínimo tempo de evolução quântico para sistemas quânticos fechados, sendo o critério MT estendido,

$$t \geq t_{MT}(t) = \frac{\hbar \arccos \sqrt{F(t)}}{\Delta \overline{H}_t}, \quad \Delta \overline{H}_t = \frac{1}{t} \int_0^t \Delta H_{t'} dt', \quad (5.7)$$

onde $\Delta \overline{H}_t$ é a média temporal da incerteza da energia até o instante t . A saturação da desigualdade implica que a dinâmica quântica acontece ao longo da menor percurso que liga o estado quântico inicial com o estado quântico evoluído no espaço de Hilbert, percorrendo a curva geodésica. Em geral, esse critério estabelece uma previsão menor que o tempo necessário para que o estado quântico evolua e atinga um certo valor de fidelidade, sendo esse tempo tão menor quanto maior for a incerteza da energia do estado quântico.

Devido a esse fato, a atuação de uma transformação unitária sobre o sistema quântico, forneceria a descrição do sistema no referencial girante onde a incerteza da energia do estado quântico resulte ser menor que sua contrapartida no referencial do laboratório. Isso implica na diminuição da rapidez com que evolui o estado quântico nesse novo referencial. Em virtude disso, a implementação do critério MT estendido no referencial girante permitiria obter previsões mais próxima à escala de tempo da evolução quântica real. Em relação a isso, propõe-se a transformação do critério em uma equação transcendente⁴ segundo a igualdade entre o tempo de evolução e o tempo previsto. Dessa maneira, tem-se,

$$0 = \arccos \sqrt{F_G(t)} - \frac{\Delta \overline{H}_G t}{\hbar}. \quad (5.8)$$

Fisicamente, as raízes dessa equação transcendente estão associadas a cada um dos instantes em que a dinâmica do estado quântico cruza a curva geodésica existente entre o estado inicial e seu ortogonal. Sendo o interesse principal nessa parte do trabalho, prever o mínimo tempo necessário pelo estado de um sistema quântico evolua unitariamente

³Segundo o trabalho de Anandan e Aharonov [27], esse fato implica uma dinâmica do estado quântico no referencial girante menos rápida em relação à dinâmica no laboratório.

⁴Uma **equação transcendente** é uma equação que contém alguma função que não é redutível a uma fração entre polinômios e cuja solução não pode ser expressa através de funções elementares.

até atingir uma dada fidelidade. Por esse motivo, só será considerada a primeira raiz cronológica para cada valor de fidelidade.

Em relação ao raciocínio anterior, apresenta-se uma maneira de poder estimar a fidelidade quântica apresentada pelo estado no referencial girante em função da fidelidade do estado evoluído no referencial do laboratório. Para isso, inicia-se mediante a definição da fidelidade quântica de um estado puro no referencial do laboratório,

$$F(t) = |\langle \psi_0 | \psi_t \rangle|^2, \quad \Rightarrow \quad \sqrt{F(t)} = |\langle \psi_0 | \psi_t \rangle|. \quad (5.9)$$

De acordo com essa definição, o estado evoluído pode ser expresso através de uma combinação linear de estados que compõem uma base completa em relação à dimensão n do espaço de Hilbert ao qual pertence o sistema quântico,

$$|\psi_t\rangle = \sqrt{F(t)}|\psi_0\rangle + \sum_{j=1}^{n-1} a_j e^{i\varphi_j} |\psi_j^\perp\rangle, \quad (5.10)$$

onde $|\psi_j^\perp\rangle$ é o conjunto de estados ortogonais ao estado inicial. Além disso, cada um desses estados apresenta uma fase relativa dependente do tempo φ_j , em relação a $|\psi_0\rangle$, e um conjunto de constantes a_j , responsáveis por satisfazer a condição de normalização do estado evoluído. Sabendo que a fidelidade do estado quântico no referencial girante pode ser expressa como $F_G = |\langle \psi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \psi_t \rangle|^2$, tem-se,

$$F_G = \left| \sqrt{F(t)} \langle \psi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \psi_0 \rangle + \sum_{j=1}^{n-1} a_j e^{i\varphi_j} \langle \psi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \psi_j^\perp \rangle \right|^2. \quad (5.11)$$

Vale a pena mencionar que o conjunto de $n-1$ estados ortogonais poderá ser obtido através do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt sobre o estado inicial e o conjunto de $n-1$ estados da base canônica correspondente à dimensão do espaço de Hilbert. Além disso, para um certo valor de $F(t)$, torna-se necessário varrer sobre todo o conjunto da valores de φ_j e a_j para calcular a primeira raiz cronológica. Desta forma, para cada valor de fidelidade do estado quântico no referencial do laboratório, poderá ser obtida uma previsão do mínimo tempo requerido pelo estado quântico inicial no referencial do laboratório para atingir um determinado valor de fidelidade quântica. Exemplificando a praticidade do método, a seguir será analisado um sistema quântico altamente oscilante no contexto de RMN, de dimensão dois e quatro associados à interação do spin nuclear $1/2$ e $3/2$, respectivamente. Com

o intuito de realizar uma comparativa entre os resultados a serem obtidos através do método da equação transcendente, usa-se o critério MT estendido, sendo assumido o conhecimento completo da incerteza da energia apresentada pelo estado quântico em cada um dos referenciais mediante a solução da equação de Schrödinger e assim obter o valor da fidelidade $F(t)$ para todo tempo t da dinâmica. Dessa forma, pode-se afirmar que, embora o QSL não foi definido com o propósito exposto nesse capítulo, os tempos obtidos mediante a solução da equação transcendente resultam ser bem mais próximos ao tempo gesto pela dinâmica do estado quânticos, em relação aos tempos obtidos pelo critério MT estendido.

5.2 Breve Introdução à Ressonância Magnética Nuclear

5.2.1 Interações

Quando um núcleo atômico é colocado em um campo magnético, o estado fundamental será dividido em diferentes níveis de energia proporcionais à força do campo magnético. Esse efeito é conhecido como efeito Zeeman. A interação Zeeman é útil para a identificação de diferentes tipos de núcleos colocados em campos magnéticos externos, pois esse termo é diretamente proporcional à energia do campo. Além disso, a informação da dinâmica estrutural pode ser obtida mediante a consideração de acoplamentos de outras interações magnéticas e eletrônicas com o núcleo. Essas interações são perturbações em relação à interação de Zeeman. Dessa forma, o hamiltoniano completo em ressonância magnética nuclear pode ser expresso como,

$$\hat{H} = \hat{H}_{Zeeman} + \hat{H}_J + \hat{H}_{CS} + \hat{H}_{DD} + \hat{H}_Q + \hat{H}_{meio}, \quad (5.12)$$

onde \hat{H}_{Zeeman} é a interação Zeeman, \hat{H}_J é o acoplamento escalar relacionado às interações hiperfinas entre o núcleo e os elétrons vizinhos, \hat{H}_{CS} é o desvio químico associado à frequência de ressonância de um núcleo relativamente a um campo magnético padrão, \hat{H}_{DD} é o acoplamento dipolar referido à interação direta entre dois dipolos magnéticos, \hat{H}_Q é o acoplamento quadrupolar referente à distribuição de carga não esférica quando o spin nuclear é maior a $\frac{1}{2}$ e finalmente \hat{H}_{meio} corresponde à interação fraca entre o núcleo com outros núcleos, outros campos, podendo ser desprezado na maioria das vezes dentro de certa escala de tempo. Na tabela 5.1 são apresentadas as magnitudes relativas dessas

interações, mostrando que a interação Zeeman é a mais relevante para a descrição quântica, seguido da interação quadrupolar, além do desvio químico e o acoplamento dipolar, e finalmente o acoplamento escalar sendo a mais fraca de todas. Certamente, algumas interações são mais pronunciadas que outras [58].

Interação	Magnitude (Hz)
Zeeman	10^8
Quadrupolar	10^6
Desvio químico	10^3
Dipolo	10^3
J	10^1

Tabela 5.1: Magnitude das diferentes interações em ressonância magnética nuclear ($\hbar=1$).

No caso geral da ressonância magnética nuclear, as interações sentidas pelo spin nuclear são de diferentes naturezas e magnitudes. Por esse razão, somente bastaria aplicar a transformação unitária necessária para remover a dependência temporal do termo mais contribuinte, o termo Zeeman. Em consequência, obteria-se a descrição do sistema quântico em um referencial onde sua dinâmica seria mais lenta.

5.2.2 Processos de medida

À temperatura ambiente, o formalismo teórico que descreve o estado quântico de qualquer sistema de spin nuclear é dado pela aproximação do estado térmico, tomando-se apenas os termos de ordem dominante [61]

$$\hat{\rho} \approx \frac{1}{\mathcal{Z}} \hat{\mathbb{1}} + \frac{\beta \hbar \omega_L}{\mathcal{Z}} \hat{\mathbf{I}}_z, \quad (5.13)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e $\mathcal{Z} = \text{Tr} \left[e^{(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{RMN})} \right]$ é a função de partição, T é a temperatura, k_B é a constante de Boltzmann, \hbar é a constante de Planck reduzida e ω_L é a frequência de Larmor do spin nuclear. Dessa forma, o fator de polarização é $\epsilon = \frac{\beta \hbar \omega_L}{2\mathcal{Z}}$, sendo um leve desvio da ordem 10^{-5} na matriz identidade, e a matriz $\hat{\mathbf{I}}_z$ associada ao spin ao longo do eixo \hat{z} , representando o desvio da matriz densidade. Nesse caso, o estado térmico da eq. (5.13) pode ser escrito como,

$$\hat{\rho} \approx \left(\frac{1 - \epsilon}{\mathcal{Z}} \right) \hat{\mathbb{1}} + \epsilon \hat{\rho}_0, \quad (5.14)$$

onde $\hat{\rho}_0$ representa a parte pura da matriz densidade com traço unitário.

Processo de tomografia do estado quântico

A parte pura da matriz densidade é tomografada e reconstruída usando rotações globais [62]. Nesse sentido, a técnica de RMN deteta a magnetização ao longo do eixo \hat{x} e \hat{y} , correspondendo à primeira ordem de coerência da matriz densidade, sendo essa característica explorada dentro de outras ordens de coerência. Por esse motivo, apresenta-se uma breve descrição para spin $I = 1/2$, e um processo análogo é entendido para spin $I = 3/2$, para maiores detalhes recomenda-se as referências [62, 67].

Com o propósito de aplicar o processo em tomografia de um sistema de spin $I = 1/2$, identifica-se o elemento de coerência de ordem zero e um na matriz densidade. Dessa forma, devemos usar rotações adequadas para transferir as intensidades de ordem zero de coerências em primeira ordem. Em virtude disso, o operador densidade para um qubit é representado por operadores de dimensão 2×2 . Considera-se como exemplo a reconstrução da matriz densidade do spin nuclear no estado fundamental, $|\uparrow\rangle$. Dessa forma, os elementos da matriz densidade são expressos como,

$$\hat{\rho}_0 = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 + ix_3 \\ x_2 - ix_3 & x_4 \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

notando que a hermiticidade do operador densidade é satisfeita. A seguir, apresenta-se um protocolo, o qual pode ser resumido em três estágios:

Primeiro estágio: Os observáveis na RMN são as projeções do operador spin nuclear $\hat{\mathbf{I}}_x$ e $\hat{\mathbf{I}}_y$, sendo que esses correspondem à magnetização ao longo do eixo \hat{x} e \hat{y} , respectivamente. Segundo a mecânica quântica, para qualquer matriz densidade $\hat{\rho}_0$, a eq. (5.15), mostra que,

$$M_x(\hat{\rho}_0) = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{I}}_x \hat{\rho}_0 \right\} = x_2, \quad (5.16a)$$

$$M_y(\hat{\rho}_0) = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{I}}_y \hat{\rho}_0 \right\} = x_3, \quad (5.16b)$$

obtendo assim, as informações da parte real e imaginária dos elementos $\rho_{|\uparrow\rangle\langle\downarrow|}$, e também seus complexos conjugados $\rho_{|\downarrow\rangle\langle\uparrow|}$.

Segundo estágio: Transforma-se $\hat{\rho}_0$ aplicando o operador $\hat{R}_y(\frac{\pi}{2})$ e cada elemento da matriz densidade transformada pode ser representado por,

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_1 + x_4 - 2x_2 & x_1 - x_4 + 2ix_3 \\ x_1 - x_4 - 2ix_3 & x_1 + x_4 + 2x_2 \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

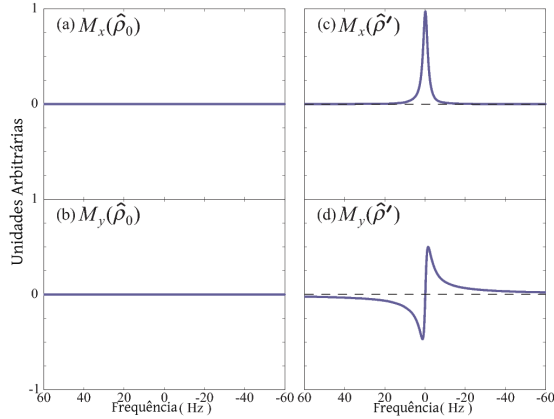


Figura 5.1: Espectro de RMN do núcleo de ^{31}P para a detecção do estado quântico inicial $|\uparrow\rangle$ representado pela matriz densidade $\hat{\rho}_0$. Uma janela espectral de 120 Hz é estabelecida para a medida da magnetização: (a) ao longo do eixo \hat{x} com $M_x(\hat{\rho}_0)$, (b) eixo \hat{y} , com $M_y(\hat{\rho}_0)$, (c) eixo \hat{x} , com $M_x(\hat{\rho}')$, onde $\hat{\rho}' = \hat{R}_y(\frac{\pi}{2})\hat{\rho}_0\hat{R}_y^\dagger(\frac{\pi}{2})$ e (d) eixo \hat{y} , com $M_y(\hat{\rho}')$.

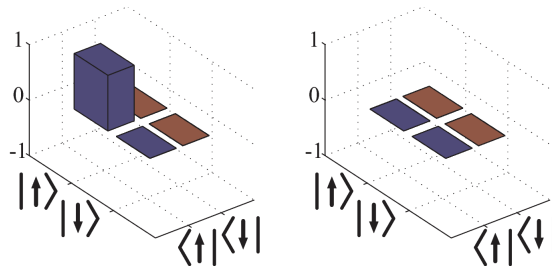


Figura 5.2: Tomografia de estados quânticos. Apresenta-se a correspondente matriz densidade do estado $\hat{\rho} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$, sendo as barras da esquerda as componentes reais e da direita as componentes imaginárias.

Após da detecção do sinal de RMN é detetada, a magnetização ao longo do eixo \hat{x} e \hat{y} correspondem à parte real e imaginária dos elementos

$\rho'_{|\uparrow\rangle\langle\downarrow|}$, resultando ser,

$$M_x(\hat{\rho}') = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{I}}_x \hat{\rho}' \right\} = \frac{x_1 - x_4}{2}, \quad (5.18a)$$

$$M_y(\hat{\rho}') = \text{Tr} \left\{ \hat{\mathbf{I}}_y \hat{\rho}' \right\} = x_3. \quad (5.18b)$$

Além disso, usa-se uma propriedade da matriz densidade, a qual estabelece seu traço unitário $x_1 + x_4 = 1$. Então, o conjunto de equações gerado pelo processo anterior é completo.

Terceiro estágio: A fim de reconstruir a matriz densidade, precisamos identificar cada uma das equações dos estágios anteriores com seus quatro espectros, como pode ser visto na Fig. 5.1. Nesse sentido, o espectro da Fig. 5.1a e 5.1b representam a magnetização $M_x(\hat{\rho}_0)$ e $M_y(\hat{\rho}_0)$, as quais são quantificadas pela eq.(5.16a) e (5.16b). Similarmente, os espectro nas Fig.5.1c e 5.1d representam a magnetização depois de uma rotação $\frac{\pi}{2}$, gerando $\hat{\rho}'$. Nesse caso, usa-se e aplica-se a magnetização $M_x(\hat{\rho}') = 0.5$ (cujos valores são aproximados com uma casa decimal nesse exemplo). Dessa forma, resume-se o processo a,

$$\begin{aligned} x_2 &= 0, \\ x_3 &= 0, \\ x_1 - x_4 &= 1, \\ x_1 + x_4 &= 1, \end{aligned}$$

e resolvendo-os, obtém-se a matriz densidade.

$$\hat{\rho}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

A sua contrapartida experimental é apresentada na Fig. 5.2, na qual a barra da esquerda(*direita*) corresponde à parte real(*imaginária*) da contribuição de $\hat{\rho}_0$. Portanto, usa-se um procedimento similar para a reconstrução da matriz densidade de outros sistemas quânticos.

