



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

RICARDO ALEXANDRE DOS SANTOS XIMENES FILHO

**UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA
NÃO RELATIVÍSTICA E SUA APLICAÇÃO AO TEMPO DE TRAVESSIA**

Recife
2018

RICARDO ALEXANDRE DOS SANTOS XIMENES FILHO

**UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO
RELATIVÍSTICA E SUA APLICAÇÃO AO TEMPO DE TRAVESSIA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Olímpio
Ribeiro Dias

Coorientador: Prof. Dr. Fernando Roberto
de Luna Parisio Filho

Recife
2018

Catálogo na fonte
Bibliotecário Jefferson Luiz Alves Nazareno CRB4-1758

X6e Ximenes Filho, Ricardo Alexandre dos Santos.

Uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica não relativística e sua aplicação ao tempo de travessia / Ricardo Alexandre dos Santos Ximenes Filho. – 2018.
49 f.

Orientador: Eduardo Olímpio Ribeiro Dias.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física. Recife, 2018.
Inclui referências.

1. Mecânica quântica 2. Tempo de tunelamento. I. Dias, Eduardo Olímpio Ribeiro. (Orientador). II. Título.

530.12

CDD (22. ed.)

UFPE-FQ 2018-20

RICARDO ALEXANDRE DOS SANTOS XIMENES FILHO

**UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO
RELATIVÍSTICA E SUA APLICAÇÃO AO TEMPO DE TRAVESSIA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 23/02/2018.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Eduardo Olímpio Ribeiro Dias
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Fernando Roberto de Luna Parisio Filho
Co-Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Daniel Felinto Pires Barbosa
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Pablo Lima Saldanha
Examinador Externo
Universidade Federal de Minas Gerais

Agradecimentos

Agradeço aos meus orientadores, Eduardo Dias e Fernando Parisio, por todos esses anos de orientação. Em 2014, quando comecei minha iniciação científica, eu era apenas um estudante de quarto período sem nenhuma experiência em pesquisa. Hoje, uma graduação e mestrado depois, considero que grande parte do que sei é devido a eles. Mais do que me ensinarem física, acredito que eles me ensinaram a *fazer* física. Agradeço aos professores, Cabral, Murilo, Alessandro, Wilson, Parisio, Maurício e Santa-Cruz pelos incríveis cursos dados durante o Bacharelado e Mestrado. Ao meu grupo de laboratório, Márcio, Marcos, Ari e Eulises por todas as conversas construtivas.

Agradeço aos meus pais e minha família por tudo que me ensinaram e por todo apoio emocional e financeiro que recebi. Aos meus grandes amigos, July, Rodolfo, Júlia, João, Arthur, Jampa, Thaísa, André, Bella, Romero, Carol, Mário, Filipe e Ale por todas as risadas nos momentos de descontração.

Agradeço a minha esposa, Klivya, por sempre estar presente tanto nos momentos bons como nos momentos difíceis. Este trabalho nunca seria possível sem sua ajuda e seus encorajamentos.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro.

Resumo

Um fato conhecido da mecânica quântica não relativística é que ela apresenta uma clara assimetria entre espaço e tempo. Essa assimetria é comumente atribuída ao fato dessa teoria não apresentar invariância por transformações de Lorentz. Recentemente, o trabalho [Phys. Rev. A 95, 032133 (2017)] mostrou que apesar deste argumento ser parcialmente válido, existe um cenário físico mais amplo no qual espaço e tempo podem ser tratados de forma muito mais simétrica na mecânica quântica não relativística. Nesse formalismo espaço-tempo-simétrico, um espaço de Hilbert adicional é introduzido de tal forma que o tempo é elevado ao status de operador enquanto a posição torna-se um parâmetro. Dessa forma, uma nova função de onda e uma equação espaço-condicional que rege sua dinâmica são definidas. No presente trabalho, investigamos algumas das propriedades físicas dessa teoria e sua aplicação ao controverso problema do tempo de travessia, definido como o tempo necessário para uma partícula atravessar uma certa região do espaço. Com relação às propriedades físicas, abordamos os seguintes tópicos desse novo formalismo: a partir da equação clássica de Hamilton-Jacobi e assumindo o caráter ondulatório da mecânica quântica, “deduzimos” a equação espaço-condicional; obtemos a solução geral para a equação espaço-condicional no caso de um potencial independente do tempo; deduzimos a lagrangiana geradora da equação espaço-condicional; e por último provamos que este formalismo espaço-tempo-simétrico é invariante por escolha de calibre do campo eletromagnético. Por outro lado, utilizamos o recém-definido operador tempo para descrever o tempo necessário para uma partícula atravessar uma barreira de potencial retangular, incluindo o regime de tunelamento. Comparamos nossa previsão com os modelos mais conhecidos para este tipo de problema, os modelos de Büttiker-Landauer e phase-time, e com os dados de um experimento óptico análogo ao problema quântico do tempo de travessia. Como resultado, nosso formalismo mostrou uma melhor concordância com os dados experimentais em comparação aos modelos tradicionais.

Palavras-chave: Fundamentos da mecânica quântica. Tempo na mecânica quântica. Operador Tempo. Tempo de Tunelamento.

Abstract

It is well known that non-relativistic quantum mechanics presents a clear asymmetry between space and time. This asymmetry is usually attributed to the lack of invariance of this theory under Lorentz transformations. Recently, the work [Phys. Rev. A 95, 032133 (2017)] showed that even though this is partially true, there is a broader physical scenario in which space and time can be handled in non-relativistic quantum theory in a much more symmetric way. In this space-time-symmetric formalism, an additional Hilbert space is defined so that time is raised to the status of operator and position becomes a parameter. Thus, a new wave function and a space-conditional equation that governs its dynamics are defined. In this work, we investigate some of the physical properties of this theory and its application to the controversial problem of the traversal time, defined as the time required for a particle to traverse a certain region of space. Regarding the physical properties, we study the following aspects of this new formalism: starting from the Hamilton-Jacobi classical equation and assuming the wavelike character of quantum mechanics we “deduce” the space-conditional equation; we obtain a solution of the space-conditional equation in the case of a time-independent potential; we “infer” the Lagrangian that generates the space-conditional equation; and the gauge invariance of the electromagnetic field on the space-time-symmetric formalism is proved. On the other hand, we use the newly-defined time operator to describe the time required for a particle to traverse a rectangular potential barrier, including the tunneling regime. We compare our predictions with the most well-known models for this kind of problem, the Büttiker-Landauer and phase-time models, and with the data of an electromagnetic experiment analogous to the quantum traversal problem. As a result, our formalism is in better agreement with the experimental data when compared with the traditional models.

key words: Foundations of quantum mechanics. Time in quantum mechanics. Time operator. Tunneling Time.

Lista de ilustrações

Figura 1	– <i>A desintegração da persistência da memória</i> – Por Salvador Dalí. Enquanto alguns autores interpretam o trabalho <i>A persistência da memória</i> como uma representação artística das ideias da teoria da relatividade de Einstein, interpretações do trabalho <i>A desintegração da persistência da memória</i> argumentam que ele é uma representação das emergentes ideias da mecânica quântica. Fonte: Ref. [1].	9
Figura 2	– Barreira de potencial $V(x)$ em função da posição. A figura também indica a direção de incidência da partícula na barreira.	34
Figura 3	– Esquema do experimento realizado em [33, 34]. A região mais larga corresponde à X-band, enquanto a mais estreita corresponde à P-band. O tempo de atraso τ é medido através da separação entre o sinal detectado antes e depois do estreitamento. Fonte: Ref.[33]	36
Figura 4	– Medições para o <i>delay-time</i> em uma “barreira de potencial” de tamanho L em função da frequência média do pulso. A curva sólida representa o modelo usando o formalismo STS da mecânica quântica, a linha tracejada longa representa o modelo phase time (PT), e a linha tracejada curta representa o modelo de Büttkier-Landauer (BL). (a) Barreira de potencial de tamanho $L = 15$ cm. Uma distribuição lorentziana de largura de banda $\Lambda = 30$ MHz é utilizada no nosso modelo. Os pontos representam os dados experimentais da Ref. [34]. (b) Barreira de potencial de tamanho $L = 20$ cm. Nesse caso, a largura de banda utilizada é $\Lambda = 50$ MHz. Os pontos e quadrados representam duas diferentes séries de medições realizadas na Ref. [33, 34]. A linha vertical indica a frequência de <i>cut-off</i>	38
Figura 5	– Representação gráfica de um guia de onda de forma arbitrária. Suas paredes são feitas de material condutor enquanto seu interior é um vácuo. Fonte: Ref. [44]	46
Figura 6	– Guia de onda em formato retangular. O índice m do modo $TE_{m,n}$ está associado à direção vertical (eixo x), enquanto o índice n está associado a direção horizontal (eixo y). Fonte: Ref. [44]	47

Sumário

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Relações de incerteza e o argumento de Pauli	10
1.2	A mecânica quântica através de probabilidades condicionais	12
1.3	O problema do tempo de travessia	15
1.4	O que vem a seguir	16
2	UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂN- TICA	18
2.1	Construção via Hamilton-Jacobi	18
2.2	Formulação matemática	20
2.3	Equação dinâmica para $\phi(t x)$	22
2.4	Solução para a partícula livre	24
2.5	Solução para potencias independentes do tempo	25
2.6	Potencial eletromagnético: invariância de calibre do formalismo STS	27
2.7	Lagrangiana da equação espaço-condicional	29
3	O FORMALISMO STS E O PROBLEMA DO TEMPO DE TRAVESSIA . .	31
3.1	Valores esperados e o operador tempo	31
3.2	Tempo de atraso	32
3.3	Aplicação a um potencial retangular	34
3.4	Analogia eletromagnética para o tempo de travessia	35
3.5	Teoria vs experimento	37
4	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	40
	REFERÊNCIAS	42
	APÊNDICE A - PROVA DO "TEOREMA" DE PAULI	45
	APÊNDICE B - GUIAS DE ONDA	46
	APÊNDICE C - OS MODELOS DE BÜTTKIER-LANDAUER E PHASE-TIME	48

1 INTRODUÇÃO

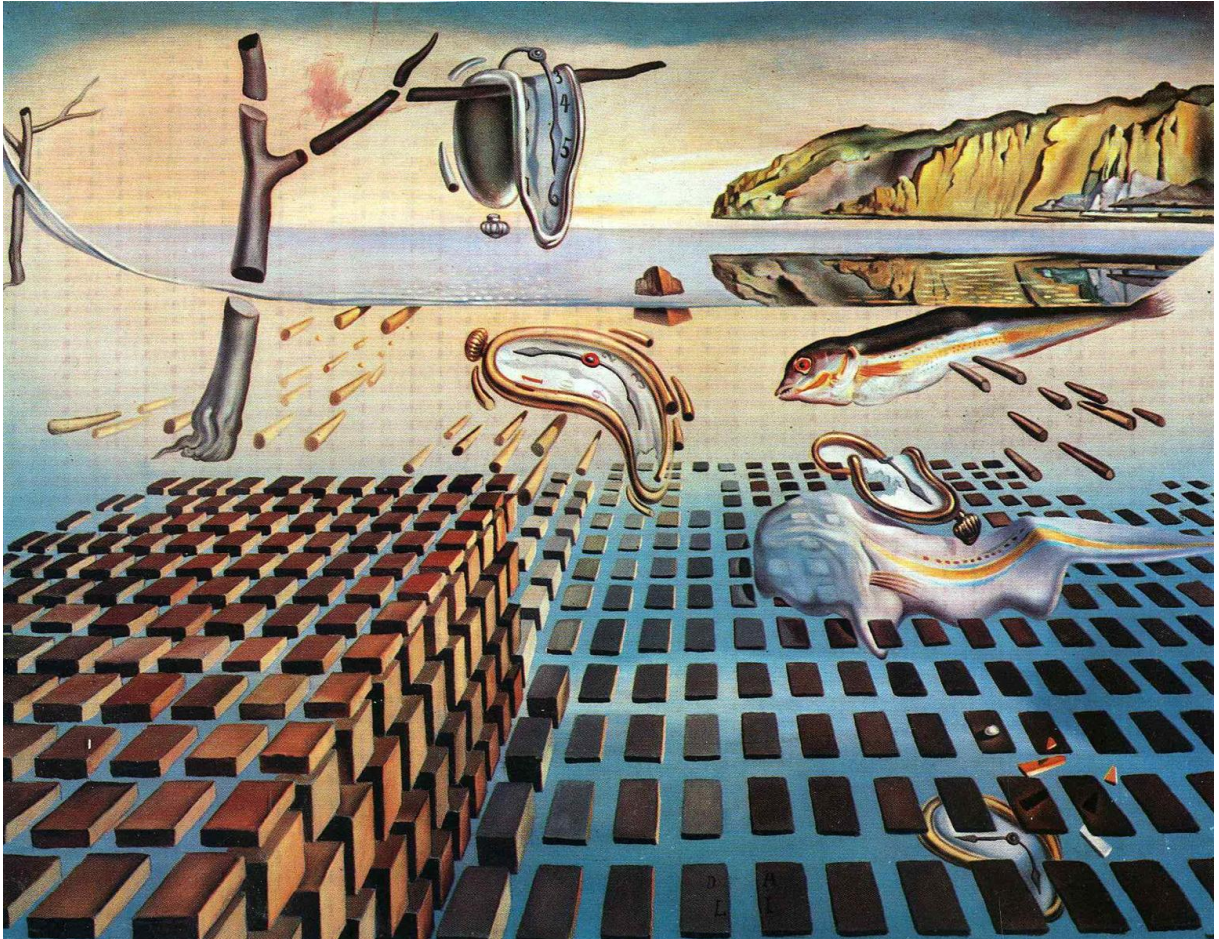


Figura 1 – *A desintegração da persistência da memória* – Por Salvador Dalí. Enquanto alguns autores interpretam o trabalho *A persistência da memória* como uma representação artística das ideias da teoria da relatividade de Einstein, interpretações do trabalho *A desintegração da persistência da memória* argumentam que ele é uma representação das emergentes ideias da mecânica quântica. Fonte: Ref. [1].

O que é o tempo? Essa é uma das mais profundas, intrigantes e fundamentais questões da física. Registros a respeito desse tema podem ser encontrados datando de até 2 milênios A.C., como, por exemplo, no texto *Vedas*, uma das mais antigas escrituras do Hinduísmo. As primeiras abordagens desse tópico são bastante rudimentares e algumas delas bem curiosas. Por exemplo, os Incas tratavam espaço e tempo como um único conceito, o denominado *pancha* [2]. Apesar de antiga, essa é uma pergunta que permanece essencialmente em aberto, e respondê-la está fora do escopo deste trabalho. Aqui focamos nossa atenção em uma tarefa mais específica, porém ainda bastante complexa, relacionada ao tratamento físico do tempo no contexto da mecânica quântica não relativística.

Na versão tradicional da mecânica quântica não relativística existe uma clara assimetria

entre espaço e tempo. O tempo é um parâmetro contínuo que pode ser escolhido com precisão arbitrária para avaliar o estado quântico do sistema. Por outro lado, posição é associada a um operador, e portanto, o valor obtido durante uma medição de posição é inerentemente probabilístico. Dessa forma, o tempo não é tratado como um observável na mecânica quântica tradicional e, portanto, gerando obstáculos em descrever medições temporais. É comum escutar que a razão dessa assimetria é devido ao caráter não covariante da teoria quântica. Entretanto, apesar de o tempo ser um parâmetro, não é no mínimo estranho que o aspecto não relativístico dessa teoria dificulte responder perguntas a respeito de medidas temporais? Essa é uma das principais motivações para a introdução de um operador tempo na mecânica quântica não relativística, uma vez que isso muniria a teoria com as ferramentas necessárias para resolver essa dificuldade.

Existe uma vasta literatura de propostas para a introdução de um operador tempo na mecânica quântica [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]. Comum entre várias dessas abordagens é a tentativa de introduzir um operador tempo dentro do âmbito da mecânica quântica tradicional. Porém, essas abordagens geram complicações matemáticas e conceituais. Por exemplo, uma propriedade esperada de qualquer operador tempo é que ele simultaneamente seja hermitiano (autovalores reais) e satisfaça uma relação de comutação canônica com um operador energia. Entretanto, as abordagens limitadas ao escopo da teoria quântica tradicional não conseguem satisfazer ambas as características simultaneamente.

Recentemente, tendo em vista a importância da introdução de um operador tempo, os autores na Ref. [23] propuseram uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica como solução para esse problema. Nesse contexto, naturalmente é introduzido um operador tempo que satisfaz simultaneamente tanto a condição de hermiticidade como a de comutação canônica com um operador energia.

Nesta dissertação, investigamos as propriedades teóricas da extensão proposta na Ref. [23], assim como sua aplicação a situações físicas envolvendo medidas temporais, onde o caráter condicional no tempo da mecânica quântica tradicional gera complicações na descrição desses experimentos. Ao longo desta introdução, vamos retratar duas questões marcantes no desenvolvimento histórico do tempo na mecânica quântica, além de introduzir algumas das ideias propostas na Ref. [23]. Esta discussão servirá para preparar o leitor para os tópicos dos capítulos seguintes deste trabalho.

1.1 Relações de incerteza e o argumento de Pauli

O início do século XX foi um período marcante na história da física. As primeiras décadas desse século foram o palco para duas completas revoluções na física, que ocorreram em regimes onde a mecânica clássica falhava em descrever o que era observado experimentalmente. O primeiro desses domínios corresponde ao regime macroscópico de altas energias, descrito

pela recém-nascida relatividade geral, com suas ideias revolucionárias unindo espaço e tempo em uma única entidade física, o espaço-tempo. O segundo desses domínios refere-se ao regime microscópico, descrito pela ainda em construção mecânica quântica. Esse segundo domínio, em contraste com o primeiro, não usa como base uma descrição relativística mas sim as ideias de tempo absoluto feitas por Newton, quase 400 anos antes. Atualmente, apesar da ideia de tempo absoluto já ter sido, de certa forma, resolvida na mecânica quântica relativística, veremos que outros aspectos temporais dessa teoria ainda permanecem em aberto.

No domínio quântico, um dos aspectos mais intrigantes foi descoberto em 1927 [24], quando Heisenberg introduziu a ideia de que duas grandezas canonicamente conjugadas, ou seja, duas grandezas tais que $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$, satisfazem uma relação de incerteza

$$\Delta A \Delta B \geq \hbar/2, \quad (1.1)$$

onde ΔA e ΔB indicariam a imprecisão no valor obtido na medição simultânea das grandezas A e B de um mesmo sistema. Por exemplo, como os operadores posição $\hat{x}$ e momento $\hat{p}$ satisfazem $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, temos

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2. \quad (1.2)$$

Além disso, na Ref. [24] Heisenberg também introduziu a relação de incerteza

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2, \quad (1.3)$$

onde a energia E estaria relacionada ao operador hamiltoniano $\hat{H}$ e t a algum operador tempo $\hat{T}$, de modo que $[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar$, porém sem dar nenhum detalhe sobre a natureza do operador $\hat{T}$.

A interpretação moderna e mais comum da Eq. (1.2) é a de que Δx (Δp) representa o desvio padrão do resultado de repetidas medições de posição (momento) em sistemas preparados identicamente. Nesse contexto, a Eq. (1.3) deveria possuir uma interpretação equivalente à Eq. (1.2), ou seja, associados à Eq. (1.3) estariam os operadores energia $\hat{H}$ e tempo $\hat{T}$, com ΔT também representando o desvio padrão do resultado de repetidas medições de alguma quantidade temporal em sistemas preparados identicamente.

Vamos supor por um momento que isso seja verdade, ou seja, que exista um operador hermitiano $\hat{T}$ (desejamos que os autovalores deste operador sejam reais) canonicamente conjugado ao operador hamiltoniano,

$$[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar, \quad (1.4)$$

de forma que a Eq. (1.3) pode ser interpretada de maneira análoga à Eq. (1.2). Nesse cenário é possível mostrar que a aplicação de um operador unitário $\exp[iE'\hat{T}/\hbar]$ (que fisicamente representa um deslocamento de $-E'$ na energia), com $E' \in \mathbb{R}$, no autoestado de energia $|E\rangle$ do operador $\hat{H}$ produz um novo autoestado de energia com autovalor $E - E'$ (ver apêndice A para prova). Portanto $E - E'$ pode tomar qualquer valor em $\mathbb{R}$, i.e. dado um autovalor de energia E , podemos sempre escolher um valor para E' de forma a acessar qualquer autoestado com energia

$E - E' \in \mathbb{R}$ desejado. Assim, vemos que se este operador existisse o espectro de energias do hamiltoniano se estenderia continuamente em $(-\infty, \infty)$ independentemente do sistema físico.

Como consequência do argumento feito acima, vemos que a introdução de um operador tempo $\hat{T}$ que seja simultaneamente hermitiano e canonicamente conjugado ao operador $\hat{H}$ é claramente problemática, uma vez que, como sabemos, o espectro de energias do hamiltoniano deve possuir um limite inferior. O discurso que acabamos de descrever foi originalmente feito por Pauli em uma nota de rodapé em seu segundo artigo enciclopédico [25] e é algumas vezes denominado de “teorema” de Pauli. Ao fazer essa exposição Pauli chegou à seguinte conclusão:

“... A introdução de um operador $\hat{T}$ precisa ser fundamentalmente abandonada...”

Com tudo isso que foi dito, vemos que a interpretação da Eq. (1.3) não pode ser a mesma da Eq. (1.2). Dessa forma, a interpretação comumente dada para a relação de incerteza energia-tempo é que Δt em (1.3) na verdade representa

$$\Delta t = \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle / dt|}, \quad (1.5)$$

onde $\hat{Q}$ é um observável e σ_Q é o desvio padrão desse observável. Na Eq. (1.3) Δt simplesmente indica quanto tempo leva para o valor esperado do observável $\hat{Q}$ variar de um desvio padrão. Dessa forma, para diferentes observáveis $\hat{Q}$, temos diferentes incertezas temporais, além de não termos um operador tempo associado.

Apesar dessa clara assimetria entre x e t nas Eqs. (1.2) e (1.3), o que acabamos de argumentar parece fazer sentido, afinal, na mecânica quântica não relativística, posição, momento e energia são variáveis dinâmicas, ou seja, quantidades mensuráveis de um sistema para qualquer instante de tempo. Por outro lado, o tempo não é uma variável dinâmica e, portanto, não é representado como operador. Contudo, argumentamos no começo deste capítulo que o fato de estarmos trabalhando na mecânica quântica não relativística não deveria restringir nossa capacidade de fazer previsões a respeito de medidas temporais. Dessa forma, como seria possível introduzir um operador tempo $\hat{T}$ simultaneamente hermitiano e canonicamente conjugado a um operador energia, de forma que a Eq. (1.3) seja satisfeita, e Δt represente o desvio padrão do resultado de repetidas medições de tempo em sistemas preparados identicamente? Para responder essa pergunta, precisamos discutir brevemente sobre probabilidades condicionais, o teorema de Bayes e associar essas propriedades à mecânica quântica.

1.2 A mecânica quântica através de probabilidades condicionais

Vamos considerar I como sendo uma variável aleatória. Definimos a densidade de probabilidade da variável I possuir valor $I = i$ como sendo $P_I(i)$. Assim, a probabilidade de I possuir valor entre a e b é dada por

$$p(a, b) = \int_a^b P_I(i) di. \quad (1.6)$$

Agora, vamos considerar que além da variável I também temos uma variável aleatória J . Podemos definir uma densidade de probabilidade condicional $P_I(i|j)$ dada pela densidade de probabilidade de o valor de I ser $I = i$ *dado que* a variável J possui valor $J = j$. Portanto, a probabilidade de a variável I possuir valor entre a e b *dado que* $J = c$ é dada por

$$p(a, b|c) = \int_a^b P_I(i|c) di. \quad (1.7)$$

Ainda no contexto de duas variáveis aleatórias, podemos introduzir uma densidade de probabilidade conjunta $P_{I,J}(i, j)$ dado pela densidade de probabilidade das variáveis I e J terem valores $I = i$ e $J = j$. Nesse caso, a probabilidade de a variável I possuir valor entre a e b e a variável J entre c e d é dada por

$$p(a, b \& c, d) = \int_a^b \int_c^d P_{I,J}(i, j) di dj. \quad (1.8)$$

Com as definições feitas acima, o teorema (ou regra) de Bayes diz que

$$P_{I,J}(i, j) = P_I(i|j)P_J(j), \quad (1.9)$$

ou seja, a densidade de probabilidade conjunta das variáveis I e J terem valores $I = i$ e $J = j$ é igual à densidade de probabilidade de termos $I = i$ *dado que* $J = j$ multiplicada pela probabilidade da variável J ser igual a j . Mais ainda, nada nos impede de trocar os papéis das variáveis I e J na Eq. (1.9), de forma que

$$P_{J,I}(j, i) = P_J(j|i)P_I(i). \quad (1.10)$$

É interessante notar que a densidade de probabilidade conjunta possui uma simetria perante a troca $i \rightleftharpoons j$, portanto $P_{I,J}(i, j) = P_{J,I}(j, i)$. Dessa maneira, da Eq. (1.9) e (1.10) temos

$$P_{I,J}(i, j) = P_I(i|j)P_J(j) = P_J(j|i)P_I(i). \quad (1.11)$$

Vamos agora tentar responder à pergunta feita no final da seção 1.1. Dentro da mecânica quântica tradicional, uma das possíveis interpretações para a quantidade $|\psi(x, t)|^2 = |\langle x|\psi(t)\rangle|^2$ é a de que ela representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula na posição x *dado que* a medição ocorreu no instante t . Ora, isso nada mais é do que a densidade de probabilidade condicional $P_I(i|j)$ que acabamos de definir com $i = x$ e $j = t$, ou seja, $P_X(x|t) = |\psi(x, t)|^2$. Nesse contexto, $P_{X,T}(x, t) \equiv \mathcal{P}(x, t)$ representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula na posição x e no instante t . Mais ainda, $P_T(t) \equiv f(t)$ indica a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula no instante t independente da posição em que a detecção ocorreu. Portanto, a Eq. (1.9) diz que

$$\mathcal{P}(x, t) = |\psi(x, t)|^2 f(t). \quad (1.12)$$

Além disso, usando a Eq. (1.10), a regra de Bayes também diz que

$$\mathcal{P}(x, t) = P_T(t|x)P_X(x), \quad (1.13)$$

onde $P_T(t|x)$ e $P_X(x)$, assim como $f(t)$, representam novas distribuições de probabilidade que não estão presentes na mecânica quântica tradicional. $P_X(x) \equiv g(x)$ representa a densidade de

probabilidade de detectarmos a partícula na posição x independente do instante da detecção, enquanto $P_T(t|x)$ representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula no instante t *dado que* a medição ocorreu na posição x . De (1.12) e (1.13) temos que

$$\mathcal{P}(x, t) = |\psi(x|t)|^2 f(t) = P_T(t|x) g(x). \quad (1.14)$$

Por simetria, analisando a Eq. (1.14), é natural esperar que exista uma nova função de onda $\phi(t, x)$ tal que $P_T(t|x) = |\phi(t, x)|^2$. Assim, podemos rescrever a Eq. (1.14) como

$$\mathcal{P}(x, t) = |\psi(x|t)|^2 f(t) = |\phi(t|x)|^2 g(x), \quad (1.15)$$

onde passamos a utilizar a notação $\psi(x|t)$ e $\phi(t|x)$ visto o caráter condicional destas quantidades. Resumindo, temos que:

$|\psi(x|t)|^2$ *representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula na posição x **dado que** a medição ocorreu no instante t .*

$|\phi(t|x)|^2$ *representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula no instante t **dado que** a medição ocorreu na posição x .*

Nesse contexto, os autores na Ref. [23] apresentaram a seguinte proposta para uma extensão temporal da mecânica quântica: Sabemos que na mecânica quântica tradicional, o estado de uma partícula sem spin em uma dimensão é dado por $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}_X$. Além disso, a posição da partícula é representada pelo observável $\hat{X}$, de forma que $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$, e a função de onda de Schrödinger é obtida através da representação do estado $|\psi(t)\rangle$ na base $|x\rangle$, ou seja, $\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x|t)$. Portanto, de forma a transformar t em um operador, foi introduzido um novo estado $|\phi(x)\rangle$ e um operador tempo $\hat{T}$, relacionados a um novo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_T$. Nesse cenário, **os autovalores do operador $\hat{T}$ representam o tempo no qual o sistema é observado**, e por analogia, devemos ter $\hat{T}|t\rangle = t|t\rangle$. Mais ainda, a função de onda condicional na posição $\phi(t|x)$ corresponde à representação do estado $|\phi(x)\rangle$ na base $|t\rangle$, $\langle t|\phi(x)\rangle = \phi(t|x)$.

Dentro do contexto da extensão proposta na Ref. [23] podemos responder à pergunta feita no final da seção 1.1 relacionada à possibilidade de introduzir um operador tempo $\hat{T}$ na mecânica quântica de maneira apropriada: Como veremos no capítulo 2, o operador $\hat{T}$ definido acima é simultaneamente hermitiano e canonicamente conjugado a um novo operador energia $\hat{h}$ atuando em $\mathcal{H}_T$. Além disso, *o operador tempo assim introduzido não gera nenhum conflito com o operador hamiltoniano $\hat{H}$, pois estes dois operadores atuam em espaços de Hilbert distintos de maneira que o argumento de Pauli não é mais válido*. Finalmente, como os operadores $\hat{T}$ e $\hat{h}$ atuando em $\mathcal{H}_T$ são canonicamente conjugados, temos a relação de incerteza

$$\Delta E \Delta T \geq \hbar/2, \quad (1.16)$$

associada a esses operadores. Na Eq. (1.16), ΔT genuinamente representa o desvio padrão do resultado de repetidas medições de tempo em sistemas preparados identicamente. Em outras palavras, uma incerteza temporal do momento de medição do sistema.

O material introduzido nessa seção possivelmente deixou muitas perguntas em aberto na mente do leitor. Por exemplo, quais são as propriedades matemáticas e físicas envolvidas no novo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_T$? Existe uma nova equação dinâmica para a função $\phi(t|x)$? Essas e outras perguntas são os temas de estudo do capítulo 2 deste trabalho.

Nesse contexto da extensão temporal proposta na Ref. [23], da mesma maneira que previsões a respeito de medidas espaciais são feitas por estados em $\mathcal{H}_X$, é esperado que previsões a respeito de medidas temporais devam ser feitas por estados em $\mathcal{H}_T$. Portanto, vamos utilizar esta extensão teórica para estudar um problema envolvendo medidas temporais, relacionado ao tempo de travessia [3, 26, 27, 8, 9, 28, 29, 30, 31, 32]

1.3 O problema do tempo de travessia

Uma pergunta que pode ser feita tanto no âmbito da mecânica clássica como no da mecânica quântica é a seguinte:

“Quanto tempo uma partícula leva para atravessar uma região do espaço?”

Mais rigorosamente, qual o tempo necessário para uma partícula partindo da posição $\mathbf{x}_0$ chegar na posição $\mathbf{x}_f$? Na mecânica clássica, dado que seja possível resolver as equações de movimento, esta pergunta não representa nenhum problema. Existe uma função $\mathbf{x}(t)$ que descreve a trajetória da partícula e indica unicamente a posição da partícula para um dado tempo t . Logo, temos que o tempo de travessia será, de uma maneira simplificada, dado por $t(\mathbf{x}) - t(\mathbf{x}_0)$.