5.3 Spin 1/2 em RMN

Nessa seção será descrito um sistema quântico relativamente simples, composto pela interação entre o spin nuclear e um campo magnético externo que apresenta um movimento harmônico de precessão. Apesar da simplicidade, sua análise é capaz de fornecer uma grande informação para o propósito do seguinte trabalho, pois a solução analítica

da equação de Schrödinger será obtida com o intuito de comparar as previsões do mínimo tempo de evolução quântico que serão obtidas posteriormente. Dessa forma, inicia-se expressando a interação do spin nuclear com o campo magnético através do operador momento magnético $\hat{\vec{\mu}}$. Assim, o hamiltoniano da interação é expresso,

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} + \hat{H}_{meio}, \quad (5.20)$$

onde $\vec{\mu} = -\gamma\vec{I}$, sendo γ o fator giromagnético do núcleo e $\vec{I} = \hbar\vec{\sigma}/2$ o operador de spin nuclear. Segundo a escala de tempo utilizada para a análise, a interação do spin com o meio pode ser desprezada devido a suas fracas contribuições. Adicionalmente, o campo magnético é expresso de maneira que apresente um movimento de precessão harmônico com frequência ω_p em torno do eixo \hat{z} ,

$$\vec{B} = B_0 \cos(\omega_p t + \varphi) \hat{x} + B_0 \sin(\omega_p t + \varphi) \hat{y} + B_1 \hat{z}. \quad (5.21)$$

Consequentemente, o hamiltoniano resulta em,

$$\begin{aligned} \hat{H}_t &= \gamma \vec{I} \cdot \vec{B}, \\ &= \gamma [B_0 \hat{I}_x \cos(\omega_p t + \varphi) + B_0 \hat{I}_y \sin(\omega_p t + \varphi) + B_1 \hat{I}_z], \\ &= [\omega_0 \hat{I}_x \cos(\omega_p t + \varphi) + \omega_0 \hat{I}_y \sin(\omega_p t + \varphi) + \omega_1 \hat{I}_z], \quad \omega_i \equiv \gamma B_i, \quad i=0, 1. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Além disso, será desprezado qualquer fase inicial apresentada pelo campo magnético, dado por $\varphi=0$. Dessa maneira, o hamiltoniano no referencial do laboratório é dado por,

$$\hat{H}_t = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_1 & \omega_0 e^{-i\omega_p t} \\ \omega_0 e^{i\omega_p t} & -\omega_1 \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Devido ao movimento de precessão do campo magnético em torno do eixo \hat{z} , a descrição do estado quântico no referencial do laboratório pode ser árdua como consequência da dependência temporal apresentada pelo hamiltoniano, uma vez que esse não comuta consigo mesmo para tempos diferentes. Em relação a esse fato, pode ser assumido um referencial que acompanhe o tempo todo o movimento de precessão do campo externo, sendo esse denominado *referencial girante*. Naturalmente, esse referencial está diretamente relacionado com o referencial do laboratório mediante uma transformação unitária de rotação em torno do eixo de simetria apresentado pelo campo magnético. Denotando $|\psi_t\rangle$ o estado do sistema descrito no referencial do laboratório e

$|\phi_t\rangle$ o estado do sistema descrito no referencial girante. Desse modo, os estados quânticos nos dois referenciais estão relacionados da seguinte maneira,

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_R(t)|\phi_t\rangle, \quad \hat{U}_R(t) = e^{-i\hat{\sigma}_z\omega_p t/2}. \quad (5.24)$$

Assim, a equação de Schrödinger descrita por um observador no referencial girante é dada por,

$$i\hbar|\dot{\phi}_t\rangle = \hat{H}_G|\phi_t\rangle, \quad \hat{H}_G = \hat{H}_0 - \hat{\sigma}_z \frac{\hbar\omega_p}{2}, \quad (5.25)$$

onde \hat{H}_0 é o hamiltoniano no instante inicial. Portanto, obtém-se o hamiltoniano girante,

$$\hat{H}_G = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \omega_0 \\ \omega_0 & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

onde $\Delta \equiv \omega_1 - \omega_p$ corresponde à dessintonia entre a frequência precessão do campo magnético e a frequência de Larmor do spin. Com base nesse hamiltoniano, tem-se os autoestados girantes, os quais serão denotados segundo a projeção do spin com respeito ao campo magnético, e dado que o campo magnético apresenta uma direção constante definida pelo o ângulo polar χ . Tem-se que,

$$|\phi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\chi}{2}) \\ \sin(\frac{\chi}{2}) \end{pmatrix}, \quad |\phi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\frac{\chi}{2}) \\ -\cos(\frac{\chi}{2}) \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

Particularmente, o ângulo χ está relacionado com as grandezas físicas do sistema através das seguintes relações trigonométricas: $\sin\chi = \omega_0/\Omega$, $\cos\chi = (\omega_1 - \omega_p)/\Omega$, sendo $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + (\omega_1 - \omega_p)^2}$, com a energia de cada autoestado dada por $E_{\pm} = \pm\Omega\hbar/2$. Em virtude da independência temporal do hamiltoniano no referencial girante, a evolução do estado pode ser expressa através da seguinte transformação unitária,

$$|\phi_t\rangle = e^{-i\hat{H}_G t/\hbar}|\phi_0\rangle. \quad (5.28)$$

Portanto, o estado quântico evoluído no referencial do laboratório pode ser escrito como,

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{\sigma}_z\omega_p t/2} e^{-i\hat{H}_G t/\hbar}|\psi_0\rangle. \quad (5.29)$$

Em geral, o estado quântico inicial de um sistema quântico bidimensional, pode ser definido mediante a sua representação geométrica na esfera de Bloch. Assim, qualquer estado quântico puro é representado

como uma combinação linear da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ mediante dois parâmetros angulares, os ângulos polar e azimutal. Dessa forma, o estado quântico inicial pode ser expresso da seguinte maneira,

$$|\phi_0\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Por um lado, quando se projeta do estado quântico inicial na base completa dos autoestados girantes eq.(5.27), obtém-se,

$$|\phi_0\rangle = c_+ |\phi_+\rangle + c_- |\phi_-\rangle, \quad (5.31)$$

onde os coeficientes complexos pertencentes a cada um dos autoestados girantes são dados por,

$$c_+ = \left(\cos\left(\frac{\chi}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\chi}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right), \quad (5.32a)$$

$$c_- = \left(\sin\left(\frac{\chi}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - e^{i\varphi} \cos\left(\frac{\chi}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right). \quad (5.32b)$$

Em virtude da representação do estado quântico inicial, a dinâmica quântica no referencial girante é expressa mediante a adição de uma fase local proporcional à energia de cada autoestado. Dessa forma, o estado evoluído no tempo t é escrito como,

$$|\phi_t\rangle = c_+ e^{-i\Omega t/2} |\phi_+\rangle + c_- e^{i\Omega t/2} |\phi_-\rangle. \quad (5.33)$$

A partir da eq.(5.24), o estado quântico evoluído no referencial do laboratório pode ser expresso,

$$|\psi_t\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_p t/2} \left(e^{-i\Omega t/2} c_+ \cos\left(\frac{\chi}{2}\right) + e^{i\Omega t/2} c_- \sin\left(\frac{\chi}{2}\right) \right) \\ e^{i\omega_p t/2} \left(e^{-i\Omega t/2} c_+ \sin\left(\frac{\chi}{2}\right) - e^{i\Omega t/2} c_- \cos\left(\frac{\chi}{2}\right) \right) \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Após de alguns passos algébricos, tem-se que o produto interno entre o estado quântico inicial com o estado evoluído até o instante t é,

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi_t \rangle &= \cos\left(\frac{\omega_p t}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \left(\cos\theta \cos\chi + \cos\varphi \sin\theta \sin\chi \right) \right] \\ &\quad - i \sin\left(\frac{\omega_p t}{2}\right) \cos\chi \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \left(\cos\theta \cos\chi + \cos\varphi \sin\theta \sin\chi \right) - i \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] \\ &\quad - i \sin\left(\frac{\omega_p t}{2}\right) \sin\chi 2\mathbf{Re} \left\{ c_+^* c_- e^{i\Omega t/2} \right\}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Analisando isoladamente o último termo obtido anteriormente, tem-se,

$$2\mathbf{Re} \left\{ c_+^* c_- e^{i\Omega t/2} \right\} = \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \left(\cos\theta \sin\chi - \cos\varphi \sin\theta \cos\chi \right) + \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \sin\theta \sin\varphi. \quad (5.36)$$

Portanto, pode-se concluir que o produto interno entre os estados resulta em,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_0 | \psi_t \rangle &= [\cos(\frac{\omega_p t}{2}) \cos(\frac{\Omega t}{2}) - \cos\chi \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \sin(\frac{\Omega t}{2})] \\
 &\quad - i (\cos\theta \cos\chi + \cos\varphi \sin\theta \sin\chi) [\cos(\frac{\omega_p t}{2}) \sin(\frac{\Omega t}{2}) + \cos\chi \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \cos(\frac{\Omega t}{2})] \\
 &\quad - i \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \sin\chi [\cos(\frac{\Omega t}{2}) (\cos\theta \sin\chi - \cos\varphi \sin\theta \cos\chi) + \sin(\frac{\Omega t}{2}) \sin\theta \sin\varphi].
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Com base nesse resultado, a fidelidade quântica no referencial do laboratório para qualquer instante é expressa como,

$$\begin{aligned}
 F_t &= [\cos(\frac{\omega_p t}{2}) \cos(\frac{\Omega t}{2}) - \cos\chi \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \sin(\frac{\Omega t}{2})]^2 \\
 &\quad + \left\{ (\cos\theta \cos\chi + \cos\varphi \sin\theta \sin\chi) [\cos(\frac{\omega_p t}{2}) \sin(\frac{\Omega t}{2}) + \cos\chi \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \cos(\frac{\Omega t}{2})] \right. \\
 &\quad \left. + \sin(\frac{\omega_p t}{2}) \sin\chi [\cos(\frac{\Omega t}{2}) (\cos\theta \sin\chi - \cos\varphi \sin\theta \cos\chi) + \sin(\frac{\Omega t}{2}) \sin\theta \sin\varphi] \right\}^2.
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

Em particular, quando o estado inicial de spin for definido como sendo um dos autoestado girantes, por exemplo $|\psi_0\rangle = |\phi_+\rangle$ correspondendo aos parâmetros de Bloch $\theta = \chi$ e $\varphi = 0$, pode-se mostrar que a ação do campo magnético após meio ciclo de precessão $T/2 = \pi/\omega_p$, a fidelidade acaba sendo $|\langle \psi_0 | \psi_{T/2} \rangle|^2 = \cos^2\chi$. Dessa forma, mostra-se que a fidelidade no referencial do laboratório depende da orientação efetiva do campo magnético no referencial girante, ver Figura 5.3.

Calculando no referencial do laboratório algumas quantidades físicas necessárias para o cálculo da incerteza da energia do estado quântico nesse referencial, o valor médio da energia é,

$$\langle \psi_t | \hat{H}_t | \psi_t \rangle = \langle \phi_t | \hat{H}_G | \phi_t \rangle + \frac{\hbar\omega_p}{2} \langle \phi_t | \hat{\sigma}_z | \phi_t \rangle. \tag{5.39}$$

A energia quadrática média é,

$$\langle \psi_t | \hat{H}_t^2 | \psi_t \rangle = \langle \phi_t | \hat{H}_G^2 | \phi_t \rangle + \frac{\hbar^2\omega_p^2}{4} \langle \phi_t | \hat{\sigma}_z^2 | \phi_t \rangle + \frac{\hbar\omega_p}{2} \langle \phi_t | \{ \hat{H}_G, \hat{\sigma}_z \} | \phi_t \rangle. \tag{5.40}$$

Portanto, a variância da energia no referencial do laboratório é escrita da seguinte maneira,

$$\Delta H_t^2 = \Delta H_G^2 + \frac{\hbar^2\omega_p^2}{4} (\Delta\hat{\sigma}_z)^2 + \frac{\hbar^2\omega_p\Delta}{2} - \hbar\omega_p \langle \phi_t | \hat{H}_G | \phi_t \rangle \langle \phi_t | \hat{\sigma}_z | \phi_t \rangle. \tag{5.41}$$

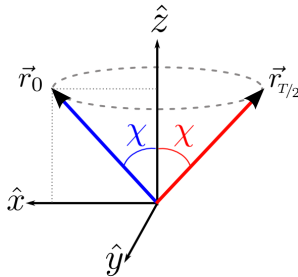


Figura 5.3: Estado inicial e o estado evoluído no instante de meio período de precessão do campo magnético.

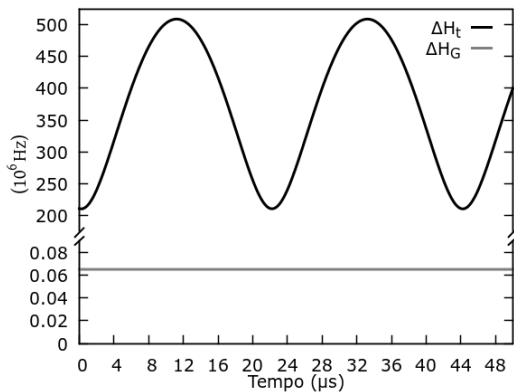


Figura 5.4: Comparação entre as incertezas da energia em ambos referencias.

Conseqüentemente, quando os parâmetros do campo magnético externo com relação à frequência de Larmor do spin nuclear são $\omega_p \approx \omega_1$, então $|\Delta| \approx 0$, e $\omega_1 \gg \omega_0$, conclui-se que a incerteza da energia do estado quântico no referencial girante é menor que sua contrapartida no referencial do laboratório $\Delta H_t > \Delta H_G$. Para corroborar essa afirmação, será calculada a incerteza da energia no referencial girante, a qual é constante e, portanto, pode ser calculada mediante o cálculo de algumas grandezas prévias,

$$\langle \phi_0 | \hat{H}_G | \phi_0 \rangle = \frac{\hbar \Omega}{2} (\cos \chi \cos \theta + \cos \varphi \sin \chi \sin \theta), \quad \langle \phi_0 | \hat{H}_G^2 | \phi_0 \rangle = \frac{\hbar^2 \Omega^2}{4}. \quad (5.42)$$

Portanto, a incerteza da energia para o estado quântico nesse referencial

acaba sendo independente do tempo,

$$\Delta H_G = \frac{\hbar\Omega}{2} \sqrt{1 - (\cos\chi \cos\theta + \cos\varphi \sin\chi \sin\theta)^2}. \quad (5.43)$$

Com base na análise anterior, apresenta-se na Figura 5.4 a incerteza da energia nos referenciais do laboratório e girante para o estado quântico inicial definido pelos parâmetros de Bloch $\theta = 24,48^\circ$ e $\varphi = 4,02^\circ$. De acordo com a montagem experimental efetuada nesse trabalho, o campo magnético externo é estabelecido na condição de ressonância, caracterizado pelos parâmetros $\omega_0 = 2\pi \times 22.727,0$ rad/s, e $\omega_1 = 2\pi \times 161.975.424,8$ rad/s. Devido à alta frequência de precessão do campo magnético em torno do eixo \hat{z} no referencial do laboratório, nota-se que a incerteza da energia nesse referencial é aproximadamente quatro ordens de grandeza maior que sua contrapartida no referencial girante, em consequência, a dinâmica do estado nesse último referencial é mais lenta.

5.3.1 Problema do mínimo tempo de evolução quântico

Para realizar uma comparativa justa do critério MT estendido e o método da equação transcendente, sendo essa ser escrita como,

$$0 = \arccos \sqrt{F_G(t)} - \frac{\Delta H_G t}{\hbar}, \quad (5.44)$$

decide-se assumir o conhecimento completo da incerteza da energia apresentada pelo estado quântico em cada referencial eq.(5.41) e eq.(5.43). Em contraste, apresenta-se uma estimativa da fidelidade quântica do estado evoluído no referencial girante em função da fidelidade atingida pelo estado evoluído no referencial do laboratório. Dessa foram, o estado evoluído pode ser expresso mediante uma combinação linear entre o estado inicial e o estado ortogonal ao inicial, incluindo um termo de fase relativa φ_0 entre os dois estados. Dado que esses dois estados quânticos compõem uma base completa para o sistema quântico de dois níveis, o estado evoluído normalizado pode ser expresso como,

$$|\psi_t\rangle = \sqrt{F(t)}|\psi_0\rangle + \sqrt{1-F(t)}e^{i\varphi_0}|\psi_0^\perp\rangle. \quad (5.45)$$

Com base nesse resultado, pode-se expressar a fidelidade quântica no referencial girante mediante a transformação unitária sobre o estado no referencial do laboratório, obtendo assim $F_G(t) = |\langle\psi_0|\hat{U}_t^\dagger|\psi_t\rangle|^2$. Por

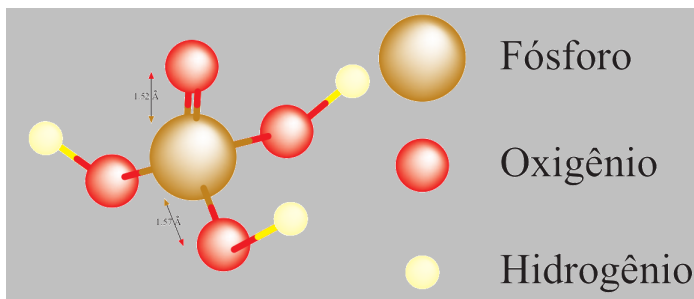


Figura 5.5: Molécula de ácido o-Fosfórico (H_3PO_4). Núcleo de fósforo é o principal da interação.

consequente, ou seja,

$$F_G(t) = \left| \sqrt{F(t)} \langle \psi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \psi_0 \rangle + \sqrt{1-F(t)} e^{i\varphi_0} \langle \psi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \psi_0^\perp \rangle \right|^2. \quad (5.46)$$

Essa estimativa mostra que $F_G(t)$ depende da fidelidade no referencial do laboratório $F(t)$, da fase relativa φ_0 entre o estado ortogonal respeito ao inicial, igualmente da transformação unitária e da definição do estado quântico inicial $|\psi_0\rangle$. Por exemplo, na ressonância magnética nuclear, sabe-se que o gerador da transformação unitária é um observável quântico, assim, se o estado inicial for definido como sendo um dos autoestados desse observável, então, a fidelidade quântica nos dois referenciais resultam ser iguais.