Em contraste com a mecânica clássica, a resposta para essa pergunta na mecânica quântica é bem mais complicada. Como discutido previamente, a mecânica quântica tradicional permite fazer previsões probabilísticas a respeito das variáveis dinâmicas. Entretanto, o tempo *não* é uma dessas variáveis, de forma que não existe um operador tempo associado a ele. Não bastando apenas isso, essa pergunta é ainda mais complexa devido a um fenômeno puramente quântico que pode acontecer quando uma partícula encontra uma barreira de potencial classicamente não acessível, existindo uma probabilidade não nula de a partícula atravessar essa barreira, o fenômeno denominado de tunelamento. Qualquer previsão a respeito do tempo de travessia na mecânica quântica também precisa levar em conta esse efeito.

A questão de quanto tempo uma partícula quântica leva para atravessar uma barreira de potencial é um tópico que permanece controverso até hoje, quase 100 anos depois da primeira menção ao problema em 1932 [27]. Esse problema tem sido estudado intensivamente nas últimas décadas e, devido ao fato de a mecânica quântica tradicional não apresentar uma maneira simples de introduzir um operador tempo, uma variedade de abordagens surgiram para tentar solucionar

esse problema [3, 26, 8, 9, 28, 29, 30, 31, 32], tais como: relógios quânticos, mecânica quântica Bohmiana, integrais de trajetórias, entre outras.

Além das dificuldades teóricas envolvidas na descrição do tempo de travessia (também denominado tempo de atraso ou *delay-time*), há também relevantes complicações experimentais. Por exemplo, o regime de tunelamento de partículas massivas, como elétrons, normalmente envolve tempos curtíssimos e de difícil detecção, da ordem de femtosegundos [8]. Com isso, na década de 1990, devido à similaridade entre as equações do eletromagnetismo clássico e a equação de Schrödinger, estudos começaram a ser realizados [33, 34] envolvendo sistemas ópticos análogos ao problema de tunelamento quântico. Os experimentos realizados nesses estudos investigam a propagação de micro-ondas através de um guia de onda estreitado. Este estreitamento simula uma barreira de potencial quântico, de forma que a propagação de um pulso através dele é formalmente equivalente ao problema de tunelamento. Isso eleva o tempo de atraso nesses experimentos ópticos para uma faixa de mais fácil detecção, de nanosegundos [34].

Os experimentos ópticos de tunelamento realizados na Ref. [33, 34] correspondem ao protótipo da situação ideal para a utilização da distribuição temporal $|\phi(t|x)|^2$ introduzida na seção 1.2. Esses experimentos realizam medições em posições fixas imediatamente antes e depois do estreitamento do guia de onda a fim de detectar a distribuição temporal de chegada do pulso, simulando o tempo de chegada de partículas massivas na travessia de uma barreira de potencial. Este contexto corresponde justamente à interpretação feita na seção anterior para $|\phi(t|x)|^2$. Com isso, no capítulo 3, comparamos a previsão feita pela função de onda $\phi(t|x)$ não só com os dados experimentais obtidos na Ref. [33, 34], mas também com a previsão feita pelos modelos teóricos mais conhecidos para tempo de tunelamento que utilizam como base a mecânica quântica tradicional, os modelo de Büttiker-Landauer e phase-time [26, 3].

1.4 O que vem a seguir

Vamos agora indicar brevemente o conteúdo de cada um dos capítulos seguintes deste trabalho, destacando os resultados originais desta dissertação [35, 36] daqueles já existentes na literatura.

No capítulo 2, investigamos algumas das consequências teóricas da proposta introduzida na Ref. [23]. Nele temos os seguintes pontos de estudo:

- Seção 2.1: introduzimos o formalismo espaço-tempo-simétrico através das equações de Hamilton-Jacobi.
- Seção 2.2, 2.3 e 2.4: Fazemos um breve resumo dos pontos chave da Ref. [23] e repetimos seu argumento para a solução do problema de uma partícula livre.

- Seção 2.5: Mostramos como resolver a equação espaço-condicional proposta na Ref. [23] para o caso de um potencial independente do tempo.
- Seção 2.6: Provamos que a extensão teórica proposta na Ref. [23] possui invariância por escolha de calibre do potencial eletromagnético .
- Seção 2.7: Introduzimos a lagrangiana geradora da equação espaço-condicional e mostramos que ela de fato gera esta equação para o caso de um potencial independente do tempo.

No capítulo 3, continuamos com a discussão a respeito do tempo de travessia. Neste capítulo, temos os seguintes pontos de estudos:

- Seção 3.1: Revisamos como a proposta introduzida na Ref. [23] lida com valores médios temporais.
- Seção 3.2 e 3.3: Mostramos como utilizar a extensão espaço-tempo-simétrica para o cálculo do tempo de atraso.
- Seção 3.4: Revisamos a analogia entre o problema quântico do tempo de tunelamento e o experimento óptico análogo realizado nas Refs. [33, 34], e mostramos como utilizar esta analogia na expressão obtida pela extensão espaço-tempo-simétrica para o tempo de atraso.
- Seção 3.5: Realizamos uma comparação quantitativa dos modelos espaço-tempo-simétrico, Büttkier-Landauer e phase-time com os dados obtidos nos experimentos feitos nas Refs. [33, 34].

2 UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

Vamos começar nosso estudo sobre a extensão espaço-tempo-simétrica [*space-time-symmetric* (STS)] da mecânica quântica construindo este formalismo a partir da equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica. Em seguida, vamos introduzir de maneira mais rigorosa o formalismo matemático dessa teoria, como elaborado na Ref. [23], estudando alguns casos particulares de aplicações a sistemas físicos. Por exemplo, abordaremos o caso de uma partícula sob a ação de um potencial eletromagnético, onde mostraremos que a teoria STS satisfaz a invariância de calibre. Por fim, sabendo que a equação de Schrödinger pode ser obtida de uma lagrangiana que é função de um campo complexo clássico, provamos que isto continua sendo verdade para a equação espaço condicional (EC) que este formalismo introduz.

2.1 Construção via Hamilton-Jacobi

O nosso ponto de partida para formular essa extensão mais simétrica da mecânica quântica é através de uma analogia entre mecânica quântica e mecânica clássica utilizando a ação clássica S . A ação tem um papel fundamental não só na mecânica clássica, mas na física teórica como um todo, o que justifica seu uso como ponto de partida. Sabemos que na mecânica clássica a equação de Hamilton-Jacobi diz que [37]

$$H(x, p; t) = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (2.1)$$

onde o momento p satisfaz a relação

$$p = \frac{\partial S}{\partial x}. \quad (2.2)$$

Nesse contexto, o hamiltoniano é uma função das variáveis x e p e a trajetória da partícula é dada pela solução da Eq. (2.1), que corresponde a uma curva no espaço de fase (x, p) parametrizada pelo tempo t . Dessa forma, $x(t)$ e $p(t)$ são funções a serem calculadas, em contraste ao tempo t , que é apenas um parâmetro.

É possível “obter” a mecânica quântica tradicional partindo da equação de Hamilton-Jacobi (2.1) usando uma abordagem similar à utilizada por Schrödinger na Ref. [38]. Vamos supor que a ação S seja a fase de algum processo físico ondulatório, ou seja, $\psi = e^{iS/\hbar}$. Podemos isolar S nessa relação, $S = -i\hbar \ln \psi$, e substituir de volta nas Eqs. (2.1) e (2.2). Esse cálculo resulta em

$$H(x, p; t) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (2.3)$$

onde p é tal que

$$p \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (2.4)$$

Note que inspecionando a Eq. (2.4) vemos claramente que o momento p se comporta como um operador $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ atuando em ψ . Além disso, como a posição não é um parâmetro, podemos identifica-lá como sendo um operador tal que $\hat{x}\psi = x\psi$. Com isso, a Eq. (2.3) torna-se a equação de Schrödinger

$$\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}; t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t). \quad (2.5)$$

A Eq. (2.5) determina como a função de onda ψ varia temporalmente, ditando a dinâmica do sistema. Por outro lado, a relação $\hat{p} \psi = -i\hbar d\psi/dx$ apenas define como o operador momento atua na função de onda.

Esse processo de “quantização” mantém o tempo t como um parâmetro, enquanto que as variáveis canônicas x e p , e funções dessas variáveis, como o hamiltoniano, são elevadas ao papel de operadores. Esse procedimento é extremamente desfavorável a qualquer definição de operador temporal, afinal, o tempo é considerado como um parâmetro desde o início da nossa análise. Por outro lado, como discutimos na seção 1.2, podemos pensar numa nova função de onda ϕ que descreva probabilidades de medidas temporais condicionadas no espaço e não no tempo. Nesse contexto, queremos tentar descrever um processo quântico onde agora a posição é um parâmetro e o tempo uma varável canônica e, portanto, representada por um operador. Se queremos que x seja um parâmetro, então, em contraste à (2.3), deve existir uma nova equação dinâmica que descreve como ϕ varia espacialmente. Nesse caso, como o momento é gerador de translações espaciais, uma equação equivalente à Eq. (2.4), porém atuando na nova função de onda ϕ , deve ditar a dinâmica *espacial* do sistema.

De forma a determinar essa nova dinâmica quântica espacial, voltemos a analisar a equação de Hamilton-Jacobi. A discussão acima sugere uma inversão dos papéis de $H(x, p; t)$ e p , e x e t nas Eqs. (2.1) e (2.2): $H(x, p; t)$ e t devem se tornar variáveis canônicas, x deve se tornar um parâmetro e p uma função das novas variáveis canônicas e do parâmetro x . Por conveniência, vamos definir $(H(x, p; t), t) \equiv (h, t)$. Nesse contexto, a função momento $p = P(h, t; x)$ pode ser facilmente obtida através da inversão da relação $h = P^2/(2m) + V(x, t)$, de modo que as equações (2.2) e (2.1), respectivamente, podem ser rescritas como

$$P(t, h; x) = \frac{\partial S}{\partial x} \quad (2.6)$$

e

$$h = -\frac{\partial S}{\partial t}. \quad (2.7)$$

Note que a função $P(t, h; x)$, aqui denominada de *hamiltoniano*, é uma função das variáveis canônicas h e t , e a trajetória da partícula é dada pela solução da Eq. (2.6), que corresponde a uma curva no espaço de fase (h, t) parametrizada pela posição x . Dessa forma, $h(x)$ e $t(x)$ são funções a serem calculadas, em contraste à posição x , que neste caso é apenas um parâmetro. Vale

ressaltar que essa mudança de variáveis não altera a solução clássica, mas terá uma repercussão de extrema relevância no processo de quantização.

Nosso objetivo agora é determinar o equivalente quântico das Eqs. (2.6) e (2.7). Vamos proceder de maneira análoga ao que fizemos na “dedução” da equação de Schrödinger. Supondo que a ação S seja a fase de um processo físico tal que $\phi = e^{iS/\hbar}$, e então substituindo $S = -i\hbar \ln \phi$ nas equações (2.6) e (2.7) obtemos

$$P(t, h; x) \phi = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}. \quad (2.8)$$

e

$$h \phi = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (2.9)$$

Nesse cenário, a Eq. (2.9) indica que a energia h se comporta como um operador $\hat{h} = i\hbar d/dt$ atuando em ϕ e, analogamente ao operador $\hat{x}\psi = x\psi$ em Schrödinger, também devemos ter $\hat{t}\phi = t\phi$. Portanto, a Eq. (2.8) pode ser rescrita como

$$\hat{P}(\hat{t}, \hat{h}; x) \phi(t, x) = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(t, x). \quad (2.10)$$

Note que a Eq. (2.10) determina como a função de onda ϕ varia espacialmente, ditando a dinâmica *espacial* do sistema. Por outro lado, similarmente à Eq. (2.4) no caso de Schrödinger, a relação $\hat{h} = i\hbar d/dt$ apenas define como o operador energia atua em ϕ . A Eq. (2.10) corresponde exatamente à equação espaço-condicional (EC) para a função de onda $\phi(t|x)$ obtida na Ref. [23].

O caráter paramétrico do tempo na Eq. (2.5) e da posição em (2.10) indica um aspecto condicional nas funções de onda $\psi(x, t) = \psi(x|t)$ e $\phi(t, x) = \phi(t|x)$. De fato, como visto na seção 1.2, a função de onda $\psi(x|t)$ [$\phi(t|x)$] representa a amplitude de densidade de probabilidade de detectarmos a partícula na posição x [no tempo t] *dado que* a medição ocorreu no tempo t [na posição x]. Antes de seguirmos para a próxima seção, vale fazer a seguinte ressalva: é possível ir da equação (2.5) para a (2.10), e vice-versa, através da transformação $(x, p, H; \psi) \Leftrightarrow (-t, h, P; \phi)$. Essa é uma simetria importante que será vista recorrentemente ao longo desse trabalho.

2.2 Formulação matemática

Uma vez discutida essa nova maneira de construir o formalismo STS, vamos agora elaborá-lo da maneira originalmente proposta na Ref. [23]. O formalismo STS é construído sobre duas hipóteses.

Hipótese 1. *O espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ mínimo necessário para a descrição completa de uma partícula unidimensional sem spin é definido pelo produto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_T$. Nessa definição, $\mathcal{H}_T$ é um novo espaço de Hilbert onde o papel da posição e do tempo são trocados em relação ao espaço de Hilbert tradicional $\mathcal{H}_X$, isto é, posição é um parâmetro enquanto tempo é*

um operador. A informação física contida em $\mathcal{H}_X \setminus \{\mathcal{H}_T\}$ está presente nos estados condicionais $|\psi(t)\rangle \setminus \{|\phi(x)\rangle\}$. Além disso, note que nessa hipótese, $\mathcal{H}_T$ é tão intrínseco ao sistema como $\mathcal{H}_X$. Com isso, o estado físico que descreve completamente o sistema é dado por $||\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ tal que

$$||\Psi\rangle = \int \int \Psi(x \& t) |xt\rangle dx dt, \quad (2.11)$$

onde $\langle x't' || \Psi \rangle = \Psi(x' \& t')$ e $|xt\rangle = |x\rangle \otimes |t\rangle$. Os kets $\{|x\rangle\} \in \mathcal{H}_X$ correspondem a uma base de autovetores do operador posição $\hat{X}$, isto é, $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$, enquanto $\{|t\rangle\} \in \mathcal{H}_T$ corresponde a uma base de autovetores do operador tempo $\hat{T}$, ou seja, $\hat{T}|t\rangle = t|t\rangle$.

A razão física para a definição do estado $||\Psi\rangle$ dado pela Eq. (2.11) fica clara quando interpretamos o módulo quadrado da função de onda “completa” $|\Psi(x \& t)|^2$ como a densidade de probabilidade de detectar a partícula na posição x e no tempo t , o que justamente corresponde à distribuição $\mathcal{P}(x, t)$ definida na seção 1.2. Assim, $\Psi(x \& t)$ está relacionada às funções de ondas condicionais através das relações (1.12) e (1.13)

$$\Psi(x \& t) = \psi(x|t) \sqrt{f(t)} = \phi(t|x) \sqrt{g(x)}. \quad (2.12)$$

Dessa maneira, vemos que a função $\Psi(x \& t)$ engloba tanto medidas condicionadas pelo tempo, $\psi(x|t)$, quanto medidas parametrizadas pela posição, $\phi(x|t)$, o que justifica denominá-la de função de onda completa. Além disso, o conhecimento de apenas $\psi(x|t)$ ou $\phi(t|x)$ não dá informação física suficiente para a descrição total do sistema, ou seja, não permite determinar $\Psi(x \& t)$. É preciso informação adicional do sistema através das funções $f(t)$ ou $g(x)$.

Hipótese 2. Em analogia aos operadores tradicionais $\hat{X}$, $\hat{p}$ e $\hat{H}(\hat{X}, \hat{p}; t)$ atuando em $\mathcal{H}_X$, definimos os operadores “imagem” atuando em $\mathcal{H}_T$: tempo $\hat{T}$ (imagem de $\hat{X}$), energia $\hat{h}$ (imagem de $\hat{p}$) e o operador que chamamos de pamiltoniano $\hat{P}(\hat{T}, \hat{p}; x)$ (imagem de $\hat{H}$). Os operadores em letra minúscula são definidos pela sua ação nos vetores de base $\{|x\rangle\}$ e $\{|t\rangle\}$ através das relações

$$\langle xt | \hat{p} || \Psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x \& t), \quad \langle xt | \hat{h} || \Psi \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x \& t). \quad (2.13)$$

Uma vez que vamos majoritariamente trabalhar com as funções de ondas condicionais, será útil rescrever a Eq. (2.13) em termos de $\psi(x|t)$ e $\phi(t|x)$. Para isto, vamos primeiramente analisar a relação no lado esquerdo na Eq. (2.13). Essa relação pode ser rescrita usando a Eq. (2.11)

$$\langle xt | \hat{p} || \Psi \rangle = \langle xt | \hat{p} \int \int \Psi(x' \& t') |x't'\rangle dx' dt' = \int \int \Psi(x' \& t') \langle xt | \hat{p} | x't' \rangle dx' dt' \quad (2.14)$$

e, como $\hat{p}$ não atua sobre a base $\{|t\rangle\}$, temos que

$$\langle xt | \hat{p} || \Psi \rangle = \int \int \Psi(x' \& t') \langle x | \hat{p} | x' \rangle \delta(t - t') dx' dt' = \int \Psi(x' \& t) \langle x | \hat{p} | x' \rangle dx'. \quad (2.15)$$

Substituindo $\Psi(x \& t)$ pela primeira igualdade da (2.12), obtemos

$$\langle xt | \hat{p} || \Psi \rangle = \int \psi(x'|t) \sqrt{f(t)} \langle x | \hat{p} | x' \rangle dx' = \sqrt{f(t)} \int \psi(x'|t) \langle x | \hat{p} | x' \rangle dx', \quad (2.16)$$

e, lembrando que $\psi(x|t) = \langle x|\psi(t)\rangle$, concluímos que

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\Psi\rangle &= \sqrt{f(t)} \int \langle x'|\psi(t)\rangle \langle x|\hat{p}|x'\rangle dx' = \sqrt{f(t)} \langle x|\hat{p} \int |x'\rangle \langle x'| dx' |\psi(t)\rangle = \\ &= \sqrt{f(t)} \langle x|\hat{p}|\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Substituindo este resultado de volta na relação no lado esquerdo da Eq. (2.13) e usando a primeira igualdade da Eq. (2.12), vemos que

$$\sqrt{f(t)} \langle x|\hat{p}|\psi(t)\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x \& t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x|t) \sqrt{f(t)}, \quad (2.18)$$

o que corresponde à conhecida definição do operador momento $\hat{p}$ na mecânica quântica tradicional

$$\langle x|\hat{p}|\psi(t)\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x|t). \quad (2.19)$$

Usando essa mesma linha de raciocínio é simples mostrar que a relação no lado direito da Eq. (2.13) é equivalente à

$$\langle t|\hat{h}|\phi(x)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(t|x), \quad (2.20)$$

que corresponde à definição análoga da Eq. (2.19) para o operador energia $\hat{h}$ em termos da função de onda $\phi(t|x)$.

É importante também falarmos brevemente sobre as relações de comutação canônica. Assim como na mecânica quântica tradicional, definida em $\mathcal{H}_X$, a Eq. (2.19) leva à

$$[\hat{X}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (2.21)$$

na nossa teoria estendida, definida em $\mathcal{H}_T$, da (2.20) temos

$$[\hat{T}, \hat{h}] = -i\hbar. \quad (2.22)$$

Além disso, no caso mais geral de um espaço tridimensional, teremos que o espaço de Hilbert necessário para descrição completa do sistema é $\mathcal{H} = \mathcal{H}_T \otimes \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y \otimes \mathcal{H}_Z$. Dessa forma, definindo os operadores $\hat{X}^\mu = (\hat{T}, \hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ e $\hat{p}^\nu = (\hat{h}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ temos que as relações de comutação canônica podem ser expressas compactamente como

$$[\hat{X}^\mu, \hat{p}^\nu] = g^{\mu\nu} i\hbar, \quad (2.23)$$

onde $g = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$ é a métrica com assinatura positiva.

2.3 Equação dinâmica para $\phi(t|x)$

Dado que introduzimos as ferramentas básicas da extensão STS da mecânica quântica, nesta seção vamos reobter a equação de movimento (2.10) porém agora de maneira análoga

à Ref. [23]. Para o caso de medidas condicionais no tempo, temos a conhecida equação de Schrödinger (tempo-condicional)

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \quad (2.24)$$

que rege a dinâmica da evolução *temporal* do ket $|\psi(t)\rangle$. De maneira similar, desejamos agora determinar a equação que rege a dinâmica da evolução *espacial* do ket $|\phi(x)\rangle$. Para este fim, devemos lembrar que na hipótese 2 supomos que o operador pamiltoniano $\hat{P}$, atuando em $\mathcal{H}_T$, representa o papel do operador hamiltoniano, que atua em $\mathcal{H}_X$. Além disso, analisando as Eqs. (2.19) e (2.20), também esperamos que a mudança da equação de Schrödinger para a equação desejada requer a substituição $t \Rightarrow -x$. Assim, realizando a troca $[t, |\psi(t)\rangle, \hat{H}] \Rightarrow [-x, |\phi(x)\rangle, \hat{P}]$ na equação de Schrödinger (2.24), obtemos

$$\hat{P}|\phi(x)\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}|\phi(x)\rangle. \quad (2.25)$$

Uma vez que temos uma equação dinâmica para $|\phi(x)\rangle$, precisamos de uma regra que diga a forma explícita do operador pamiltoniano. Para isso, vamos retornar à analogia com $\hat{H}$. Sabemos que o operador hamiltoniano do sistema é definido através da tradicional regra de quantização do hamiltoniano clássico

$$H(x, p; t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \Rightarrow \hat{H}(\hat{X}, \hat{p}; t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{X}, t). \quad (2.26)$$

onde $V(x, t)$ é o potencial agindo sobre o sistema em análise. Podemos proceder de maneira similar para o pamiltoniano. Classicamente, este operador é obtido invertendo a dependência funcional do hamiltoniano, ou seja,

$$p(t, H; x) = \pm \sqrt{2m[H - V(x, t)]}. \quad (2.27)$$

Dessa forma, bem como a Eq. (2.26) devemos ter $H \Rightarrow \hat{h}$ e $t \Rightarrow \hat{T}$ (onde $\hat{h}$ e $\hat{T}$ foram definidos na seção 2.2)

$$p(t, H; x) = \pm \sqrt{2m[H - V(x, t)]} \Rightarrow \hat{P}(\hat{T}, \hat{h}; x) = \hat{\sigma}_z \sqrt{2m[\hat{h} - V(x, \hat{T})]}. \quad (2.28)$$

Aqui estamos usando a definição $\hat{\sigma}_z = \text{diag}(1, -1)$ representando os dois ramos da raiz quadrada de p (momentos positivos ou negativos). Substituindo (2.28) de volta em (2.25), temos

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m[\hat{h} - V(x, \hat{T})]}|\phi(x)\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}|\phi(x)\rangle, \quad (2.29)$$

que corresponde à equação espaço condicional obtida na Ref. [23]. Para fins práticos, é interessante rescrever essa equação na base temporal $\{|t\rangle\}$. Aplicando $\langle t|$ em (2.29) e utilizando (2.20), temos

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(x, t)\right)}\phi(t|x) = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(t|x), \quad (2.30)$$

que corresponde a equação dinâmica (2.10) obtida via Hamilton-Jacobi na seção 2.1. Note que no lado esquerdo dessa equação, o operador atuando em $\phi(t|x)$ corresponde ao operador hamiltoniano na base $\{|t\rangle\}$.

O caráter matricial do operador $\hat{\sigma}_z$ implica que a função de onda condicional no espaço deve ser um vetor de duas componentes

$$\phi(t|x) = \begin{pmatrix} \phi^+(t|x) \\ \phi^-(t|x) \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

onde $\phi^+(t|x)$ é interpretado como sendo a amplitude de probabilidade de a partícula ser detectada incidindo pela direita no aparato localizado em x , enquanto $\phi^-(t|x)$ indicando a amplitude de probabilidade dela ser detectada incidindo pela esquerda. Logicamente, a densidade de probabilidade total é dada por

$$\rho(t|x) = |\phi^+(t|x)|^2 + |\phi^-(t|x)|^2 = \phi^\dagger(t|x)\phi(t|x), \quad (2.32)$$

onde o símbolo $\dagger$ indica a operação de transposição e conjugação complexa da matriz.

2.4 Solução para a partícula livre

Devido à sua simplicidade, um ótimo ponto de partida para a análise de qualquer teoria é o problema de uma partícula livre. Logo, esse será o primeiro problema que abordaremos utilizando a equação EC (o resultado dessa seção foi primeiramente obtido na Ref. [23]). Nessa situação temos que $V(x, t) = 0$ e a equação (2.30) toma uma forma mais simples dada por

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)} \phi(t|x) = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(t|x). \quad (2.33)$$

A maneira mais rápida de nos livrarmos do operador fracionário é através de uma separação de variáveis do tipo $\phi(t|x) = e^{-i\epsilon t/\hbar} \phi_\epsilon(x)$ (estamos definindo $\hat{h}|\epsilon\rangle = \epsilon|\epsilon\rangle$). O operador envolvendo a derivada fracionária pode ser expandido em série

$$\sqrt{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^n, \quad (2.34)$$

de modo que

$$\sqrt{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} e^{-i\epsilon t/\hbar} \phi_\epsilon(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \epsilon^n e^{-i\epsilon t/\hbar} \phi_\epsilon(x) = \sqrt{\epsilon} e^{-i\epsilon t/\hbar} \phi_\epsilon(x). \quad (2.35)$$

Portanto, substituindo esse resultado de volta na Eq. (2.33), temos que

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m\epsilon} \phi_\epsilon(x) = -i\hbar \frac{d\phi_\epsilon}{dx}(x). \quad (2.36)$$

Essa é uma equação linear de primeira ordem cuja solução é dada por

$$\phi_\varepsilon(x) \propto e^{i\hat{\sigma}_z Px/\hbar}, \quad P = \pm\sqrt{2m\varepsilon}. \quad (2.37)$$

Utilizando (2.37), note que a substituição de $\phi(t|x) = e^{-i\varepsilon t/\hbar}\phi_\varepsilon(x)$ de volta na Eq. (2.33) resulta em

$$\hat{P}\phi(t|x) = P\phi(t|x). \quad (2.38)$$

Portanto, P é um autovalor do operador momento e, para que este autovalor seja real, precisamos que $\varepsilon \geq 0$. Assim, no problema da partícula livre, nenhum problema surge devido à existência de soluções com energias negativas.

A solução $\phi_\varepsilon(t|x)$ que acabamos de encontrar para a equação dinâmica (2.33) corresponde a uma solução particular. Dessa forma, devido à linearidade dessa equação, vemos que a solução geral é dada por

$$\phi(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty e^{(i/\hbar)\hat{\sigma}_z\sqrt{2m\varepsilon}x - i\varepsilon t/\hbar} C_\varepsilon d\varepsilon, \quad (2.39)$$

onde C_ε é um vetor de duas componentes. Podemos ainda rescrever essa integral em termos dos momentos,

$$\phi(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi m\hbar}} \int_0^\infty e^{(i/\hbar)\hat{\sigma}_z Px - i\varepsilon P t/\hbar} C_P dP, \quad \varepsilon_P = P^2/2m. \quad (2.40)$$

Logo, usando a definição (2.32), temos que a densidade de probabilidade no problema da partícula livre é dada por

$$\rho(t|x) = \frac{1}{2\pi m\hbar} \left[\left| \int_0^\infty e^{(i/\hbar)Px - i\varepsilon P t/\hbar} C_P^+ dP \right|^2 + \left| \int_0^\infty e^{-(i/\hbar)Px - i\varepsilon P t/\hbar} C_P^- dP \right|^2 \right], \quad (2.41)$$

onde C_P^+ e C_P^- estão associados à amplitude de probabilidade de medirmos a partícula com momento p e $-p$, respectivamente. Esse resultado é conhecido como a densidade de probabilidade do tempo de chegada de uma partícula livre em um aparato. Essa equação apresenta uma excelente concordância com simulações numéricas do tipo “quantum-jumps” para tempos de voo [39]. Vale ressaltar que existem vários modelos que obtêm a Eq. (2.41) dentro do escopo da mecânica quântica tradicional, porém tais modelos recorrem a artifícios *ad-hoc* para deduzi-la. Por outro lado, a abordagem aqui apresentada foi desenvolvida através de uma nova função de onda, condicional no espaço, definida por primeiros princípios.

2.5 Solução para potencias independentes do tempo

Nesta seção vamos dar um passo adiante em relação aos resultados da Ref. [23]. Mostramos na seção 2.4 que para o problema de uma partícula livre, existe uma forma fechada para a solução da Eq. (2.30). Agora, vamos mostrar que para uma vasta gama de sistemas físicos, os quais estão sob ação de um potencial independente do tempo, é possível usar uma técnica

similar à da seção anterior e também obter uma solução fechada para a Eq. (2.30). Na ausência de dependência temporal no potencial, a Eq. (2.30) torna-se

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(x) \right)} \phi(t|x) = -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(t|x). \quad (2.42)$$

De maneira análoga à seção anterior, podemos usar uma separação de variáveis $\phi(t|x) = e^{-i\epsilon t/\hbar} \phi_\epsilon(x)$, e pelo mesmo argumento da expansão em série vemos que

$$\hat{\sigma}_z \sqrt{2m [\epsilon - V(x)]} \phi_\epsilon(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \phi_\epsilon(x). \quad (2.43)$$

Novamente, esta é uma equação diferencial de primeira ordem cuja solução é dada por

$$\phi_\epsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{(i/\hbar)\hat{\sigma}_z \int^x \sqrt{2m[\epsilon - V(x')]} dx'}. \quad (2.44)$$

Portanto, como (2.42) ainda é uma equação linear, temos que a solução geral é

$$\phi(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{(i/\hbar)\hat{\sigma}_z \int^x \sqrt{2m[\epsilon - V(x')]} dx' - i\epsilon t/\hbar} C_\epsilon d\epsilon, \quad (2.45)$$

ou, em termos do momento clássico $P(\epsilon, x)$,

$$\phi(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{(i/\hbar) \int^x P(\epsilon; x') dx' - i\epsilon t/\hbar} C_\epsilon d\epsilon. \quad (2.46)$$

Vemos que para qualquer potencial $V(x)$ basta realizar a integração no argumento da exponencial para obter a solução geral do problema. À primeira vista, essa simplicidade pode parecer estranha, afinal, para a equação de Schrödinger não temos uma solução com formato único para todo $V(x)$ como observado em (2.45). Entretanto, este resultado é de certa forma esperado: primeiramente, analisando a Eq. (2.42), vemos que o potencial $V(x, t) = V(x)$ que escolhemos só depende do parâmetro condicional dessa equação, ou seja, da posição x . Dessa forma, se desejamos obter um resultado equivalente na equação de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x|t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x|t), \quad (2.47)$$

devemos escolher um potencial $V(x, t)$ que só dependa do parametro condicional t dessa equação. Assim, fazendo $V(x, t) = V(t)$ na Eq. (2.47), temos que

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t) \right] \psi(x|t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x|t). \quad (2.48)$$

Essa equação pode ser facilmente resolvida por uma separação de variáveis, resultando em

$$\psi(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-(i/\hbar) \int^t [p^2/2m + V(t')] dt' + ipx/\hbar} A_p dp. \quad (2.49)$$

ou, em termos do hamiltoniano $H(p;t)$,

$$\psi(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-(i/\hbar) \int^t H(p;t') dt' + ipx/\hbar} A_p dp. \quad (2.50)$$