Através de uma colaboração experimental com o prof. Dr. Ruben Auccaise da Universidade Estadual de Ponta Grossa, foi possível medir a evolução temporal do spin nuclear dos átomos de fósforo na molécula de ácido Fosfórico de spin 1/2, ver Figura 5.5. O objetivo de tal colaboração é de se ter acesso aos dados experimentais para compará-los com as previsões do mínimo tempo de evolução segundo o critério MT estendido e da solução da equação transcendente. Ao final faz-se uma comparação entre essas duas previsões respeito à dinâmica real.

Algumas das características do experimento implementado são: um campo magnético com movimento de precessão em torno do eixo \hat{z} , apresentando na direção axial a frequência de Larmor de ressonância do núcleo de Fósforo $\omega_1 = 2\pi \times 161.975.424,8$ rad/s, e uma frequência de Larmor na direção perpendicular de intensidade $\omega_0 = 2\pi \times 22.727,0$ rad/s. A partir dessas frequência $\omega_1 \gg \omega_0$, pode-se inferir a alta oscilação do sistema quântico.

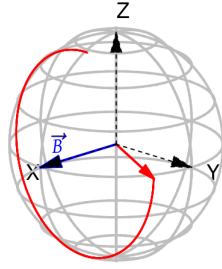


Figura 5.6: Dinâmica do vetor de Bloch no referencial girante até o instante $t = 32,96 \mu\text{s}$. A seta azul representa a direção efetiva do campo magnético nesse referencial. Dado que $\omega_0 \ll \omega_1$, a dinâmica do estado no laboratório resulta ser muito rápida, assim como se pode visualizar no [vídeo](#) em YouTube.

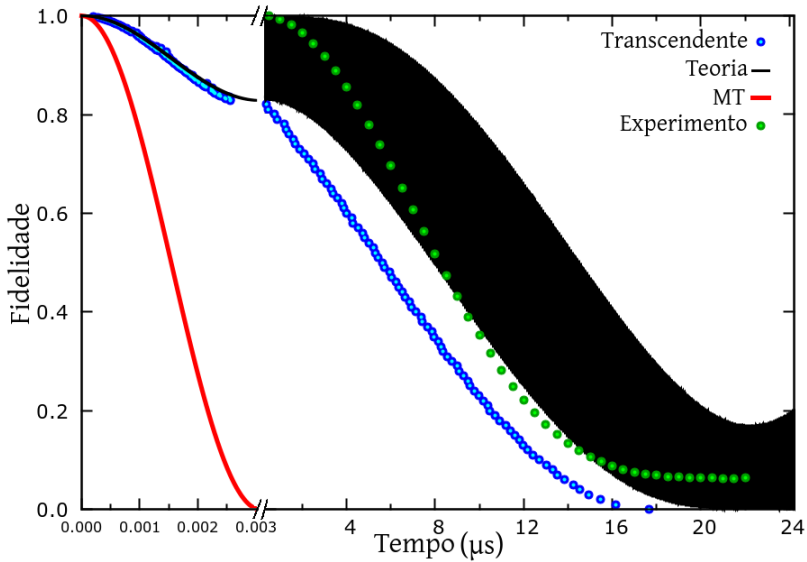


Figura 5.7: Gráfico comparativo entre os diferentes resultados obtidos segundo o método da equação transcendente pontos azuis, e o critério MT estendido linha vermelha, segundo a dinâmica teórica e experimental do estado quântico no referencial do laboratório. Devido à alta precessão do campo magnético a fidelidade quântica do estado no referencial no laboratório é representada mediante uma faixa preta, mas ao fazer um *zoom*, nota-se sua dinâmica oscilatória.

Devido a uma dinâmica quântica em ressonância, onde a frequência de precessão do campo magnético é $\omega_p \approx \omega_1$, os diferentes dados experimentais são obtidos no referencial girante, por esse motivo, representa-se na Figura 5.6 a evolução teórica do vetor de Bloch no referencial girante do estado quântico inicial definido mediante os parâmetros de Bloch $\theta = 24, 48^\circ$ e $\varphi = 4, 02^\circ$. Além disso, os diferentes dados experimentais podem ser expressos no referencial do laboratório mediante a ação da transformação unitária $\tilde{U}_R(t) = \exp\{-i\hat{\sigma}_z\omega_1 t/2\}$. Na Figura 5.7 apresenta-se a comparação entre a dinâmica experimental do estado quântico no referencial do laboratório em relação à dinâmica teórica eq.(5.34), igualmente são apresentadas as previsões do mínimo tempo de evolução segundo o critério MT estendido e as diferentes raízes da equação transcendente para a definição do estado inicial nesse sistema quântico. Quando o estado evoluído torna-se ortogonal (i.e. fidelidade zero) o critério MT estendido prevê um tempo aproximadamente 10^4 vezes menor em relação à dinâmica do estado, contrastando com o tempo previsto pela equação transcendente.

Em consequência da alta oscilação do sistema quântico no referencial do laboratório, algumas poucas raízes resultaram em tempos sutilmente maiores à própria dinâmica quântica, esse fato pode ser atribuído a certos erros numéricos obtido no processo computacional implementado para resolver a equação transcendente no lapso da primeira metade do período de precessão do campo magnético.

Caso Particular

Com o fim de comparar os resultados obtidos através do método da equação transcendente e as previsões do critério de MT estendido dentro da mesma escala de tempo, define-se o estado inicial do spin nuclear mediante os parâmetros $\theta = \pi/6$ e $\varphi = \pi$, interagindo com o campo magnético fora da ressonância $\omega_p = \omega_1 - \omega_0/\sqrt{3}$, sendo os parâmetros do campo $\omega_0 = 2\pi \times 1.250,0$ rad/s, $\omega_1 = 2\pi \times 16.000,0$ rad/s. Dessa forma, o campo magnético apresenta uma direção efetiva $\chi = \pi/3$ no referencial girante. Na Figura 5.8 apresenta-se a dinâmica oscilatória do estado quântico no referencial do laboratório e a parte positiva da equação transcendente para diferentes fases relativas φ_0 apresentadas pelo estado ortogonal respeito ao estado inicial.

Calculando as primeiras raízes cronológicas da equação transcendente para os valores de fidelidade do laboratório $F(t)$, obtém-se uma previsão mais próxima em relação ao critério MT estendido, segundo a dinâmica que apresenta o estado do sistema quântico no referencial do laboratório, ver Figura 5.9. Além disso, para tempo muito

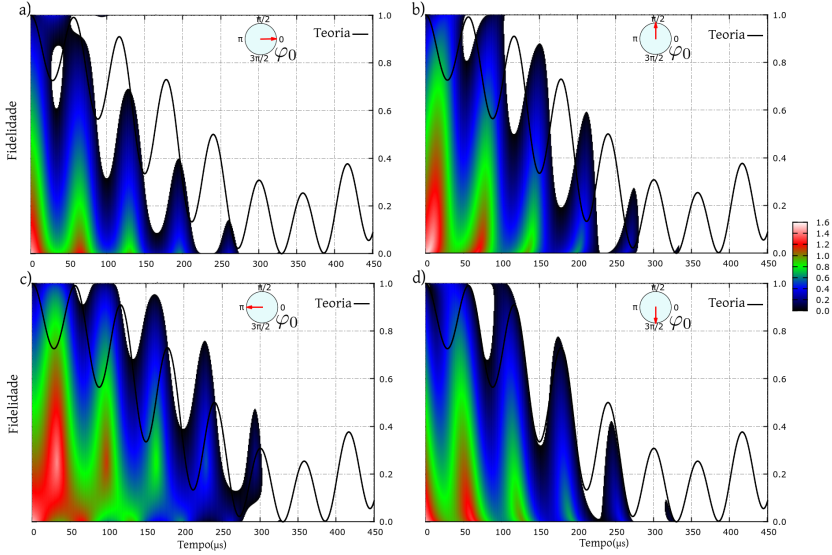


Figura 5.8: Visualização da parte positiva da equação transcendente em relação ao tempo, à fidelidade do laboratório e em cada um dos gráficos *a*, *b*, *c*, *d*, aos diferentes valores do ângulo φ_0 . Clicar em [transcendente](#) para visualizar o vídeo em YouTube.

pequenos as duas previsões são muito próximas entre si à dinâmica do estado, pois a distância percorrida pelo estado é aproximadamente à curva geodésica. Por um lado, as descontinuidades apresentadas pelo critério se devem ao cálculo da média temporal da incerteza da energia segundo o tempo gasto em atingir por primeira vez um determinado valor de fidelidade quântica.

5.4 Spin 3/2 em Ressonância Magnética Nuclear

Nessa seção apresentar-se-á a análise da interação de um spin nuclear 3/2 com um campo magnético de módulo constante que apresenta um movimento harmônico de precessão em torno do eixo \hat{z} , além da interação com um gradiente de campo elétrico,

$$\hat{H}_t = \omega_1 \hat{I}_z + \frac{\omega_Q}{6} \left(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 \right) + \omega_0 \left(\hat{I}_x \cos(\omega_p t + \delta_0) + \hat{I}_y \sin(\omega_p t + \delta_0) \right) + \hat{H}_{meio}. \quad (5.47)$$

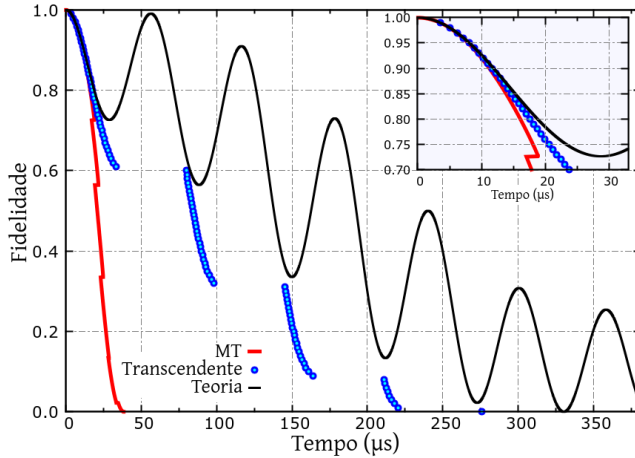


Figura 5.9: Comparativa entre o método da equação transcendente e o critério de Mandelstam-Tamm estendido segundo a dinâmica do estado quântico no referencial do laboratório.

Esse sistema quântico é denominado como ressonância magnética nuclear de um sistema quadrupolar, onde o primeiro termo do hamiltoniano está associado à interação do momento magnético nuclear com o campo magnético forte alinhado ao longo do eixo \hat{z} , denotado mediante a frequência de Larmor ω_1 . O segundo termo está relacionado à interação do momento magnético quadrupolar do núcleo com o gradiente interno de campo elétrico, sendo ω_Q a intensidade desse acoplamento, a qual para a presente análise satisfaz a desigualdade $\omega_Q \ll \omega_1$. O terceiro termo representa a dependência temporal externa com o campo magnético de radio frequências, sendo sua intensidade $B_0 = \omega_0 / \gamma$, onde γ é a razão giromagnética e $\omega_0 \ll \omega_1$. Finalmente, o quarto termo corresponde à interação fraca entre o núcleo quadrupolar com outro núcleos, elétrons e outros campos, por esse motivo é denotado como o hamiltoniano do meio ambiente, podendo ser desprezado devido a sua fraca contribuição dentro de certas escalas de tempo.

Por outro lado, na realização experimental foi assumido a frequência de precessão do campo magnético externo próxima da condição de ressonância, levando à descrição do sistema quântico do referencial do laboratório para o referencial girante, obtendo o seguinte hamiltoniano

niano,

$$\hat{H}_G = (\omega_1 - \omega_p) \hat{I}_z + \frac{\omega_Q}{6} (3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2) + \omega_0 (\hat{I}_x \cos \varphi_0 + \hat{I}_y \sin \varphi_0) + \hat{H}_{meio}, \quad (5.48)$$

onde $\hat{I} = \hbar \hat{\Sigma}/2$ é o operador de spin nuclear, sendo Σ_x , Σ_y e Σ_z as matrizes associadas a cada uma das orientações do momento magnético de spin para esse sistema quadridimensional no espaço de Hilbert,

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_x &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\Sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\Sigma}_z &= \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Naturalmente, os estados quânticos em cada um desses dois referenciais estão relacionados entre si através da transformação unitária de rotação ao longo do eixo axial $\hat{U}_R(t) = \exp\{-i\hat{I}_z \omega_p t / \hbar\}$, mediante a seguinte relação $|\psi_t\rangle = \hat{U}_R(t)|\phi_t\rangle$, denotando $|\psi_t\rangle$ e $|\phi_t\rangle$ aos estados quânticos no referencial do laboratório e girante, respetivamente. Em relação à montagem experimental, tem-se $\Delta \approx |\omega_p - \omega_1|$ e $\Delta \approx 0$. Assumindo a fase inicial do campo magnético $\delta_0 = 0$, obtém-se,

$$\hat{H}_G = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}\omega_0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}\omega_0 & 0 & 2\omega_0 & 0 \\ 0 & 2\omega_0 & 0 & \sqrt{3}\omega_0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\omega_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.50)$$

Mediante o processo de diagonalização do hamiltoniano no referencial girante, obtém-se os quatro autoestados girante,

$$\begin{aligned} |V_0\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, & |V_1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ -1 \\ 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \\ |V_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \\ -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, & |V_3\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Além das correspondentes energias,

$$E_0 = \frac{3\hbar\omega_0}{2}, \quad E_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad E_2 = \frac{-\hbar\omega_0}{2}, \quad E_3 = \frac{-3\hbar\omega_0}{2}. \quad (5.52)$$

Em consequência, o operador de evolução temporal do estado quântico no referencial girante pode ser expresso como,

$$\hat{U}_t = \exp\left[-i\hat{L}_x\omega_0 t/\hbar\right]. \quad (5.53)$$

Adicionalmente, os autoestados da matriz $\hat{\Sigma}_z$ correspondem aos estados que compõem a base computacional nessa dimensão,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.54)$$

Em particular, o estado quântico inicial é definido como sendo um estado do tipo coerente atômico para spin total $j=3/2$, sendo esse estado expresso na base computacional mediante os parâmetros angulares θ e φ , analogamente ao vetor de Bloch,

$$|\phi_0(\theta, \varphi)\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle + C_2|2\rangle + C_3|3\rangle, \quad (5.55)$$

onde os subíndices dos coeficientes estão associados às projeções m do spin j sobre o eixo axial \hat{z} , assim $\{0,1,2,3\} \rightarrow \{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\}$,

$$C_m = \frac{(-e^{-i\varphi} \tan \theta/2)^{j+m}}{(1 + \tan^2 \theta/2)^j} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}}. \quad (5.56)$$

Com o intuito de poder compreender facilmente o comportamento dos coeficientes do estado coerente atômico, apresenta-se na Figura 5.10 o módulo de cada coeficiente em relação ao ângulo polar. Dessa forma, nota-se que essa definição do estado inicial é incapaz de poder representar todos os estados da base computacional, pois só dois desses podem ser representados quando θ for igual a 0 ou π . Alternativamente, projetando o estado quântico inicial na base completa dos autoestados girantes normalizados, obtém-se,

$$|\phi_0(\theta, \varphi)\rangle = \left(\sum_{i=0}^3 |V_i\rangle \langle V_i| \right) |\phi_0(\theta, \varphi)\rangle. \quad (5.57)$$

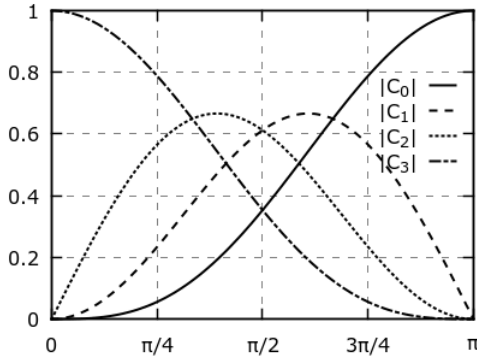


Figura 5.10: Comportamento do módulo dos coeficientes do estado atômico coerente em relação ao ângulo polar θ .