Comparando (2.45) com (2.49) e (2.46) com (2.50), vemos que quando consideramos $V = V(x)$ para $\phi(t|x)$ e $V = V(t)$ para $\psi(x|t)$, obtemos uma solução geral simples em termos de uma integração do momento e do hamiltoniano, respectivamente. Aqui, também podemos ver a simetria entre resultados em $\mathcal{H}_X$ e $\mathcal{H}_T$ através da transformação $(x, p, H; \psi) \Leftrightarrow (-t, \varepsilon, P; \phi)$ aplicada às Eqs. (2.50) e (2.46). As similaridades entre essas duas soluções ficam ainda mais claras se identificarmos a ação clássica

$$S(x, t) = \int^t L(x, t') dt' = \int^t \left[p(x, t') \frac{dx}{dt'} - H(x, t') \right] dt' = \int^x dx' p(x', t) - \int^t dt' H(x, t') \quad (2.51)$$

em (2.50) e (2.46), temos

$$\phi(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\varepsilon e^{-(i/\hbar) S(x)} C_\varepsilon, \quad V(x, t) = V(x). \quad (2.52)$$

$$\psi(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{-(i/\hbar) S(t)} A_p, \quad V(x, t) = V(t). \quad (2.53)$$

2.6 Potencial eletromagnético: invariância de calibre do formalismo STS

Até agora, todos os casos de aplicação da equação EC que discutimos foram em problemas independentes do tempo, e que permitiam a eliminação da derivada fracionária. Nesta seção vamos discutir um caso onde *não* podemos fazer essa simplificação. Nesse contexto, mostraremos como levar em consideração a interação eletromagnética no formalismo STS e provaremos que a equação EC (2.30) possui invariância sob escolha de calibre do potencial eletromagnético. O hamiltoniano para uma partícula em um campo eletromagnético é obtido fazendo o acoplamento mínimo no hamiltoniano da partícula livre [37], ou seja,

$$H = \frac{1}{2m} \left[p - \frac{q}{c} A(x, t) \right]^2 + q\Phi(x, t), \quad (2.54)$$

onde $A(x, t)$ é o potencial vetor e $\Phi(x, t)$ o potencial escalar. No caso geral, os campos elétrico e magnético são dados por

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad \text{e} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.55)$$

A fim de obter a equação dinâmica para $|\phi(x)\rangle$, devemos calcular o hamiltoniano do sistema. Para isso, precisamos inverter a equação Eq. (2.54) para obter o momento cinético em função do hamiltoniano e dos potenciais. Isolando o momento na Eq. (2.54), temos

$$p = \pm \sqrt{2m[H - q\Phi(x, t)]} + \frac{q}{c} A(x, t), \quad (2.56)$$

e, seguindo a receita dada pela Eq.(2.28) para a quantização deste operador, obtemos

$$\hat{P}(\hat{T}, \hat{h}) = \hat{\sigma}_z \sqrt{2m [\hat{h} - q\hat{\Phi}(x, \hat{T})]} + \frac{q}{c} \hat{A}(x, \hat{T}). \quad (2.57)$$

Substituindo o hamiltoniano (2.57) de volta na equação EC (2.25), temos

$$\left[\hat{\sigma}_z \sqrt{2m [\hat{h} - q\hat{\Phi}(x, \hat{T})]} + \frac{q}{c} \hat{A}(x, \hat{T}) \right] |\phi(x)\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} |\phi(x)\rangle, \quad (2.58)$$

que na representação temporal torna-se

$$\left[\hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi(x, t) \right)} + \frac{q}{c} A(x, t) \right] \phi(t|x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi(t|x). \quad (2.59)$$

Como sabemos, existe uma arbitrariedade na escolha dos potenciais $A(x, t)$ e $\Phi(x, t)$ de modo que poderíamos ter escolhido um outro conjunto de potenciais $A'(x, t)$ e $\Phi'(x, t)$ tais que

$$\Phi'(x, t) = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial F}{\partial t}, \quad A'(x, t) = A(x, t) + \frac{\partial F}{\partial x}, \quad (2.60)$$

e a Eq. (2.55) continuaria resultando nos mesmos campos $E(x, t)$ e $B(x, t)$. Logo, para que o formalismo STS possua invariância de calibre, a equação EC para os potenciais $A'(x, t)$ e $\Phi'(x, t)$

$$\left[\hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x, t) \right)} + \frac{q}{c} A'(x, t) \right] \phi'(t|x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi'(t|x) \quad (2.61)$$

deve resultar na equação com os potenciais originais, Eq. (2.59), quando $\phi'(t|x)$ for relacionada à $\phi(t|x)$ por uma transformação unitária $\hat{U}$, i.e. $\phi'(t|x) = \hat{U} \phi(t|x)$. Note que nesse caso, as probabilidades previstas pelas equações (2.59) e (2.61) são as mesmas já que a densidade de probabilidade se mantém inalterada,

$$\rho'(t|x) = \phi'^{\dagger}(t|x) \phi'(t|x) = \phi^{\dagger}(t|x) \hat{U}^{\dagger} \hat{U} \phi(t|x) = \phi^{\dagger}(t|x) \phi(t|x) = \rho(t|x). \quad (2.62)$$

Agora, para mostrar que o argumento de invariância é verdadeiro, ou seja, que a Eq. (2.59) é equivalente à Eq. (2.61), vamos considerar a transformação unitária mais simples possível dada por $\hat{U} = e^{iqF(x, t)/(\hbar c)}$. Logo, substituindo $\phi'(x, t)$ por $e^{\frac{iq}{\hbar c} F(x, t)} \phi(x, t)$ na Eq. (2.61), temos

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x, t) \right)} e^{\frac{iq}{\hbar c} F(x, t)} \phi(t|x) + \frac{q}{c} \left(A'(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} F(x, t) \right) e^{\frac{iq}{\hbar c} F(x, t)} \phi(t|x) = \\ = -i\hbar e^{\frac{iq}{\hbar c} F(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} \phi(t|x). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Vamos analisar como o operador fracionário irá se comportar quando atuado em $e^{\frac{iq}{\hbar c} F(x, t)} \phi(x, t)$. Expandindo esse operador em série temos que

$$\sqrt{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x, t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi(x, t) \right)^n. \quad (2.64)$$

Portanto, o resultado da aplicação da potência de ordem $n = 1$ dessa expansão na função $e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(x,t)$ resulta em

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x,t)\right)e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(t|x) = e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\left(\Phi'(x,t) + 1/c\frac{\partial F}{\partial t}\right)\right]\phi(t|x). \quad (2.65)$$

Agora, inspecionando a Eq. (2.65), vemos que para $n = 2$, a segunda aplicação do mesmo operador é dada por

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x,t)\right)^2 e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(t|x) = e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\left(\Phi'(x,t) + 1/c\frac{\partial F}{\partial t}\right)\right]^2 \phi(t|x). \quad (2.66)$$

Dessa forma, a n -ésima aplicação gera a expressão

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x,t)\right)^n e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(t|x) = e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\left(\Phi'(x,t) + 1/c\frac{\partial F}{\partial t}\right)\right]^n \phi(t|x). \quad (2.67)$$

Concluimos que o operador da Eq. (2.64), quando aplicado em $\phi'(x,t)$, pode ser rescrito como

$$\sqrt{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi'(x,t)}e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(x,t) = e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\sqrt{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\left(\Phi'(x,t) + 1/c\frac{\partial f}{\partial t}\right)}\phi(x,t). \quad (2.68)$$

Substituindo este resultado de volta em (2.63), temos que

$$\begin{aligned} e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\hat{\sigma}_z\sqrt{2m\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\left(\Phi'(x,t) + 1/c\frac{\partial F}{\partial t}\right)\right]}\phi(t|x) + \frac{q}{c}\left(A'(x,t) - \frac{\partial}{\partial x}F(x,t)\right)e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\phi(t|x) = \\ = -i\hbar e^{\frac{iq}{\hbar c}F(x,t)}\frac{\partial}{\partial x}\phi(t|x). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Finalmente, cancelando as exponenciais em ambos os lados da Eq. (2.69) e usando a transformação da calibre (2.60), obtemos

$$\hat{\sigma}_z\sqrt{2m\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi(x,t)\right)}\phi(t|x) + \frac{q}{c}A(x,t)\phi(t|x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(t|x), \quad (2.70)$$

que corresponde exatamente à Eq. (2.59). Concluimos assim a prova da invariância de calibre do formalismo STS.

2.7 Lagrangiana da equação espaço-condicional

Concluimos este capítulo construindo uma lagrangiana geradora da equação EC através de argumentos de simetria. Como sabemos [37], a equação de Schrödinger pode ser obtida a partir da seguinte lagrangiana para o campo complexo clássico $\psi(x|t)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\psi(\psi, \psi^*, \partial_x^2\psi, \partial_t\psi; x, t) &= \psi^*(x|t)\left[\hat{H} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\psi(x|t) \\ &= \psi^*(x|t)\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x,t) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]\psi(x|t). \end{aligned} \quad (2.71)$$

Dessa forma, pelos resultados obtidos anteriormente é de se esperar que a lagrangiana geradora da equação EC será obtida através da transformação $(x, p, H; \psi) \Leftrightarrow (-t, h, P; \phi)$. Assim, esperamos que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_\phi(\phi, \phi^\dagger, \partial_x \phi, \partial_t^{1/2} \phi; x, t) &= \phi^\dagger(t|x) \left[\hat{P} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi(t|x) \\ &= \phi^\dagger(t|x) \left[\hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(x) \right)} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi(t|x). \quad (2.72)\end{aligned}$$

Como veremos abaixo, essa é de fato a lagrangiana para a equação (2.59) quando consideramos potenciais independentes do tempo. Por outro lado, a prova de que essa é a lagrangiana que gera a equação EC para um potencial geral $V = V(x, t)$ ainda não foi obtida devido a dificuldades matemáticas geradas pela raiz do operador derivada temporal. Para potenciais do tipo $V = V(x)$, utilizando a equação (2.46), sabemos que essa lagrangiana toma uma forma muito mais simples dada por

$$\mathcal{L}_\phi(\phi, \phi^\dagger, \partial_x \phi; x) = \phi^\dagger(t|x) \left[\hat{\sigma}_z \sqrt{2m[\varepsilon - V(x)]} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi(t|x). \quad (2.73)$$

Agora, aplicando a equação de Euler-Lagrange para o campo $\phi(t|x)$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_\phi}{\partial (\frac{\partial \phi}{\partial x})} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}_\phi}{\partial \phi} = 0, \quad (2.74)$$

obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \phi^\dagger}{\partial x}(t|x) - \phi^\dagger(t|x) \hat{\sigma}_z \sqrt{2m[\varepsilon - V(x)]} = 0. \quad (2.75)$$

Tomando o complexo conjugado desta equação,

$$-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x}(t|x) = \hat{\sigma}_z \sqrt{2m[\varepsilon - V(x)]} \phi(t|x), \quad (2.76)$$

o que prova que esta lagrangiana gera a equação EC.

Neste capítulo, revisamos os conceitos introduzidos na Ref. [23]. Além disso, elaboramos o formalismo STS via Hamilton-Jacobi, resolvemos a equação EC para um potencial do tipo $V = V(x)$, verificamos a invariância de calibre dessa teoria, e por último mostramos como obter a equação EC a partir de uma lagrangiana para um campo complexo clássico. No próximo capítulo, aplicamos essa extensão teórica da mecânica quântica ao problema do tempo de travessia.

3 O FORMALISMO STS E O PROBLEMA DO TEMPO DE TRAVESSIA

Neste capítulo comparamos as previsões feitas pela função de onda EC, $\phi(t|x)$, com os resultados experimentais para o tempo de travessia em sistemas eletromagnéticos análogos realizados em [33, 34]. Além da comparação com os dados experimentais, também comparamos nosso resultado com os modelos teóricos popularmente utilizados na descrição do tempo de tunelamento: os modelos de Büttiker-Landauer e phase-time. Como veremos, o resultado destas comparações é que o nosso modelo STS além de ser teoricamente mais simples, também apresenta uma maior compatibilidade com os dados experimentais quando comparado aos modelos tradicionais.

3.1 Valores esperados e o operador tempo

Na mecânica quântica tradicional, temos que o valor esperado de um observável $\hat{A}$ em relação a um estado $|\psi(t)\rangle$ é dado por

$$\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} \equiv \frac{\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle}. \quad (3.1)$$

Mas, é simples ver que $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$, uma vez que

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x|t)|^2 \quad (3.2)$$

representa a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer posição do espaço, *dado que* a medida ocorreu no tempo t . Isto é esperado pois admitimos a existência da partícula e, portanto, devemos sempre encontrá-la em alguma posição independente do instante da medição (matematicamente isso é representado pela evolução unitária da dinâmica de Schrödinger). Dessa forma,

$$\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} \equiv \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \quad (3.3)$$

A interpretação desta equação é a de que ela representa a média de várias medidas do observável $\hat{A}$ quando as mesmas acontecem no instante t .

No capítulo anterior, mostramos como o formalismo STS introduz de forma natural um novo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_T$ sobre o qual os observáveis $\hat{B}$ podem atuar. Dessa forma, podemos similarmente à Eq. (3.1) definir o valor esperado do operador $\hat{B}$ em relação ao estado $|\phi(x)\rangle$ como

$$\langle \hat{B} \rangle_{\phi(x)} \equiv \frac{\langle \phi(x) | \hat{B} | \phi(x) \rangle}{\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle}. \quad (3.4)$$

Essa equação representa a media de várias medidas do observável $\hat{B}$ quando as mesmas ocorrem na posição x . Aqui surge uma diferença fundamental entre as funções ψ e ϕ . O termo no denominador

$$\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt |\phi(t|x)|^2, \quad (3.5)$$

representa a probabilidade de detectar a partícula em qualquer tempo t , *dado que* a medida ocorreu na posição x . Esse valor, entretanto, não necessariamente precisa ser 1. Este é um fato que pode ser entendido utilizando até mesmo a mecânica quântica usual. Por exemplo, quando uma partícula está em um estado que possui um nó (ponto onde a função de onda $\psi(x|t)$ é sempre nula para todo tempo, e.g. uma franja escura no experimento de dupla fenda), a partícula nunca poderá ser detectada na posição do nó, independente do tempo t escolhido, ou seja, $\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle = 0$. Assim, temos que não só há pontos onde $\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle \neq 1$ mas existem pontos onde $\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle = 0$. A conclusão que chegamos é que a probabilidade de detectar a partícula em qualquer tempo t na posição x deve satisfazer a relação

$$0 \leq \langle \phi(x) | \phi(x) \rangle \leq 1. \quad (3.6)$$

Logo, o termo no denominador em (3.4) não pode ser ignorado. Vale ressaltar que a condição (3.6) nos diz que a dinâmica espacial (2.25) é não unitária.

Para calcular a média de medidas temporais do instante de observação vamos considerar $\hat{B} = \hat{T}$ e escrever a expressão (3.4) em termos da densidade de probabilidade $|\phi(t|x)|^2$

$$\langle \hat{T} \rangle_{\phi(x)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dt \, t |\phi(t|x)|^2}{\int_{-\infty}^{\infty} dt |\phi(t|x)|^2}. \quad (3.7)$$

Aqui usamos a identidade $\mathbb{1} = \int dt |t\rangle \langle t|$. No restante deste trabalho vamos utilizar $\langle \hat{B} \rangle_{\phi(x)} = \langle \hat{B} \rangle(x)$ já que estaremos sempre realizando médias em $\mathcal{H}_T$.

3.2 Tempo de atraso

Agora, uma vez que o formalismo STS permite definir um operador tempo e valores esperados para este operador, é natural definir o tempo de travessia de maneira intuitiva. Uma medida do tempo de travessia de x_0 a x , também chamada de tempo de atraso (*delay-time*), consiste em calcular, em média, a diferença entre o instante em que a partícula é detectada em x e o instante que ela é detectada em x_0 . Isto pode ser expresso de forma simples como

$$T_{\text{delay}}(x, x_0) \equiv \langle \hat{T} \rangle(x) - \langle \hat{T} \rangle(x_0). \quad (3.8)$$

Para o caso de uma partícula livre, obtivemos no capítulo anterior a expressão analítica

$$\rho(t|x) = \frac{1}{2\pi m\hbar} \left[\left| \int_0^{\infty} e^{(i/\hbar)px - i\varepsilon_p t/\hbar} C_p^+ dp \right|^2 + \left| \int_0^{\infty} e^{-(i/\hbar)px - i\varepsilon_p t/\hbar} C_p^- dp \right|^2 \right]. \quad (3.9)$$

Logo, podemos calcular a Eq. (3.7) e, conseqüentemente, a Eq.(3.8) substituindo a (3.9) em (3.7). Para isto, vamos primeiramente rescrever a Eq. (3.9) em termo dos números de onda,

$$\rho(t|x) = \frac{\hbar}{2\pi m} \sum_{r=\pm} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \sqrt{kk'} C_k^r C_{k'}^{r*} \times e^{ir(k-k')x} e^{-i\hbar(k^2-k'^2)t/(2m)}, \quad (3.10)$$

onde $*$ indica o complexo conjugado. Agora, substituindo a Eq. (3.10) de volta em (3.7), temos duas integrais a serem feitas, uma no numerador e outra no denominador. Se definirmos a integral no numerador como I , temos que

$$I = \frac{\hbar}{2\pi m} \sum_{r=\pm} \int_0^\infty dk \int_0^\infty dk' \sqrt{kk'} C_k^r C_{k'}^{r*} \times e^{ir(k-k')x} \int_{-\infty}^\infty dt \, t \, e^{-i\hbar(k^2-k'^2)t/(2m)}. \quad (3.11)$$

A integração na variável t em I resulta em

$$\int_{-\infty}^\infty dt \, t \, e^{-i\hbar(k^2-k'^2)t/(2m)} = \frac{2\pi m}{i\hbar k'} \frac{\partial}{\partial k'} \delta[\hbar(k^2 - k'^2)/(2m)], \quad (3.12)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Assim, usando a relação

$$\delta\left[\frac{\hbar(k^2 - k'^2)}{2m}\right] = \frac{m}{\hbar k} \left[\delta(k + k') + \delta(k - k') \right],$$

e notando que $k, k' \geq 0$, a única contribuição não nula para I vem do termo $\delta(k - k')$. Portanto, substituindo a expressão resultante de (3.12) em I e realizando a integração em k temos que

$$I = \frac{m}{i\hbar} \sum_{r=\pm} \int_0^\infty dk' \frac{C_{k'}^{r*}}{\sqrt{k'}} e^{-ir k' x} \frac{\partial}{\partial k'} \left[\frac{C_{k'}^r}{\sqrt{k'}} e^{ir k' x} \right]. \quad (3.13)$$

Este resultado pode ser expresso de forma mais compacta se trocarmos k' por k e introduzirmos uma nova função $\Gamma_k^r(x) \equiv C_k^r e^{ir k x} / \sqrt{k}$,

$$I = \frac{m}{i\hbar} \int_0^\infty dk \left[\Gamma_k^{+*}(x) \frac{\partial \Gamma_k^+(x)}{\partial k} + \Gamma_k^{-*}(x) \frac{\partial \Gamma_k^-(x)}{\partial k} \right]. \quad (3.14)$$

A integral no denominador da Eq. (3.7) pode ser feita de maneira similar, resultando em $\int_{-\infty}^\infty dt \, \rho(t|x) = \int_0^\infty dk \left[|C_k^+|^2 + |C_k^-|^2 \right]$. Finalmente, substituindo esses resultados de volta em (3.7), temos

$$\langle \hat{T} \rangle(x) = \frac{\frac{m}{i\hbar} \int_0^\infty dk \left[\Gamma_k^{+*}(x) \frac{\partial \Gamma_k^+(x)}{\partial k} + \Gamma_k^{-*}(x) \frac{\partial \Gamma_k^-(x)}{\partial k} \right]}{\int_0^\infty dk \left[|C_k^+|^2 + |C_k^-|^2 \right]}. \quad (3.15)$$

A Eq. (3.15) corresponde à expressão para o valor esperado do operador tempo $\hat{T}$ calculado para o estado $|\phi(x)\rangle$ de uma partícula livre na posição x , ou seja, a média do tempo de detecção de uma partícula dado que as medidas ocorrem na posição x . Apesar desta dedução ter sido feita para o caso de uma partícula livre, se assumimos que $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_k - V_0)}$, esta expressão continua válida para um potencial constante V_0 .

3.3 Aplicação a um potencial retangular

Como discutido na introdução deste capítulo, vamos agora usar a equação (3.15) para calcular o *delay-time* para uma partícula atravessar uma barreira de potencial V_0 definida na região $0 < x < L$, representada graficamente na Fig 2. Para esse problema, o valor do tempo de

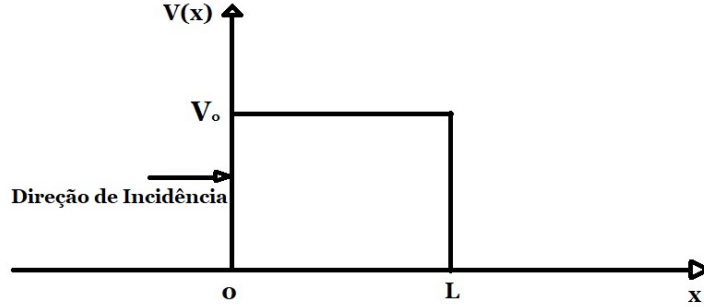


Figura 2 – Barreira de potencial $V(x)$ em função da posição. A figura também indica a direção de incidência da partícula na barreira.

atraso será dado, segundo a equação (3.8), por

$$T_{\text{delay}}(L) \equiv \langle \hat{T} \rangle(L) - \langle \hat{T} \rangle(0). \quad (3.16)$$

Este cálculo requer um conhecimento prévio dos coeficientes $C_k^\pm$ da (3.15). Entretanto, em experimentos usuais conhecemos a função de onda incidente ψ da partícula

$$\psi(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \tilde{C}_k e^{ikx - iE_k t/\hbar}. \quad (3.17)$$

Portanto, comumente temos informações a respeito de $\tilde{C}_k$ em vez de $C_k^\pm$. Devemos então relacionar estes dois coeficientes. À primeira vista, os coeficientes $C_k^\pm$ da (3.9) aparentam não ter relação com os coeficientes $\tilde{C}_k$ da (3.17), afinal, obtivemos (3.9) de forma independente da (3.17). Além disso, estes coeficientes estão relacionados a situações experimentais diferentes: os coeficientes de $\psi(x|t)$ [$\phi(t|x)$] descrevem resultados experimentais onde o tempo (posição) é um parâmetro condicional. Todavia, a regra de Bayes, discutida na seção 1.2, mostra que os coeficientes $C_k^\pm$ e $\tilde{C}_k$ estão conectados pela relação

$$|\psi(x,t)|^2 f(t) = |\phi(t,x)|^2 g(x). \quad (3.18)$$

Além disso, esses coeficientes possuem interpretações similares, dada pela amplitude de probabilidade de medir a partícula com momento $\hbar k$. Logo a hipótese mais simples que podemos fazer é que

$$C_k^\pm = \Theta(\pm k) \tilde{C}_k, \quad (3.19)$$

com $\Theta(\pm k)$ sendo a função degrau, ou seja, nula se $\pm k < 0$ e com valor 1 se $\pm k > 0$.

Nesse contexto, considerando que o detector está localizado imediatamente após a barreira, o cálculo de $\langle T \rangle(L)$ exige o conhecimento de $\tilde{C}_k$ para $x > L$, para então calcularmos

$C_k^\pm$. Sabemos que a função de onda de Schrödinger estacionária para a região $x > L$ é dada por $\psi_k \sim \mathcal{T}(k)e^{ikx}$, onde $\mathcal{T}(k)$ é a amplitude coeficiente de transmissão [40]

$$\mathcal{T}(k) = \frac{4kk_1 e^{-iL(k-k_1)}}{(k+k_1)^2 - e^{2iLk_1}(k-k_1)^2}. \quad (3.20)$$

Aqui, $k = \sqrt{2mE}$ e $k_1 = \sqrt{2m(E-V_0)}$ são os vetores de onda dentro e fora da barreira respectivamente. Dessa forma, para $x > L$ temos, usando (3.19), $C_k^+ = A_k \mathcal{T}(k)$ e $C_k^- = 0$, onde A_k corresponde à amplitude da função de onda de Schrödinger incidindo na barreira. Assim, substituindo $C_k^\pm$ de volta na (3.15), obtemos

$$\langle \hat{T} \rangle(L) = \frac{\frac{m}{i\hbar} \int_0^\infty dk \left(\frac{A_k}{\sqrt{k}} \mathcal{T}(k) e^{ikL} \right)^* \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{A_k}{\sqrt{k}} \mathcal{T}(k) e^{ikL} \right)}{\int_0^\infty dk |A_k \mathcal{T}(k)|^2}. \quad (3.21)$$

É sempre possível escolher uma fase apropriada nos coeficientes A_k de forma que em média o pulso incidente atinge o início da barreira em $t = 0$, ou seja, $\langle \hat{T} \rangle(0) = 0$. Dessa forma, concluímos que

$$T_{\text{delay}}(L) = \frac{\frac{m}{i\hbar} \int_0^\infty dk \left(\frac{A_k}{\sqrt{k}} \mathcal{T}(k) e^{ikL} \right)^* \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{A_k}{\sqrt{k}} \mathcal{T}(k) e^{ikL} \right)}{\int_0^\infty dk |A_k \mathcal{T}(k)|^2}. \quad (3.22)$$

Este é o nosso principal resultado teórico deste capítulo, onde definimos o tempo para uma partícula atravessar uma barreira de potencial em termos do valor esperado de um operador tempo. A Eq. (3.21) será chamada de modelo STS para o tempo de travessia.

3.4 Analogia eletromagnética para o tempo de travessia

Como previamente discutido, o tempo de tunelamento de partículas massivas é usualmente muito curto, levando a dificuldades experimentais. Isto motivou o uso de experimentos eletromagnéticos análogos cujo tempo envolvido é muito mais longo, sendo possível dessa forma testar mais facilmente as previsões feitas por modelos quânticos para o tunelamento de partículas. Esses experimentos consistem na propagação de micro-ondas em guias de onda de dimensões variáveis que simulam uma barreira de potencial (incluindo o regime de tunelamento). A analogia entre esses dois problemas é vista através da equação de Schrödinger independente do tempo

$$E \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi(x), \quad (3.23)$$

que no caso de um potencial constante V_0 , pode se escrita como

$$[E - V_0] \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (3.24)$$

ou ainda

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k_1^2 \psi(x) = 0, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}, \quad (3.25)$$

que é equivalente à equação de Helmholtz do eletromagnetismo clássico [41].

Vamos agora utilizar o nosso modelo STS para a descrição dos dados dos experimentos eletromagnéticos da Ref. [33, 34]. Essas realizações consistem de um circuito X-band (frequências entre 8 GHz e 12 GHz) de micro-ondas, o qual possui uma região estreitada de tamanho L , a região P-band (frequências entre 250 MHz e 500 MHz). O circuito é feito de um guia de onda com formato retangular que possui dimensões $a' \times b' = 7.9 \times 15.8 \text{ mm}^2$ na P-band, e $a \times b = 10.16 \times 22.86 \text{ mm}^2$ na X-band, ver Fig. 3. O sinal eletromagnético utilizado no circuito

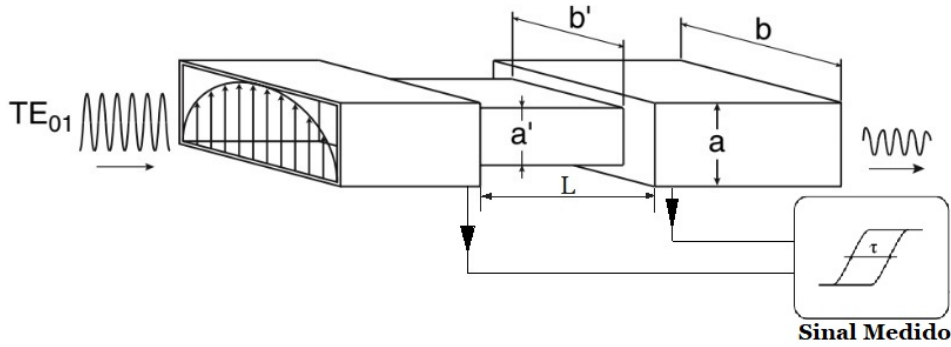


Figura 3 – Esquema do experimento realizado em [33, 34]. A região mais larga corresponde à X-band, enquanto a mais estreita corresponde à P-band. O tempo de atraso τ é medido através da separação entre o sinal detectado antes e depois do estreitamento. Fonte: Ref.[33]

é enviado para um osciloscópio de alta resolução, e medições do sinal são feitas imediatamente antes e depois da região que sofre o estreitamento (para mais informações a respeito do *setup* experimental, ver Ref. [33, 34]). Nessa realização o modo $TE_{0,1}$ do guia de onda é excitado (para uma breve revisão sobre guias de onda ver apêndice B), e sabemos que esse modo tem número de onda dado por (B.7)

$$k = \sqrt{(\omega/c)^2 - \pi^2(1/b)^2}, \quad (3.26)$$

o que leva ao seguinte valor para o índice de refração efetivo do guia

$$n \equiv \frac{c}{v} = \frac{ck}{\omega} = \frac{c\sqrt{(\omega/c)^2 - \pi^2(1/b)^2}}{\omega} = \sqrt{1 - [\lambda/(2b)]^2}, \quad (3.27)$$

com λ representando o comprimento de onda do sinal no vácuo. Com isso em mente, o problema de uma barreira retangular é equivalente ao de um circuito óptico dadas as seguintes conexões:

$$\begin{aligned} k &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \longrightarrow \frac{2\pi}{\lambda}n = \frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1 - [\lambda/(2b)]^2} = \frac{2\pi}{c}(v^2 - v_{out}^2)^{1/2}, \quad e \\ k_1 &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} \longrightarrow \frac{2\pi}{\lambda}n' = \frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1 - [\lambda/(2b')]^2} = \frac{2\pi}{c}(v^2 - v_{in}^2)^{1/2}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde k e k_1 são os vetores de onda dentro e fora da barreira de potencial, respectivamente, e v é a frequência do pulso. As constantes v_{in} e v_{out} em (3.28) dependem dos parâmetros experimentais b e b' , $v_{in} = c/2b'$ e $v_{out} = c/2b$, e elas representam a frequência mínima para que a onda

se propague no interior das respectivas regiões do guia. Note que substituindo a Eq. (3.28) na relação de dispersão para partículas quânticas $\hbar^2 k_1^2 / (2m) = \hbar^2 k^2 / (2m) + V_0$, obtemos o potencial equivalente V_0 para o sistema óptico $k_0 \equiv \sqrt{2mV_0} / \hbar = 2\pi / c (v_{in}^2 - v_{out}^2)^{1/2}$. Mais ainda, a velocidade de grupo para uma partícula livre é dada por $d\omega / dk = \hbar k / m$, enquanto que para o guia de onda temos $d\omega / dk = c^2 k / \omega$. Portanto, devemos também realizar a substituição

$$\frac{\hbar}{m} \rightarrow \frac{c^2}{2\pi v}. \quad (3.29)$$

Agora, usando as relações eletromagnéticas-quânticas descritas acima, podemos rescrever a nossa expressão para o modelo STS de maneira apropriada para comparar nossas previsões com os experimentos da Ref. [33, 34]. Substituindo (3.28) e (3.29) em (3.21), e definindo $A_v \equiv \sqrt{\partial k / \partial v} A_k$, temos que

$$\langle \hat{T} \rangle(L) = \frac{\int_{v_{out}}^{\infty} dv \left(\mathcal{T}(v) A_v e^{ik(v)L} \right)^* \frac{\partial}{\partial v} \left(\mathcal{T}(v) A_v e^{ik(v)L} \right)}{2\pi i \int_{v_{out}}^{\infty} dv |\mathcal{T}(v) A_v|^2}. \quad (3.30)$$

Finalmente, para completar a analogia entre a função de onda da mecânica quântica e as ondas do eletromagnetismo, vamos associar o modulo quadrado do coeficiente A_v com a intensidade da linha espectral do pulso. No experimento em questão, o sinal de micro-ondas é fornecido por um Klystron (Varian X-13) para o qual a largura de linha típica é da ordem de 30 MHz [42]. Logo, assumindo que o pulso eletromagnético possui uma distribuição lorentziana típica, temos que

$$A_v = \frac{\sqrt{\Lambda / (2\pi)} e^{-i2\pi v t_\mu}}{i(v + v_\mu) + (\Lambda/2)} - \frac{\sqrt{\Lambda / (2\pi)} e^{-i2\pi v t_\mu}}{i(v - v_\mu) - (\Lambda/2)}, \quad (3.31)$$

onde Λ é o parâmetro que especifica a meia largura a meia altura de forma que $O(\Lambda) = 30$ MHz, e v_μ é a frequência média da distribuição lorentziana. Na Eq. (3.31), temos que $t_\mu = \ell / V_\mu$, com ℓ sendo a distância percorrida pelo pulso eletromagnético até o começo da barreira ($x = 0$) e V_μ é a velocidade de fase da frequência média v_μ . Sob estas circunstâncias, note que o fator de fase $\exp\{-i2\pi v t_\mu\}$ na Eq. (3.31), já leva em consideração o tempo médio para o sinal chegar à barreira, de forma que o delay-time é dado por $T_{delay}(L, v_\mu) = \langle T \rangle(L, v_\mu)$.