Denotando d_i como o coeficiente complexo associado à projeção do autoestado girante V_i sobre o estado inicial,

$$\begin{aligned} d_i &= \langle V_i | \phi_0(\theta, \varphi) \rangle, \\ &= C_0 v_i^{(1)} + C_1 v_i^{(2)} + C_2 v_i^{(3)} + C_3 v_i^{(4)}, \end{aligned} \quad (5.58)$$

onde o conjunto $v_i^{(k)}$, $k=1, 2, 3, 4$, representa cada uma das componentes normalizadas do autoestado girante $|V_i\rangle$. A partir disso, o estado quântico inicial é expresso como,

$$|\phi_0(\theta, \varphi)\rangle = d_0|V_0\rangle + d_1|V_1\rangle + d_2|V_2\rangle + d_3|V_3\rangle. \quad (5.59)$$

Em virtude da representação do estado inicial na base dos autoestados girantes, pode-se expressar facilmente a evolução do estado no referencial girante mediante a ação do operador unitário de evolução temporal \hat{U}_t . Dessa forma, obtém-se,

$$|\phi_t\rangle = d_0 e^{-iE_0 t/\hbar} |V_0\rangle + d_1 e^{-iE_1 t/\hbar} |V_1\rangle + d_2 e^{-iE_2 t/\hbar} |V_2\rangle + d_3 e^{-iE_3 t/\hbar} |V_3\rangle. \quad (5.60)$$

Por conseguinte, o estado evoluído no referencial do laboratório pode ser expresso mediante a ação da transformação unitária $\hat{U}_R(t)$ sobre o estado evoluído no referencial girante como,

$$|\psi_t(\theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i3\omega_p t/2} \phi_t^{(1)} \\ e^{-i\omega_p t/2} \phi_t^{(2)} \\ e^{i\omega_p t/2} \phi_t^{(3)} \\ e^{i3\omega_p t/2} \phi_t^{(4)} \end{pmatrix}, \quad (5.61)$$

onde o conjunto $\phi_t^{(i)}$, $i = 1, 2, 3, 4$ são as respetivas componentes do estado $|\phi_t\rangle$ na base computacional. Com base nessa descrição teórica, experimentalmente foi implementada a dinâmica quântica do estado inicial definido de acordo com os parâmetros do estado coerente quântico $\theta = 0$ e $\varphi = 0$, sendo esse equivalente a um dos estados da base computacional,

$$|\phi_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.62)$$

Iniciando a descrição quântica do estado no referencial girante, e dada a condição experimental de ressonância entre a precessão do campo magnético externo com a frequência de Larmor de precessão do spin nuclear, implicando $\Delta \approx 0$, tem-se que o estado quântico evoluído pode ser expresso,

$$|\phi_t\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(e^{-3i\omega_0 t/2} |V_0\rangle + e^{-i\omega_0 t/2} \sqrt{3} |V_1\rangle + e^{i\omega_0 t/2} \sqrt{3} |V_2\rangle + e^{i3\omega_0 t/2} |V_3\rangle \right). \quad (5.63)$$

Por outro lado, expressando o estado evoluído no referencial do laboratório mediante relação $|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{\Sigma}_z \omega_1 t/2} |\phi_t\rangle$, obtém-se,

$$|\psi_t\rangle = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} -ie^{-i3\omega_1 t/2} & (\sin(3\omega_0 t/2) - 3\sin(\omega_0 t/2)) \\ \sqrt{3}e^{-i\omega_1 t/2} & (\cos(3\omega_0 t/2) - \cos(\omega_0 t/2)) \\ -ie^{i\omega_1 t/2} & (\sin(3\omega_0 t/2) + \sin(\omega_0 t/2)) \\ e^{i3\omega_1 t/2} & (\cos(3\omega_0 t/2) + 3\cos(\omega_0 t/2)) \end{pmatrix}. \quad (5.64)$$

A partir disso, calcula-se o produto entre o estado inicial e o estado evoluído no referencial do laboratório. Dessa maneira, tem-se,

$$\langle\psi_0|\psi_t\rangle = \frac{e^{i3\omega_1 t/2}}{4} \left[\cos\left(\frac{3}{2}\omega_0 t\right) + 3\cos\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) \right]. \quad (5.65)$$

Portanto, a fidelidade do estado quântico evoluído no referencial do laboratório em relação ao estado inicial é expressa como,

$$F(t) = \frac{1}{16} \left[\cos\left(\frac{3}{2}\omega_0 t\right) + 3\cos\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) \right]^2. \quad (5.66)$$

Por outro lado, deseja-se analisar a incerteza da energia no referencial do laboratório. Inicia-se calculando o valor médio da energia nesse

referencial,

$$\begin{aligned}\langle \psi_t | \hat{H}_t | \psi_t \rangle &= \langle \phi_t | \hat{U}_R^\dagger(t) \hat{H}_t \hat{U}_R(t) | \phi_t \rangle, \\ &= \langle \phi_t | \hat{H}_G | \phi_t \rangle + \frac{\hbar\omega_p}{2} \langle \phi_t | \hat{\Sigma}_z | \phi_t \rangle.\end{aligned}\quad (5.67)$$

Seguidamente, a energia quadrática média é,

$$\begin{aligned}\langle \psi_t | \hat{H}_t^2 | \psi_t \rangle &= \langle \phi_t | (\hat{U}_R^\dagger(t) \hat{H}_t \hat{U}_R(t))^2 | \phi_t \rangle, \\ &= \langle \phi_t | \hat{H}_G^2 | \phi_t \rangle + \frac{\hbar^2\omega_p^2}{4} \langle \phi_t | \hat{\Sigma}_z^2 | \phi_t \rangle + \frac{\hbar\omega_p}{2} \langle \phi_t | \{ \hat{H}_G, \hat{\Sigma}_z \} | \phi_t \rangle.\end{aligned}\quad (5.68)$$

Em virtude dessas duas grandezas físicas e de acordo à condição de ressonância $\Delta \approx 0$, a variância da energia no referencial do laboratório pode ser expressa como,

$$(\Delta H_t)^2 = (\Delta H_G)^2 + \frac{\hbar^2\omega_1^2}{4} (\Delta \Sigma_z)^2 + \frac{\hbar^2\omega_0\omega_1}{4} \langle \phi_t | \{ \hat{\Sigma}_x, \hat{\Sigma}_z \} | \phi_t \rangle. \quad (5.69)$$

Segundo esse resultado, os dois primeiros termos correspondem no referencial girante à variância da energia, e a variância da projeção do spin no eixo \hat{z} , respectivamente. Devido a $\omega_1 \gg \omega_0$, então, pode ser garantido que a incerteza da energia no referencial do laboratório é muito maior que incerteza no referencial girante.

Para contrastar esse resultado, calcula-se o valor médio da energia no referencial girante $\langle \phi_0 | \hat{H}_G | \phi_0 \rangle = 0$, devido à definição do estado inicial na base dos autoestados girante, onde é uma superposição homogênea entre autoestados com o mesmo módulo de energia eq.(5.59). Além disso, a energia quadrática média $\langle \phi_0 | \hat{H}_G^2 | \phi_0 \rangle = 3\hbar^2\omega_0^2/4$. Por conseguinte, a incerteza da energia do estado quântico no referencial girante é,

$$\Delta H_G = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar\omega_0. \quad (5.70)$$

Portanto, pode-se afirmar que a incerteza da energia do estado quântico no referencial girante é muito menor que sua contrapartida no referencial do laboratório $\Delta H_G \ll \Delta H_t$. Isso se deve principalmente à alta taxa de precessão apresentada pelo momento magnético no referencial do laboratório, sendo esse movimento removido através da transformação unitária de rotação $\hat{U}_R(t)$. Dessa forma, consegue-se uma dinâmica quântica com menor rapidez no referencial girante.

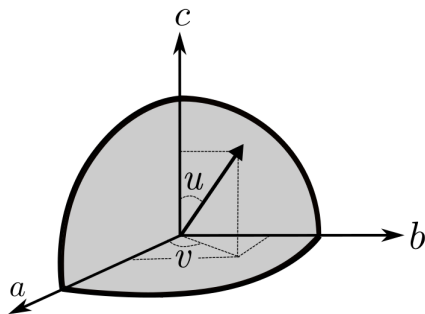


Figura 5.11: Primeiro octante da esfera de raio $\sqrt{1-F(t)}$.

5.4.1 Problema do mínimo tempo de evolução quântico

Desejando realizar uma comparativa justa das previsões obtidas através do critério MT estendido e do método da equação transcendente, sendo essa escrita como,

$$0 = \arccos \sqrt{F_G(t)} - \frac{\Delta H_G t}{\hbar}, \quad (5.71)$$

será assumido o conhecimento completo da incerteza da energia apresentada pelo estado quântico em cada referencial eq.(5.69) e eq.(5.70). Em contraste, ignorar-se-á o conhecimento da dinâmica do estado quântico no referencial girante, pois resolveria a dinâmica completa do estado quântico no referencial do laboratório. Por esse motivo, apresenta-se uma maneira de estimar a fidelidade quântica do estado evoluído no referencial girante em função da fidelidade atingida pelo estado evoluído no referencial do laboratório. O estado evoluído pode ser expresso mediante uma combinação linear de estados que compõem uma base completa respeito à dimensão do hamiltoniano do laboratório. Dessa forma, tem-se,

$$|\psi_t\rangle = \sqrt{F(t)}|\psi_0\rangle + a e^{i\alpha}|\psi_1\rangle + b e^{i\beta}|\psi_2\rangle + c e^{i\gamma}|\psi_3\rangle, \quad (5.72)$$

onda α , β e γ são as fases relativas com respeito ao estado inicial. De acordo com a condição de normalização do estado, tem-se a seguinte expressão $F(t) + a^2 + b^2 + c^2 = 1$, podendo ser interpretada geometricamente como a equação de uma esfera de raio $\sqrt{1-F(t)}$. Em virtude disso, os valores de a , b e c podem ser parametrizados em relação às variáveis $u, v \in [0, \pi/2]$, como apresenta a Figura 5.11, através das

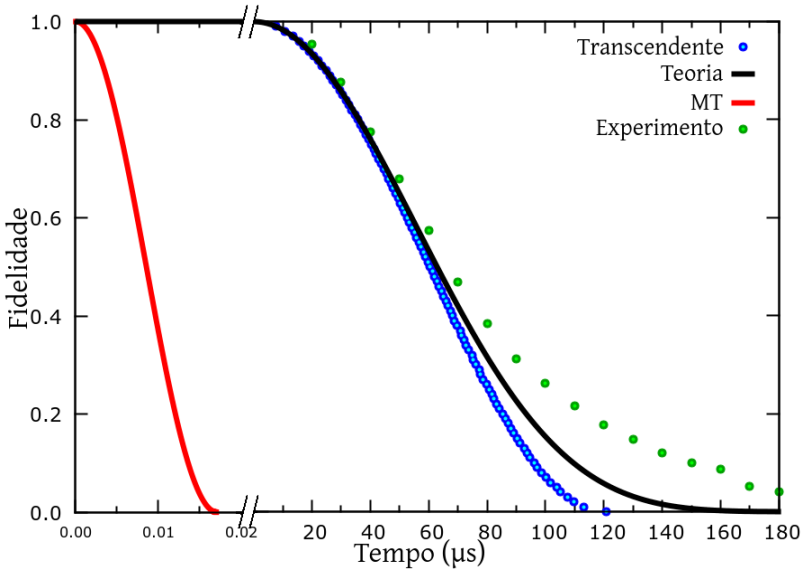


Figura 5.12: Gráfico comparativo entre os diferentes resultados obtidos segundo o método da equação transcendente e o critério de Mandelstam-Tamm estendido, segundo a dinâmica teórica e experimental do estado quântico no referencial do laboratório.

relações,

$$\begin{aligned}
 a &= \sqrt{1-F(t)} \sin u \cos v, \\
 b &= \sqrt{1-F(t)} \sin u \sin v, \\
 c &= \sqrt{1-F(t)} \cos u.
 \end{aligned}
 \tag{5.73}$$

Em relação ao estado quântico inicial, os outros três estados ortogonais podem ser obtidos mediante o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, assumindo quaisquer três vetores da base computacional de dimensão 4 para completar o conjunto de quatro vetores a serem ortogonalizados. Devido que o estado quântico no referencial girante pode ser expresso como $|\phi_t\rangle = \hat{U}_R^\dagger(t)|\psi_t\rangle$, então a fidelidade do estado quântico no referencial girante em função da fidelidade do estado do sistema no

referencial do laboratório pode ser expressa da seguinte maneira,

$$F_G = \left| \sqrt{F(t)} \langle \phi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \phi_0 \rangle + a e^{i\alpha} \langle \phi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \phi_1 \rangle + b e^{i\beta} \langle \phi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \phi_2 \rangle + c e^{i\gamma} \langle \phi_0 | \hat{U}_t^\dagger | \phi_3 \rangle \right|^2. \quad (5.74)$$

Essa estimativa de F_G mostra a dependência com a fidelidade no referencial girante, dos estados ortogonais, seus coeficientes e as fases relativas associadas a cada um desses em relação ao estado inicial. Em consequência, desejando calcular a primeira raiz cronológica da equação transcendente para um determinado valor de fidelidade do laboratório, é preciso realizar uma varredura sobre o conjunto completo de parâmetros que compõem a estimativa da fidelidade no referencial girante. Repetindo o mesmo processo para todos os valores de $F(t)$, consegue-se representar na Figura 5.12 as previsões do mínimo tempo de evolução segundo o método da equação transcendente, e compará-las com o critério MT estendido, sendo que esse último prevê um tempo aproximadamente 10^4 vezes menor para o estado ortogonal, em relação à dinâmica teórica do estado quântico e dos diferentes dados experimentais obtidos no referencial girante da evolução do estado quântico inicial de spin 3/2 do núcleo de ^{23}Na presente em sulfato de dodecilo de sódio em um cristal líquido liotrópico, preparado com 21,3% em peso de sulfato de dodecilo de sódio, 3,7% em peso de decano, e 75% em peso de água deuterada [57]. Em virtude do bom controle experimental respeito à coerência quântica do estado e da precisão na sua evolução, pode-se afirmar que a transformação entre os referenciais é unitária dentro da escala de tempo da evolução. Além disso, os parâmetros do campo magnético $\omega_0 = 15.000,0$ rad/s e $\omega_1 = 105.850.000,0$ rad/s.

Finalmente, apresenta-se na Figura 5.13 uma representação geométrica de um sistema quântico de quatro níveis com o objetivo de visualizar a dinâmica do estado do sistema no referencial girante. Podendo ser apreciado o percurso feito pela dinâmica do estado inicial, e notando que essa difere do menor caminho possível até seu estado ortogonal de maior energia.

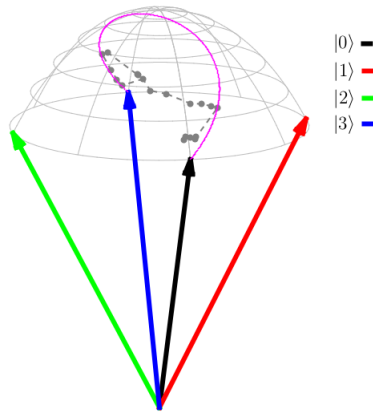


Figura 5.13: A curva lilá corresponde à dinâmica teórica do estado no referencial girante, e a linha tracilhada cinza com pontos representam os diferentes dados experimentais, visualizados nessa representação geométrica de um sistema quântico de quatro níveis, denominada *Tetrapous*, cujo significado do grego é quatro patas. Cada vetor da base canônica pertence à calota esférica de raio unitário. Clique [aqui](#) para ver o vídeo em YouTube.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

De acordo com a análise apresentada para um elétron em um campo magnético uniforme e segundo a definição do seu estado inicial como sendo uma superposição entre dois autoestados de igual probabilidade pertencentes a níveis energéticos diferentes, pode-se concluir uma maneira de conectar dois espaços físicos próprios desse sistema quântico: o espaço de Hilbert e o espaço das coordenadas espaço-temporal. Isso foi possível mediante o cálculo da posição média do elétron pertencente a cada estado quântico e o cálculo do mínimo tempo de evolução necessário pelo sistema para transicionar do estado inicial até o estado ortogonal.

Adicionalmente, afirma-se de modo geral, não qualquer caso de superposição entre autoestados fornece mudanças na distância radial média do elétron com relação à origem do sistema de coordenadas. Apenas aqueles casos de superposições em que os autoestados apresentam a mesma projeção de momento angular orbital na direção \hat{z} e a mesma orientação de spin. Observando em primeira instância que a rapidez média apresentada pelo deslocamento radial do elétron aumenta na medida em que os autoestados da superposição possuem números quânticos mais próximos, sendo as superposições que apresentam a maior rapidez quando os autoestados são vizinhos próximos.

Depois de ter analisado quanticamente vários casos de superposição entre autoestado do elétron quando esse acha-se sobre a presença de uma campo magnético muito forte, pode-se afirmar que a descrição mais correta para a dinâmica dessa partícula é a estabelecida

pela teoria de Dirac, devido a levar em consideração os efeitos relativísticos relevantes para a análise nos casos extremos de um campo magnético forte, um momento linear do elétron grande, e a energia da massa em repouso do próprio elétron.