3.5 Teoria vs experimento

Vamos agora voltar nossa atenção à comparação da previsão feita pelo modelo STS dado por (3.30) com os dados experimentais da Ref. [33, 34], e com os modelos teóricos de Büttiker-Landauer e phase-time abordados no apêndice C [Eq. (C.4) e Eq. (C.5)]. Para facilitar a comparação com os resultados existentes, a Fig. 4 segue o esquema usado nos *plots* equivalentes da Ref. [33, 34]: Figs. 4(a) e 4(b) ilustram como o tempo de travessia (*delay-time*) varia em função da frequência média do pulso v_μ .

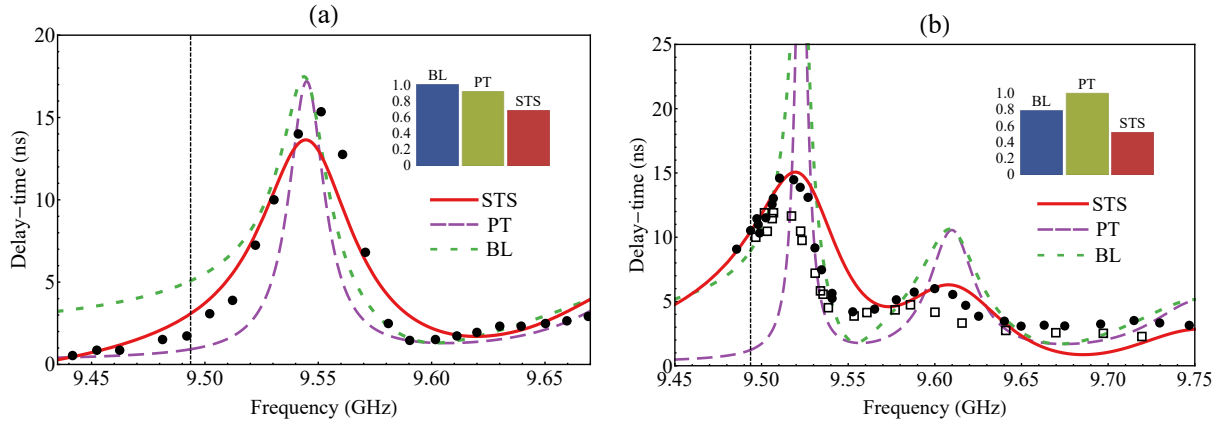


Figura 4 – Medições para o *delay-time* em uma “barreira de potencial” de tamanho L em função da frequência média do pulso. A curva sólida representa o modelo usando o formalismo STS da mecânica quântica, a linha tracejada longa representa o modelo phase time (PT), e a linha tracejada curta representa o modelo de Büttkier-Landauer (BL). (a) Barreira de potencial de tamanho $L = 15$ cm. Uma distribuição lorentziana de largura de banda $\Lambda = 30$ MHz é utilizada no nosso modelo. Os pontos representam os dados experimentais da Ref. [34]. (b) Barreira de potencial de tamanho $L = 20$ cm. Nesse caso, a largura de banda utilizada é $\Lambda = 50$ MHz. Os pontos e quadrados representam duas diferentes séries de medições realizadas na Ref. [33, 34]. A linha vertical indica a frequência de *cut-off*.

Na Fig 4 plotamos três curvas teóricas: a previsão feita pelo nosso modelo STS (3.30) [curva sólida], o modelo de Büttkier-Landauer (C.5) [BL – curva com tracejado longo], e o modelo phase-time (C.4) [PT – curva com tracejado curto]. Nessa figura, a linha tracejada vertical representa a frequência de *cut-off*, de forma que frequências menores resultam no regime de tempo de tunelamento. O *inset* na figura representa uma estimativa do erro de cada um dos modelos em relação aos pontos experimentais, calculado utilizando a expressão

$$\delta_k = N^{-1} \sqrt{\sum_i [y_i - f_k(x_i)]^2} \equiv N^{-1} \Delta_k, \quad (3.32)$$

onde (x_i, y_i) representa os pontos experimentais e f_k denota o resultado das expressões teóricas $k = (\text{BL}, \text{PT}, \text{STS})$. Em cada um dos gráficos, o maior erro é normalizado à unidade, $N = \max\{\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3\}$.

Para compararmos nossa equação (3.30) com os dados experimentais, consideramos valores típicos da largura de banda do Klystron [42]: na figura 4(a) utilizamos $\Lambda = 30$ MHz. Nesse caso temos $L = 15$ cm. Analisando a Fig. 4(a), observamos que a previsão feita pelo modelo STS apresenta a melhor concordância com os dados experimentais. Por outro lado, o modelo BL falha ao descrever o tempo de travessia medido na região de tunelamento, enquanto que a previsão feita pelo PT, comparando ao BL, apresenta uma melhor concordância com os pontos experimentais dessa região.

Na figura 4(b) temos $L = 20$ cm, enquanto que todos os outros parâmetros são mantidos iguais aos da figura 4(a). Neste caso, a análise é mais sutil pois, de acordo com os autores da

Ref. [33, 34], a diferença entre as previsões feitas pelos modelos teóricos, BL e PT, e os valores medidos no experimento são devidas à desconsideração de perdas, que neste caso ($L = 20$ cm) tornam-se relevantes. Nesta realização houve duas séries de medições (círculos e quadrados), o que ilustra a variabilidade dos resultados sob as mesmas condições experimentais. Os valores mostrados no *inset* são calculados em relação às medições representadas por círculos já que as mesmas parecem apresentar menos perdas. Os autores das Refs. [33, 34] são bastante vagos com relação à explicação para essas atenuações. Dessa forma seguimos o caminho mais simples possível para levar em conta esse efeito. Um fato conhecido é que em um guia de onda cilíndrico, a largura de banda aumenta com a frequência média do pulso [43]. Por outro lado, sabe-se que atenuações são mais significativas para maiores frequências médias. Portanto, vamos supor que a largura Λ aumenta devido a atenuações no guia, até mesmo no caso de uma geometria retangular. Procuramos por valores de Λ maiores que 30 MHz, mas ainda na região de dezenas de MHz, que melhor descreve os pontos experimentais. O valor efetivo obtido foi $\Lambda = 50$ MHz. Novamente, nós claramente observamos que a previsão feita pelo modelo STS é superior às previsões dos modelos BL e PT. Nesse caso, em contraste ao observado na Fig. 4(a), o modelo PT apresenta a pior performance.

Concluindo, a análise do *inset* na Fig. 4 mostra que para $L = 15$ cm o modelo PT descreve de forma superior os dados em comparação ao modelo BL. Por outro lado, para $L = 20$ cm, diferentemente do observado na Fig. 4(a), o modelo BL descreve de forma superior os dados em comparação ao modelo PT. Todavia, nas duas configurações, o nosso modelo é o que possui a melhor concordância com os dados experimentais.

4 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

A assimetria entre espaço e tempo na versão tradicional da mecânica quântica não relativística é usualmente atribuída à falta de covariância de Lorentz. Dessa forma, um argumento comumente usado é o de que a única maneira de remover essa assimetria é exclusivamente através de uma abordagem relativística dessa teoria. Entretanto, o recente trabalho [23] argumenta que essa assimetria entre espaço e tempo na mecânica quântica não relativística não é só devida à falta de covariância de Lorentz dessa teoria, mas também ao fato de naturalmente tratarmos o tempo como um parâmetro e a posição como um observável. Uma consequência dessa assimetria entre espaço e tempo é a que a teoria quântica tradicional apresenta dificuldades em prever medidas temporais. De maneira a resolver essa assimetria ainda no limite não relativístico, a Ref. [23] propõe uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica que, baseada em argumentos de simetria e inferências estatísticas, equipa a teoria quântica com um operador tempo $\hat{T}$, hermitiano e canonicamente conjugado a um operador energia, de forma que previsões a respeito de medidas temporais possam ser realizadas naturalmente.

A extensão espaço-tempo-simétrica proposta na Ref. [23] requer a introdução de um novo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_T$ no qual a posição é um parâmetro. Nesse novo espaço, um operador tempo $\hat{T}$ é definido e os estados físicos são representados por kets $|\phi(x)\rangle \in \mathcal{H}_T$. Dessa forma, uma equação que dita a evolução espacial dos estados $|\phi(x)\rangle$ é introduzida na Ref. [23]. Nós a definimos como a equação espaço-condicional.

Nesse trabalho, demos continuidade ao estudo iniciado em [23]. Mostramos como “deduzir” a equação EC através da formulação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica e obtemos a solução geral para essa equação no caso de um potencial independente do tempo. Além disso, usando argumentos de simetria, obtemos a lagrangiana geradora da equação espaço-condicional e mostramos que de fato ela gera essa equação no caso de um potencial independente do tempo. Mais ainda, provamos que a extensão teórica proposta na Ref. [23] satisfaz a condição de invariância de calibre, um importante resultado que é esperado por qualquer proposta teórica que deseja estender a mecânica quântica.

Por outro lado, de forma a verificar a validade da proposta feita em [23], aplicamos essa teoria ao problema do tempo de travessia. A razão da escolha desse problema é que em experimentos de tempo de travessia, medidas temporais são usualmente realizadas em duas posições fixas distintas, de forma a estimar o tempo necessário para uma partícula percorrer o caminho entre essas duas posições. Em outras palavras, esse experimento é espacialmente condicional assim como a função de onda $\phi(t|x)$ que definimos nesse trabalho. Dessa maneira, no contexto da teoria proposta na Ref. [23], argumentamos que é intuitivo definir o tempo de travessia entre as posições $x = 0$ e $x = L$ como $\langle \hat{T} \rangle(L) - \langle \hat{T} \rangle(0)$. Em particular, o problema do

tempo de travessia que estudamos consiste em estimar o tempo necessário para uma partícula atravessar uma barreira de potencial retangular definida em $x = 0$ e $x = L$.

No início da década de 90, experimentos eletromagnéticos começaram a ser realizados com o intuito de simular o problema quântico de travessia. Utilizando os resultados bem estabelecidos de dois desses experimentos [33, 34], fomos capazes de comparar nossa teoria com os dados obtidos. Esses experimentos consistem em um circuito de micro-ondas eletromagnéticas que propagam-se através de uma região estreitada, o qual é formalmente análogo à barreira de potencial quântico. Comparamos o desempenho da nossa previsão e dos modelos de Büttiker-Landauer e phase-time com as medidas obtidas nos experimentos realizados em [33, 34]. Através de uma análise quantitativa, mostramos que a nossa abordagem é superior a esses dois outros modelos em duas configurações experimentais distintas.

A extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica é uma proposta bastante recente, com seus primeiros resultados divulgados em 2015 [19]. Dessa forma, muitas questões envolvendo essa abordagem ainda estão em aberto. Nesse trabalho, investigamos como essa extensão teórica trata o problema do tempo de travessia na situação particular de uma barreira de potencial retangular. Entretanto, esse é apenas um entre os vários problemas envolvendo tempo na mecânica quântica que permanecem em aberto [21, 22]. Atualmente temos trabalhado na aplicação dessa teoria em algumas dessas outras situações, como por exemplo, o de medidas temporais em um sistema sob a ação de um potencial harmônico. Em contrapartida, também permanecem em aberto questões envolvendo propriedades dessa teoria, como por exemplo, a verificação da invariância de Galileu da equação espaço-condicional. A dificuldade em provar tais propriedades surge devido ao aspecto fracionário do operador hamiltoniano. Nos problemas em que abordamos nesse trabalho (exceto no tratamento do campo eletromagnético) contornamos essa dificuldade através de uma expansão em série do operador hamiltoniano para potenciais independentes do tempo. Porém, no âmbito mais geral de potenciais dependentes do tempo, essa não parece ser a melhor abordagem para lidar com esse operador visto o caráter não comutativo dos operadores ∂_t e $V(x, t)$. Atualmente, também temos trabalhado em técnicas para contornar essa dificuldade.

Referências

- 1 URL. <www.wikiart.org/en/salvador-dali/the-disintegration-of-the-persistence-of-memory>.
- 2 QESPI, M.; EUSEBIO, A. Pacha: un concepto andino de espacio y tiempo. *Revista española de antropología americana*, v. 24, p. 155–189, 1994.
- 3 WIGNER, E. P. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Physical Review*, APS, v. 98, n. 1, p. 145, 1955.
- 4 KIJOWSKI, J. On the time operator in quantum mechanics and the heisenberg uncertainty relation for energy and time. *Reports on Mathematical Physics*, Elsevier, v. 6, n. 3, p. 361–386, 1974.
- 5 MUGA, J.; BROUARD, S.; MACIAS, D. Time of arrival in quantum mechanics. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 240, n. 2, p. 351–366, 1995.
- 6 WERNER, R. Screen observables in relativistic and nonrelativistic quantum mechanics. *Journal of mathematical physics*, AIP, v. 27, n. 3, p. 793–803, 1986.
- 7 HARTLE, J. *Gravitation and Quantizations: Proceedings of the 1992 Les Houches Summer School*. [S.l.]: North Holland Amsterdam, 1995.
- 8 BÜTTIKER, M.; LANDAUER, R. Traversal time for tunneling. *Physical Review Letters*, APS, v. 49, n. 23, p. 1739, 1982.
- 9 HAUGE, E.; STØVNENG, J. Tunneling times: a critical review. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 61, n. 4, p. 917, 1989.
- 10 GROT, N.; ROVELLI, C.; TATE, R. S. Time of arrival in quantum mechanics. *Physical Review A*, APS, v. 54, n. 6, p. 4676, 1996.
- 11 KUMAR, N. Quantum first-passage problem. *Pramana*, Springer, v. 25, n. 4, p. 363–367, 1985.
- 12 GIANNITRAPANI, R. Positive-operator-valued time observable in quantum mechanics. *International Journal of Theoretical Physics*, Springer, v. 36, n. 7, p. 1575–1584, 1997.
- 13 TORRES-VEGA, G. Energy-time representation for quantum systems. *Physical Review A*, APS, v. 75, n. 3, p. 032112, 2007.
- 14 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Quantum time. *Physical Review D*, APS, v. 92, n. 4, p. 045033, 2015.
- 15 ROVELLI, C. Time in quantum gravity: an hypothesis. *Physical Review D*, APS, v. 43, n. 2, p. 442, 1991.
- 16 HALLIWELL, J. et al. A self-adjoint arrival time operator inspired by measurement models. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 379, n. 39, p. 2445–2451, 2015.
- 17 SELS, D.; WOUTERS, M. The thermodynamics of time. *arXiv preprint arXiv:1501.05567*, 2015.

- 18 GALAPON, E. A.; CABALLAR, R. F.; JR, R. T. B. Confined quantum time of arrivals. *Physical review letters*, APS, v. 93, n. 18, p. 180406, 2004.
- 19 DIAS, E. O.; PARISIO, F. Elements of a new approach to time in quantum mechanics. *arXiv preprint arXiv:1507.02899*, 2015.
- 20 YEARSLEY, J. et al. Quantum arrival and dwell times via idealized clocks. *Physical Review A*, APS, v. 84, n. 2, p. 022109, 2011.
- 21 MUGA, J. G.; MAYATO, R. S.; EGUSQUIZA, I. L. Time in quantum mechanics - vol. 1. In: . [S.l.]: Springer, 2008.
- 22 MUGA GONZALO, R. A. d. C. A. Time in quantum mechanics - vol. 2. In: . [S.l.]: Springer, 2009.
- 23 DIAS, E. O.; PARISIO, F. Space-time-symmetric extension of nonrelativistic quantum mechanics. *Physical Review A*, APS, v. 95, n. 3, p. 032133, 2017.
- 24 HEISENBERG, W. Über den anschaulichen inhalt der quantentheoretischen kinematik und mechanik. In: *Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten*. [S.l.]: Springer, 1985. p. 478–504.
- 25 PAULI, W. Die allgemeinen prinzipien der wellenmechanik. In: *Quantentheorie*. [S.l.]: Springer, 1933. p. 83–272.
- 26 BÜTTIKER, M. Larmor precession and the traversal time for tunneling. *Physical Review B*, APS, v. 27, n. 10, p. 6178, 1983.
- 27 MACCOLL, L. Note on the transmission and reflection of wave packets by potential barriers. *Physical Review*, APS, v. 40, n. 4, p. 621, 1932.
- 28 BROUARD, S.; SALA, R.; MUGA, J. Systematic approach to define and classify quantum transmission and reflection times. *Physical Review A*, APS, v. 49, n. 6, p. 4312, 1994.
- 29 LANDAUER, R. Traversal time in tunneling. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, Wiley Online Library, v. 95, n. 3, p. 404–410, 1991.
- 30 JONSON, M. Tunneling times in quantum mechanical tunneling. In: *Quantum Transport in Semiconductors*. [S.l.]: Springer, 1992. p. 193–238.
- 31 OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E. Recent developments in the time analysis of tunneling processes. *Physics Reports*, Elsevier, v. 214, n. 6, p. 339–356, 1992.
- 32 LANDAUER, R.; MARTIN, T. Barrier interaction time in tunneling. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 66, n. 1, p. 217, 1994.
- 33 MUGNAI, D.; RANFAGNI, A. Microwave experiments on tunneling time. In: *Time in Quantum Mechanics*. [S.l.]: Springer, 2008. p. 355–397.
- 34 RANFAGNI, A. et al. Delay-time measurements in narrowed waveguides as a test of tunneling. *Applied physics letters*, AIP, v. 58, n. 7, p. 774–776, 1991.
- 35 XIMENES, R.; DIAS, E. O. Physical and mathematical properties of the space-time-symmetric formalism. *arXiv preprint arXiv:1712.03446*, 2017.

- 36 XIMENES, R.; PARISIO, F.; DIAS, E. O. Traversal time predictions from a space-time-symmetric quantum formalism. *arXiv preprint arXiv:1712.00397*, 2017.
- 37 LEMOS, N. A. Mecânica analítica. In: . [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2013.
- 38 SCHRODINGER, E. Quantisation as a problem of proper values. *Ann d Phys*, v. 79, n. 4, p. 1–9, 1926.
- 39 MUGA, J. G.; MAYATO, R. S.; EGUSQUIZA, I. L. Introduction. In: *Time in quantum mechanics*. [S.l.]: Springer, 2008. p. 1–30.
- 40 J., G. D. Introduction to quantum mechanics. Prentice Hall, 2004.
- 41 MAHON, J. R. P. Mecânica quântica. LTC, 2011.
- 42 <http://www2.l3t.com/edd/pdfs/datasheets/l-3_edd_brochure.pdf>.
- 43 SHIMABUKURO, F. I.; YEH, C. Attenuation measurement of very low loss dielectric waveguides by the cavity resonator method applicable in the millimeter/submillimeter wavelength range. *IEEE transactions on microwave theory and techniques*, IEEE, v. 36, n. 7, p. 1160–1166, 1988.
- 44 GRIFFITHS, D. Introduction to electrodynamics. Cambridge University Press, 1999.

APÊNDICE A - PROVA DO "TEOREMA" DE PAULI

Neste apêndice vamos mostrar que o estado $\exp[iE'\hat{T}/\hbar] |E\rangle$ é um autoestado do operador hamiltoniano $\hat{H}$, com autovalor de energia $E - E'$. Vamos começar expandindo o operador exponencial em uma série

$$e^{iE'\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^n, \quad (\text{A.1})$$

e, aplicando pela esquerda o operador hamiltoniano, obtemos

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{H} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^n. \quad (\text{A.2})$$

Agora, precisamos passar o operador hamiltoniano para a direita do operador tempo. Para isso, note que

$$\hat{H}\hat{T} = \hat{T}\hat{H} + [\hat{H}, \hat{T}] = \hat{T}\hat{H} + i\hbar. \quad (\text{A.3})$$

Onde usamos o fato que o teorema de Pauli supoe que $[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar$. Assim, aplicando o operador $\hat{T}$ pela direita em (A.3), temos

$$\hat{H}\hat{T}^2 = \hat{T}\hat{H}\hat{T} + i\hbar\hat{T}, \quad (\text{A.4})$$

e, usando (A.3) no primeiro termo no lado direito dessa equação, vemos que

$$\hat{H}\hat{T}^2 = \hat{T}^2\hat{H} + 2i\hbar\hat{T}. \quad (\text{A.5})$$

De maneira similar é possível mostrar que

$$\hat{H}\hat{T}^3 = \hat{T}^3\hat{H} + 3i\hbar\hat{T}^2, \quad (\text{A.6})$$

e, de forma geral, temos que

$$\hat{H}\hat{T}^n = \hat{T}^n\hat{H} + ni\hbar\hat{T}^{n-1}. \quad (\text{A.7})$$

Portanto, substituindo (A.7) de volta na Eq. (A.2),

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iE'}{\hbar} \right)^n (\hat{T}^n\hat{H} + ni\hbar\hat{T}^{n-1}) = e^{iE'\hat{T}/\hbar}\hat{H} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E'}{n-1!} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^{n-1}, \quad (\text{A.8})$$

logo,

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} = e^{iE'\hat{T}/\hbar}(\hat{H} - E') \quad (\text{A.9})$$

e concluímos que

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} |E\rangle = e^{iE'\hat{T}/\hbar} (E - E') |E\rangle = (E - E') e^{iE'\hat{T}/\hbar} |E\rangle. \quad (\text{A.10})$$

APÊNDICE B - GUIAS DE ONDA

Neste apêndice vamos revisar os elementos básicos de um guia de onda. Para isso, consideremos uma onda eletromagnética propagando-se no interior de um tubo oco (denominado guia de onda), onde esse tubo é composto de um material condutor, enquanto a região oca no interior do tubo consiste de vácuo, ver Fig 5. Do eletromagnetismo, sabemos que dentro de um

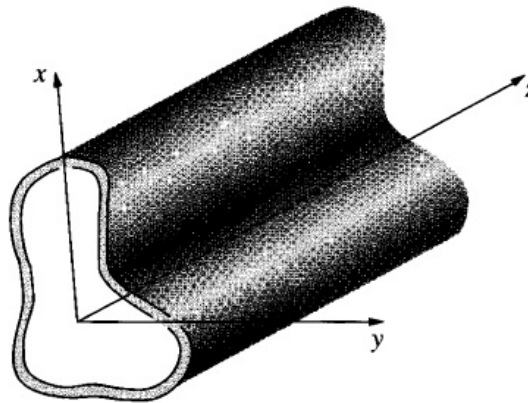


Figura 5 – Representação gráfica de um guia de onda de forma arbitrária. Suas paredes são feitas de material condutor enquanto seu interior é um vácuo. Fonte: Ref. [44]

condutor perfeito o campo eletromagnético deve satisfazer $\mathbf{E} = 0$ e $\mathbf{B} = 0$ [44]. Dessa forma, as condições de contorno geradas pelas equações de Maxwell requerem que a onda propagando-se no interior do guia satisfaça

$$\mathbf{E}^{\parallel} = 0 \quad \text{e} \quad \mathbf{B}^{\perp} = 0 \quad (\text{B.1})$$

na superfície entre a região interna do guia e o condutor. Assumindo que a secção transversal do guia de onda define o plano x - y , e que a onda está propagando-se na direção do eixo z , temos que para uma onda eletromagnética os campos elétrico e magnético devem ter o seguinte formato:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{E}} \\ \tilde{\mathbf{B}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{E}}_0(x, y) \\ \tilde{\mathbf{B}}_0(x, y) \end{pmatrix} e^{ik(z - \omega t)}, \quad (\text{B.2})$$

onde $\sim$ indica que estamos usando um campo complexo (o resultado físico é obtido tomando a parte real dos campos complexos). Esses campos, além de satisfazerem as condições de contorno Eq. (B.1), também precisam satisfazer as equações de Maxwell no interior do guia (onde não há cargas nem correntes)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0, & \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \nabla \times \mathbf{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Portanto, o problema que desejamos responder consiste em determinar as funções $\tilde{\mathbf{E}}_0$ e $\tilde{\mathbf{B}}_0$ que satisfaçam as Eqs. (B.1) e (B.3). É possível mostrar que na situação que desejamos resolver, as componentes $E_{x,y}$ e $B_{x,y}$ dos campos são funções das componentes E_z e B_z . Logo, basta determinar E_z e B_z para termos todas as outras componentes. Além disso, também é possível mostrar que as componentes destes campos na direção z satisfazem a equação

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (\omega/c)^2 - k^2 \right] \begin{pmatrix} E_z \\ B_z \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{B.4})$$

O chamado modo TE corresponde à solução desse problema no caso em que $E_z = 0$, o que reduz a (B.4) a apenas uma equação

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + (\omega/c)^2 - k^2 \right] B_z = 0. \quad (\text{B.5})$$

Além disso, para o caso de uma caixa retangular de dimensões $(a \times b)$, essa equação pode ser facilmente resolvida por separação de variáveis, resultando em

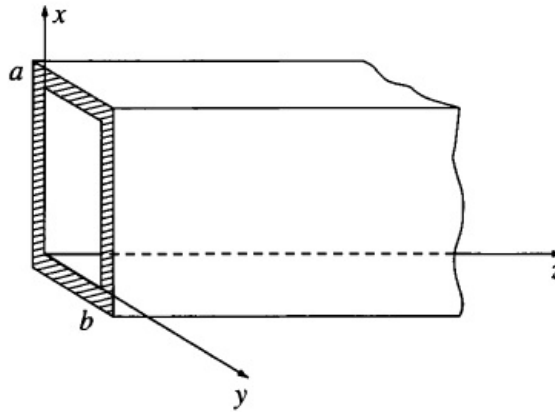


Figura 6 – Guia de onda em formato retangular. O índice m do modo $\text{TE}_{m,n}$ está associado à direção vertical (eixo x), enquanto o índice n está associado a direção horizontal (eixo y). Fonte: Ref. [44]

$$B_z = B_0 \cos(m\pi x/a) \sin(n\pi y/b), \quad m, n \in \mathbb{N}, \quad (\text{B.6})$$

que é denominado de modo $\text{TE}_{m,n}$ do guia de onda, ver Fig. 6. Mais ainda, também é possível mostrar que para o modo $\text{TE}_{m,n}$ o número de onda satisfaz a relação

$$k = \sqrt{(\omega/c)^2 - \pi^2 [(m/a)^2 + (n/b)^2]}, \quad (\text{B.7})$$

concluindo esta breve revisão do material necessário sobre guias de onda.

APÊNDICE C - OS MODELOS DE BÜTTKIER-LANDAUER E PHASE-TIME

Por completeza, nesse apêndice vamos discutir de forma breve os modelos que utilizamos para o tempo de tunelamento, indicando as referências para uma descrição mais detalhada. Antes de relatar a equação de cada modelo, notemos que no problema do tunelamento através de uma barreira constante de tamanho L , a amplitude de transmissão $\mathcal{T}(k)$ é uma função complexa dada por [21]

$$\mathcal{T}(k) = |\mathcal{T}(k)|e^{i\Delta\phi(k)},$$

onde seu módulo satisfaz

$$|\mathcal{T}(k)| = \left[1 + \left(\frac{(k^2 - k_1^2)^2}{4k_1^2 k^2} \right) \sin^2(k_1 L) \right]^{-1}, \quad (\text{C.1})$$

e a fase $\Delta\phi$ é dada por

$$\tan(\Delta\phi) = \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \tan(k_1 L). \quad (\text{C.2})$$

O Modelo Phase-time

Este é o modelo mais intuitivo, o tempo de atraso para um processo de espalhamento pode ser obtido seguindo o pico do pacote de onda pelo método do ponto de sela, ver Ref.[3] para mais detalhes. De forma simples, este tempo é representado por

$$\tau_\phi = \hbar \frac{\partial \Delta\phi}{\partial E}. \quad (\text{C.3})$$

Para o caso que estamos interessados, substituindo (C.2) em (C.3) obtemos (aqui as derivadas são calculadas no exterior da barreira)

$$\tau_\phi = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \Delta\phi}{\partial \nu} = \frac{2\pi\nu}{c^2 k} \frac{\partial \Delta\phi}{\partial k} = \frac{2\pi\nu}{c^2} \frac{k}{k_1} \left[\frac{2k_1 k^2 L (k^2 + k_1^2) - k_0^4 \sin(2k_1 L)}{4k^2 k_1^2 + k_0^4 \sin^2(k_1 L)} \right]. \quad (\text{C.4})$$

O Modelo de Büttkier-Landauer

O modelo de Büttkier-Landauer é mais elaborado, sua construção leva em conta não só a mudança na fase quando a onda atravessa a barreira, mas também a mudança na amplitude, para mais detalhes ver Ref. [26]. A maneira mais simples de representar o tempo de Buttkier-Landauer é através do valor absoluto da função complexa $\tau_y + i\tau_z$, ou seja,

$$\tau_{BL}(k) = \left[\tau_y^2(k) + \tau_z^2(k) \right]^{1/2}. \quad (\text{C.5})$$

A parte real dessa função está associado à mudança na fase

$$\tau_y(k) = \frac{2\pi\nu}{c^2 k_1} \frac{\partial \Delta\phi}{\partial k_1} = \frac{2\pi\nu}{c^2} \frac{k}{k_1} \left[\frac{2k_1 L (k^2 + k_1^2) - k_0^2 \sin(2k_1 L)}{4k^2 k_1^2 + k_0^4 \sin^2(k_1 L)} \right] \quad (\text{C.6})$$

e a parte imaginaria está associada à variação na amplitude

$$\tau_z(k) = \frac{2\pi\nu}{c^2 k_1} \frac{\partial \ln |\mathcal{T}(k_1)|}{\partial k_1} = \frac{2\pi\nu}{c^2} \frac{k_0^2}{k_1^2} \left[\frac{(k^2 + k_1^2) \sin^2(k_1 L) - (1/2) k_0^2 k_1 L \sin(2k_1 L)}{4k^2 k_1^2 + k_0^4 \sin^2(k_1 L)} \right]. \quad (\text{C.7})$$

Nestes casos as derivadas são calculadas no interior da barreira.