Além disso, permite obter um comportamento assintótico ou limitante superior para a rapidez com que a posição radial média do elétron se desloca, sendo essa menor à velocidade da luz no vácuo, no lapso do menor tempo dessa transição obtido mediante o uso do mínimo tempo de evolução quântico, sendo esse um limite natural bem aceito para a evolução de um sistema quântico independente do tempo. Por um lado, esses resultados contrastam fortemente com a descrição realizada via equação de Schrödinger, onde a rapidez média pode atingir valores superiores a esse limite relativístico.

Por outro lado, desejando obter previsões mais próximas do mínimo tempo de evolução para o estado de um sistema quântico dependente do tempo e de dinâmica unitária, nesse trabalho apresentou-se uma maneira de melhorar as previsões do critério MT estendido mediante a aplicação de uma transformação unitária, sobre a condição que essa permita a descrição do sistema quântico em um novo referencial onde a incerteza da energia seja menor em relação a sua contrapartida no referencial do laboratório. Devido à importância que apresenta a incerteza da energia para o critério MT estendido e segundo seu significado geométrico, a implementação de uma transformação unitária sobre essa condição permitiu obter uma dinâmica quântica menos rápida e, portanto, a razão entre a distância geodésica e a rapidez média do critério MT estendido não resultou ser tão pequena. Com base nesse raciocínio, analisou-se o critério MT estendido no novo referencial, estimando a fidelidade do estado quântico nesse referencial em função da fidelidade apresentada pelo estado no referencial do laboratório. Estabelecendo a saturação da desigualdade do critério MT estendido no referencial girante, propôs-se transformá-lo em uma equação transcendente. Dessa forma, quando essa equação for resolvida somente ao considerar as primeiras raízes cronológicas em relação à fidelidade quântica do estado no referencial do laboratório, pôde-se obter uma previsão do mínimo tempo de evolução do estado inicial puro até o estado evoluído com um dada fidelidade muito mais próxima ao tempo gasto pela evolução real, em relação às previsões prematuras obtidas no referencial do laboratório.

Portanto, pode-se concluir que o método da equação transcendente fornece um aperfeiçoamento da previsão do mínimo tempo de evolução para sistema quânticos dependentes do tempo e de dinâmica

unitária.

Algumas das perspectivas de trabalho a serem desenvolvidas são: a análise da influência da métrica do espaço-tempo no problema do mínimo tempo de evolução, e a utilização de hamiltonianos efetivos para a determinação do mínimo tempo de evolução, podendo ser essa uma maneira mais fácil de poder estimar a incerteza da energia [59,60].

Apêndice A

Critérios do Mínimo Tempo de Evolução Quântico

O quão rápido pode evoluir um sistema quântico? Essa é a pergunta essencial em diferentes áreas da física quântica na procura do mínimo tempo de duração de certo processo em particular. Nesse capítulo apresenta-se a obtenção analítica do mínimo tempo que precisa um sistema quântico fechado para evoluir desde um estado inicial por meio de uma dinâmica unitária até atingir um estado ortogonal ao inicial.

A.1 Critério de Mandelstam-Tamm

Partindo da relação de incerteza entre o operador de posição \hat{q} e o operador momento linear \hat{p} ,

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \begin{aligned} \Delta q &= \sqrt{\langle \hat{q}^2 \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2}, \\ \Delta p &= \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Onde Δq e Δp são as respectivas incertezas. Podendo considera-se na mecânica quântica uma relação similar entre a energia e o tempo sendo essa uma situação completamente diferente pelo fato que o tempo é considerado um parâmetro característico na dinâmica própria de todo sistema físico. Tentando obter uma expressão mais geral do princípio de incerteza no formalismo de Schrödinger, parte-se do conhecimento

que a energia total de um sistema físico isolado é um valor constante e bem definidos, isso é simplesmente consequente à lei da conservação da energia na mecânica quântica. Seja no caso geral onde tem-se duas grandezas físicas representadas pelos operadores hermitianos \hat{R} e \hat{S} . A relação de incerteza entre eles é,

$$\Delta S \Delta R \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{S}, \hat{R}] \rangle \right|, \quad \Delta S = \sqrt{\langle (\hat{S} - \langle \hat{S} \rangle)^2 \rangle}. \quad (\text{A.2})$$

Em relação à equação de movimento de Heisenberg para o operador \hat{R} ,

$$\frac{\partial \hat{R}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{R}, \hat{H}]. \quad (\text{A.3})$$

Onde \hat{H} o hamiltoniano independente do tempo do sistema em questão. Definindo $\hat{S} \equiv \hat{H}$ na eq.(A.2) e usando a equação anterior obtém-se,

$$\Delta H \Delta R \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{H}, \hat{R}] \rangle \right|, \quad \frac{\partial R}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{R}]. \quad (\text{A.4})$$

Portanto a relação de incerteza resulta ser,

$$\Delta H \Delta R \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\partial \langle \hat{R} \rangle}{\partial t} \right|. \quad (\text{A.5})$$

Essa relação de incerteza geral fornece a conexão entre a incerteza da energia total do sistema isolado ΔH , em relação à incerteza de uma grandeza dinâmica ΔR através da sua própria taxa de variação temporal. Em alguns casos é conveniente definir Δt como o tempo que lhe leva ao valor médio de cada grandeza mudar em uma quantidade igual à sua incerteza. Por tal motivo Δt poderia ser chamado como “incerteza do tempo”. Com base àquilo muda-se $\hat{R} \rightarrow t$,

$$\Delta H \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \begin{cases} \Delta H \neq 0, \\ \Delta H \neq \infty. \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Consequentemente poder-se-á dizer que uma grandeza dinâmica não apresenta mudança se a sua incerteza permanece igual a zero (i.e. espectro discreto), mas se o seu valor médio não é constante, significa que valores pequenos de Δt , a incerteza ΔR mudará mais rápido que ela mesma \hat{R} .

Exemplo:

Seja um sistema quântico qualquer caracterizado por apresentar as suas linhas espectrais com largura igual a ΔH . Desejando calcular a evolução temporal da população dada a condição inicial: o estado do sistema $|\psi_0\rangle$ inicialmente acha-se totalmente populado. Denotando o operador projeção do estado inicial como \hat{L} . Seja $|\psi\rangle$ o estado em um tempo posterior, define-se a população no estado inicial da seguinte maneira,

$$\hat{L}|\psi\rangle = \left(|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\right)|\psi\rangle, \quad \langle\psi_0|\psi\rangle = \int \psi_0^* \psi \, dx. \quad (\text{A.7})$$

Conhecendo as propriedades que caracterizam ao operador projeção¹ e os seus valores próprios, onde só um desses valores próprios é igual a um, com isso poder-se-á calcular o valor médio do operador $\langle\hat{L}\rangle$, significando dessa modo a probabilidade de achar o sistema no estado inicial $|\psi_0\rangle$, evidentemente $0 \leq \langle\hat{L}(t)\rangle \leq 1$. A incerteza do operador projetor é,

$$\Delta L = \sqrt{\langle\hat{L}^2\rangle - \langle\hat{L}\rangle^2} = \sqrt{\langle\hat{L}\rangle - \langle\hat{L}\rangle^2}. \quad (\text{A.8})$$

A relação de incerteza (A.5) entre o operador projeção e o hamiltoniano resulta da seguinte maneira,

$$\Delta H \sqrt{\langle\hat{L}\rangle - \langle\hat{L}\rangle^2} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\partial\langle\hat{L}\rangle}{\partial t} \right|. \quad (\text{A.9})$$

Dado que a desigualdade só depende de uma variável, e sendo assumida a condição inicial $\langle\hat{L}(0)\rangle = 1$, pode-se obter,

$$\frac{2\Delta H dt}{\hbar} \geq \frac{d\langle\hat{L}\rangle}{\sqrt{\langle\hat{L}\rangle}\sqrt{1 - \langle\hat{L}\rangle}}, \quad (\text{similar à derivada do arcsin}(x)). \quad (\text{A.10})$$

Onde,

$$d\sqrt{\langle\hat{L}\rangle} = \frac{d\langle\hat{L}\rangle}{2\sqrt{\langle\hat{L}\rangle}}, \quad \rightarrow \quad d\langle\hat{L}\rangle = 2\sqrt{\langle\hat{L}\rangle} \cdot d\sqrt{\langle\hat{L}\rangle}. \quad (\text{A.11})$$

Substituindo e integrando,

$$\int_0^t \frac{2\Delta H}{\hbar} dt \geq \int_1^{\langle\hat{L}(t)\rangle} \frac{2\sqrt{\langle\hat{L}\rangle} \cdot d\sqrt{\langle\hat{L}\rangle}}{\sqrt{\langle\hat{L}\rangle}\sqrt{1 - \sqrt{\langle\hat{L}\rangle}}}, \quad (\text{A.12})$$

¹O operador satisfaz as seguintes propriedades: i) Operador hermitiano $\hat{L}^\dagger = \hat{L}$,
ii) Idempotência $\hat{L}^2 = \hat{L}$.

Obtendo assim,

$$\frac{\Delta H \cdot t}{\hbar} \geq \arcsin \left(\sqrt{\langle \hat{L}(t) \rangle} \right) - \frac{\pi}{2}, \quad 0 \leq t \leq \frac{\pi \hbar}{2\Delta H}. \quad (\text{A.13})$$

Aplicando o cosseno na equação anterior,

$$\cos \left(\frac{\Delta H \cdot t}{\hbar} \right) \geq \cos \left(\arcsin \left(\sqrt{\langle \hat{L}(t) \rangle} \right) - \frac{\pi}{2} \right) = \sqrt{\langle \hat{L}(t) \rangle} \quad (\text{A.14})$$

Resulta em,

$$\cos \left(\frac{\Delta H \cdot t}{\hbar} \right) \geq \sqrt{\langle \hat{L}(t) \rangle}, \quad \rightarrow \quad \langle \hat{L}(t) \rangle \geq \cos^2 \left(\frac{\Delta H \cdot t}{\hbar} \right). \quad (\text{A.15})$$

Essa última expressão é somente válida no intervalo $0 \leq t \leq \frac{\pi \hbar}{2\Delta H}$. Portanto o mínimo tempo que tardará o sistema em atingir um estado ortogonal em relação ao inicial é,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi \hbar}{2\Delta H}. \quad (\text{A.16})$$

A.2 Critério de Margolus-Levitin

Desde o ponto de vista energético, as evoluções temporais na mecânica quântica são construídas fora da superposição de componentes de frequências (i.e. evolução unitária). Seja $E_{\text{máx}}$ o valor máximo de energia pertencente a certo sistema, espera-se que a frequência na qual esse sistema possa mudar de um estado inicial até um estado ortogonal final seja,

$$\nu_{\perp} \leq \frac{E_{\text{máx}}}{\hbar}. \quad (\text{A.17})$$

Assumindo a energia do estado fundamental $E_0=0$, já que a diferença energética entre os diferentes estados é o realmente relevante para a evolução. Será discutido mais na frente o caso caracterizado através valor médio da energia $\langle \hat{H} \rangle \neq E_{\text{máx}}$, existe um limite similar,

$$\nu_{\perp} \leq \frac{2E}{\hbar}, \quad E_0 = 0. \quad (\text{A.18})$$

Essa expressão pode ser relacionada ao valor da energia de um sistema macroscópico sendo igual ao número máximo de estados ortogonais que o sistema acessará por unidade de tempo. Consequentemente essa será

a taxa máxima que pode ser suportada ao longo da evolução temporal.

Contrariamente ao limite de velocidade quântica obtida por Mandelstam-Tamm, onde o estado quântico possui o valor médio fixo de energia $\langle \hat{H} \rangle$, e incerteza da energética ΔH . Ele apresenta o mínimo tempo de transição entre estados ortogonais dado pela expressão $t \geq \pi \hbar / 2 \Delta H$. Assumindo um sistema quântico fechado no instante inicial $t=0$ acha-se no estado $|\psi_0\rangle$, expressado através de uma combinação linear de todos os possíveis estado acessíveis de energia E_n com função própria $|E_n\rangle$. Sendo a energia média do sistema quântico,

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n. \quad (\text{A.19})$$

Com base àquilo o estado inicial trás a evolução temporal fica expresso,

$$|\psi_t\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |E_n\rangle. \quad (\text{A.20})$$

A superposição do estado evoluído em relação ao estado inicial é,

$$S(t) = \langle \psi_0 | \psi_t \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (\text{A.21})$$

Procurando o mínimo tempo que lhe leva o estado inicial evoluir até se transformar em um estado ortogonal a si mesmo, implica $S(T_{\text{mín}}) = 0$. Analisando a parte real de $S(t)$, nota-se que,

$$\begin{aligned} \text{Re}(S) &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \cos\left(\frac{E_n t}{\hbar}\right), \\ &\geq \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \left[1 - \frac{2}{\pi} \left(\frac{E_n t}{\hbar} + \sin\left(\frac{E_n t}{\hbar}\right) \right) \right], \\ &\geq 1 - \frac{2\langle \hat{H} \rangle t}{\pi \hbar} + \frac{2}{\pi} \text{Im}(S). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Onde foi usada a desigualdade² $\cos x \geq 1 - (2/\pi)(x + \sin x)$, valida para valores de $x \geq 0$. Se para um tempo posterior t , o estado obtido é

²Seja a desigualdade trigonométricas de Kober $\cos(x) \geq 1 - \frac{2}{\pi}x$, valida no intervalo $[0, \pi/2]$. Ao substituir $x \rightarrow x + \sin(x)$, $\cos(x) \geq \cos(x + \sin(x)) \geq 1 - \frac{2}{\pi}(x + \sin(x))$, <http://arxiv.org/abs/1105.0859v1>.

ortogonal ao estado inicial, significa que $S(t) = 0$, portanto a parte real e imaginária de $S(t)$ são nulas simultaneamente.

$$0 \geq 1 - \frac{2\langle \hat{H} \rangle t}{\hbar}. \quad (\text{A.23})$$

Portanto o mínimo tempo para que isso aconteça é obtido na última linha da eq.(A.22). De maneira geral sem assumir a energia fundamental nula tem-se,

$$T_{\text{mín}} = \frac{\pi \hbar}{2(\langle \hat{H} \rangle - E_0)}. \quad (\text{A.24})$$

A.3 Critério de Mandelstam-Tamm Estendido

Anteriormente, apresentou-se a dedução do critério MT mediante a relação de incerteza entre a energia e o tempo. Nesse caso, será considerado ao quadrado da rapidez instantânea $\dot{\mathcal{L}}^2$ associada à menor distância que ligas dois estado quânticos no espaço de Hilbert. Segundo a métrica de Fibini-Study, o ângulo de Bures define a distância entre dois estados quânticos $\mathcal{L} = \arccos(\sqrt{F(\hat{\rho}_0, \hat{\rho}_t)})$, onde a fidelidade de Uhlmann é,

$$F(\hat{\rho}_0, \hat{\rho}_t) = \left[\text{tr} \left\{ \sqrt{\sqrt{\hat{\rho}_0} \hat{\rho}_t \sqrt{\hat{\rho}_0}} \right\} \right]^2. \quad (\text{A.25})$$

Para o caso particular de estados quânticos puros $\hat{\rho}_0 = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ e $\hat{\rho}_t = |\psi_t\rangle\langle\psi_t|$, a fidelidade resulta ser a probabilidade de superposição entre os dois estados $F = |\langle\psi_0|\psi_t\rangle|^2$. De acordo com Braunstein e Caves [32], a distância de Bures entre dois estado quântico infinitesimalmente e estatisticamente distantes $\hat{\rho}$ e $\hat{\rho}' = \hat{\rho} + d\hat{\rho}$ pode ser expressa como,

$$\dot{\mathcal{L}}^2 = \text{tr} \{ d\hat{\rho} \mathcal{R}_\rho^{-1}(d\hat{\rho}) \}, \quad (\text{A.26})$$

onde o superoperador \mathcal{R}^{-1} para um operador \hat{O} , dado o operador densidade $\hat{\rho} = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$ é,

$$\mathcal{R}^{-1}(\hat{O}) = \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\langle j|\hat{O}|k\rangle}{(p_j + p_k)} |j\rangle\langle k|. \quad (\text{A.27})$$

Definindo uma dinâmica quântica unitária, a equação de movimento de von Neumann permite expressar,

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}}_t = [\hat{H}_t, \hat{\rho}_t] = [\hat{H}_t - \langle \hat{H}_t \rangle, \hat{\rho}_t] = [\Delta \hat{H}_t, \hat{\rho}_t], \quad (\text{A.28})$$

onde $\Delta\hat{H}_t$ define a variação do operador hamiltoniano respeito de seu valor médio, sendo esse último um número real positivo. Dessa forma, combinando a eq.(A.28) na eq.(A.26), obtém-se,

$$\begin{aligned}
\dot{\mathcal{L}}^2 &= \text{tr}\{d\hat{\rho}\mathcal{R}_\rho^{-1}(d\hat{\rho})\} = \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k} \frac{(p_j - p_k)^2}{p_j + p_k} |\langle j|\Delta\hat{H}_t|k\rangle|^2, \\
&\leq \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k} \frac{(p_j + p_k)^2}{p_j + p_k} |\langle j|\Delta\hat{H}_t|k\rangle|^2, \\
&= \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k} (p_j + p_k) |\langle j|\Delta\hat{H}_t|k\rangle|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2} \langle (\Delta\hat{H}_t)^2 \rangle.
\end{aligned} \tag{A.29}$$

Segundo esse resultado, a variação instantânea da distância entre os estados vê-se limitada superiormente pela variança da energia do sistema quântico. Em relação à desigualdade, quando for aplicada a raiz quadrada, tem-se,

$$\dot{\mathcal{L}} \leq |\dot{\mathcal{L}}| \leq \frac{1}{\hbar} \sqrt{\langle (\Delta\hat{H}_t)^2 \rangle}. \tag{A.30}$$

Resolvendo a desigualdade segundo as condições iniciais e finais mediante a integração, obtém-se,

$$\frac{1}{t} \int_0^{\mathcal{L}(\psi_0, \psi_t)} d\mathcal{L} \leq \frac{1}{t\hbar} \int_0^t \sqrt{\langle (\Delta\hat{H}_{t'})^2 \rangle} dt', \tag{A.31}$$

Dessa forma, obtém-se a seguinte desigualdade,

$$t \geq \frac{\hbar \arccos(|\langle \psi_0 | \psi_t \rangle|)}{\overline{\Delta H}}, \quad \overline{\Delta H} = \frac{1}{t} \int_0^t \sqrt{\langle \hat{H}_{t'}^2 \rangle - \langle \hat{H}_{t'} \rangle^2} dt', \tag{A.32}$$

onde $\overline{\Delta H}$ é a média temporal da incerteza da energia apresentada pelo estado quântico no instante t . Portanto, essa desigualdade corresponde ao critério de Mandelstam-Tamm estendido para Hamiltonianos dependentes do tempo, sendo o estado evoluído definido mediante uma valor de fidelidade diferente à ortogonal.

Apêndice B

Posição Quadrática Média

A idéia principal nesse apêndice é provar a equivalência ao expressar as funções de onda nas coordenadas polares e nas coordenadas cartesianas no cálculo da distância quadrática média (i.e. $\langle \varrho^2 \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle$). Seja o número quântico principal do oscilador ($n=2$), há três possíveis valores de momento angular ($m_l=2, 0, -2$). As autofunções associadas a ($m_l=-2$) e ($m_l=2$) só diferenciam-se por um fator de fase. A implementação das coordenadas polares leva a caracterizar o autoestado através dos números quânticos (n, m_l), em contrapartida (n_x, n_y) nas coordenadas cartesianas. A relação entre as duas notações é: ($n=n_x+n_y$) e ($m_l=n_x-n_y$). Portanto a autofunção $F_{2,0}(\varrho, \varphi)$ é equivalente a $F_{1,1}(x, y)$, e

$F_{2,2}(\varrho, \varphi)$ é equivalente a $F_{2,0}(x, y)$.

$$\begin{aligned}
 \langle \varrho^2 \rangle_{2,0} &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} [(\beta\varrho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2} \varrho^2 \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} [(\beta\varrho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2} \varrho \, d\varrho \, d\varphi, \\
 &= 2 \int_0^{\infty} \beta^2 \varrho^3 [(\beta\varrho)^2 - 1]^2 e^{-\beta^2 \varrho^2} \, d\varrho, \\
 &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} (\beta\varrho)^3 [(\beta\varrho)^4 - 2(\beta\varrho)^2 + 1] e^{-\beta^2 \varrho^2} \, d\varrho, \\
 &= \frac{2}{\beta} \int_0^{\infty} [(\beta\varrho)^7 - 2(\beta\varrho)^5 + (\beta\varrho)^3] e^{-\beta^2 \varrho^2} \, d\varrho, \\
 &= \frac{1}{\beta^2} (\Gamma(4) - 2\Gamma(3) + \Gamma(2)) = \frac{3}{\beta^2}.
 \end{aligned}
 \tag{B.1}$$

Sendo a função em coordenadas cartesianas $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{\beta}{2\sqrt{\pi}}} e^{-\beta^2 x^2 / 2} 2(\beta x)$.

Nesse caso o função em x e em y são iguais, só calcula-se,

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta}{2\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 x^2} 4(\beta^2 x^4) \, dx, \\
 &= \frac{2}{\beta^2 \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta x)^4 e^{-\beta^2 x^2} \, dx, \\
 &= \frac{2}{\beta^2 \sqrt{\pi}} \Gamma(5/2) = \frac{3}{2\beta^2} = \langle y^2 \rangle_1.
 \end{aligned}
 \tag{B.2}$$

Portanto, $\langle \varrho^2 \rangle_{2,0} = \langle x^2 \rangle_1 + \langle y^2 \rangle_1$.

De maneira similar,

$$\begin{aligned}
 \langle \varrho^2 \rangle_{2,2} &= \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} (\beta \varrho)^2 e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2} e^{-i2\varphi} \varrho^2 \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} (\beta \varrho)^2 e^{-\beta^2 \varrho^2 / 2} e^{i2\varphi} \varrho d\varrho d\varphi, \\
 &= \int_0^\infty \beta^2 \varrho^3 (\beta \varrho)^4 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho, \\
 &= \frac{1}{\beta} \int_0^\infty (\beta \varrho)^7 e^{-\beta^2 \varrho^2} d\varrho = \frac{1}{2\beta^2} \Gamma(4) = \frac{3}{\beta^2}.
 \end{aligned}
 \tag{B.3}$$

Sendo $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{\beta}{8\sqrt{\pi}}} e^{-\beta^2 x^2 / 2} (4(\beta x)^2 - 2)$, $\psi_0(y) = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}} e^{-\beta^2 x^2 / 2}$.

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta x^2}{8\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 x^2} [16(\beta x)^4 - 16(\beta x)^2 + 4] dx, \\
 &= \frac{1}{8\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} [16(\beta x)^6 - 16(\beta x)^4 + 4(\beta x)^2] e^{-\beta^2 x^2} dx, \\
 &= \frac{1}{8\beta^2\sqrt{\pi}} [16\Gamma(7/2) - 16\Gamma(5/2) + 4\Gamma(3/2)] = \frac{5}{2\beta^2}.
 \end{aligned}
 \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
 \langle y^2 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta y^2}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 x^2 / 2} dy, \\
 &= \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta y)^2 e^{-\beta^2 y^2} dy = \frac{1}{\beta^2\sqrt{\pi}} \Gamma(3/2) = \frac{1}{2\beta^2}.
 \end{aligned}
 \tag{B.5}$$

Portanto, $\boxed{\langle \varrho^2 \rangle_{2,2} = \langle x^2 \rangle_2 + \langle y^2 \rangle_0}$.

Apêndice C

Unidades Naturais

O sistema internacional de Unidades *SI* baseado nas unidades *MKS*, são realmente úteis para medir as grandezas físicas na maioria das aplicações pertencentes aos fenômenos macroscópicos. Quando desejar-se analisar processos da física quântica ou na relatividade, as unidades do *SI* não são as mais apropriadas para expressar os resultados, devido a expressar as constantes físicas sendo números muito grandes ou muito pequenos. Em vista que as constantes físicas fundamentais como a velocidade da luz ($c = 2,99792458 \times 10^{10} \text{kg s}^{-1}$) e a constante de Planck ($\hbar = 6,6260693 \times 10^{-34} \text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$) diferem enormemente em escala, se introduz a noção de um sistema de unidades onde essas constantes fundamentais sejam ($c = \hbar = 1$), isso foi bem aceitado na área da física atômica, nuclear, física de partículas, astrofísica e mais outras, dado a sua simplicidade na análise dimensional devido a expressar todas as grandezas físicas em termos de uma quantidade só (*elétron-volt eV*). Esse sistema de unidades é chamado de *Unidades Naturais*.

Na análise realizada expressou-se as grandezas físicas nas unidades naturais pela sua simplicidade numérica, a seguir apresentam-se algumas relações entre o Sistema Internacional de unidades e as Unidades Naturais,

$$\begin{aligned}c &= 2.99792458 \times 10^8 \text{ [m/s]} \\ \hbar &= 1.054571726(47) \times 10^{-34} \text{ [kg m}^2\text{/s]} \\ 1\text{eV} &= 1.602176565(35) \times 10^{-19} \text{ [kg m}^2\text{/s}^2] \\ \hbar c &= 3.161525 \times 10^{-26} \text{ [kg m}^3\text{/s}^2] = 197.327053 \text{ [MeV fm]}. \end{aligned} \tag{C.1}$$

Unidade	Valor Métrico	Derivação
1eV^{-1} de comprimento	1.9747×10^{-7} [m]	$= (1\text{eV}^{-1})\hbar c$
1eV do massa	1.7825×10^{-35} [kg]	$= (1\text{eV})/c^2$
1eV^{-1} unidade de tempo	6.5823×10^{-16} [s]	$= (1\text{eV}^{-1})\hbar$

O campo magnético expresso nesse sistema de unidade é,

$$\begin{aligned}
 |B| &= \frac{(1\text{eV})^2}{(\hbar c)^{3/2}} = \frac{(1\text{eV})^2}{(197.327053 \text{ MeV fm})^{3/2}}, \\
 &= 3.607615 \times 10^{-13} \left[\frac{\text{eV}^{1/2}}{\text{fm}^{3/2}} \right] \times \left(1.602176 \times 10^{-12} \left[\frac{\text{gm cm}^2}{\text{s}^2 \text{ eV}} \right] \right)^{1/2} \times \left(10^{-13} \left[\frac{\text{cm}}{\text{fm}} \right] \right) \\
 &= 14.440269 [\text{gauss}] = 1.444026 \times 10^{-3} [\text{T}].
 \end{aligned}
 \tag{C.2}$$

Assim, $1\text{eV}^2 = 1.444026 \times 10^{-3}$ [Tesla].

Apêndice D

Resultados Numéricos

Dada a superposição entre dois estados próprios expressos através dos espinores,

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{n,0}(\varrho, \varphi) + U_{n+2,0}(\varrho, \varphi) \right] e^{ip_z z}.$$

n	Rapidez	n	Rapidez	n	Rapidez
0	2.407829E-01	46	2.687545E-01	92	2.694617E-01
2	2.536831E-01	48	2.688125E-01	94	2.694770E-01
4	2.588266E-01	50	2.688660E-01	96	2.694917E-01
6	2.615626E-01	52	2.689156E-01	98	2.695058E-01
8	2.632509E-01	54	2.689616E-01	100	2.695193E-01
10	2.643923E-01	56	2.690043E-01	102	2.695323E-01
12	2.652138E-01	58	2.690443E-01	104	2.695448E-01
14	2.658330E-01	60	2.690816E-01	106	2.695568E-01
16	2.663167E-01	62	2.691166E-01	108	2.695684E-01
18	2.667055E-01	64	2.691494E-01	110	2.695796E-01
20	2.670250E-01	66	2.691803E-01	112	2.695904E-01
22	2.672921E-01	68	2.692094E-01	114	2.696008E-01
24	2.675184E-01	70	2.692369E-01	116	2.696109E-01
26	2.677124E-01	72	2.692629E-01	118	2.696206E-01
28	2.678801E-01	74	2.692876E-01	120	2.696300E-01
30	2.680266E-01	76	2.693109E-01	122	2.696390E-01
32	2.681555E-01	78	2.693331E-01	124	2.696479E-01
34	2.682699E-01	80	2.693542E-01	126	2.696555E-01
36	2.683721E-01	82	2.693742E-01	128	2.696644E-01
38	2.684640E-01	84	2.693934E-01	130	2.696691E-01
40	2.685471E-01	86	2.694116E-01	132	2.696784E-01
42	2.686225E-01	88	2.694291E-01		
44	2.686914E-01	90	2.694458E-01		

Tabela D.1: Superposição entre estados próprios de energia positiva.

n	Rapidez	n	Rapidez	n	Rapidez
0	1.168295E-01	46	1.337390E-01	92	1.343886E-01
2	1.232688E-01	48	1.337913E-01	94	1.344029E-01
4	1.263600E-01	50	1.338396E-01	96	1.344168E-01
6	1.281688E-01	52	1.338845E-01	98	1.344300E-01
8	1.293555E-01	54	1.339262E-01	100	1.344428E-01
10	1.301941E-01	56	1.339652E-01	102	1.344551E-01
12	1.308184E-01	58	1.340017E-01	104	1.344669E-01
14	1.313011E-01	60	1.340358E-01	106	1.344783E-01
16	1.316857E-01	62	1.340679E-01	108	1.344893E-01
18	1.319991E-01	64	1.340981E-01	110	1.344999E-01
20	1.322597E-01	66	1.341266E-01	112	1.345101E-01
22	1.324797E-01	68	1.341535E-01	114	1.345200E-01
24	1.326680E-01	70	1.341789E-01	116	1.345295E-01
26	1.328308E-01	72	1.342030E-01	118	1.345388E-01
28	1.329732E-01	74	1.342258E-01	120	1.345477E-01
30	1.330986E-01	76	1.342475E-01	122	1.345564E-01
32	1.332100E-01	78	1.342682E-01	124	1.345649E-01
34	1.333096E-01	80	1.342878E-01	126	1.345731E-01
36	1.333992E-01	82	1.343066E-01	128	1.345794E-01
38	1.334802E-01	84	1.343245E-01	130	1.345891E-01
40	1.335538E-01	86	1.343416E-01		
42	1.336209E-01	88	1.343579E-01		
44	1.336825E-01	90	1.343736E-01		

Tabela D.2: Superposição entre estados próprios com sinal energético diferente.

Apêndice E

Pacote de Onda Relativístico

A equação de Dirac fornece um conjunto completo de autofunções de energia positiva e negativa. Sendo o caso de uma partícula em repouso, as soluções negativas são associadas à energia da massa em repouso negativa. Os estados de energia negativa são interpretados de maneira diferente, esses possuem energia cinética de carácter negativo, o movimento da partícula é oposto em relação à partícula de energia positiva, a carga elétrica da partícula é de sinal oposta à carga da partícula. Com todas essas características parece ser que aqueles estados não se conseguem evidenciar de maneira natural, mas sem esses a interpretação da equação de Dirac não estaria completa.

Em relação à análise da helicidade do elétron, nota-se que aqueles espinores correspondentes aos autoestados de energia positiva descrevem a partícula com o mesmo sinal energético nas suas duas primeiras componentes e uma partícula de sinal energética oposta nas últimas duas componentes. Analogamente e de maneira inversa, estão expressos os espinores correspondentes aos autoestados de energia negativa.

Com motivo de analisar as contribuições da partícula com sinal energético oposto na descrição quântica relativística, define-se no instante inicial ($t_0 = 0$) um pacote de onda com perfil gaussiano composto por espinores que só apresentará componentes associadas à partícula de energia positivas, fazendo uso das unidades naturais,

expressa-se o pacote como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi d^2)^{3/4}} e^{-r^2/4d^2} e^{i\vec{p}_0 \cdot \vec{r}} U(\vec{p}_0), \quad U(\vec{p}_0) = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Onde d caracteriza a largura do pacote de onda. Por outro lado, de maneira geral representa-se a superposição de espinores de energia positiva e negativa como,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_i \left(A_i(\vec{p}) u_i(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} + B_i(\vec{p}) v_i(\vec{p}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \right). \quad (\text{E.2})$$

Onde A_i é o coeficiente da expansão pertencente ao espinor positivo u_i e B_i ao espinor negativo v_i . Para construir a superposição de um pacote de onda gaussiano, primeiro se expressa esse nas coordenada do momento linear por meio da transformada de Fourier, usando a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2-bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-b^2/4a}$, tem-se,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{p}, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi d^2)^{3/4}} e^{-r^2/4d^2} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}_0) \cdot \vec{r}} U(\vec{p}_0) d\vec{r}, \\ &= (8\pi d^2)^{3/4} e^{-(\vec{p}-\vec{p}_0)^2 d^2} U(\vec{p}_0). \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Dessa maneira resulta fácil associar o perfil gaussiano com o estado em superposição mediante uma série,

$$(8\pi d^2)^{3/4} e^{-(\vec{p}-\vec{p}_0)^2 d^2} U(\vec{p}_0) = \sum_i \left(A_i(\vec{p}) u_i(\vec{p}) + B_i(\vec{p}) v_i(\vec{p}) \right) \quad (\text{E.4})$$

Desejando calcular as amplitudes da série, multiplica-se a equação anterior por $u_i^\dagger(\vec{p})$ ou por $v_i^\dagger(\vec{p})$, em visto que os espinores constituem um conjunto ortonormal entre si, obtém-se assim,

$$\begin{aligned} A_i(\vec{p}) &= (8\pi d^2)^{3/4} e^{-(\vec{p}-\vec{p}_0)^2 d^2} U(\vec{p}_0) u_i^\dagger(\vec{p}), \\ B_i(\vec{p}) &= (8\pi d^2)^{3/4} e^{-(\vec{p}-\vec{p}_0)^2 d^2} U(\vec{p}_0) v_i^\dagger(\vec{p}). \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Nota-se que os coeficientes apresentam um perfil gaussiano. Para compreender as consequência de assumir esse tipo de pacote de onda, será analisado fora da simplicidade $\vec{p}=0$ o caso onde apresenta-se as principais modificações, $\vec{p} \neq 0$. Em visto à definição de U na eq.(E.1) associado aos espinores de partículas livres u_i e v_i , tem-se dessa maneira a razão entre os coeficientes da expansão,

$$\frac{B_i(\vec{p})}{A_i(\vec{p})} \propto \frac{|\vec{p}|}{E + m_0}, \quad E = \sqrt{m_0^2 + p^2}. \quad (\text{E.6})$$

Com base à expressão obtida, nota-se que a contribuição dos termos de energia negativa no pacote de onda gaussiano tornam-se irrelevantes quando $|\vec{p}| \ll m_0$, então $B_i(\vec{p}) \ll A_i(\vec{p})$. No caso contrário, se os termos de energia negativa são relevantes para a descrição quântica, tem-se $|\vec{p}| \gg m_0$, então $B_i(\vec{p}) \approx A_i(\vec{p})$. Analisando as duas condições anteriores em relação à largura do pacote e o comprimento de onda de Compton do elétron $\lambda_C = 1/m$, pode-se entender melhor sob quais condições os termos de energia negativa são relevantes para a descrição quântica. Em particular, se a largura do pacote é muito maior que o comprimento de Compton e escrevendo os recíprocos dessas grandezas $d^{-1} \ll m_0$. Essa condição se pode expressar como $|\vec{p}| \lesssim d^{-1} \ll m_0$. Por outro lado, se a largura do pacote é muito menor que o comprimento de Compton, tem-se $d^{-1} \gg m_0$. Isso implica que $|\vec{p}| \gtrsim d^{-1} \gg m_0$. Portanto, pode-se concluir que as contribuições dos termos de energia negativa são relevantes para a descrição quântica em dois casos, quando o pacote de onda apresenta um momento linear muito grande ou quando o pacote acha-se fortemente confinado. Caso contrário, as contribuições desses termos serão irrelevantes.

Apêndice F

Pacote de Onda Gaussiano

Apresenta-se a análise do um elétron livre descrito mediante um pacote de onda de perfil gaussiano, ver figura F.1. O motivo principal dessa descrição é compreender melhor a localização espacial da partícula em contraste com a aproximação de onda plana. Dessa maneira se pode apreciar o deslocamento da posição média do elétron no transcorrer do tempo.

Assumindo o movimento unidimensional do elétron livre ao longo da direção \hat{z} , define-se no instante inicial $t=0$ o pacote de onda com momento linear médio p_0 como,

$$\psi_z(z) = \frac{1}{(2\pi d^2)^{1/4}} e^{-z^2/4d^2} e^{ip_0 z/\hbar}. \quad (\text{F.1})$$

Fazendo uso do sistema de unidades naturais para facilitar os cálculos que serão aprestados ($\hbar = c = 1$), deseja-se analisar a composição do pacote gaussiano em relação às componentes de momento linear axial, para aquilo expressa-se o pacote no espaço do momento linear mediante a transformada de Fourier,

$$\begin{aligned} \phi_z(p_z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}(2\pi d^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/4d^2} e^{ip_0 z} e^{-ip_z z} dz, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}(2\pi d^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/4d^2} e^{-i(p_z - p_0)z} dz. \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

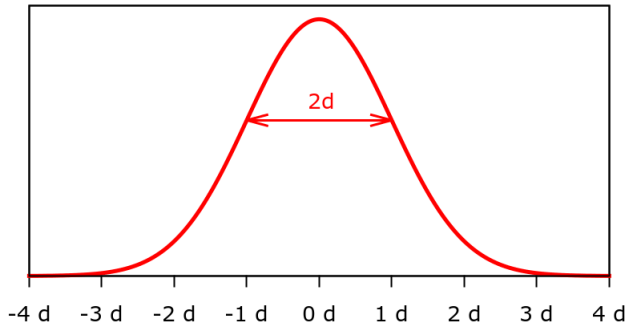


Figura F.1: Densidade de probabilidade do pacote de onda de perfil gaussiano.

Dada a integração gaussiana definida,

$$\mathbf{I}_0) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2-bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}, \quad (\text{F.3})$$

obtém-se assim,

$$\phi(p_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (8\pi d^2)^{1/4} e^{-(p_z-p_0)^2 d^2}. \quad (\text{F.4})$$

Vale a pena enfatizar que o espaço do momento linear corresponde ao espaço recíproco do espaço das coordenadas espaciais, implicando assim que, uma forte localização espacial da partícula está associado um grande desconhecimento do momento linear exato que essa possui, isso está diretamente relacionado ao princípio de incerteza de Heisenberg. Em contrapartida a onda plana estabelece o total desconhecimento da localização da partícula, mas um conhecimento exato do seu momento linear.

Já tendo a expressão do pacote gaussiano no espaço do momento linear, a equação de Schrödinger para uma partícula livre no espaços do momentos é,

$$\frac{\hat{p}_z^2}{2m_0} \phi(p_z) = i\hbar \frac{\partial \phi(p_z)}{\partial t}. \quad (\text{F.5})$$

Em consequência se pode expressar o pacote gaussiano no espaço do momento linear em função do tempo, mediante a ação do operador

unitário de evolução temporal sendo esse uma fase associada à energia cinética da partícula,

$$\phi(p_z, t) = \phi(p_z) e^{-i \frac{p_z^2}{2m_0} t}. \quad (\text{F.6})$$

Em relação àquilo, o valor da energia média do elétron no tempo t é,

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_z \rangle &= \frac{1}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p_z, t) \hat{p}_z^2 \phi(p_z, t) dp_z, \\ &= \frac{(8\pi d^2)^{1/2}}{\sqrt{2\pi} 2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} p_z^2 e^{-2(p_z - p_0)^2 d^2} dp_z. \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

Rearranjando os termos da exponencial tem-se,

$$\langle \hat{H}_z \rangle = \frac{d}{\sqrt{2\pi} m_0} e^{-2p_0^2 d^2} \int_{-\infty}^{+\infty} p_z^2 e^{-2d^2 p_z^2 + 4p_0 d^2 p_z} dp_z. \quad (\text{F.8})$$

Dada a integração gaussiana definida,

$$\mathbf{I}_2) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2 - bx} dx = \frac{\sqrt{\pi}(2a+b^2)}{4a^{5/2}} e^{b^2/4a}, \quad (\text{F.9})$$

obtém-se assim a energia cinética média do elétron,

$$\langle \hat{H}_z \rangle = \frac{1}{8m_0 d^2} + \frac{p_0^2}{2m_0}. \quad (\text{F.10})$$

Realizando a transformada de Fourier inversa ao pacote obtido na eq.(F.6), consegue-se expressar o pacote gaussiano no espaço da posição em função do tempo,

$$\begin{aligned} \psi_z(z, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p_z) \exp \left\{ i \left(p_z z - \frac{p_z^2}{2m_0} t \right) \right\} dp_z, \\ &= \frac{(8\pi d^2)^{1/4}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(p_z - p_0)^2 d^2} \exp \left\{ i \left(p_z z - \frac{p_z^2}{2m_0} t \right) \right\} dp_z, \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

Organizando os termos da função exponencial segundo às suas potências,

$$\psi_z(z, t) = \frac{(8\pi d^2)^{1/4}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ - \left(d^2 + \frac{it}{2m_0} \right)^2 p_z^2 + (2p_0 d^2 + iz)p_z - p_0^2 d^2 \right\} dp_z, \quad (\text{F.12})$$

fazendo uso da integrais gaussianas eq.(F.3) e (F.9), obtém-se assim o pacote de onda gaussiano espacial para qualquer instante de tempo t , posterior ao tempo inicial,

$$\psi_z(z, t) = \frac{(8\pi d^2)^{1/4} e^{-p_0^2 d^2}}{2\sqrt{\pi} \left(d^2 + \frac{it}{2m_0} \right)^{1/2}} \exp \left\{ \frac{-z^2 + 4p_0 d^2 (p_0 d^2 + iz)}{4 \left(d^2 + \frac{it}{2m_0} \right)} \right\}. \quad (\text{F.13})$$

Calculando a densidade de probabilidade axial do elétron,

$$|\psi_z(z, t)|^2 = \frac{d e^{-p_0^2 d^2}}{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}} \exp \left\{ \frac{-z^2 d^2 + 4p_0 d^2 \left(p_0 d^4 + \frac{zt}{2m_0} \right)}{2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\}, \quad (\text{F.14})$$

nota-se que essa apresenta dispersão no tempo, em outras palavras, a partícula inicialmente localizada espalha-se até achar-se completamente deslocalizada em um tempo muito grande.

A seguir, prova-se a normalização da densidade de probabilidade do elétron livre descrito pelo pacote de onda gaussiano,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_z(z, t)|^2 dz &= \frac{d e^{-p_0^2 d^2}}{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ \frac{-z^2 d^2 + 4p_0 d^2 \left(p_0 d^4 + \frac{zt}{2m_0} \right)}{2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\} dz, \\ &= \frac{d e^{-p_0^2 d^2}}{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}} \cdot \frac{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}}{d} \exp \left\{ \frac{p_0^2 d^4 t^2}{m_0^2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\} \\ &= e^{-p_0^2 d^2} \exp \left\{ \frac{2p_0^2 d^6 + \frac{p_0^2 d^2 t^2}{2m_0^2}}{\left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\} = e^{-p_0^2 d^2} \exp \left\{ \frac{2p_0^2 d^2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)}{\left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

Finalmente se apresenta na figura(F.2) o perfil do pacote gaussiano em diferentes instantes de tempo a cada 50eV^{-1} , podendo ser observado claramente a dispersão da densidade de probabilidade axial do elétron.

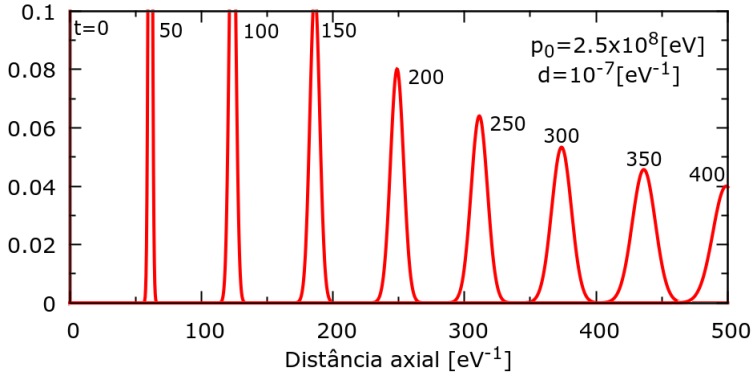


Figura F.2: Perfil do pacote de onda gaussiano para tempos diferentes, o tempo está expresso em eV^{-1} .

Cálculo da posição média do elétron

Com base à análise apresentada anteriormente, deseja-se conhecer a dinâmica do elétron para aquilo será calculado a seguir a sua posição média para qualquer instante de tempo,

$$\begin{aligned}
 \langle z \rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty} z |\psi_z(z, t)|^2 dz, \\
 &= \frac{d e^{-2p_0^2 d^2}}{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2}\right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} z \exp \left\{ \frac{-z^2 d^2 + 4p_0 d^2 \left(p_0 d^4 + \frac{zt}{2m_0}\right)}{2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2}\right)} \right\} dz.
 \end{aligned}
 \tag{F.16}$$

Organizando os termos exponenciais segundo a potência da variável z ,

$$\langle z \rangle_t = \frac{d e^{-p_0^2 d^2} \exp \left\{ 2p_0^2 d^6 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{-1/2} \right\}}{\sqrt{2\pi} \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} z \exp \left\{ \frac{-\frac{d^2}{2} z^2 + \frac{p_0 d^2 t}{m_0^2} z}{\left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)^{1/2}} \right\} dz. \quad (\text{F.17})$$

Fazendo uso da seguinte integral gaussiana,

$$\mathbf{I}_1) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2+bx} dx = \frac{\sqrt{\pi} b e^{b^2/4a}}{2a^{3/2}}, \quad (\text{F.18})$$

obtem-se após de alguns passos algébricos,

$$\begin{aligned} \langle z \rangle_t &= \frac{p_0 t}{m_0} e^{-2p_0^2 d^2} \exp \left\{ \frac{2p_0^2 d^6 + \frac{p_0^2 d^2 t^2}{2m_0^2}}{\left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\}, \\ &= \frac{p_0 t}{m_0} \exp \left\{ \frac{-2p_0^2 d^2 \left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right) + 2p_0^2 d^6 + \frac{p_0^2 d^2 t^2}{2m_0^2}}{\left(d^4 + \frac{t^2}{4m_0^2} \right)} \right\} = \frac{p_0 t}{m_0}. \end{aligned} \quad (\text{F.19})$$

Portanto, a posição média do elétron no eixo \hat{z} resulta apresentar um comportamento linear em função do tempo,

Descrição Relativística

Seja o espinor associado ao estado do elétron quando esse acha-se na presença do campo magnético uniforme ao longo do eixo \hat{z} , com os seguintes número quântico n , m_l e $m_s = 1/2$. Definido no tempo $t_0 = 0$ o elétron com perfil de onda gaussiano na direção axial, o espinor resulta ser,

$$U_{n,m_l}(z, t_0) = N \left(\begin{array}{c} F_{n,m_l} \\ 0 \\ \frac{\hat{p}_z}{(E_{n,m_l} + m_0)} F_{n,m_l} \\ 2i\beta \sqrt{\frac{n+m_l}{2} + 1} \\ \frac{(E + m_0)}{(E + m_0)} F_{n+1,m_l+1} \end{array} \right) \psi(z), \quad (\text{F.20})$$

$$N = \left[1 + \frac{p_z^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)}{(E+m_0)^2} \right]^{-1/2}, \quad E = \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)}. \quad (\text{F.21})$$

O terceiro termo do espinor atuando na função axial resulta ser,

$$\frac{\hat{p}_z}{(E+m_0)}\psi(z) = \frac{-i\partial_z}{(E+m_0)} \frac{e^{-z^2/4d^2} e^{ip_0 z}}{(2\pi d^2)^{1/4}} = \frac{(p_0 + \frac{iz}{2d^2})}{(E+m_0)}\psi(z). \quad (\text{F.22})$$

Assim o espinor fica da seguinte maneira,

$$U_{n,m_l}(z, t_0) = N \begin{pmatrix} F_{n,m_l} \\ 0 \\ \frac{(p_0 + \frac{iz}{2d^2})}{(E+m_0)} F_{n,m_l} \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n+m_l}{2} + 1}}{(E+m_0)} F_{n+1,m_l+1} \end{pmatrix} \psi(z) \quad (\text{F.23})$$

Expressando o espinor no espaço de momento linear mediante a transformada de Fourier,

$$\hat{U}_{n,m_l}(p_z, t_0) = N \begin{pmatrix} F_{n,m_l}\phi(p_z) \\ 0 \\ \frac{p_0 F_{n,m_l}}{(E+m_0)} \phi(p_z) + \frac{i F_{n,m_l}}{2d^2(E+m_0)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z \psi(z) e^{-ip_z z} dz \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n+m_l}{2} + 1}}{(E+m_0)} F_{n+1,m_l+1}\phi(p_z) \end{pmatrix}. \quad (\text{F.24})$$

Fazendo uso da integrais gaussianas definida anteriormente, analisa-se isoladamente a integração do terceiro termo do espinor,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z \exp \left\{ -\frac{z^2}{4d^2} - i(p_z - p_0)z \right\} dz = -4i\sqrt{\pi}(p_z - p_0)d^3 e^{-(p_z - p_0)^2 d^2}. \quad (\text{F.25})$$

Após de alguns passos algébricos obtém-se,

$$\hat{U}_{n,m_l}(p_z, t_0) = N \begin{pmatrix} F_{n,m_l} \\ 0 \\ \frac{p_z}{(E+m_0)} F_{n,m_l} \\ \frac{2i\beta\sqrt{\frac{n+m_l}{2} + 1}}{(E+m_0)} F_{n+1,m_l+1} \end{pmatrix} \phi(p_z). \quad (\text{F.26})$$

A energia média do pacote gaussiano relativístico é analisada no espaço do momento linear considerando todas as componentes de momento linear que contribuem para a construção do pacote, infelizmente não há uma expressão pronta para essa integração,

$$\langle E \rangle_{n, m_l} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)} |\hat{U}_{n, m_l}(p_z, t_0)|^2 dp_z = \left\{ \text{Integração Numérica} \right. \quad (\text{F.27})$$

Onde,

$$|\hat{U}_{n, m_l}(p_z)|^2 = N^2 \left[|F_{n, m_l}|^2 \left(1 + \frac{p_z^2}{(E+m_0)^2} \right) + \frac{2\beta^2(n+m_l+2)}{(E+m_0)^2} |F_{n+1, m_l+1}|^2 \right] |\phi(p_z)|^2 \quad (\text{F.28})$$

Após de integrar na coordenada radial e no ângulo polar obtém-se,

$$|\hat{U}_{n, m_l}(p_z)|^2 = N^2 \left[1 + \frac{p_z^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)}{(E+m_0)^2} \right] |\phi(p_z)|^2. \quad (\text{F.29})$$

Portanto a densidade de probabilidade no espaço do momento linear axial resulta ser,

$$|\hat{U}_{n, m_l}(p_z)|^2 = |\phi(p_z)|^2 \quad (\text{F.30})$$

Assim a energia média do estado (n, m_l) é,

$$\langle E \rangle_{n, m_l} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{m_0^2 + p_z^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)} |\phi(p_z)|^2 dp_z. \quad (\text{F.31})$$

Numericamente pode ser mostrado que a energia média do estado do elétron é igual à expressão de energia relativística quando o comportamento de partícula livre é descrito mediante uma onda plana de momento linear médio p_0 , isso deve-se ao carácter simétrico do pacote de onda gaussiano no espaço de momento linear,

$$\langle E \rangle_{n, m_l} = \sqrt{m_0^2 + p_0^2 + 2\beta^2(n+m_l+2)}. \quad (\text{F.32})$$

Aplicando o operador unitário de evolução temporal, introduz-se uma fase que é proporcional à energia relativística de cada uma das componentes que constituem o pacote. Voltando para o espaço da posição

axial mediante a transformada de Fourier inversa obtém-se,

$$U_{n,m_l}(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} F_{n,m_l} \int_{-\infty}^{+\infty} N\phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \\ 0 \\ F_{n,m_l} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Np_z}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \\ 2i\beta\sqrt{\frac{n+m_l}{2}} + 1 F_{n+1,m_l+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \end{pmatrix} \quad (\text{F.33})$$

Calculando a densidade de probabilidade espacial do elétron,

$$\begin{aligned} |U_{n,m_l}(z,t)|^2 &= \frac{|F_{n,m_l}|^2}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} N\phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2 \\ &+ \frac{|F_{n,m_l}|^2}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Np_z}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2 \\ &+ \frac{2\beta^2(n+m_l+2)}{2\pi} |F_{n+1,m_l+1}|^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{F.34})$$

Dada a densidade de probabilidade espacial do elétron, pode-se obter facilmente a densidade de probabilidade axial ao não depender do estado radial do elétron,

$$\begin{aligned} D_z(z,t) &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} N\phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2 \\ &+ \frac{1}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Np_z}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2 \\ &+ \frac{2\beta^2(n+m_l+2)}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N}{(E+m_0)} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E t)} dp_z \right|^2, \end{aligned} \quad (\text{F.35})$$

Resulta muito complicado analisar o comportamento da densidade de probabilidade axial do elétron em função do tempo devido à grande dificuldade analítica de calcular os valores das integrações. Realizando as integrações numericamente obtém-se o efeito da dispersão da probabilidade, além de um fenômeno puramente relativístico associado à tremida do valor médio da velocidade axial, conhecido na literatura como *zitterbewegung*.

Análise Heurística

A construção de uma expressão heurística que possa reproduzir de maneira confiável os resultados da rapidez do deslocamento radial ao levar em consideração a dilatação temporal e o deslocamento axial do elétron quando esse é definido como a superposição homogênea de dois estados de energia positiva $\psi = (U_{n,0} + U_{n+2,0})/\sqrt{2}$, é o foco central da seguinte análise. Partindo da definição do pacote gaussiano em função do tempo,

$$\psi(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p_z) e^{i(p_z z - E(p_z)t)} dp_z, \quad E = \sqrt{m_0^2 + p_z^2}. \quad (\text{F.36})$$

A velocidade com a qual o centro do pacote desloca-se é,

$$v_g = \left. \frac{dE(p_z)}{dp_z} \right|_{p_0} = \frac{p_0}{\sqrt{m_0^2 + p_0^2}}. \quad (\text{F.37})$$

Nota-se que esse resultado é idêntico à expressão da relatividade restrita para a velocidade das partículas em função do momento linear,

$$p_z = \frac{m_0 v_z}{\sqrt{1 - v_z^2}} \quad \rightarrow \quad v_z = \frac{p_z}{\sqrt{m_0^2 + p_z^2}}. \quad (\text{F.38})$$

Voltando para a velocidade de grupo, nota-se que o denominador é a própria energia do elétron, decide-se mudar o denominador por uma expressão que possua as mesmas unidades de energia e leve em consideração o estado em superposição. A raiz quadrada da energia quadrática média é a melhor opção para reproduzir de maneira muito similar a dependência da velocidade de grupo axial em função do valor médio do momento linear axial,

$$v_g = \left. \frac{p_0}{\sqrt{\langle E^2 \rangle}} \right|_{p_0} = \frac{p_0}{\sqrt{m_0^2 + p_0^2 + 2\beta^2(n+3)}}, \quad (\text{F.39})$$

onde n representa o número quântico principal do estado quântico de menor energia. Portanto, a dilatação temporal do mínimo tempo de evolução resulta ficar expressa de maneira geral,

$$T_{\min} = \frac{T'_{\min}}{\sqrt{1-v_g^2}} = T'_{\min} \left(1 - \frac{p_0^2}{m_0^2 + p_0^2 + 2\beta^2(n+3)} \right)^{-1/2}. \quad (\text{F.40})$$

A rapidez radial média do elétron em função do momento linear axial médio é,

$$\bar{V} = \frac{|\langle \varrho \rangle_{\min} - \langle \varrho \rangle_0|}{T'_{\min}} \sqrt{1 - \frac{p_0^2}{m_0^2 + p_0^2 + 2\beta^2(n+3)}}. \quad (\text{F.41})$$

No caso particular da superposição do **caso 1** onde $n=0$, as rapidez axial calculada numericamente e a expressão heurística eq.(F.39) são comparadas no seguinte gráfico. A grande similaridade da expressão heurística para reproduzir os resultados numéricos da velocidade axial média do elétron mostra que o fator gama modificado heurísticamente, consegue explicar o comportamento decrescente da rapidez radial média a medida que aumento o momento linear axial médio do elétron como consequência da dilatação temporal.

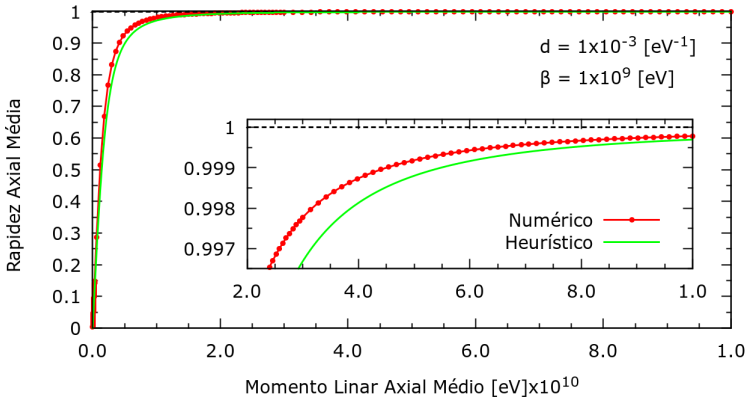


Figura F.3: Rapidez axial média do pacote em função do momento linear médio e a curva heurística.

Bibliografia

- [1] J. D. Bekenstein, *Universal upper bound on the entropy-to-energy ratio for bounded systems*, *Phys. Rev. D* **23**, 287 (1981).
- [2] K. K. Likharev, *Classical and quantum limitations on energy consumption in computation*, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 311 (1982).
- [3] Seth Lloyd, *Quantum-mechanical computers and uncomputability*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 943 (1993).
- [4] Seth Lloyd, *Universal Quantum Simulators*, *Science* **273**, 1073 (1996).
- [5] Seth Lloyd, *Quantum-Mechanical Maxwell's Demon*, *Phys. Rev. A* **56**, 3374 (1997).
- [6] Seth Lloyd, *Ultimate Physical Limits to Computation*, *Nature (London)* **406**, 1047 (2000); *Dynamical Generation of Noiseless Quantum Subsystems* *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3520 (2000).
- [7] Q. A. Turchette, C. J. Hood, W. Lange and H. Mabuchi, *Measurement of Conditional Phase Shifts for Quantum Logic*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4710 (1995).
- [8] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano and D. J. Wineland, *Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4714(1995).
- [9] N. A. Gershenfeld and I. L. Chuang, *Bulk Spin-Resonance Quantum Computation*, *Science* **275**, 350 (1997).
- [10] I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen, X. Zhou, D. W. Leung and S. Lloyd, *Experimental realization of a quantum algorithm*, *Nature* **393**, 143 (1998).

- [11] J. A. Jones, M. Mosca, and R. H. Hansen, *Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer*, *Nature* **393**, 344 (1998).
- [12] I. L. Chuang, N. Gershenfeld and M. Kubinec, *Experimental Implementation of Fast Quantum Searching*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3408 (1998).
- [13] DiCarlo et al., *Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor*, *Nature* **460**, 240 (2009).
- [14] Johnson et al., *Quantum annealing with manufactured spins*, *Nature* **473**, 194 (2011).
- [15] Boixo et al., *Evidence for quantum annealing with more than one hundred qubits*, *Nature Physics* **10**, 218 (2014).
- [16] Lanting et al., *Entanglement in a Quantum Annealing Processor*, *Phys. Rev. X* **4**, 021041 (2014).
- [17] Albash et al., *Reexamining classical and quantum models for the D-Wave One processor*, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **224**, 111 (2015).
- [18] C. Monroe, *Quantum information processing with atoms and photons*, *Nature* **416**, 238 (2002).
- [19] Werner Heisenberg, *Ueber den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen kinematik und mechanik*, *Z. Phys.* **43**, 172 (1927).
- [20] N. Bohr, *The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Theory*, *Nature* **121**, 528 (1928).
- [21] L. Mandelstam and I. G. Tamm, *The uncertainty relation between energy and time in non-relativistic quantum mechanics*, *J. Phys. (URSS)* **9**, 249 (1945).
- [22] J. D. Bekenstein, *Entropy content and information flow in systems with limited energy*, *Phys. Rev. D.* **30**, 1669 (1984).
- [23] J. Uffink and J. Hilgevoord, *Uncertainty principle and uncertainty relations*, *Found. Phys.* **15**, 925 (1985).
- [24] L. Vaidman, *Minimum time for the evolution to an orthogonal quantum state*, *Am. J. Phys.* **60**, 182 (1992).
- [25] J. Uffink, *The rate of evolution of a quantum state*, *Am. J. Phys.* **61**, 935 (1993).

- [26] P. Pfeifer and J. Fröhlich, *Generalized time-energy uncertainty relations and bounds on lifetimes of resonances*, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 759 (1995).
- [27] J. Anandan and Y. Aharonov, *Geometry of Quantum Evolution*, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1697 (1990).
- [28] S. Deffner and E. Lutz, *Energy-time uncertainty relation for driven quantum systems This*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 335302 (2013).
- [29] P. Jones and P. Kok, *Geometric derivation of the quantum speed limit*, *Phys. Rev. A* **82**, 022107 (2010).
- [30] M. M. Taddei, B. M. Escher, L. Davidovich and R. L. de Matos Filho, *Quantum speed limit for physical processes*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 050402 (2013).
- [31] D. P. Pires et al, *Generalized Geometric Quantum Speed Limits*, *Phys. Rev. X* **6**, 021031 (2016).
- [32] S. Brauntein, C. Caves, *Statistical distance and the geometry of quantum states*, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3439 (1994).
- [33] N. Margolus and L. B. Levitin, *The maximum speed of dynamical evolution*, *Phys. D* **120**, 188 (1998).
- [34] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *Advances in quantum metrology*, *Nat. Photonics* **5**, 222 (2011).
- [35] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *Quantum limits to dynamical evolution*, *Phys. Rev. A* **67**, 052109 (2003).
- [36] T. Caneva, M. Murphy, T. Calarco, R. Fazio, S. Montangero, V. Giovannetti, and G. E. Santoro, *Optimal Control at the Quantum Speed Limit*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 240501 (2009).
- [37] S. Deffner and E. Lutz, *Generalized Clausius Inequality for Nonequilibrium Quantum Processes* *Phys. Rev. Lett.* **105**, 170402(2010).
- [38] L. B. Levitin and T. Toffoli, *Fundamental Limit on the Rate of Quantum Dynamics: The Unified Bound Is Tight*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 160502 (2009).

- [39] V. Giovannetti, S. Lloyd and L. Maccone, *The role of entanglement in dynamical evolution*, *Europhys. Lett.* **62**, 615 (2003).
- [40] J. Söderholm et al, *States that minimize the evolution time to become an orthogonal state*, *Phys. Rev. A* **59**, 1788 (1999).
- [41] A. del Campo, I. L. Egusquiza, M. B. Plenio and S. F. Huelga, *Quantum speed limits in open system dynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 050403 (2013).
- [42] S. Deffner and E. Lutz, *Quantum speed limit for non-Markovian dynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 010402 (2013).
- [43] Ying-Jie Zhang, Wei Han, Yun-Jie Xia, Jun-Peng Cao and Heng Fan, *Quantum speed limit for arbitrary initial states*, *Scientific Reports* **4**, 4890 (2014).
- [44] D. V. Villamizar and E. I. Duzzioni, *Quantum speed limit for a relativistic electron in a uniform magnetic field*, *Phys. Rev. A* **92**, 042106 (2015).
- [45] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë; *Quantum mechanics* vol.1 Section D_{VI}, ISBN: 978-0-471-16433-3, Wiley (1991).
- [46] Daijiro Yoshioka, *The Quantum Hall Effect*, Chapter 2, ISBN: 978-3-642-07720-3, Springer (2002).
- [47] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Dirac fermion confinement in graphene*, *Phys. Rev. B* **73**, 241403 (2006).
- [48] R. G. Unanyan, J. Otterbach, and M. Fleischhauer, *Confinement limit of Dirac particles in scalar one-dimensional potentials*, *Phys. Rev. A* **79**, 044101 (2009).
- [49] J. Y. Cheng, *More stringent confinement limit of the Dirac particle in one dimension*, *Phys. Rev. A* **83**, 054103 (2011).
- [50] Paul Strange, *Relativistic Quantum Mechanics: with applications in condensed matter and atomic physics*, ISBN: 9780521565837, Cambridge University Press (1998).
- [51] H. P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, ISBN: 978-0-198-52063-4 , Oxford University, New York, (2002).

- [52] A. Rivas and S. F. Huelga, *Open Quantum Systems. An Introduction*, ISBN: 978-3-642-23353-1, Springer, Heidelberg, (2011).
- [53] J. I. Cirac and P. Zoller, *Goals and opportunities in quantum simulation*, *Nat. Phys.* **8**, 264 (2012).
- [54] S. F. Huelga, C. Macchiavello, T. Pellizzari, A. K. Ekert, M. B. Plenio, and J. I. Cirac, *Improvement of Frequency Standards with Quantum Entanglement*, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3865(1997).
- [55] A. W. Chin, S. F. Huelga, and M. B. Plenio, *Quantum Metrology in Non-Markovian Environments*, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 233601 (2012).
- [56] Jerzy Dajka, Jerzy Luczka and Peter Hänggi, *Distance between quantum states in the presence of initial qubit-environment correlations: A comparative study*, *Phys. Rev. A* **84**, 032120 (2011).
- [57] R. A. Estrada et al, *Spin coherent states in NMR quadrupolar system: experimental and theoretical applications*, *Eur. Phys. J. D* **67**, 127 (2013).
- [58] M. J. Duer, *Solid State NMR Spectroscopy: Principles and Applications*, ISBN: 0-632-05351-8 , Blackwell Science Ltd. USA. (2002).
- [59] O. Gamel and D. James, *Time-averaged quantum dynamics and the validity of the effective Hamiltonian model*, *Phys. Rev. A* **82**, 052106 (2010).
- [60] Z. Sun, J. Liu, J. Ma and X. Wang, *Quantum speed limits in open systems: Non-Markovian dynamics without rotating-wave approximation*, *Scientific Reports* **5**, 8444 (2015).
- [61] I. S. Oliveira, T. J. Bonagamba, R. S. Sarthour, J. C. Checon and E. R. Azevedo, *NMR Quantum Information Processing*, ISBN: 978-0-444-52782-0, Elsevier - Amsterdam, (2007).
- [62] J. Teles and E. R. Azevedo and R. Auccaise and R. S.Sarthour and I. S. Oliveira and T. J. Bonagamba, *Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system*, *J. Chem. Phys.* **126**, 154506, (2007).
- [63] N. Gershenfeld and I. L. Chuang, *Bulk Spin-Resonance Quantum Computation*, *Science*, **275**, 350, (1997).

- [64] D. G. Cory, A. F. Fahmy, and T. F. Havel, *Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy*, *PNAS*, **94**, 1634, (1997).
- [65] E. M. Fortunato, M. A. Pravia, N. Boulant, G. Teklemariam, Timothy F. Havel, and David G. Cory, *Design of strongly modulating pulses to implement precise effective Hamiltonians for quantum information processing*, *J. Chem. Phys.* **116**, 7599, (2002).
- [66] J. A. Nelder and R. Mead, *A Simplex Method for Function Minimization*, *Computer Journal* **7**, 308 (1965).
- [67] R. A. Estrada et al, *Spin coherent states in NMR quadrupolar system: experimental and theoretical applications*, *Eur. Phys. J. D* **67**, 127 (2013).